

Festkörperphysik

- Bücher:
- 1) Gross-Marx: Festkörperphysik
 - 2) Ashcroft - Mermin: Solid State Physics
 - 3) Kapitza - (Herzog): Einf. in die Festkörperphysik
 - 4) Kittel: Einf. in die Festkörperphysik
 - teilweise: 5) Deutsches Experimentalphysik Bd. 3
- Fortgeschritten

II. Kristallstrukturen

1) Ortsraum

Kristall = Translationsgitter + Basis
(Periodizität).

Translationsgitter aufgebaut aus Translationsvektoren

$$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \quad \vec{R}_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$n_i \in \mathbb{Z} \rightarrow$ Kristall "unendlich weit ausgedehnt"

Translationsvektor

$$\vec{R}_{m_1 m_2 m_3} = \vec{R}_{0_0 0_2 0_3} + \vec{T}_{t_1 t_2 t_3}, \quad \vec{T}_{t_1 t_2 t_3} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 + t_3 \vec{a}_3$$

$t_i \in \mathbb{Z}$

Einheitszelle: Volumen, dass von den Vektoren \vec{a}_i aufgespannt wird

↪ Einheitszelle nicht eindeutig, da a_i frei wählbar

Primitive Einheitszelle: Einheitszelle mit minimal möglichen Vol

↪ Wahl der EZ nicht eindeutig!

Basis: Bausteine des Kristalls (Atome, Moleküle...)

Legge der k Bausteine

$$\vec{r}_i = \boxed{x_{ij} \vec{a}_j} \quad i = 1, \dots, k \quad |x_{ij}| \leq 1$$

Summation

2) reziproker Raum (k-Raum)

1D physikal. Eigenschaften: Kristall-periodisch

$$x = ma$$

$$f(x) = f(x + a) = f(x + ma)$$

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{ik_n x} \quad k_n = n \cdot \frac{2\pi}{a}$$

$$= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(n \frac{2\pi}{a} x) + b_n \sin(n \frac{2\pi}{a} x))$$

Reziproker Gitter

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ Volumen der Einheitszelle

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

Reziproker Gittervektoren: ein 2 zu viel aufgrund Schachknoten

$$i=1, \dots, 3 \quad \vec{b}_i = \frac{2\pi}{V} \epsilon_{ijk} (\vec{a}_j \times \vec{a}_k) \quad [\text{Summe}]$$

Eigenschaften:

$$(1) \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$$(2) \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = (2\pi)^3 / V \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

Fourier: Kristall mit Periode ∞ :

In "Fourierreihe" Basisfunktion $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ mit \vec{k} beliebig!

Kristall mit endlicher Periode:

$$\text{Periodizität der Basisfunktion } e^{i(\vec{k}\vec{r} + \vec{R}_{m_1 m_2})} = e^{i\vec{k}\vec{r}} \\ \Rightarrow e^{i\vec{k}\vec{R}_{m_1 m_2}} = 1$$

↳ Selektion von bestimmten \vec{k} aufgrund der Periodizität

$$\vec{k} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$e^{i(m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3)(m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3)} \\ = e^{i(m_1 m_1 2\pi + m_2 m_2 2\pi + m_3 m_3 2\pi)} = 1, \text{ da } e^{i2\pi \cdot (f \in \mathbb{Z})}$$

3) Wigner - Sitz - Zelle \ Brillouin - Zelle

unterschiedliche Wahl der Anfangspunkte des Gitters treffen, nämlich im Schwerpunkt der Einheitszelle

- (1) Verbindungslien von einem Punkt zu seinen Nachbarn
- (2) Errichtung der Mittelsenkrechten auf diesen Verbindungslien

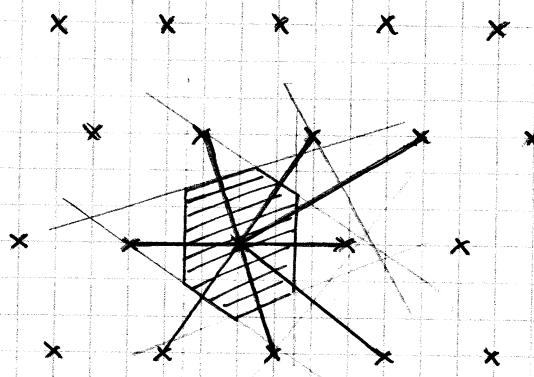
(2)

