

Experimentelle Physik IIIa

# **Struktur der Materie: Festkörperphysik WS 2018**

Dieter Suter

31. Januar 2019

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>10</b>
1.1	Themenübersicht . . . . .	10
1.1.1	Mikroskopische Grundlagen . . . . .	10
1.1.2	Ziele und Interessen . . . . .	11
1.1.3	Kondensierte Materie . . . . .	11
1.1.4	Entwicklung . . . . .	12
1.1.5	Methodik . . . . .	12
1.1.6	Inhalt . . . . .	13
1.2	Festkörperphysik in Dortmund . . . . .	13
1.2.1	Spektroskopische Methoden . . . . .	13
1.2.2	Forschungsthemen . . . . .	15
<b>2</b>	<b>Symmetrie und Struktur</b>	<b>16</b>
2.1	Ordnung in Festkörpern . . . . .	16
2.1.1	Atomtheorie . . . . .	16
2.1.2	Langreichweitige Ordnung . . . . .	16
2.1.3	Flüssigkristalle . . . . .	17
2.1.4	Translationssymmetrie . . . . .	18
2.1.5	Einheitszelle und Basis . . . . .	20
2.1.6	Die Wigner-Seitz Konstruktion . . . . .	20
2.1.7	Punktsymmetrie-Operationen . . . . .	21
2.1.8	Gruppen . . . . .	22
2.1.9	Hermann-Maugin Notation . . . . .	23
2.2	Symmetrie und Gitter . . . . .	23
2.2.1	Primitive und nichtprimitive Gitter . . . . .	23
2.2.2	Punktsymmetrieklassen . . . . .	24
2.2.3	Kristallsysteme . . . . .	26
2.2.4	Bravais-Gitter . . . . .	26
2.2.5	Raumgruppen . . . . .	27
2.3	Strukturen . . . . .	28
2.3.1	Netzebenen und Miller Indizes . . . . .	28
2.3.2	Dichteste Kugelpackung . . . . .	29
2.3.3	Kubische Strukturen . . . . .	30
2.3.4	Quasikristalle . . . . .	31
2.3.5	Defekte . . . . .	32
2.4	Strukturbestimmung . . . . .	34
2.4.1	Feld-Ionen Mikroskopie . . . . .	34
2.4.2	Elektronenmikroskopie . . . . .	35
2.4.3	Rastersonden Mikroskopie . . . . .	35

2.4.4	Röntgenbeugung . . . . .	36
2.4.5	Beugung von Materiewellen . . . . .	37
2.4.6	Neutronenbeugung . . . . .	38
2.5	Das reziproke Gitter . . . . .	40
2.5.1	Periodizität der Elektronendichte . . . . .	40
2.5.2	Definition des reziproken Gitters . . . . .	41
2.5.3	Beispiele . . . . .	41
2.5.4	Gitterelemente . . . . .	42
2.5.5	Reziproke Gittervektoren und Ebenenscharen . . . . .	43
2.5.6	Brillouin-Zonen . . . . .	44
2.6	Strukturbestimmung mit Beugungsmethoden . . . . .	44
2.6.1	Streuung an kontinuierliche Medien . . . . .	44
2.6.2	Bragg-Bedingung . . . . .	45
2.6.3	Röntgenstrahlung . . . . .	46
2.6.4	Ewald-Konstruktion . . . . .	46
2.6.5	Beugung an Pulvern . . . . .	47
2.6.6	Einkristall-Verfahren . . . . .	48
2.6.7	Laue-Bedingung . . . . .	49
2.7	Berechnung der gestreuten Intensität . . . . .	49
2.7.1	Streuamplitude und Strukturfaktor . . . . .	49
2.7.2	Atomare Beiträge . . . . .	50
2.7.3	Beispielrechnung . . . . .	51
2.7.4	Symmetriebedingte Auslöschung . . . . .	52
2.7.5	Atomformfaktor . . . . .	53
2.7.6	Das Phasenproblem . . . . .	54
2.7.7	Reelle und Komplexe Streuamplituden . . . . .	55
2.7.8	Thermische Bewegung . . . . .	56
2.7.9	Debye-Waller Faktor . . . . .	57
<b>3</b>	<b>Bindungen im Festkörper</b>	<b>59</b>
3.1	Grundlagen . . . . .	59
3.1.1	Wechselwirkung und Bindungsenergie . . . . .	59
3.1.2	Bindungstypen . . . . .	59
3.1.3	Bindungsenergien: Übersicht . . . . .	60
3.1.4	Das Wasserstoffmolekül . . . . .	61
3.1.5	Energie . . . . .	62
3.1.6	Molekülorbitale . . . . .	63
3.2	Paarwechselwirkungen . . . . .	64
3.2.1	Kovalente Bindung . . . . .	64
3.2.2	Kovalente Bindungen in Festkörpern . . . . .	65
3.2.3	Hybridorbitale . . . . .	66
3.2.4	Polare Bindungen . . . . .	67
3.2.5	Ionenpaare . . . . .	68
3.2.6	Pauli-Prinzip und Austauschwechselwirkung . . . . .	69
3.2.7	Van der Waals Bindung . . . . .	70
3.2.8	Gekoppeltes System . . . . .	72
3.2.9	Lennard-Jones Potenzial . . . . .	73

