

# 1 Einführung

Dieser Teil der Vorlesung befasst sich mit der Festkörperphysik. Die wichtigsten Ziele sind

- Übersicht über die Phänomenologie
- Verständnis für die mikroskopischen Ursachen
- Übersicht über Untersuchungsmethoden (theoretisch und experimentell)

Um sich den Stoff richtig zu erarbeiten ist ein passendes Lehrbuch (besser: 2 oder 3 passende Lehrbücher) eine unabdingbare Voraussetzung. Die Liste zeigt einige bewährte Standardwerke. Natürlich stellt diese Liste nur eine kleine Auswahl möglicher Vorlesungsbegleiter dar.

- K. Kopitzki: *Einführung in die Festkörperphysik*, Teubner Studienbücher
- Ch. Kittel: *Einführung in die Festkörperphysik*, R. Oldenbourg, München
- K. H. Hellwege: *Einführung in die Festkörperphysik*, Springer-Verlag, Berlin
- N. Ashcroft, N. Mermin: *Solid state physics*, Holt, Rinehart and Winston
- H. Ibach, H. Lüth: *Festkörperphysik*, Springer

## 1.1 Themenübersicht

### 1.1.1 Mikroskopische Grundlagen

Die Festkörperphysik diskutiert “feste Körper”, d.h. kondensierte Materie, welche sich in einem kristallinen Zustand befindet. Als Beispiel kann man sich einen Kristall anschauen. Die Beschreibung eines solchen Kristalls kann auf unterschiedlichen Ebenen erfolgen. Meist beginnt man auf einer phänomenologischen Ebene, d.h. man

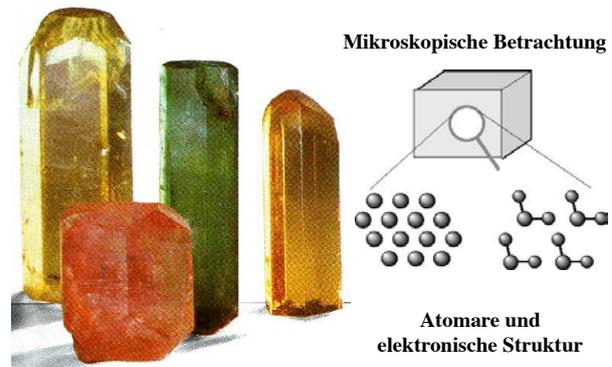


Abbildung 1.1: Festkörper und ihre mikroskopische Beschreibung.

beschreibt zunächst die makroskopischen Eigenschaften wie z.B. optische Eigenschaften, elektrische Leitfähigkeit, Wärmekapazität etc. Diese Ebene wird nicht nur in der Festkörperphysik, sondern auch in der Mechanik und Werkstoffkunde untersucht.

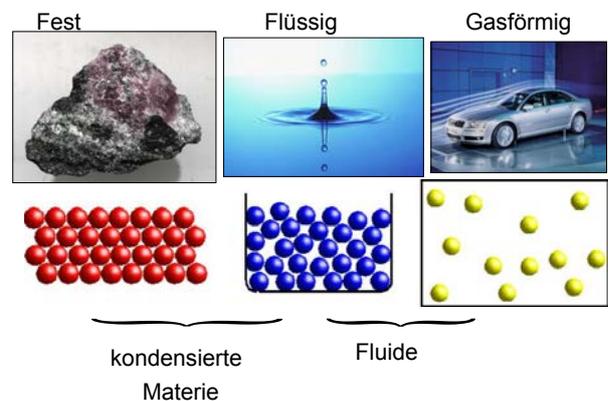


Abbildung 1.2: Die wichtigsten Aggregatzustände.

Feste Körper bezeichnen einen der drei wichtigsten Aggregatzustände, wie in Abb. 1.2 gezeigt. Alle drei gezeigten Aggregatzustände stellen idealisierte Modelle dar. Während es in den meisten Fällen klar ist, welches Modell eine gute

Beschreibung darstellt, gibt es auch Grenzfälle. Abb. 1.3 zeigt als Beispiel einen Gletscher. Eis wird meistens als Festkörper bezeichnet (im Gegensatz zu Wasser als Flüssigkeit und Wasserdampf als Gas). Aus der Figur wird aber auch deutlich, dass Eis auf größeren Zeitskalen auch Eigenschaften einer Flüssigkeit aufweist.



