Theoretische Festkörperphysik

Allgemeine Einführung

Vorlesung

Di 10 - 12 EW203 } Marten Richter

Mi 10 - 12 EW203 } mrichter@itp.tu-berlin.de

Sprechstunde:

Mo 16 - 17 Uhr

Übung

~~Fr 14 - 16 Uhr EW 114~~ } ~~Ein Termin~~ auswählen

oder Mo 14 - 16 Uhr EW226 }

Übungszettelausgabe und -abgabe in der Übung

Diese Vorlesung kann entweder als Vertiefungspfad TPIV verwendet werden oder

oder zusammen mit VL von Prof Scholz als

Quantenmechanik gebundener Atome

Mo 12 - 14 EW 203

als Wahlpflicht,

alternativ Seminar 14 - 16 Di EW 731

Scheinerwerb 60 % Übungsaufgaben Punkte

Gliederung der Vorlesung (vorläufig)

I. Kristallsymmetrie

II. Born-Oppenheimer Näherung

III. Elektronische Zustände

IV. Gitterschwingungen

V. Zweite Quantisierung

VI. Elektron-Phonon Wechselwirkung

VII. Elektron-Elektron Wechselwirkung

VIII. Elektrischer Transport

XI. Optische Anregungen: Exzitonen

XII. Polaritonen

XIII. Supraleitung

XIV. 2D Spektroskopie ......

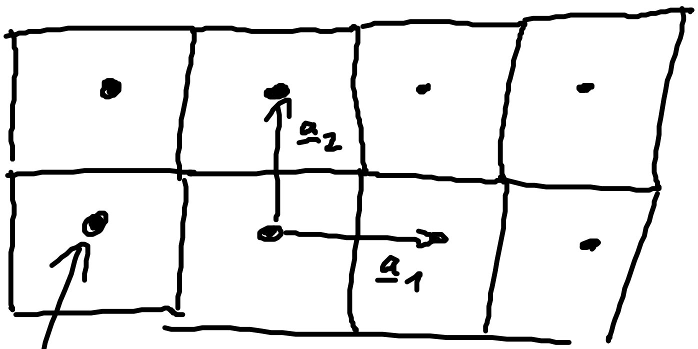
I. Kristallsymmetrie

Atome im Kristall besitzen im Gegensatz zum amorphen Festkörper regelmäßige Atompositionen.

(Invarianz gegenüber Symmetrietransformation des diskreten Gitter)

Die kleinste Einheit ist die Einheitszelle

<u>Bsp:</u>



Atomposition

durch periodische Fortsetzung wird gesamter Festkörper beschrieben.

$\underline{a}_i$ sind Einheitsvektoren

Die erlaubten Translationsoperationen werden beschrieben durch die <u>primitiven Translationen</u>.

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

(Außerdem wird dadurch das Punktgitter des Kristalls beschrieben)

Wichtig: im Allgemeinen sind $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$ nicht senkrecht und <u>nicht</u> normiert!

Weiterhin sind Drehung und Spiegel möglich; die Punkttransformation S.

Diese haben Gruppeneigenschaften:

1) $S_1 S_2$ wieder ein Element der Gruppe
2) $S_1 (S_2 S_3) = (S_1 S_2) S_3$

3) $S \underset{\substack{\uparrow \\ \text{1l Element}}}{E} = S$

4) Es existiert für jedes S ein S^{-1} mit $SS^{-1} = E$

Punkttransformation sind lineare Abbildungen:

$\underline{r}' = S\underline{r}$; hier S durch 3x3 Matrix darstellbar

S ist orthogonal damit Skalarprodukt invariant bleibt.

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

$\Rightarrow S^T S = E$

$\Rightarrow \det S = 1$ Drehung

$\det S = -1$ Drehung + Inversion

$S = -E$ Inversion

Welche Drehungen können die Translationsinvariante Geometrie invariant lassen?

