

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einführung</b>	<b>2</b>
1.1 Themenübersicht	2
1.1.1 Mikroskopische Grundlagen	2
1.1.2 Ziele und Interessen	3
1.1.3 Kondensierte Materie	4
1.1.4 Entwicklung	4
1.1.5 Methodik	5
1.1.6 Inhalt	6
1.2 Festkörperphysik in Dortmund	6
1.2.1 Spektroskopische Methoden	6
1.2.2 Forschungsthemen	7
<b>2 Symmetrie und Struktur</b>	<b>9</b>
2.1 Ordnung in Festkörpern	9
2.1.1 Atomtheorie	9
2.1.2 Langreichweitige Ordnung	10
2.1.3 Flüssigkristalle	10
2.1.4 Translationssymmetrie	12
2.1.5 Einheitszelle und Basis	13
2.1.6 Die Wigner-Seitz Konstruktion	13
2.1.7 Punktsymmetrie-Operationen	14
2.1.8 Gruppen	15
2.1.9 Hermann-Mauguin Notation	16
2.2 Symmetrie und Gitter	17
2.2.1 Primitive und nichtprimitive Gitter	17
2.2.2 Punktsymmetrieklassen	17
2.2.3 Kristallsysteme	20
2.2.4 Bravais-Gitter	20
2.2.5 Raumgruppen	21
2.3 Strukturen	22
2.3.1 Netzebenen und Miller Indizes	22
2.3.2 Dichteste Kugelpackung	23
2.3.3 Kubische Strukturen	24
2.3.4 Quasikristalle	26
2.3.5 Defekte	27
2.4 Strukturbestimmung	28
2.4.1 Feld-Ionen Mikroskopie	28
2.4.2 Elektronenmikroskopie	29
2.4.3 Rastersonden Mikroskopie	30

2.4.4	Röntgenbeugung	31
2.4.5	Beugung von Materiewellen	32
2.4.6	Neutronenbeugung	33
2.5	Das reziproke Gitter	34
2.5.1	Periodizität der Elektronendichte	35
2.5.2	Definition des reziproken Gitters	35
2.5.3	Beispiele	36
2.5.4	Gitterelemente	37
2.5.5	Reziproke Gittervektoren und Ebenenscharen	38
2.5.6	Brillouin-Zonen	39
2.6	Strukturbestimmung mit Beugungsmethoden	39
2.6.1	Streuung an kontinuierliche Medien	39
2.6.2	Bragg-Bedingung	40
2.6.3	Röntgenstrahlung	41
2.6.4	Ewald-Konstruktion	42
2.6.5	Beugung an Pulvern	42
2.6.6	Einkristall-Verfahren	43
2.6.7	Laue-Bedingung	44
2.7	Berechnung der gestreuten Intensität	44
2.7.1	Streuamplitude und Strukturfaktor	45
2.7.2	Atomare Beiträge	45
2.7.3	Beispielrechnung	46
2.7.4	Symmetriebedingte Auslöschung	47
2.7.5	Atomformfaktor	49
2.7.6	Das Phasenproblem	50
2.7.7	Reelle und Komplexe Streuamplituden	51
2.7.8	Thermische Bewegung	51
2.7.9	Debye-Waller Faktor	52
<b>3</b>	<b>Bindungen im Festkörper</b>	<b>54</b>
3.1	Grundlagen	54
3.1.1	Wechselwirkung und Bindungsenergie	54
3.1.2	Bindungstypen	55
3.1.3	Bindungsenergien: Übersicht	55
3.1.4	Das Wasserstoffmolekül	56
3.1.5	Energie	57
3.1.6	Molekülorbitale	58
3.2	Paarwechselwirkungen	59
3.2.1	Kovalente Bindung	59
3.2.2	Kovalente Bindungen in Festkörpern	60
3.2.3	Hybridorbitale	61
3.2.4	Polare Bindungen	62
3.2.5	Ionenpaare	63
3.2.6	Pauli-Prinzip und Austauschwechselwirkung	65
3.2.7	Van der Waals Bindung	66
3.2.8	Gekoppeltes System	67
3.2.9	Lennard-Jones Potenzial	69