Abbildung 1.3: Gletscher.

Im Gegensatz dazu steht die Beschreibung auf einer mikroskopischen Ebene. Hier geht es um die Deutung der phänomenologischen Beobachtungen, so z.B. die Erklärung des elektrischen Widerstandes aufgrund von Streueffekten an Fehlstellen; der Supraleitung durch Paarbildung von Elektronen; des Magnetismus durch Kopplungen zwischen Elektronen.

Der Wunsch, makroskopische Beobachtungen auf mikroskopische Strukturen oder Prozesse zurückzuführen hat in der Physik eine lange Tradition. So wurde die Atomtheorie, also die Theorie von der Existenz kleinster Teilchen, welche in der Antike von Demokrit (460-370 v. Chr.) postuliert worden war, in der Neuzeit wieder entdeckt, weil man verschiedene makroskopische Beobachtungen damit am elegantesten erklären konnte. Die bekannteste Beobachtung, welche die Atomhypothese nahe legte stammen aus der Chemie, wo Antoine Lavoisier und John Dalton im 18. Jh. beobachtete, dass chemische Elemente in bestimmten Verhältnissen miteinander reagieren. So entstehen z.B. aus zwei Teilen Wasserstoff und einem Teil Sauerstoff Wasser. Die möglichen Verhältnisse, in denen die gleichen Elemente reagie-

ren, können durch kleine ganze Zahlen beschrieben werden konnten. Der andere Teil dieser Vorlesung (Kerne und Teilchen) diskutiert die konsequente Fortsetzung dieses Programms auf noch kleineren Stufen.

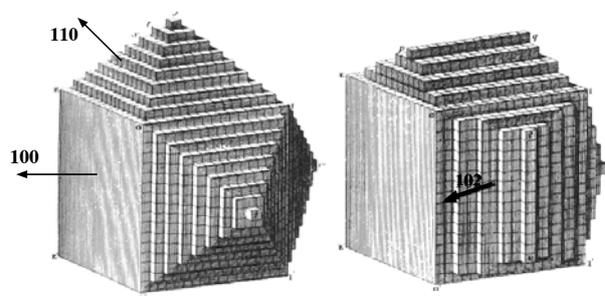


Abbildung 1.4: Indizierung von Kristallebenen.

Die experimentellen Möglichkeiten, Materie auf atomarer Struktur zu untersuchen, wurden im 19. und 20. Jahrhundert entwickelt. Einfache Hinweise erhaben sich zunächst aus rein makroskopischen Betrachtungen der Form von Kristallen. So stellte man fest, dass die Ebenen der Kristalle durch wenige ganze Zahlen indiziert werden konnten. Diese makroskopische Beobachtung konnte man wiederum am besten erklären, wenn man davon ausging, dass die Kristalle aus vielen identischen, regelmäßig angeordneten Teilchen bestehen.

### 1.1.2 Ziele und Interessen

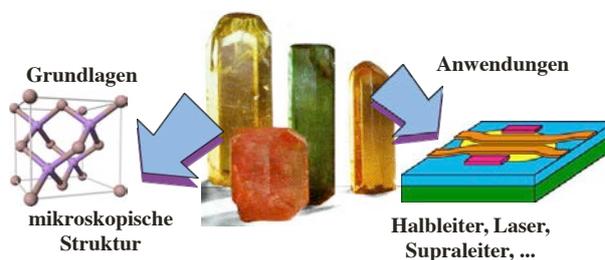


Abbildung 1.5: Ziele der Festkörperphysik: Verständnis und Anwendungen.

Die Festkörperphysik versucht, das Verständnis für die Materialeigenschaften von festen Körpern

zu verbessern. Hierzu gehören auf der Grundlagenseite vor allem Aussagen über die mikroskopische Struktur und deren Konsequenzen für makroskopisch beobachtbare Eigenschaften. Genau so versucht die Festkörperphysik, diese Eigenschaften für praktische Anwendungen nutzbar zu machen. Hier sind viele entsprechende Resultate bekannt, wie z.B. Halbleiter, Laser oder Supraleiter.