3.2.10	Metallische Bindung . . . . .	74
3.2.11	Kombinierte Bindungen . . . . .	75
3.2.12	Wasserstoffbrücken . . . . .	75
3.3	Gitterenergie . . . . .	76
3.3.1	Van der Waals . . . . .	76
3.3.2	Gleichgewichtsabstand . . . . .	78
3.3.3	Ionische Bindung . . . . .	78
3.3.4	Berechnung der Madelung-Konstanten . . . . .	79
3.3.5	Effizientere Algorithmen . . . . .	80
3.3.6	Metalle . . . . .	81
<b>4</b>	<b>Gitterschwingungen und Phononen</b>	<b>82</b>
4.1	Grundlagen . . . . .	82
4.1.1	Gleichgewichtsumgebung . . . . .	82
4.1.2	Die eindimensionale Kette . . . . .	83
4.1.3	Normalkoordinaten und Dispersionsrelation . . . . .	83
4.1.4	Brillouin-Zone . . . . .	84
4.1.5	Gruppengeschwindigkeit und Phasengeschwindigkeit . . . . .	85
4.1.6	Transversalschwingungen . . . . .	86
4.2	Kontinuumsmechanik . . . . .	86
4.2.1	Spannung und Dehnung . . . . .	86
4.2.2	Elastische Konstanten . . . . .	87
4.2.3	Scherung . . . . .	88
4.2.4	Unelastisches Verhalten . . . . .	88
4.2.5	Dehnungstensor . . . . .	89
4.2.6	Spannungstensor . . . . .	90
4.2.7	Wellenausbreitung in einem anisotropen Kontinuum . . . . .	91
4.2.8	Abbildung von Schallwellen . . . . .	91
4.2.9	Seismische Wellen . . . . .	92
4.3	Schwingungen in diskreten dreidimensionalen Systemen . . . . .	93
4.3.1	Richtungsabhängigkeit . . . . .	93
4.3.2	Zweiatomige Basis . . . . .	94
4.3.3	Große Wellenlängen . . . . .	95
4.3.4	Optischer Ast . . . . .	96
4.3.5	Verhalten am Zonenrand . . . . .	96
4.3.6	Beispiele . . . . .	98
4.3.7	Absorptionsmessung . . . . .	99
4.3.8	Inelastische Lichtstreuung . . . . .	99
4.3.9	Inelastische Röntgen-Streuung . . . . .	101
4.3.10	Phononenspektroskopie mit thermischen Neutronen . . . . .	102
4.4	Phononen und spezifische Wärme . . . . .	103
4.4.1	Spezifische Wärme . . . . .	103
4.4.2	Phononen . . . . .	104
4.4.3	Energie pro Gitterschwingung . . . . .	105
4.4.4	Zustandsdichte . . . . .	106
4.4.5	Debye-Modell . . . . .	108
4.4.6	Debye-Temperatur . . . . .	109