3.2.10 Metallische Bindung	70
3.2.11 Kombinierte Bindungen	70
3.2.12 Wasserstoffbrücken	71
3.3 Gitterenergie	72
3.3.1 Van der Waals	72
3.3.2 Gleichgewichtsabstand	73
3.3.3 Ionische Bindung	74
3.3.4 Berechnung der Madelung-Konstanten	75
3.3.5 Effizientere Algorithmen	76
3.3.6 Metalle	77
<b>4 Gitterschwingungen und Phononen</b>	<b>78</b>
4.1 Grundlagen	78
4.1.1 Gleichgewichtsumgebung	78
4.1.2 Die eindimensionale Kette	79
4.1.3 Normalkoordinaten und Dispersionsrelation	79
4.1.4 Brillouin-Zone	80
4.1.5 Gruppengeschwindigkeit und Phasengeschwindigkeit	81
4.1.6 Transversalschwingungen	82
4.2 Kontinuumsmechanik	83
4.2.1 Spannung und Dehnung	83
4.2.2 Elastische Konstanten	83
4.2.3 Scherung	84
4.2.4 Unelastisches Verhalten	85
4.2.5 Dehnungstensor	85
4.2.6 Spannungstensor	86
4.2.7 Wellenausbreitung in einem anisotropen Kontinuum	87
4.2.8 Abbildung von Schallwellen	88
4.2.9 Seismische Wellen	89
4.3 Diskrete Systeme in 3D	89
4.3.1 Richtungsabhängigkeit	89
4.3.2 Zweiatomige Basis	91
4.3.3 Große Wellenlängen	91
4.3.4 Optischer Ast	92
4.3.5 Verhalten am Zonenrand	93
4.3.6 Beispiele	94
4.3.7 Absorptionsmessung	95
4.3.8 Inelastische Lichtstreuung	96
4.3.9 Inelastische Röntgen-Streuung	97
4.3.10 Phononenspektroskopie mit thermischen Neutronen	99
4.4 Phononen und spezifische Wärme	100
4.4.1 Spezifische Wärme	100
4.4.2 Phononen	101
4.4.3 Energie pro Gitterschwingung	102
4.4.4 Zustandsdichte	103
4.4.5 Debye-Modell	104
4.4.6 Debye-Temperatur	106

4.4.7	Spezifische Wärme im Debye-Modell	106
4.4.8	Das $T^3$ Gesetz	108
4.4.9	Vereinfachtes Modell	109
4.4.10	Das Einstein-Modell	110
4.4.11	Reale Zustandsdichten	111
4.4.12	Beispiele und Diskussion	112
4.5	Anharmonische Effekte	113
4.5.1	Potenzial	113
4.5.2	Wärmeausdehnung	113
4.6	Wärmeleitung	115
4.6.1	Grundlagen	115
4.6.2	Wärmeleitfähigkeit	116
4.6.3	Stöße von Phononen	117
4.6.4	Freie Weglänge	118
4.6.5	Wärmeleitkoeffizient	119
4.6.6	Isotopeneffekte	120
<b>5</b>	<b>Freie Elektronen</b>	<b>121</b>
5.1	Klassische Beschreibung	121
5.1.1	Metalle und ihre Eigenschaften	121
5.1.2	Das Drude-Modell	121
5.1.3	Ergebnisse	122
5.1.4	Grenzen des Drude-Modells	123
5.2	Das quantenmechanische Modell	124
5.2.1	Das Sommerfeld-Modell	124
5.2.2	Das Teilchen im Potenzialtopf	125
5.2.3	Drei Raumdimensionen	125
5.2.4	Fermi-Kugel	126
5.2.5	Fermi-Energie	127
5.2.6	Zustandsdichte	128
5.3	Thermodynamik des Elektronengases	129
5.3.1	Besetzungswahrscheinlichkeit	129
5.3.2	Die Fermi-Dirac Verteilung	130
5.3.3	Eigenschaften der Fermi-Dirac Verteilung	131
5.3.4	Die thermische Energie des Elektronengases	131
5.3.5	Spezifische Wärme	133
5.3.6	Vergleich Elektronen / Phononen	134
5.3.7	Effektive Masse	135
5.4	Elektrische Leitfähigkeit	136
5.4.1	Grundlagen	136
5.4.2	Widerstand	137
5.4.3	Streuung an Phononen	138
5.4.4	Temperaturabhängigkeit	139
5.4.5	Der Hall-Effekt	140
5.4.6	Hall-Konstante	141
5.4.7	Der Quanten-Hall-Effekt	142