Ursprünglich hat man versucht, die makroskopischen Eigenschaften mit Hilfe von mechanischen Modellen zu erklären. Es zeigte sich aber, dass dies nur in sehr begrenztem Umfang möglich ist. Statt dessen muss zur Erklärung der allermeisten Phänomene die Quantenmechanik benutzt werden. Die Festkörperphysik ist deshalb wahrscheinlich eine der wichtigsten Anwendungsgebiete für die Quantenmechanik. So können die qualitativen Unterschiede zwischen verschiedenen Stoffklassen, wie z.B. Metalle, Isolatoren, oder Supraleiter nur quantenmechanisch erklärt werden. Sie dürfen dies durchaus als Aufforderung verstehen, sich nochmals Ihre Unterlagen zur Quantenmechanik anzuschauen.

### 1.1.3 Kondensierte Materie

Die Festkörperphysik ist ein Teilgebiet der Physik der kondensierten Materie. Das erweiterte Gebiet umfasst insbesondere auch die Physik des flüssigen Zustandes. Im Rahmen dieser Vorlesung wird nicht spezifisch auf Flüssigkeiten eingegangen. Man sollte sich aber im klaren sein, dass eine exakte Abgrenzung zwischen Flüssigkeiten und Festkörpern nicht möglich ist. So wird ein Glas häufig als Flüssigkeit bezeichnet, welche zu kalt sei, um zu gefrieren, und der Übergang zwischen den beiden Aggregatzuständen, nämlich der Glaspunkt, ist nicht immer exakt bestimmt.

Im englischsprachigen Raum wird meist von der Physik der kondensierten Materie (“condensed matter physics”) gesprochen. Während sich die traditionelle Festkörperphysik in erster Linie auf kristalline Festkörper konzentriert werden in einem weiteren Umfeld auch Systeme diskutiert,

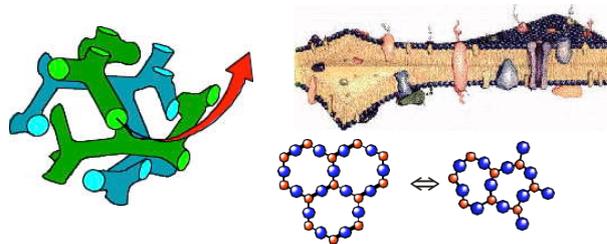


Abbildung 1.6: Oberflächendominierte Systeme, weiche Materie und teilgeordnete Systeme (Gläser).

welche zwar zur kondensierten Materie gehören, jedoch keine strenge langreichweitige Ordnung besitzen. Wie in Abb. 1.6 gezeigt, gehören dazu z.B. so genannte weiche Materialien wie z.B. molekulare Systeme, Gläser, Polymere und andere amorphe Materialien. Auch oberflächendominierte, mikro- und nanostrukturierte Systeme werden heute immer intensiver untersucht.

### 1.1.4 Entwicklung

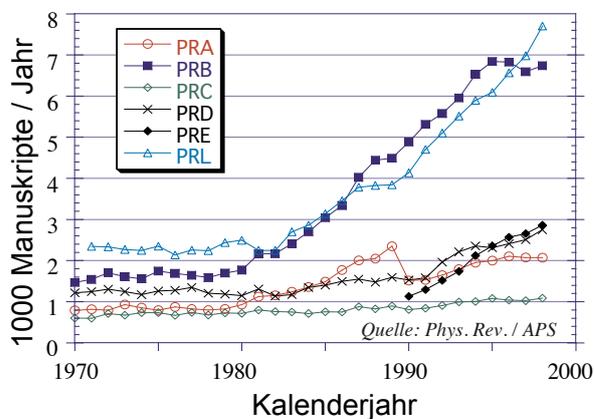


Abbildung 1.7: Anzahl Publikationen pro Jahr für verschiedene Gebiete der Physik.

Die Festkörperphysik stellt ein Teilgebiet der Physik dar. Dabei handelt es sich um ein Teilgebiet, welches in den letzten Jahren ein enormes Wachstum erlebt hat und heute mit Abstand das wichtigste Teilgebiet darstellt. Man kann dies z.B. anhand der Publikationen verfolgen, welche

in den letzten 30 Jahren in Physical Review erschienen sind. Physical Review B, welche Publikationen aus dem Bereich der Festkörperphysik enthält, hat das weitaus größte Wachstum erlebt. Es kann davon ausgegangen werden, dass die Betonung der Materialforschung als ein Schlüsselthema diesen Effekt eher noch verstärken wird. Stichworte: Halbleiterindustrie, neue Materialien, HTC-Supraleiter etc.