Man kann zeigen, dass nur Winkel von $\varphi \in \{0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \pi\}$ möglich sind (ÜA)

also: Aus $E, \underbrace{D_2}_{\substack{\text{zweizählige} \\ \text{Symmetrie}}}, D_3, D_4, D_6, -E$ können alle Punktgruppen zusammengesetzt werden.

Bemerkung: Aus den Punktgruppen können oft allgemeine Aussagen über physikalische Größen wie z.B. permanentes Dipolmoment bei Inversionssymetrie geschlossen werden.

Die Klassifikation der verschiedenen Gitter erfolgt über die Bravais Gitter.

Allgemein gilt für eine auf den Gitterpunkten definierte Fkt

$$f(S\underline{r} + \underline{R}) = f(\underline{r})$$ für die Symmetrieoperationen und Translationen des jeweiligen Gitters!

Reziprokes Gitter

Bei einer gitterperiodischen Fkt $f(\underline{r}) = f(\underline{r} + \underline{R})$ kann diese über die Fourierreihe dargestellt werden:

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

Welche reziproken Gittervektoren $\underline{G}$ sind erlaubt?

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

$$\Rightarrow \quad \underline{G}\cdot\underline{R} = 2\pi m, \quad m \in \mathbb{Z}$$

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

Ansatz für $\underline{G} = m_1 \underline{g}_1 + m_2 \underline{g}_2 + m_3 \underline{g}_3 \qquad m_i \in \mathbb{Z}$

$$(n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3)(m_1 \underline{g}_1 + m_2 \underline{g}_2 + m_3 \underline{g}_3) = 2\pi m$$

Man kann z.B. $\underline{a}_i \cdot \underline{g}_j = 2\pi\, \delta_{ij}$ wählen!

$\{\underline{g}_i\}$ spannen das Reziproke Gitter auf.

Also steht der Vektor $\underline{g}_i$ senkrecht zu den Vektoren $\underline{a}_j, \underline{a}_k$ ist (i, j, k zyklisch)

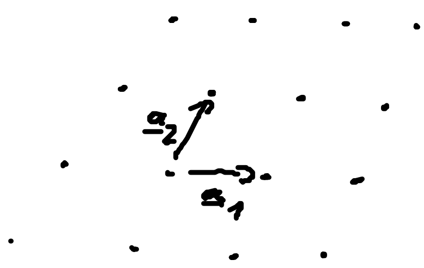
Daher $\quad \underline{g}_i = c\; \underline{a}_j \times \underline{a}_k$

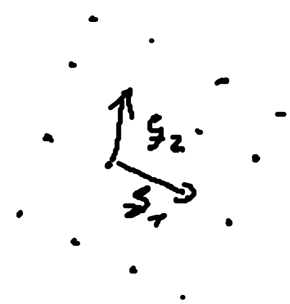
und aus $\underline{a}_i \cdot \underline{g}_i = c\, \underbrace{\underline{a}_i \cdot (\underline{a}_j \times \underline{a}_k)}_{\text{Volumen der Einheitszelle}} = 2\pi$

$$\Rightarrow \quad \underline{g}_i = 2\pi \frac{\underline{a}_j \times \underline{a}_k}{\underline{a}_i \cdot (\underline{a}_j \times \underline{a}_k)} \quad ; \quad \underline{a}_i = 2\pi \frac{\underline{g}_j \times \underline{g}_k}{\underline{g}_i \cdot (\underline{g}_j \times \underline{g}_k)}$$

<u>Beispiel</u> 2D Gitter

reziprokes Gitter





$\underline{a}_1 \perp \underline{g}_2$

$\underline{a}_2 \perp \underline{g}_1$

Zurück zur <u>Fourier Reihe</u>:

$$f(\underline{r}) = \sum_{\underline{g}} F(\underline{g})\, \underbrace{e^{i \underline{g} \cdot \underline{r}}}_{\text{ONS auf der Elementarzelle } \Omega}$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\underline{r}\; e^{i(\underline{g}' - \underline{g}) \cdot \underline{r}} = \delta_{\underline{g}, \underline{g}'}$$