5.5	Wärmeleitung in Metallen	143
5.5.1	Ansatz	143
5.5.2	Temperaturabhängigkeit	143
5.5.3	Vergleich elektrische / thermische Leitfähigkeit	144
5.5.4	Thermoelektrische Effekte	145
5.6	Kollektive Phänomene	146
5.6.1	Abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung	146
5.6.2	Metall-Isolator Übergang	148
5.6.3	Quantisierte elektronische Anregungszustände	148
5.6.4	Messung der Plasmafrequenz	149
5.6.5	Elektromagnetische Wellen in Metallen	150
5.7	Elektron-Phonon Wechselwirkung	151
5.7.1	Grundlagen	151
5.7.2	Polaronen	151
5.7.3	Cooper Paare	152
<b>6</b>	<b>Fast Freie Elektronen: Bandstrukturen</b>	<b>153</b>
6.1	Periodisches Potenzial	153
6.1.1	Probleme des Modells freier Elektronen	153
6.1.2	Störung durch Kerngitter	154
6.1.3	Pseudopotenzial	155
6.1.4	Punktförmige Störung	155
6.1.5	Gestörter Hamiltonoperator	156
6.1.6	Gekoppelte Zustände	157
6.2	Eigenfunktionen im periodischen Potenzial	157
6.2.1	Das Bloch'sche Theorem	157
6.2.2	Beweis des Bloch'schen Theorems	158
6.2.3	Der Phasenfaktor	159
6.2.4	Schrödingergleichung in 1D	160
6.2.5	Lösungsansatz	160
6.2.6	Lösung	161
6.2.7	Zonenrand	161
6.2.8	Zustände und Energiefläche	162
6.2.9	Abschätzung der Bandlücke	163
6.3	Bänder	164
6.3.1	Dispersionsrelation und Brillouin-Zone	164
6.3.2	Zonenschemata	164
6.3.3	Drei Dimensionen	165
6.3.4	Fermioberfläche	166
6.3.5	Darstellung höherer BZ	166
6.3.6	Zonenrand-Effekte	167
6.3.7	Messung	168
6.3.8	Zustandsdichte und Bandlücke	169
6.3.9	Fermiflächen von Alkalimetallen	170
6.3.10	Metalle und Isolatoren	171
6.3.11	Halbleiter und Halbmetalle	172

6.4	Dynamik	173
6.4.1	Bewegungsgleichungen	173
6.4.2	Bloch-Oszillationen	174
<b>7</b>	<b>Halbleiter</b>	<b>176</b>
7.1	Phänomenologie	176
7.1.1	Einführung	176
7.1.2	Klassifizierung	177
7.1.3	Thermische Anregung	177
7.1.4	Dotierung	178
7.1.5	Absorption von Licht	179
7.1.6	Lichtemission	181
7.2	Ladungsträger	182
7.2.1	Elektronen und Löcher	182
7.2.2	Eigenschaften der Löcher	182
7.2.3	Effektive Masse und Bandkrümmung	183
7.2.4	3D: Halbklassische Bewegungsgleichung	185
7.2.5	Effektive Massen in Halbleitern	185
7.2.6	Dynamik am Zonenrand	186
7.2.7	Leichte und schwere Elektronen	187
7.2.8	Form der Fermi-Oberfläche / Zyklotronresonanz	188
7.2.9	Beispiele	189
7.2.10	Zustandsdichte im Magnetfeld	191
7.3	Leitfähigkeit	191
7.3.1	Zustandsdichte	192
7.3.2	Ladungsträgerdichte	192
7.3.3	Temperaturabhängigkeit	193
7.3.4	Beweglichkeit	193
7.3.5	Dotierung	194
7.3.6	Donatorzustände	195
7.3.7	P-Dotierung	196
7.3.8	Exzitonen	197
7.3.9	Thermische Anregung	197
7.3.10	Ladungsträger-Gleichgewicht	198
7.4	Halbleiter-Bauelemente	199
7.4.1	n-p Übergang	199
7.4.2	Diode	200
7.4.3	Diodenkenlinie	201
7.4.4	Thermoelektrische Effekte	201
<b>8</b>	<b>Magnetismus</b>	<b>203</b>
8.1	Diamagnetismus und Paramagnetismus	203
8.1.1	Phänomenologie	203
8.1.2	Diamagnetismus	204
8.1.3	Atomare magnetische Momente	206
8.1.4	Hund'sche Regeln	206
8.1.5	Übergangsmetall-Atome	207