### 1.1.5 Methodik

Jedes Gebiet hat seine eigenen Arbeitsmethoden. Der Atomphysiker Wolfgang Pauli sagte einmal über die Festkörperphysik, diese sei eine ‘Schmutzphysik’. Damit wollte er in erster Linie darauf hinweisen, dass in der Festkörperphysik Verunreinigungen und Imperfektionen eine wesentlich wichtigere Rolle spielen als z.B. in der Atomphysik: Festkörper bestehen im Allgemeinen aus einer sehr großen Zahl von Teilchen, welche nie perfekt angeordnet sind – im Gegensatz zu Atomen: zwei Wasserstoffatome sind immer identisch und ununterscheidbar. Diese ‘Verunreinigungen’ können die wichtigsten Eigenschaften eines Materials ausmachen. Dies wird z.B. in der Halbleiterindustrie verwendet. Wir werden uns allerdings während dem größten Teil dieser Veranstaltung mit sehr idealisierten Systemen beschäftigen und die Diskussion der meisten Imperfektionen für spezialisierte Veranstaltungen aufsparen.

Einen anderen Aspekt betont der Festkörpertheoretiker P.W. Anderson<sup>1</sup> in einem 1972 erschienenen Artikel (P.W. Anderson, ‘More is different’, Science 177, 393 (1972)). Damit spricht er in erster Linie die Hierarchie von Phänomenen an, welche unter anderem in der Festkörperphysik sehr wichtig sind: Es sind die kollektiven Phänomene, also Phänomene, bei denen viele Teilchen zusammenwirken, die neue Physik hervorbringen in dem Sinn, dass dafür eine neue Art der

<sup>1</sup>Philip Warren Anderson (1923 – 2020); 1977 Nobelpreis für seine “fundamental theoretical investigations of the electronic structure of magnetic and disordered systems”

Beschreibung benötigt wird. Es ist nicht möglich oder auch nur sinnvoll, die Schwingungen eines Festkörpers anhand der Bewegungen der einzelnen Atome zu beschreiben, sondern man führt dafür kollektive Freiheitsgrade ein, die Gitterschwingungen oder Phononen.

Die Supraleitung ist ein gutes Beispiel: Hier ordnen sich alle Elektronen im Wechselspiel mit dem Kristallgitter zu einem makroskopischen Quantenzustand zusammen, der widerstandsfrei Strom führen kann. Ein anderes Beispiel ist der Quanten-Hall Effekt: Im Zusammenwirken von Elektronen bildet sich in zweidimensionalen Systemen ein Ladungsträgersystem mit quantisiertem Hallwiderstand aus.

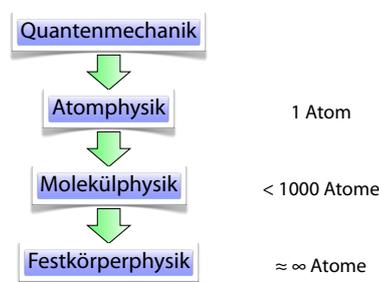


Abbildung 1.8: Von der Quantenmechanik zur Festkörperphysik.

In beiden Fällen muss man sich somit mit einer praktisch unendlichen Zahl von Freiheitsgraden beschäftigen. So ist ein Kristall aus einer extrem großen Anzahl ( $> 10^{20}$ ) von Teilchen aufgebaut, die alle miteinander in Wechselwirkung stehen. Eine exakte und vollständige Beschreibung eines solchen Systems ist deshalb nicht möglich. Häufig ist es aber auch gar nicht nötig, eine exakte Beschreibung zu haben, sondern es reicht, wenn man Aussagen über die Symmetrie oder die Reaktion auf eine äußere Störung machen kann. Dafür kann man auf Näherungsverfahren zurückgreifen. Das zentrale Problem ist, Näherungen so geschickt durchzuführen, dass einerseits das Problem lösbar wird, andererseits noch alle wesentlichen physikalischen Faktoren erfasst werden.