Weiterhin sind diese Gitterperiodisch

$$e^{i \underline{g}(\underline{r} + \underline{R})} = e^{i(\underline{g} \cdot \underline{r} + \underbrace{\underline{g} \cdot \underline{R}}_{2\pi m})} = e^{i \underline{g} \cdot \underline{r}}$$

Die Fourier Reihe ist umkehrbar

$$\boxed{F(\underline{g}) \overset{!}{=} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} f(\underline{r})\, e^{-i \underline{g} \cdot \underline{r}}\, d^3\underline{r}}$$

$$= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sum_{\underline{g}'} F(\underline{g}')\, e^{i \underline{g}' \cdot \underline{r} - i \underline{g} \cdot \underline{r}}\, d^3\underline{r}$$

$$= \sum_{g'} F(g') \underbrace{\frac{1}{\Omega} \int e^{i(g'-g)\cdot r} d^3r}_{\delta_{g,g'}} = F(g)$$

ged.

II. Born – Oppenheimer Näherung

Welche Probleme gibt es bei der Beschreibung des Festkörpers?

Festkörper: Viele Atome ($10^2 - 10^3$) mindestens
- Außenelektronen / freie Elektronen
- Ionen: Rumpfelektronen (innen) + Atomkerne

<u>Ziel</u>: Quantentheorie für das gesamte System

<u>Lösung</u>: das kompletten Problem des Hamiltonoperators in QM illusorisch.

<u>Daher</u>: Hamiltonoperator für Valenzelektronen + Ionen aufspalten (ähnliches Vorgehen für Moleküle Chemie)

$$H = \underbrace{H_{el}}_{\text{Elektronen allein}} + \underbrace{H_{ion}}_{\text{Ionen allein}} + \underbrace{H_{el-ion}}_{\text{WW zw. Elektronen und Ionen beschreibt.}} + \underbrace{H_{ex}}_{\text{Wechselwirkung mit externen Feldern!}}$$

Rein elektronischer Anteil

$$H_{el} = \underbrace{\sum_i \frac{p_i^2}{2m_e}}_{\text{Heliumi freie Bewegung}} + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \sum_{i\neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

Hier oft Modifikation mit ε_r (Einflussrumpfelektronen)

$\underline{P}_i$: Impulsoperator des i-ten Elektrons $\qquad \underline{r}_i$: Position des i-ten Elektrons

Anteil der Ionen

$$H_{ion} = \underbrace{\sum_i \frac{\underline{P}_i^2}{2M_i}}_{\text{kinetischer Anteil}} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V_{ion}(\underline{R}_i - \underline{R}_j)}_{\text{Wechselwirkung der Ionen untereinander}}$$

(in der Regel auch kompliziertes Vielteilchenproblem)

Valenzelektronen und Ionen treten auch miteinander in Wechselwirkung!

$$H_{el-ion} = \sum_{i,j} V_{el-ion}(\underline{r}_i - \underline{R}_j)$$

Potential, das die Wechselwirkung beschreibt.

Insgesamt kompliziertes Problem durch Kopplung der Ionen mit Elektronen

$\Rightarrow$ Ziel: Elektronen und Ionen entkoppeln!

<u>1. Beobachtung</u>: Elektronen und Ionen haben sehr unterschiedliche Masse!

Ionen schwerer als Elektronen!

$\Rightarrow$ Ionen langsam!

<u>2. Schlussfolgerung</u> Ionen können in erster <u>Näherung</u> als starr angenommen werden!

$\Rightarrow$ Lösung des elektronischen Problems bei <u>starren Ionenpositionen</u> (Gleichgewichtspositionen)

⇒ Born - Oppenheimer Näherung (auch adiabatische Näherung)

3.) Korrektur

Entwicklung der Ionenposition um Ruhelage ⇒ Gitterschwingungen, Phononen und Elektron - Phononkopplung (siehe IV Gitterschwingung und VI Elektron-Phonon Kopplung)