Theoretische Festkörperphysik

Wahlpflichtfach im Masterstudium   4 SWS VL + 2 SWS UE $\hat{=}$ 10 LP

Termin: VL Mo 10:15 – 11:45 EW 202
Mi 10:15 – 11:45 EW 202

Übung Di 14 – 16

Literatur: siehe Webseite
Grundlagen: Czycholl, (Springer Spektrum)
Theoretische Festkörperphysik Band 1 & 2

Gegenstand der Festkörperphysik

feste Körper → Kollektiv einer großen Anzahl von Atomen $\sim 10^{23}$
welche durch chem. Bindungen zusammengehalten werden.

was wird zur Beschreibung benötigt?
- Statistische Physik
- Quan mechanik

d.h. System beschrieben durch Hamiltonian
↑
ist meist bekannt da von allen 4 WW
nur elektromagnetische WW wichtig ist
Coulomb Potenzial

- Beschreibung wird möglich durch
→ Abstraktion & Modellbildung
→ Näherungen für bestimmte Teilprobleme
→ Einführen von Quasiteilchen ohne WW

Bsp.:

Phononen	Gitterschwingungen separiert von Elektronen
Magnonen	quantisierte Spinwellen
Polaronen	Elektronen mit Gitterpolarisation
Exzitonen	gebundene Elektron-Loch Paare
Polaritonen	Elektronen und Photonen WW
Plasmonen	Kollektivanregungen der Elektronen
⋮	

- Fragestellungen: (i) Grundzustand, Stabilität
  (ii) Verhalten unter äußeren Einflüssen
  - elektrische Felder -> Ladungstransport, Supraleitung
  - magn. Felder -> Dia-, Para-, Ferromagnetismus
  - ∇T -> Wärmeleitung
  - Licht -> optische Eigenschaften

20th Century of Solid State Physics

Nobelpreise seit 2000

- Halbleiterheterostrukturen 2000 Kroemer, Alferov, Kilby
- Theorie Supraleiter + Suprafluünigkeiten (Typ II) 2003 Abrikossow
- Riesenmagnetowiderstand 2007 Fert, Grünberg
- Graphen 2010 Geim, Novoselov
- blaue LED 2014 Akasaki, Amano, Nakamura
- Topologische Materiephasen 2016 Thouless, Haldane, Kosterlitz

Inhalt der VL

1. Gitter, Kristallsymmetrie — Born Oppenheimer Näherung
2. Phononen — harmon. Näherung
3. Elektronen in period. Potenzialen, Bloch Theorem
4. Elektronen - Phononen WW

   Supraleitung, Polaronen

5. Magnetismus

---

1. Kristalle

- Festkörper ist eine periodisch translationsinvariante Anordnung
- größte Symmetrie <-> geringste Unordnung (Entropie)
  -> Kristalliner Zustand wird im thermodynamischen GG bei tiefen T angenommen

  (nicht bei amorphen Struktur)

  nur Nahordnung durch rasches Erstarren (lokales Minimum) metastabiler Zustand z.B. Glas

1.1. Terminologie

- Kristallgitter
  - besteht aus Gitterpunkten im Raum $\qquad \underline{R}_n = \sum_{i=1}^{d} n_i \, \underline{a}_i$
  - d : Dimension des Gitter
  - $n = (n_1, \ldots n_d)$ d-Tupel ganzer Zahlen $n_i \in \mathbb{Z}$
  - $\underline{a}_i$: Basisvektoren der Einheitszelle mit Volumen V_{EZ}

$$d=3 \qquad V_{EZ} = \left| \underline{a}_1 (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3) \right|$$

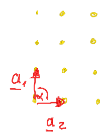
- primitive Einheitszelle, (kleinste) deren period. Fortsetzung den ganzen Raum ausfüllt
  Translationssymmetrie

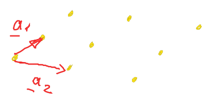
  Bsp.: In $d=2$ können 5-Ecke dies nicht
  (1982 fand man mit Röntgenbeugung 5 zählige Symmetrie ABER nur quasi-Kristalle)