Ein typisches Vorgehen ist, dass man zunächst einen einfachen Fall sucht, der zwar nicht realistisch ist, der aber mit Hilfe geeigneter Annah-

men und Näherungen exakt lösbar ist. Ein typisches Beispiel sind ideale Kristalle am absoluten Nullpunkt ( $T = 0$  K), mit Elektronen ohne Wechselwirkung. Davon ausgehend führt man Störungen ein, welche z.B. durch Anregungen und entsprechende Quasiteilchen [17] beschrieben werden können. Die theoretische Festkörperphysik beinhaltet eine entsprechend große Zahl von Quasiteilchen (Phononen, Magnonen, Polaritonen, ...) und benutzt Feldtheorien, welche formal ähnlich aufgebaut sind wie in der Quantenelektrodynamik oder Quantenchromodynamik. Bei der Beschreibung von Phänomenen wird dann

- das Verhalten eines durch Modellbildung erzeugten ‘Teilchens’
- das Verhalten einer großen Anzahl solcher Teilchen in einem kollektiven Zustand

betrachtet. In diesem Sinn bestehen direkte Analogien zur Teilchenphysik.

### 1.1.6 Inhalt

Inhaltlich beginnt die Vorlesung mit einem Überblick über die Struktur von Festkörpern. Dabei wird die Struktur wesentlich durch die möglichen Symmetrieoperationen bestimmt. Bei den Methoden, welche für die Strukturbestimmung verwendet werden, wird zwischen direkten Methoden und Beugungsmethoden unterschieden. Kapitel 3 und 4 behandeln die unterschiedlichen Kräfte, welche die Festkörper zusammenhalten und die Bewegungen der Atome um ihre Gleichgewichtspositionen. In Kapitel 5 und 6 werden die Elektronen diskutiert, wobei sie zunächst als freie Elektronen diskutiert werden, und erst danach der Einfluss der Atomkernrümpfe diskutiert wird. Das resultierende Bändermodell wird im siebten Kapitel anhand der Materialklasse ‘Halbleiter’ noch genauer diskutiert. Kapitel 8 und 9 behandeln die Aspekte Magnetismus und Supraleitung.

## 1.2 Festkörperphysik in Dortmund

Die Festkörperphysik ist das größte Standbein der Dortmunder Physik. Für die Untersuchung der Materialien benötigt man spezialisierte experimentelle Ausrüstungen. Eine Dortmunder Spezialität besteht darin, dass wir eine breite Palette von spektroskopischen Methoden entwickelt haben, wobei der Bereich der verwendeten Wellenlängen von vielen Metern bis in den sub-Å Bereich reicht.

### 1.2.1 Spektroskopische Methoden

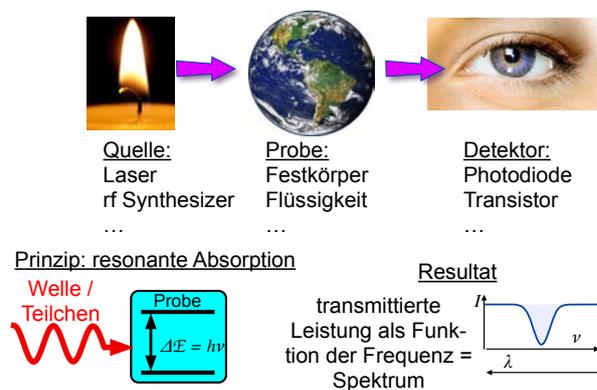


Abbildung 1.9: Prinzip spektroskopischer Untersuchungen.

Spektroskopische Methoden verwenden allgemein elektromagnetische Strahlung, welche mit dem zu untersuchenden Gegenstand in Wechselwirkung tritt. Die Stärke der Wechselwirkung hängt ab von der Frequenz, respektive der Wellenlänge der Strahlung. Aus der gemessenen Abhängigkeit kann man Informationen über den Aufbau, die Zusammensetzung, die Struktur und die Dynamik der untersuchten Materialien erhalten. In bestimmten Fällen wird anstelle von elektromagnetischen Wellen auch ein Teilchenstrom verwendet.

Ein Großgerät, welches u.a. für spektroskopische Messungen verwendet wird, ist DELTA, die Dortmunder Elektronen Testspeicher Anlage.