4.4.7	Spezifische Wärme im Debye-Modell . . . . .	110
4.4.8	Das $T^3$ Gesetz . . . . .	111
4.4.9	Vereinfachtes Modell . . . . .	112
4.4.10	Das Einstein-Modell . . . . .	113
4.4.11	Reale Zustandsdichten . . . . .	114
4.4.12	Beispiele und Diskussion . . . . .	115
4.5	Anharmonische Effekte . . . . .	116
4.5.1	Potenzial . . . . .	116
4.5.2	Wärmeausdehnung . . . . .	116
4.6	Wärmeleitung . . . . .	118
4.6.1	Grundlagen . . . . .	118
4.6.2	Wärmeleitfähigkeit . . . . .	119
4.6.3	Stöße von Phononen . . . . .	120
4.6.4	Freie Weglänge . . . . .	121
4.6.5	Wärmeleitkoeffizient . . . . .	122
4.6.6	Isotopeneffekte . . . . .	123
<b>5</b>	<b>Freie Elektronen</b> . . . . .	<b>124</b>
5.1	Klassische Beschreibung . . . . .	124
5.1.1	Metalle und ihre Eigenschaften . . . . .	124
5.1.2	Das Drude-Modell . . . . .	124
5.1.3	Ergebnisse . . . . .	125
5.1.4	Grenzen des Drude-Modells . . . . .	126
5.2	Das quantenmechanische Modell . . . . .	127
5.2.1	Das Sommerfeld-Modell . . . . .	127
5.2.2	Das Teilchen im Potenzialtopf . . . . .	127
5.2.3	Drei Raumdimensionen . . . . .	128
5.2.4	Fermi-Kugel . . . . .	129
5.2.5	Fermi-Energie . . . . .	129
5.2.6	Zustandsdichte . . . . .	131
5.3	Thermodynamik des Elektronengases . . . . .	131
5.3.1	Besetzungswahrscheinlichkeit . . . . .	131
5.3.2	Die Fermi-Dirac Verteilung . . . . .	133
5.3.3	Eigenschaften der Fermi-Dirac Verteilung . . . . .	133
5.3.4	Die thermische Energie des Elektronengases . . . . .	134
5.3.5	Spezifische Wärme . . . . .	135
5.3.6	Vergleich Elektronen / Phononen . . . . .	137
5.3.7	Effektive Masse . . . . .	137
5.4	Elektrische Leitfähigkeit . . . . .	138
5.4.1	Grundlagen . . . . .	138
5.4.2	Widerstand . . . . .	140
5.4.3	Streuung an Phononen . . . . .	140
5.4.4	Temperaturabhängigkeit . . . . .	141
5.4.5	Der Hall-Effekt . . . . .	142
5.4.6	Hall-Konstante . . . . .	143
5.4.7	Der Quanten-Hall-Effekt . . . . .	144

5.5	Wärmeleitung in Metallen . . . . .	145
5.5.1	Ansatz . . . . .	145
5.5.2	Temperaturabhängigkeit . . . . .	145
5.5.3	Vergleich elektrische / thermische Leitfähigkeit . . . . .	146
5.5.4	Thermoelektrische Effekte . . . . .	147
5.6	Kollektive Phänomene . . . . .	148
5.6.1	Abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung . . . . .	148
5.6.2	Metall-Isolator Übergang . . . . .	150
5.6.3	Quantisierte elektronische Anregungszustände . . . . .	151
5.6.4	Messung der Plasmafrequenz . . . . .	151
5.6.5	Elektromagnetische Wellen in Metallen . . . . .	152
5.7	Elektron-Phonon Wechselwirkung . . . . .	153
5.7.1	Grundlagen . . . . .	153
5.7.2	Polaronen . . . . .	153
5.7.3	Cooper Paare . . . . .	154
<b>6</b>	<b>Fast Freie Elektronen: Bandstrukturen</b>	<b>155</b>
6.1	Periodisches Potenzial . . . . .	155
6.1.1	Probleme des Modells freier Elektronen . . . . .	155
6.1.2	Störung durch Kerngitter . . . . .	156
6.1.3	Pseudopotenzial . . . . .	157
6.1.4	Punktförmige Störung . . . . .	157
6.1.5	Gestörter Hamiltonoperator . . . . .	158
6.1.6	Gekoppelte Zustände . . . . .	158
6.2	Eigenfunktionen im periodischen Potenzial . . . . .	159
6.2.1	Das Bloch'sche Theorem . . . . .	159
6.2.2	Beweis des Bloch'schen Theorems . . . . .	160
6.2.3	Der Phasenfaktor . . . . .	161
6.2.4	Schrödingergleichung in 1D . . . . .	161
6.2.5	Lösungsansatz . . . . .	162
6.2.6	Lösung . . . . .	162
6.2.7	Zonenrand . . . . .	163
6.2.8	Zustände und Energiefläche . . . . .	164
6.2.9	Abschätzung der Bandlücke . . . . .	165
6.3	Bänder . . . . .	165
6.3.1	Dispersionsrelation und Brillouin-Zone . . . . .	165
6.3.2	Zonenschemata . . . . .	166
6.3.3	Drei Dimensionen . . . . .	167
6.3.4	Fermioberfläche . . . . .	167
6.3.5	Darstellung höherer BZ . . . . .	167
6.3.6	Zonenrand-Effekte . . . . .	168
6.3.7	Messung . . . . .	169
6.3.8	Zustandsdichte und Bandlücke . . . . .	170
6.3.9	Fermiflächen von Alkalimetallen . . . . .	171
6.3.10	Metalle und Isolatoren . . . . .	172
6.3.11	Halbleiter und Halbmetalle . . . . .	173

