Vorlesung Theoretische Festkörperphysik

Allg. Einführung

Sprechstunde

VL:

Di	10 – 12	EW 203	meistens: Marten Richter mrichter@itp.tu-berlin.de	EW 710	Mo 11:30 – 12:30
Mi	10 – 12	EW 203	meistens: Ermin Malic ermin.malic@tu-berlin.de	EW 703	Mi 11:45 – 12:45

Übungen

Mi 14 – 16 EW 229 Julia Kabuß EW 703 Do 10 – 11

julia@itp.tu-berlin.de

Übungsaufgaben

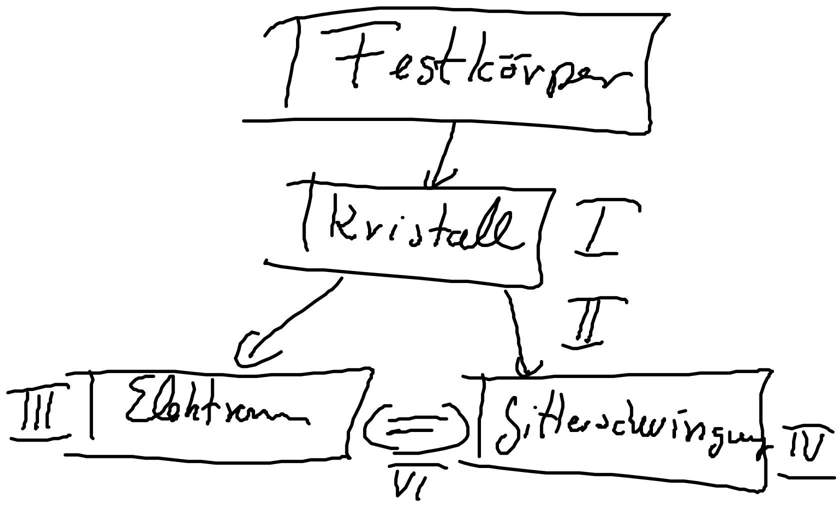
Ausgabe Di Abgabe: Mi am Beginn (!) der VL

Schein 60% der Punkte, keine Klausur

Zusammen mit VL von Prof. Scherz am Mo 12 – 14 EW 203 Wahlpflichtfach

Gliederung der Vorlesung

I Kristallsymmetrie (MR)
II Born – Oppenheimer (EM)
III Elektronische Zustände (MR)
IV Gitterschwingungen (EM)
V 2. Quantisierung (MR)
VI Elektron – Phonon Wechselwirkung (EM)
VII Elektron – Elektron Wechselwirkung (MR)
VIII Elektronischer Transport (EM)
XI Supraleitung und Polaritonen (MR)
X Optik (EM)

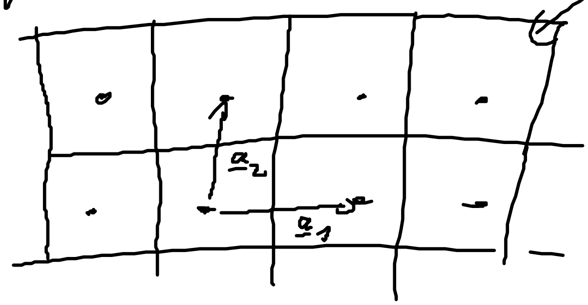


I. Kristallsymmetrie

Atome im Kristall besitzen im Gegensatz zu amorphen Festkörpern regelmäßige Atompositionen. (Invarianz gegenüber Symmetrieoperationen des diskreten Gitters)

Bsp.:

Die kleinste Einheit ist die Einheitszelle



$\underline{a}_i$ Einheitsvektor

Die erlaubten Translationen werden beschrieben durch die primitive Translation

$$\underline{R}_n = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3$$ mit n_1, n_2, n_3 ganze Zahlen!

Das beschreibt auch Gitter des Kristalls

Im Allgemeinen sind $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$ nicht orthogonal zueinander und nicht normiert.