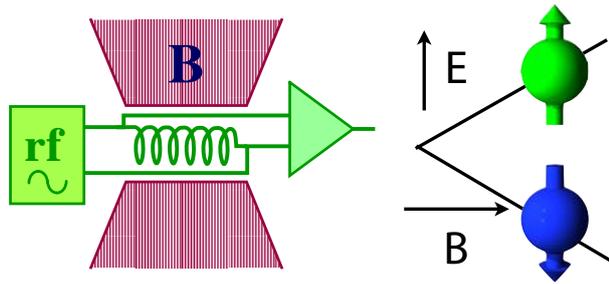
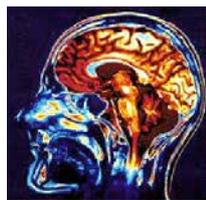


Abbildung 1.10: Prinzip der magnetischen Resonanz.

An dieser Stelle sollen die experimentellen Techniken kurz angesprochen werden, welche wir am Lehrstuhl E3 verwendet werden. Dazu gehört die magnetische Resonanz. Hierbei verwendet man ein starkes Magnetfeld, um die Entartung zwischen unterschiedlichen Spinzuständen von Kernen oder Elektronen aufzuheben. Mit Hilfe eines magnetischen Wechselfeldes werden Übergänge zwischen Spinzuständen induziert, welche dann stattfinden, wenn die Frequenz des Wechselfeldes in Resonanz mit dem Energieunterschied zwischen den zugehörigen quantenmechanischen Zuständen ist. Die dafür benötigten starken Magnetfelder von 4-14 T (ca. 100'000-faches Erdmagnetfeld) werden meist durch supraleitende Magneten erzeugt.



Um feststellen zu können, wo im Körper sich Spins befinden, muß das Signal ortsabhängig gemacht werden. Dies geschieht über ein Magnetfeld dessen Stärke als Funktion des Ortes variiert. Dabei erfolgt eine Projektion auf die Richtung des Feldgradienten.

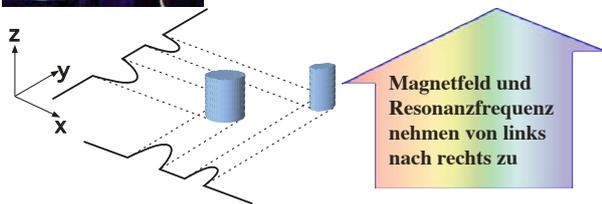


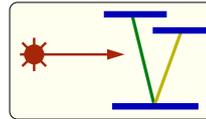
Abbildung 1.11: Prinzip der bildgebenden magnetischen Resonanz.

Zu den bekanntesten Anwendungen der magnetischen Resonanz gehört die Bildgebung; hier interessiert man sich z.B. für die Verteilung der

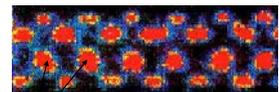
Spindichte im menschlichen Körper, wie z.B. in Abb. 1.11 im Gehirn. Dafür benötigt man ein räumlich variierendes Magnetfeld. Je stärker das Magnetfeld, desto größer die Aufspaltung zwischen den Spinzuständen und damit die Resonanzfrequenz. Indem man die Absorption von Radiowellen als Funktion der Frequenz misst, erhält man damit ein Bild der untersuchten Probe.

**Prinzip**

Laserlicht bringt ein System in energetisch höher liegende Zustände

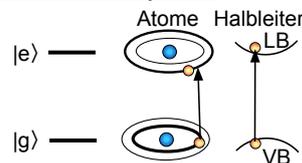


**Empfindlichkeit**



Mg<sup>+</sup>-Ionen

**Zustände und Systeme**



**Zeitliche Auflösung:**

$\Delta t < 10^{-14} \text{ s} \rightarrow \text{E2}$

**Spektrale Auflösung:**

$\Delta \nu/\nu < 10^{-15} \rightarrow \text{E3}$

Abbildung 1.12: Prinzip der Laserspektroskopie.

Neben der magnetischen Resonanz verwenden wir auch die Laserspektroskopie. Wie in Abb. 1.12 gezeigt, verwendet man dabei Laserlicht, um die Energie von elektronischen Zuständen zu messen. Laserspektroskopie ist extrem empfindlich und kann u.a. zur Untersuchung von einzelnen Teilchen, wie z.B. Atomen oder Ionen verwendet werden. Sie ermöglicht auch sehr präzise Messungen, z.B. bezüglich der zeitlichen oder spektralen Auflösung.