- $\boxed{\text{Kristall - Systeme}}$ nach Symmetrie eingeteilte Gitterart

$d=2$

1. quadratisch $\quad a_1 = a_2, \quad \alpha_1 = 90°$
2. rechtwinklig $\quad a_1 \neq a_2, \quad \alpha_1 = 90°$
3. hexagonal $\quad a_1 = a_2, \quad \alpha_1 = 60°$
4. schiefwinklig $\quad a_1 \neq a_2, \quad \alpha_1 \neq 90°$





zu jedem Kristall-System gibt es mehrere Bravais Gitter (d.h. mehr als ein Atom pro EZ)

$d=3$: es gibt 7 Kristall Systeme und 14 Bravais Gitter

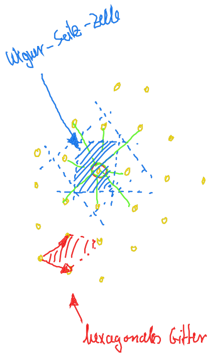
(siehe Czycholl)

- Symmetrie-Betrachtungen sind wichtig für Hamiltonian. Dieser vertauscht mit entsp. Symmetrie Operatoren
  - → Erhaltungsgröße
  - → Entartung

    kann durch Störung aufgehoben werden

Wigner – Seitz – Zelle:

- Ist eine primitive Einheitszelle gebildet über den senkrechten Ebenen, die auf halber Höhe der Verbindungslinien zum nächsten Nachbarn stehen,
- enthält einen Gitterpunkt



1.2 Fourierentwicklung und reziprokes Gitter

Sei $\underline{f}(\underline{r}) = f(\underline{r} + \underline{R})$ eine gitterperiodische Funktion $\quad n_i \in \mathbb{Z}$

$$\underline{R} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3$$

$$f(r) = \sum_{\underline{G}} F(\underline{G})\, e^{i\underline{G}\,\underline{r}}$$

$$\text{aus} \quad f(\underline{r} + \underline{R}) = \sum_{\underline{G}} F(\underline{G})\, e^{i\underline{G}\,\underline{r}}\, e^{\overbrace{i\underline{G}\cdot\underline{R}}^{2\pi m,\; m\in\mathbb{Z}}} \overset{!}{=} \sum_{\underline{G}} F(\underline{G})\, e^{i\underline{G}\,\underline{r}}$$

$$\rightarrow \underline{G}\cdot\underline{R} = 2\pi m \quad \text{für alle } n_i$$

Zerlegung von $\underline{G}$: $\quad \underline{G} = h\,\underline{b}_1 + k\,\underline{b}_2 + l\,\underline{b}_3$

$$\rightarrow (h\underline{b}_1 + k\underline{b}_2 + l\underline{b}_3)(n_1\underline{a}_1 + n_2\underline{a}_2 + n_3\underline{a}_3) = 2\pi m$$

$$\rightarrow \boxed{\underline{b}_i\, \underline{a}_j = 2\pi\, \delta_{ij}} \qquad i,j = 1,2,3$$

Das reziproke Gitter wird durch die Basis $\underline{b}_1, \underline{b}_2, \underline{b}_3$ definiert.

↑

Gitter im k-Raum , $[cm^{-1}]$

$$\underline{b}_1 = \frac{2\pi}{V_{BZ}} (\underline{a}_3 \times \underline{a}_2)$$

V_{BZ}: Volumen der Einheitszelle im reziproken Raum

$$\underline{b}_2 = \frac{2\pi}{V_{BZ}} \left(\underline{a}_3 \times \underline{a}_1 \right)$$

$$\underline{b}_3 = \frac{2\pi}{V_{BZ}} \left(\underline{a}_1 \times \underline{a}_2 \right)$$

Brillouin-Zone: Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Raumes

Bsp. Wigner Seitz Zelle des body-centered-cubic (bcc) ist Brillouin Zone des flächen-zentrierten-Gitters (fcc)

- Kristall-Struktur
  - gegeben durch Kristall-Typ + Basis Atome

$$R_{n\mu} = R_n + R_\mu$$

Gittervektor

Position des μ-ten Atoms

Bsp. Zinkblende hat 2 atomige Basis d.h. 2 fcc Gitter ineinander geschachtelt

- Millersche Indizes: h, k, l legen den reziproken Gittervektor fest