8.1.6	Seltene Erden	207
8.1.7	Einfluss des Kristallfeldes	208
8.2	Thermodynamik	209
8.2.1	Statistik im Magnetfeld	209
8.2.2	Klassischer Grenzfall	211
8.2.3	Freies Elektronengas	211
8.2.4	Zusammenfassung und Überblick	213
8.2.5	Magnetische Kühlung	213
8.3	Bahn-Quantisierung in einem Magnetfeld	214
8.3.1	Kreisbahnen	214
8.3.2	Quantisierung des Flusses	215
8.3.3	Landau-Zustände	215
8.3.4	Entartung	216
8.3.5	Besetzung und Gesamtenergie	217
8.3.6	De Haas - van Alphen Effekt	218
8.3.7	Messung von Fermiflächen	219
8.3.8	Quanten-Hall Effekt	220
8.4	Ferromagnetismus	220
8.4.1	Magnetische Ordnung	221
8.4.2	Austausch-Wechselwirkung	221
8.4.3	Molekularfeld-Näherung	222
8.4.4	Phasenübergang	223
8.4.5	Temperaturabhängigkeit	223
8.4.6	Magnetonenzahl	224
8.4.7	Angeregte Zustände	225
8.4.8	Spinwellen	226
8.4.9	Beispiele	227
8.4.10	Thermische Anregung von Magnonen	228
8.5	Antiferromagnetismus und Ferrimagnetismus	229
8.5.1	Antiferromagnetische Kopplung	229
8.5.2	Antiferromagnetische Ordnung	229
8.5.3	Beispiel: MnO	230
8.5.4	Ferrimagnetismus	231
8.5.5	Suszeptibilität	231
8.5.6	Temperaturabhängigkeit für $T > T_c$	232
8.5.7	Der antiferromagnetische Zustand	233
8.5.8	Messung mit Kernspinresonanz	233
8.5.9	Helikale Spinordnung	234
8.6	Magnetische Domänen	235
8.6.1	Phänomenologie	235
8.6.2	Magnetische Feldenergie	236
8.6.3	Domänenwände	236
8.6.4	Anisotropie	237
8.6.5	Dicke der Blochwände	238
8.6.6	Domänen im Magnetfeld	239
8.6.7	Hysterese	239
8.6.8	Magnetische Nanostrukturen	241

8.6.9 Biomagnetismus . . . . .	241
8.6.10 Magnetostriktion . . . . .	242
<b>9 Supraleitung</b>	<b>243</b>
9.1 Phänomenologie . . . . .	243
9.1.1 Entdeckung . . . . .	243
9.1.2 Leitfähigkeit . . . . .	243
9.1.3 Diamagnetismus . . . . .	244
9.1.4 Kritische Temperatur und kritisches Feld	245
9.1.5 Typ II Supraleiter . . . . .	246
9.1.6 Thermodynamik . . . . .	248
9.1.7 Energielücke . . . . .	249
9.1.8 Isotopeneffekt . . . . .	250
9.1.9 Historische Entwicklung . . . . .	251
9.2 Theoretische Ansätze (phänomenologisch) . . . . .	251
9.2.1 Stabilisierungsenergie . . . . .	251
9.2.2 Modell der 2 Flüssigkeiten . . . . .	252
9.2.3 London-Gleichung . . . . .	253
9.2.4 Eindringtiefe . . . . .	253
9.2.5 Pippard'sche Kohärenzlänge . . . . .	255
9.2.6 Shubnikov-Phase . . . . .	255
9.2.7 Ginsburg-Landau Ordnungsparameter . . . . .	256
9.2.8 GL-Kohärenzlänge . . . . .	256
9.2.9 Fluss-Quantisierung . . . . .	257
9.3 Skizze der BCS-Theorie . . . . .	258
9.3.1 Elektron-Phonon Streuung . . . . .	258
9.3.2 Cooper Paare . . . . .	259
9.3.3 BCS-Grundzustand . . . . .	260
9.3.4 Energielücke . . . . .	260
9.3.5 Die wichtigsten Resultate . . . . .	261
9.4 Resultate und Anwendungen . . . . .	262
9.4.1 Leitfähigkeit . . . . .	262
9.4.2 Tunnel-Kontakte . . . . .	262
9.4.3 Josephson-Kontakte . . . . .	263
9.4.4 DC Josephson Effekt . . . . .	264
9.4.5 AC Josephson Effekt . . . . .	265
9.4.6 Magnetfeld . . . . .	265
9.4.7 SQUID . . . . .	266
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>276</b>