**1.2.2 Forschungsthemen**

Zu den von uns untersuchten Materialien gehören z.B. Metalloproteine. Dazu gehören ca. 30% aller Enzyme. Metalloproteine enthalten mindestens ein Übergangsmetallion, welches für die Funktion des Proteins benötigt wird. Beispiele findet man vor allem bei Elektronen-Übertragungsreaktionen und bei der Atmung. Zu den bekanntesten Molekülen gehören Hämoglobin oder Chlorophyll.

Ein anderes Beispiel, welches wir untersuchen,

sind nanostrukturierte Halbleiter. Im Verlaufe der Vorlesung werden Halbleiter genauer diskutiert. Die Strukturierung auf einer Skala von wenigen Nanometern dient vor allem dazu, ihre elektronischen Eigenschaften gezielt zu verändern. Man kann solche Quantenfilme z.B. als experimentelle Realisierung des "Teilchens im Potenzialtopf" verstehen. Sie werden u.a. in Halbleiterlasern verwendet, welche wiederum in Laserzeigern, CD und CDRom Spielern verwendet werden.

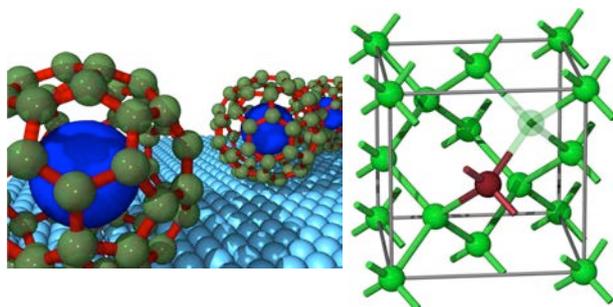


Abbildung 1.13: Speichereinheiten für Quantencomputer: endohedrale Fullere und NV-Zentren in Diamant.

Ein Schwerpunkt unserer Arbeiten ist die Quanten-Informationsverarbeitung. Wir implementieren dazu Quantenalgorithmen, führen grundlegende Messungen zur Dekohärenz durch und untersuchen Möglichkeiten, skalierbare Quantenrechner zu bauen. Ein Beispiel für einen solchen Ansatz sind endohedrale Fullerene. Dabei handelt es sich um Fullerenmoleküle, also die sog. Buckyballs oder Fußballmoleküle, in deren inneren sich ein zusätzliches Atom befindet. Prinzipiell sollte es möglich sein, in diesem Atom Information zu speichern und dies in einem Quanten-Rechenwerk zu verarbeiten.

Ein anderes physikalisches System, das interessante Möglichkeiten für die Quanteninformationsverarbeitung eröffnet, sind die sogenannten Stickstoff-Leerstellen Zentren im Diamant. Wie in Abb. 1.13 gezeigt, ist hier an Stelle eines Kohlenstoff-Atoms ein Stickstoffatom in das Gitter eingebaut, während ein benachbarter Kohlenstoff fehlt: an dieser Stelle haben wir eine Leerstelle. Dieses System ist deshalb besonders inter-

essant, weil es einem erlaubt, bei Raumtemperatur mit einzelnen atomaren Systemen zu arbeiten.

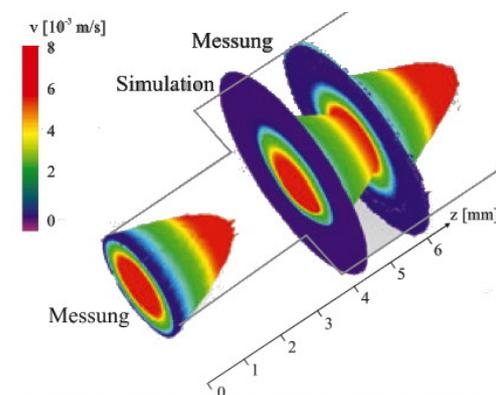


Abbildung 1.14: Vergleich von gemessener und gerechneter Strömungsgeschwindigkeit in einem Rohr mit variablem Querschnitt.

Ein weiteres aktuelles Forschungsthema der Arbeitsgruppe ist die medizinische Physik, insbesondere Anwendungen der magnetischen Resonanz. Abb. 1.14 zeigt, wie man mit Hilfe der bildgebenden NMR die Flussgeschwindigkeit ortsaufgelöst messen kann. In diesem Beispiel wird die gemessene Flussgeschwindigkeit mit gerechneten Werten verglichen.