

# Theoretische Festkörperphysik I+II

Wahlpflichtfach 8 SWS (12 ECTS)

Zus. mit 2-stündiger Spezialvorlesung

(Comput. Electr. Structure Theory, P. Rinke, Mo 10-12  
oder Quantenmech. gebundene Atome, U. Scherz, Mo 12-14  
EW 737  
EW 203)

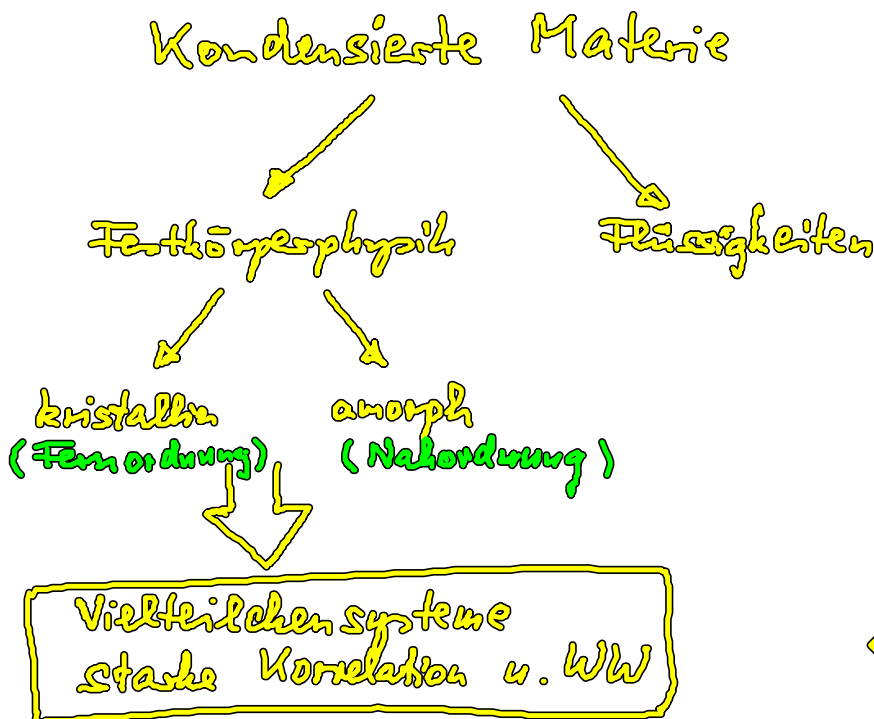
SS 2011

E. Schöll, K. Lüdge

VL: Di 10-12 EW 203  
Mi 10-12 EW 203

Übung: Mi 14-16 EW 229 Carsten Weber

Lit.: Ashcroft, Mermin  
Ibach, Lüth  
Scherz  
usw.



(DPG-Tagungen:  
Sektion Kondens. Materie SKM  
Frühjahrstagung 2012: TU Berlin  
20.-25.3.12)

↔ Gase

- Fragestellungen :
- (i) Grundlagen und Stabilität
  - (ii) Verhalten unter äußeren Einflüssen
    - (El. Felder → Ladungstransport)
    - (Magn. Felder → Magnettransport)
    - (Dia-, Para-, Ferromagnetismus, Spintronics)
  - Lichteinstrahlung → Festkörperoptik
  - Halbleiterspektroskopie im Nichtgleichgewicht (Rekombination)
  - niederdimensionale Halbleiterstrukturen, Nanostukt.

Neue Effekte in der Festkörperphysik

	Nobelpreis	
Supraleitung	1972	Bardeen, Cooper, Schrieffer
Josephson-Effekt	1973	Josephson
Halbleiter-Tunnelmethode	"	Esaki
Tunneln zwischen Supraleitern	"	Giaever
Magnetismus, Unordn.	1977	Anderson, Hott, Van Vleck
Quanten-Hall-Effekt	1985	v. Klitzing
Rastertunnelmikr.	1986	Binnig, Rohrer
Transmissions-El. Mikr.	"	Ruska
Hoch-T <sub>c</sub> -Supraleitung	1987	Bednorz, Müller
Dichtefunktionaltheorie	1998	Kohn, Pepla (Chen)
Fractionaler Quanten-Hall-Effekt	1999	Störmer, Tsui, Laughlin
Halbleiterheterostrukt. (Laser, Trans., IC)	2000	Kroemer, Alferov; Kilby
Theorie Supraleitung, -flukt.	2003	Abrikosov, Ginzburg, Leggett
Riesenmagnetoresist. Oberflächen, Selbstorg.	2007	Fert, Grünberg Gerhard Ertl (Chemie)
Fiberoptik, CCD-Sensor	2009	Kao, Boyle, Smith
Graphen (2D-Material)	2010	Geim, Novoselov