Möglich sind auch Drehungen und Spiegelungen $\Rightarrow$ 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) $S\,E = S$
4) Es existiert für jedes S ein S^{-1}, so dass $S S^{-1} = \underline{E}$

Punkttransformation lineare Abbildung

$\underline{r}' = S \underline{r}$; hier ist S durch 3×3 Matrix darstellbar.

S orthogonal, dass Skalarprodukt wird invariant gelassen

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

$\Rightarrow \det S = 1$ (Drehung)

$\det S = -1$ (Drehung + Inversion)

$S = -E$ Inversion

Welche Drehungen können die Translationsinvarianz erhalten?

Man kann zeigen, dass nur die Winkel

$$\varphi \in \{0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \pi\} \text{ möglich sind} \quad (\text{ÜA})$$

<u>also</u> $E, \underset{\substack{\Uparrow \\ \text{zweizählige} \\ \text{Symmetrie}}}{D_2}, D_3, D_4, D_6, -E$ können alle Punktgruppen bei Kombination über Drehungen aller Achsen beschreiben.

<u>Bemerkung</u>: Aus den Punktgruppen können oft allgemeine Aussagen über physikalische Eigenschaften gemacht werden.

Die Klassifikation der Gitter erfolgt über die verschiedenen Typen der <u>Bravais</u> Gitter übrig.

Allgemein für eine auf den Gitterpunkten definierte Fkt.

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

<u>Reziproke Gitter</u>

Eine Gitter periodische Fkt $f(\underline{r}) = f(\underline{r} + \underline{R})$

Fourier-Reihe

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

Welche reziproke <u>Gittervektoren</u> sind hier erlaubt?

$$\sum_{\underline{g}} F(\underline{g})\, e^{i\underline{g}\cdot\underline{r}} = f(\underline{r}) = f(\underline{r} + \underline{R}) = \sum_{\underline{g}} F(\underline{g})\, e^{i\underline{g}\cdot\underline{r} + i\underbrace{\underline{g}\cdot\underline{R}}_{= 2\pi n}}$$

$$\Rightarrow \quad \underline{g}\cdot\underline{R} = 2\pi n \qquad n \in \mathbb{Z}$$

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

$\underline{g} = m_1 \underline{g}_1 + m_2 \underline{g}_2 + m_3 \underline{g}_3 \quad m_i \in \mathbb{Z}$

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

Ich wähle jetzt $\underline{a}_i \cdot \underline{g}_j = 2\pi\, \delta_{ij}$!

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

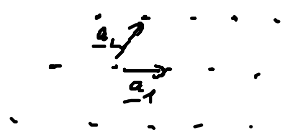
Also $\underline{g}_i$ steht senkrecht auf Vektoren $\underline{a}_j$ und $\underline{a}_k$ mit i,j,k zyklisch!

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

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

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

Beispiel: 2D Gitter



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

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

Zurück zur Fourier Reihe

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

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

Weiterhin sei das Gitter periodisch

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

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

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

$\longrightarrow$ Born Oppenheimer Abschnitt $\Rightarrow$ EM

III Elektronische Zustände

III.1 Blochsche Theorem

Formulierung der Translation $\underline{R}_n$ mittels des Translationsoperators: T_n

$$T_n f(\underline{r}) = f(\underline{r}+\underline{R}_n)$$

Kann z.B. auf die el. Wellenfunktion ψ angewandt

$$T_n \psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r}+\underline{R}_n) \overset{!}{=} t_n \psi(\underline{r})$$

Bei EV

Phasenfaktor! Warum? Die Wellenfkt ist kein Observable!
Die Wahrscheinlichkeiten $|\psi(\underline{r})|^2$ und $|\psi(\underline{r}+\underline{R})|^2$ sind Observablen und müssen dann gitterperiodisch sein!

Der Hamiltonoperator ist auch Translationsinvariant!