6.4	Dynamik . . . . .	174
6.4.1	Bewegungsgleichungen . . . . .	174
6.4.2	Bloch-Oszillationen . . . . .	175
<b>7</b>	<b>Halbleiter</b>	<b>177</b>
7.1	Phänomenologie . . . . .	177
7.1.1	Einführung . . . . .	177
7.1.2	Klassifizierung . . . . .	178
7.1.3	Thermische Anregung . . . . .	178
7.1.4	Dotierung . . . . .	179
7.1.5	Absorption von Licht . . . . .	180
7.1.6	Lichtemission . . . . .	181
7.2	Ladungsträger . . . . .	182
7.2.1	Elektronen und Löcher . . . . .	182
7.2.2	Eigenschaften der Löcher . . . . .	183
7.2.3	Effektive Masse und Bandkrümmung . . . . .	184
7.2.4	3D: Halbklassische Bewegungsgleichung . . . . .	185
7.2.5	Effektive Massen in Halbleitern . . . . .	186
7.2.6	Dynamik am Zonenrand . . . . .	187
7.2.7	Leichte und schwere Elektronen . . . . .	188
7.2.8	Form der Fermi-Oberfläche / Zyklotronresonanz . . . . .	188
7.2.9	Beispiele . . . . .	190
7.2.10	Zustandsdichte im Magnetfeld . . . . .	191
7.3	Leitfähigkeit . . . . .	192
7.3.1	Ladungsträgerdichte und Zustandsdichte . . . . .	192
7.3.2	Ladungsträgerdichte für Löcher . . . . .	193
7.3.3	Beweglichkeit . . . . .	194
7.3.4	Dotierung . . . . .	194
7.3.5	Donatorzustände . . . . .	195
7.3.6	P-Dotierung . . . . .	196
7.3.7	Exzitonen . . . . .	197
7.3.8	Thermische Anregung . . . . .	197
7.3.9	Ladungsträger-Gleichgewicht . . . . .	198
7.4	Halbleiter-Bauelemente . . . . .	199
7.4.1	n-p Übergang . . . . .	199
7.4.2	Diode . . . . .	200
7.4.3	Diodenkennlinie . . . . .	200
7.4.4	Thermoelektrische Effekte . . . . .	201
<b>8</b>	<b>Magnetismus</b>	<b>202</b>
8.1	Diamagnetismus und Paramagnetismus . . . . .	202
8.1.1	Phänomenologie . . . . .	202
8.1.2	Diamagnetismus . . . . .	203
8.1.3	Atomare magnetische Momente . . . . .	205
8.1.4	Hund'sche Regeln . . . . .	205
8.1.5	Übergangsmetall-Atome . . . . .	206
8.1.6	Seltene Erden . . . . .	206