# Literaturverzeichnis

- [1] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Microscopic theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 106(1):162–164, Apr 1957. doi: 10.1103/PhysRev.106.162.
- [2] J. Bardeen, L.N. Cooper, and J.R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, 1957.
- [3] Luca Bindi, Paul J. Steinhardt, Nan Yao, and Peter J. Lu. Natural quasicrystals. *Science*, 324(5932):1306–1309, 2009. ISSN 0036-8075. doi: 10.1126/science.1170827. URL <http://science.sciencemag.org/content/324/5932/1306>.
- [4] J. Callaway and C. S. Wang. Self-consistent calculation of energy bands in ferromagnetic nickel. *Phys. Rev. B*, 7:1096–1103, Feb 1973. doi: 10.1103/PhysRevB.7.1096. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.7.1096>.
- [5] Leon N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate Fermi gas. *Physical Review*, 104:1189, 1956. URL <http://link.aps.org/abstract/PR/v104/p1189>.
- [6] H. Fritzsche. Resistivity and hall coefficient of antimony-doped germanium at low temperatures. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 6(1):69 – 80, 1958. ISSN 0022-3697. doi: 10.1016/0022-3697(58)90220-8. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369758902208>.
- [7] H. Fröhlich. Interaction of electrons with lattice vibrations. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 215(1122):pp. 291–298, 1952. ISSN 00804630. URL <http://www.jstor.org/stable/99166>.
- [8] Ivar Giaever. Energy gap in superconductors measured by electron tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, 5:147–148, Aug 1960. doi: 10.1103/PhysRevLett.5.147. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.5.147>.
- [9] René Just Haüy. *Traité de Minéralogie*. Paris, 1801.
- [10] P. Heller and G. B. Benedek. Nuclear magnetic resonance in  $\text{mnf}_2$  near the critical point. *Phys. Rev. Lett.*, 8:428–432, Jun 1962. doi: 10.1103/PhysRevLett.8.428. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.8.428>.
- [11] Erwin Wilhelm Müller. Das feldionenmikroskop. *Z. Phys.*, 131:136, 1951.
- [12] Norman E. Phillips. Heat capacity of aluminum between 0.1 k and 4.0 k. *Phys. Rev.*, 114:676–685, May 1959. doi: 10.1103/PhysRev.114.676. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.114.676>.
- [13] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 53:1951–1953, Nov 1984. doi: 10.1103/PhysRevLett.53.1951. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.53.1951>.
- [14] R. N. Sinclair and B. N. Brockhouse. Dispersion relation for spin waves in a fcc cobalt alloy. *Phys. Rev.*, 120:1638–1640, Dec 1960. doi: 10.1103/PhysRev.120.1638. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.120.1638>.
- [15] T.T. Tsong. *Atom-probe field ion microscopy*. Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [16] Masaya Uchida, Yoshinori Onose, Yoshio Matsui, and Yoshinori Tokura. Real-space observation of helical spin order. *Science*, 311:359–361, 2006.

- [17] Liesbeth Venema, Bart Verberck, Iulia Georgescu, Giacomo Prando, Elsa Couderc, Silvia Milana, Maria Maragkou, Lina Persechini, Giulia Pacchioni, and Luke Fleet. The quasiparticle zoo. *Nat Phys*, 12(12):1085–1089, 12 2016. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nphys3977>.
- [18] P. Knipping und M. von Laue W. Friedrich. Interferenz-erscheinungen bei röntgenstrahlen. *Sitzungsberichte der mathematisch-physikalischen Klasse der K.B. Akademie der Wissenschaften zu München*, pages 303–322, 1912.
- [19] Weis, Antoine. Optically pumped alkali magnetometers for biomedical applications. *Europhysics News*, 43(3):20–23, 2012. doi: 10.1051/e pn/2012301. URL <http://dx.doi.org/10.1051/e pn/2012301>.
- [20] James P. Wolfe. Acoustic wavefronts in crystalline solids. *Physics Today*, September 1995:34–40, 1995.