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
- Quantenmechanik

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 Elektronen-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

20^{th} Century of Solid State Physics

Nobelpreise seit 2000

• Halbleiterheterostrukturen	2000	Kroemer, Alferov, Kilby
• Theorie Supraleiter + Suprafluidität (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 Strukturen)
nur Nahordnung durch rasches Erstarren (lokales Minimum) metastabiler Zustand
z.B. Glas

1.1. Terminologie

- Kristallgitter
  - besteht aus Gitterpunkten im Raum $\underline{R}_n = \sum_{i=1}^{d} n_i \, \underline{\mathbf{a}}_i$

    d : Dimension des Gitter

    $n = (n_1, \dots n_d)$ d-Tupel ganzer Zahlen $n_i \in \mathbb{Z}$

    $\underline{\mathbf{a}}_i$: <u>Basisvektoren</u> der <u>Einheitszelle</u> mit Volumen V_{EZ}

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

- <u>primitive Einheitszelle</u>, (kleinste) deren period. Fortsetzung den ganzen Raum ausfüllt

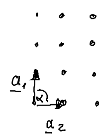
  Translationssymmetrie

  <u>Bsp.</u>: 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

<u>$d=2$</u>

① quadratisch $a_1 = a_2$, $\alpha_1 = 90°$



② rechtwinklig $a_1 \neq a_2$, $\alpha_1 = 90°$

③ hexagonal $a_1 = a_2$, $\alpha_1 = 60°$

④ schiefwinklig $a_1 \neq a_2$, $\alpha_1 \neq 90°$

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

<u>$d=3$</u> : es gibt 7 Kristall Systeme und 14 Bravais Gitter

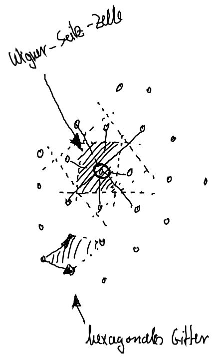
(siehe Czycholl)

- Symmetrie-Betrachtungen sind <u>wichtig</u> 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 $f(\underline{r}) = f(\underline{r} + \underline{R})$ eine gitterperiodische Funktion $n_i \in \mathbb{Z}$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

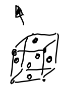
V_{BZ}: Volumen der Einheitszelle im reziproken Raum

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

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

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