8.1.7	Einfluss des Kristallfeldes . . . . .	207
8.2	Thermodynamik . . . . .	208
8.2.1	Statistik im Magnetfeld . . . . .	208
8.2.2	Klassischer Grenzfall . . . . .	209
8.2.3	Freies Elektronengas . . . . .	210
8.2.4	Zusammenfassung und Überblick . . . . .	211
8.2.5	Magnetische Kühlung . . . . .	212
8.3	Bahn-Quantisierung in einem Magnetfeld . . . . .	212
8.3.1	Kreisbahnen . . . . .	212
8.3.2	Quantisierung des Flusses . . . . .	213
8.3.3	Landau-Zustände . . . . .	214
8.3.4	Entartung . . . . .	215
8.3.5	Besetzung und Gesamtenergie . . . . .	215
8.3.6	De Haas - van Alphen Effekt . . . . .	216
8.3.7	Messung von Fermiflächen . . . . .	218
8.3.8	Quanten-Hall Effekt . . . . .	218
8.4	Ferromagnetismus . . . . .	219
8.4.1	Magnetische Ordnung . . . . .	219
8.4.2	Austausch-Wechselwirkung . . . . .	219
8.4.3	Molekularfeld-Näherung . . . . .	221
8.4.4	Phasenübergang . . . . .	221
8.4.5	Temperaturabhängigkeit . . . . .	222
8.4.6	Magnetonenzahl . . . . .	222
8.4.7	Angeregte Zustände . . . . .	223
8.4.8	Spinwellen . . . . .	224
8.4.9	Beispiele . . . . .	226
8.4.10	Thermische Anregung von Magnonen . . . . .	226
8.5	Antiferromagnetismus und Ferrimagnetismus . . . . .	227
8.5.1	Antiferromagnetische Kopplung . . . . .	227
8.5.2	Antiferromagnetische Ordnung . . . . .	228
8.5.3	Beispiel: MnO . . . . .	228
8.5.4	Ferrimagnetismus . . . . .	229
8.5.5	Suszeptibilität . . . . .	229
8.5.6	Temperaturabhängigkeit für $T > T_c$ . . . . .	230
8.5.7	Der antiferromagnetische Zustand . . . . .	231
8.5.8	Messung mit Kernspinresonanz . . . . .	232
8.5.9	Helikale Spinordnung . . . . .	232
8.6	Magnetische Domänen . . . . .	233
8.6.1	Phänomenologie . . . . .	233
8.6.2	Magnetische Feldenergie . . . . .	234
8.6.3	Domänenwände . . . . .	234
8.6.4	Anisotropie . . . . .	235
8.6.5	Dicke der Blochwände . . . . .	236
8.6.6	Domänen im Magnetfeld . . . . .	236
8.6.7	Hysterese . . . . .	237
8.6.8	Magnetische Nanostrukturen . . . . .	238
8.6.9	Biomagnetismus . . . . .	239

8.6.10	Magnetostriktion . . . . .	239
<b>9</b>	<b>Supraleitung</b>	<b>241</b>
9.1	Phänomenologie . . . . .	241
9.1.1	Entdeckung . . . . .	241
9.1.2	Leitfähigkeit . . . . .	241
9.1.3	Diamagnetismus . . . . .	242
9.1.4	Kritische Temperatur und kritisches Feld . . . . .	243
9.1.5	Typ II Supraleiter . . . . .	244
9.1.6	Thermodynamik . . . . .	246
9.1.7	Energielücke . . . . .	247
9.1.8	Isotopeneffekt . . . . .	248
9.1.9	Historische Entwicklung . . . . .	249
9.2	Theoretische Ansätze (phänomenologisch) . . . . .	249
9.2.1	Stabilisierungsenergie . . . . .	249
9.2.2	Modell der 2 Flüssigkeiten . . . . .	250
9.2.3	London-Gleichung . . . . .	251
9.2.4	Eindringtiefe . . . . .	251
9.2.5	Pippard'sche Kohärenzlänge . . . . .	252
9.2.6	Shubnikov-Phase . . . . .	253
9.2.7	Ginsburg-Landau Ordnungsparameter . . . . .	253
9.2.8	GL-Kohärenzlänge . . . . .	254
9.2.9	Fluss-Quantisierung . . . . .	255
9.3	Skizze der BCS-Theorie . . . . .	256
9.3.1	Elektron-Phonon Streuung . . . . .	256
9.3.2	Cooper Paare . . . . .	256
9.3.3	BCS-Grundzustand . . . . .	257
9.3.4	Energielücke . . . . .	258
9.3.5	Die wichtigsten Resultate . . . . .	258
9.4	Resultate und Anwendungen . . . . .	259
9.4.1	Leitfähigkeit . . . . .	259
9.4.2	Tunnel-Kontakte . . . . .	260
9.4.3	Josephson-Kontakte . . . . .	261
9.4.4	DC Josephson Effekt . . . . .	262
9.4.5	AC Josephson Effekt . . . . .	262
9.4.6	Magnetfeld . . . . .	263
9.4.7	SQUID . . . . .	263
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>265</b>