(3) Identifikation des minimalen Volumen

↳ Wigner Sattz im $O-R$, Brillouin im $b-R$

Beispiel:

Wigner-Satz



4) Kristallsysteme

a) 2D-Kristall \vec{a}_1, \vec{a}_2

vollständige Charakterisierung durch

$$\cdot |\vec{a}_1| = a_1 \cdot |\vec{a}_2| = a_2 \cdot \alpha = \vartheta(\vec{a}_1, \vec{a}_2)$$

\Rightarrow 4 Kristallsysteme erschließbar

$$m: \quad |a_1| \neq |a_2| \quad \vartheta \neq 90^\circ \quad \uparrow \rightarrow \text{sehr Skirt}$$

$$o: \quad |a_1| \neq |a_2| \quad \vartheta = 90^\circ \quad \text{Abnahme der}$$

$$lcl = ldl \quad \varphi \neq 90^\circ \quad \text{Symmetrie}$$

$$h: \quad |a_1| = |a_2| \quad \vartheta = 120^\circ \quad (\text{Symm. best. Entartung})$$

$$t: \quad |a_1| = |a_2| \quad \vartheta = 90^\circ \quad \text{des Zustands für die } e^-$$

Symmetrietrübelegungen sind wichtig für das Verständnis!

Kontinuierliche Symmetrien sind durchbrochen, d.h. Impuls

Drehimpuls sind kein guten Quantenzahlen.

Discrete Symmetrien?

1) Translationssymmetrie

Invarianz gegenüber $\overline{T_{w_1 w_2 w_3}}$

2) Punktsymmetrien:

(Symmetrieeoperationen unter Beibehaltung mind eines Pts.)

- Rotation mögl. Drehwinkel $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ 2D

$$n = 2, 3, 4, 6$$

- Spiegeln Bsp. $x' = -x, y' = y, z' = z$

- Inversion $\vec{r}' = -\vec{r}$ Kristallsystem \leftrightarrow

Kristall: alle möglichen Punktlagenformen Punktgruppe!

+ insl. Translationssymmetrische Raumgruppen!

Bravais-Gitter ↗

15.10.17

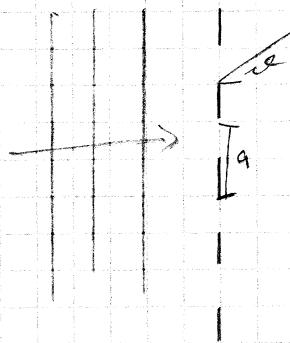
- bei größeren Einheitszellen manchmal Symmetrie besser erkennbar
- Bravais-Gitter unterscheiden Winkel zw. $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$
- bei kub.-Kristalle an dichtesten Kugelpkt \rightarrow Kugeln füllen 74 % des Raumes aus
- kubische Einheitszellen ≠ primitive Einheitszelle bei einigen Kist.
 ↳ Bsp.: fcc: lab: 4 " prim: 1 "
 bcc: lab: 2 Atom prim: 1 Atom
- hcp und fcc: unterschiedliche Anordnungen der Schichten

III. Kristallstrukturanalyse

Ortsteum: sc bcc fcc



rec. Raum: sc fcc bcc



$$a \sin \alpha = n \lambda \rightarrow \text{konstr. Interferenz}$$

$$= \lambda$$

$$\text{Wellenlänge } \lambda \approx a \approx 0.5 \text{ nm}$$

↳ für Regenbogen kein sichtbares Licht usgl.

(3)

- Elektronenmikroskopie \rightarrow nur Oberflächlich

- Röntgenstrukturanalyse notwendig

Strahlungsarten:

- Licht, γ , Röntgen: Photonenenergie \sim keV
 \hookrightarrow WW mit Elektronen: tiefes Blick in den Kristall
- Elektronen: möglichlich Oberfläche untersuchen
- Neutronen: nur magnetische Materialien

Beugung integral für 3D-Kristalle

experimentell:

$$|\vec{k}_i| = \frac{2\pi}{\lambda} = |\vec{k}_s|$$

$$\cdot E_s \sim \frac{1}{r} \iiint_{\text{Kristall}} d^3 r' g_e(\vec{r}') e^{i\varphi(\vec{r}')} \quad d \gg \lambda \text{ Fraunhoferbeugung}$$