1. Kristallsymmetrie

Regelmäßige Anordn. der Atome im Kristallgitter  
 $\Rightarrow$  Invarianz des Gitters unter Symmetrietransformationen

$\swarrow$  Punkttransformationen  $S$        $\searrow$  Translationen  $R$

Für eine bel., auf Gitter def. Fkt.  $f(\underline{r})$  gilt:  $f(S\underline{r} + \underline{R}) = f(\underline{r})$

### 1.1. Punkttransformationen u. Translationen

Die Punkttrafo  $\{S: \underline{r} \rightarrow S\underline{r}\}$  bilden eine Gruppe (Punktgruppe)

$$(S_1 S_2) S_3 = S_1 (S_2 S_3)$$

$$\exists 1: 1S = S1 = S \quad \forall S$$

$$\forall S \exists S^{-1}: SS^{-1} = S^{-1}S = 1$$

Darstellung durch  $3 \times 3$ -Matrizen im Ortsraum:  $S_{ij}$

$$\underline{r}' = S\underline{r} \quad (\Leftrightarrow) \quad x'_i = \sum_{j=1}^3 S_{ij} x_j$$

### Drehspiegelungen des Gitters

$S$  ist orthogonal:  $\det S = \pm 1$

$$(S\underline{r} \cdot S\underline{r}) = (\underline{r} \cdot S^T S \underline{r}) = (\underline{r} \cdot \underline{r})$$

da orthog. Matrix  
Skalarprodukt invariant  
lässt

$$\Rightarrow S^T S = 1 \quad (\Leftrightarrow) \quad S^T = S^{-1}$$

$$(S^T)_{ij} = S_{ji} \quad \text{transponierte Matrix}$$

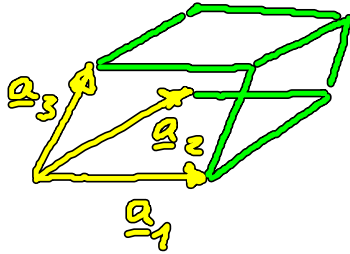
Punkttrafo mit  $\det S = 1$ : Drehungen

" "  $\det S = -1$ : Drehinversion

$S = -1$ : Inversion



Das kleinste Vol., das periodisch aneinandergereiht den Kristall beschreibt, heißt Elementarzelle



Parallelepiped, aufgespannt durch Basisvektoren  $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$  des Gitters

Das Gitter ist invariant gegenüber den  primitiven Translationen

$$\underline{R} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad \text{mit } n_i \in \mathbb{Z}$$

Alle Kristalleigenschaften  $f(\underline{r}) \stackrel{!}{=} f(\underline{r} + \underline{R})$

$\{ \underline{R} \mid n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z} \}$  bildet das Punktgitter des Kristalls.

## 1.2 Raumgruppen und Bravais-Gitter

Die allg. Symmetrietrafos  $(S, \underline{R})$  eines Kristalls bilden die Raumgruppe.

Verknüpfung:  $(S_1, \underline{R}_1) \circ (S_2, \underline{R}_2) = (S_1 S_2, S_1 \underline{R}_2 + \underline{R}_1)$

speziell primitive Transl.  $(1, \underline{R})$

Drehspiegelung ohne Transl.  $(S, \emptyset)$

allg. Schraubungen, Gleitspiegelungen  $(S, \underline{R})$

NB: (i) Die Translationsgruppe  $\{ \underline{R} \}$  mit „Einselement“  $\emptyset$  (Nullvektor) ist eine abel'sche (kommutative) Untergruppe der Raumgruppe.

(ii) Die Raumgruppe ist nicht abel'sch.

Betrachte  $(S, \emptyset) \circ (S^T, \underline{R}) = (1, S\underline{R})$

⇒ für jede Drehung ist mit  $\underline{R}$  auch  $\underline{SR}$  eine Translation.