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(\underline{r})$$

$\leftarrow$ Gitterperiodisch!

$$[H, T_n] \overset{!}{=} 0$$

Bew: $(HT_n - T_n H)\psi(\underline{r}) = H \underbrace{\psi(\underline{r}+\underline{R}_n)}_{t_n \psi(\underline{r})} - T_n \left(\frac{p^2}{2m} + V_0(\underline{r})\right)\psi(\underline{r})$

$$= t_n H \psi(\underline{r}) - \underbrace{\Big(\frac{p^2}{2m} + \underbrace{V_0(\underline{r}+\underline{R}_n)}_{V_0(\underline{r})}\Big)}_{H} \underbrace{\psi(\underline{r}+\underline{R}_n)}_{t_n \psi(\underline{r})} = t_n H \psi(\underline{r}) - t_n H \psi(\underline{r}) = 0$$

qed.

$[H, T_n]_- = 0$ folgt der Hamiltonop und Translationsoperator haben ein gemeinsames System von Eigenfkt.

Also gibt es ein System von Eigenfkt

$$H \psi_{\lambda,k}(\underline{r}) = E_{\lambda,k} \psi_{\lambda,k}(\underline{r})$$

$$T_n \psi_{\lambda,k}(\underline{r}) = t_{n,k} \psi_{\lambda,k}(\underline{r})$$

mit den Quantenzahlen λ und $\underline{k}$

Da T_n Normierung nicht ändern sollten $\Rightarrow |t_n| = 1$

außerdem $t_{n,k} t_{m,k} = t_{n+m,k}$ weil $T_{m+n} = T_n T_m$

$$\Rightarrow t_{n,k} = e^{i(\underline{k}\cdot\underline{R}_n)} \qquad t_{n,k} t_{m,k}: e^{i(\underline{k}\cdot\underline{R}_n)} e^{i(\underline{k}\cdot\underline{R}_m)} = e^{i\underline{k}\cdot(\underline{R}_n+\underline{R}_m)}$$

$$t_{n,k} = e^{i(\underline{k}\cdot\underline{R}_n + 2\pi n)} = e^{i(\underline{k}\cdot\underline{R}_n + \underline{g}\cdot\underline{R}_n)} = e^{i(\underline{k}+\underline{g})\cdot\underline{R}_n} = t_{n,\underline{k}+\underline{g}}$$

Wir können $\underline{k}$ nur eindeutig auf dem Gebiet der Einheitszelle des reziproken Gitters definieren. Andernfalls kann jedes $\underline{k}$ man durch Translation durch den reziproken Gittervektor auf die Einheitszelle des reziproken Gitters abgebildet werden.

Daraus folgt

$$\boxed{e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_n} \psi_{\lambda,k}(\underline{r}) = \psi_{\lambda,k}(\underline{r}+\underline{R}_n)}$$

Bloch Theorem

Folgender Ansatz für die Blochwellenfkt ist üblich:

$$\Big\| \; \psi_{\lambda,k}(\underline{r}) = \frac{e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}}{\sqrt{V}} \, \underbrace{u_{\lambda,\underline{k}}(\underline{r})}_{\text{Blochfunktion}} \; \Big\| \quad \text{Blochwellenfkt}$$

$V = L^3$ Volumen Festkörpers

$$\psi_{\lambda,k}(\underline{r}) = \underbrace{\psi_{\lambda,k}(\underline{r}+\underline{R}_n)}_{\frac{e^{i\underline{k}(\underline{R}_n+\underline{r})}}{\sqrt{V}} u_{\lambda,k}(\underline{r}+\underline{R})} = e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_n} \, \psi_{\lambda,k}(\underline{r})$$

$$= \frac{e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_n} \, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}}{\sqrt{V}} \, u_{\lambda,k}(\underline{r})$$

$$\Longrightarrow \quad \Big\| \; u_{\lambda,\underline{k}}(\underline{r}) = u_{\lambda,\underline{k}}(\underline{r}+\underline{R}) \; \Big\|$$