⇒ nur Drehwinkel  $\varphi = 0, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 180^\circ$  möglich

Beweis: Es gilt  $\underline{R} = u_1 \underline{a}_1 + u_2 \underline{a}_2 + u_3 \underline{a}_3$  mit  $u_i \in \mathbb{Z}$

$$\underline{SR} = w_1 \underline{a}_1 + w_2 \underline{a}_2 + w_3 \underline{a}_3 \quad \text{mit } w_i \in \mathbb{Z}$$

⇒ Drehmatrix hat in der Basis  $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$  nur ganzzahlige Komponenten

$$\Rightarrow \text{Sp } S = \text{Sp}(\underline{ASA}^{-1}) \in \mathbb{Z}$$

↑  
A affine Trafo auf kart. Koord. mit z-Achse || Drehachse

$$\underline{ASA}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Sp}(\underline{ASA}^{-1}) = 2 \cos \varphi + 1 \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow 2 \cos \varphi \in \{2, 1, 0, -1, -2\}$$

$$\varphi \in \{0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \pi\}$$

Bezeichnung  $1, D_6, D_4, D_3, D_2$

Dann gilt  $(D_n)^n = 1$  ("n-zählige Drehachse")

Erg.: Durch  $1, D_2, D_3, D_4, D_6, I$  (Inversion)

lassen sich alle Punktgruppen beschreiben,  
die in den Raumgruppen vorkommen

D=2 Dimensionen: 10 Punktgruppen

D=3 " : 32 Punktgruppen ⇒ Kristallklassen

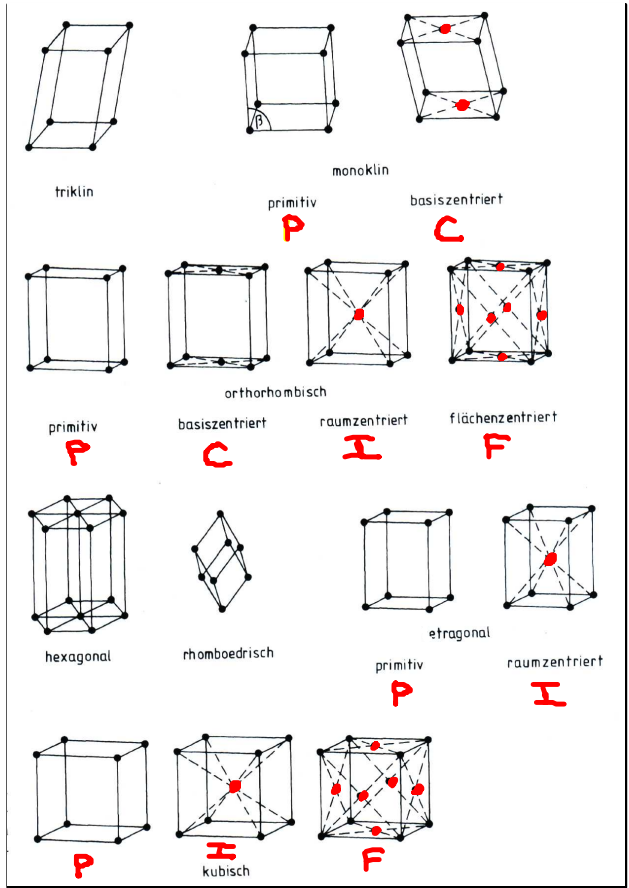
7 Kristallsysteme : 14 Bravais-Gitter

Basisvektoren bzw. Kristallachsen	Winkel	Kristallsystem
$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	triklin
$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta \neq 90^\circ$	monoklin
$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	orthorhombisch
$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	tetragonal
$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$	hexagonal
$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	rhomboedrisch
$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	kubisch

Anordnung der Atome

P  
P,C  
P,C,I,F  
P,I  
P  
P,I,F

} 14  
Bravais-Gitter



aus: Ibach-Lieth

- P : Primitives Gitter (Atome nur in den Ecken der Einheitszelle)
- C : Basiszentriert (Atome in Mittelpunkten zweier gegenüberliegender Seiten)
- I : Innenzentriert (1 Atom im Mittelp.)
- F : Flächenzentriert (Atome in Flächenmittp.)