\uparrow Elektronendichte im Kristall (ersetzt für Blendeffektionsfunktion)

$$\begin{aligned} & \varphi(\vec{r}') = (\vec{l}_s - \vec{l}_i) \cdot \vec{r}' = \Delta \vec{l} \cdot \vec{r}' \\ & g_e(\vec{r}') = g_e(\vec{r}' + \vec{R}_{u_1 u_2 u_3}), \vec{r}' = \vec{R}_{u_1 u_2 u_3} + \vec{r}'' \\ & E_s \sim \iiint_{\text{Kristall}} g_e(\vec{r}') e^{i\Delta \vec{l} \cdot \vec{r}'} d^3 r' \end{aligned}$$

$\frac{1}{r}$ dazu dehnen

$$\begin{aligned} & = \sum_{u_1 u_2 u_3 = -\infty}^{\infty} \iiint_{\text{Einkristallzelle}} g_e(\vec{R}_{u_1 u_2 u_3} + \vec{r}'') e^{i\Delta \vec{l}(\vec{R}_{u_1 u_2 u_3} + \vec{r}'')} d^3 r'' \\ & = \sum_{u_1 u_2 u_3 = -\infty}^{\infty} e^{i\Delta \vec{l} \vec{R}_{u_1 u_2 u_3}} \cdot \underbrace{\left(\iiint_{\text{Einkristallzelle}} d^3 r'' g_e(\vec{r}'') e^{i\Delta \vec{l} \vec{r}''} \right)}_{S_{\Delta \vec{l}}} \\ & = S_{\Delta \vec{l}} \sum_{u_1 u_2 u_3} e^{i\Delta \vec{l} \vec{R}_{u_1 u_2 u_3}} \quad S_{\Delta \vec{l}} \text{ Strukturfaktor} \\ & = S_{\Delta \vec{l}} \sum_{u_1 u_2 u_3} 1 = n S_{\Delta \vec{l}} \end{aligned}$$

τ Anz. der E-Z im Kristall

$$\Delta \vec{l} \cdot \vec{R}_{u_1 u_2 u_3} = (\vec{l}_s - \vec{l}_i) \vec{R}_{u_1 u_2 u_3} = h \times \pi \quad h \in \mathbb{Z}$$

$$\hookrightarrow \vec{l}_s - \vec{l}_i = \vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3 \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

24.10.17

$$\text{Streuamplitude } E_S = S_{\Delta k} \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{i \Delta k \vec{R}}$$

Welt:

$$\text{Streuamplitude} = \text{FT}(g) \cdot \text{FT}(g_e)$$

Gitterfkt. \uparrow \uparrow Streurichtung der Basis

$$g(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r} - \vec{R}) \quad \text{Gitterpunkt (Anzahl } N)$$

$$\text{FT}(g) = \int \sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r} - \vec{R}) e^{i \Delta k \vec{r}} d^3 r = \sum_{\vec{R}} e^{i \Delta k \vec{R}}$$

$$= \begin{cases} N & \Delta \vec{k} = \vec{0} \uparrow \\ 0 & \Delta \vec{k} \neq \vec{0} \downarrow \end{cases}$$

\Rightarrow Das Gitter wählt die möglichen Streuvektoren $\Delta \vec{k} = \vec{G}$ aus

$$E_S = S_{\Delta k} \underbrace{\sum_{n_1, n_2, n_3} e^{i \Delta k \vec{R}}}_{=1 \text{ für das EH2}}$$

Allgemein:

$$E_S = N S_{\Delta k}$$

$$S_{\Delta k} = S_{\vec{G}} \quad \text{Atom die im EH2 eine Basis bilden}$$

$$S_{\vec{G}} = \int_{\text{EH2}} g_e(\vec{r}'') e^{i \vec{G} \vec{r}''} d^3 r'' \quad \vec{r}' = \vec{r}' + \vec{R}_{n_1, n_2, n_3}$$



\vec{r}''' : Ortsvektor vom Zentrum des beobachteten

i-ten Atoms zu einem Volumenelement

seiner Elektronenhülle

$$\vec{r}'' = \vec{r}_i + \vec{r}''' \quad \text{Anz der Atome}$$

$$\Rightarrow g_e(\vec{r}'') = \sum_{i=1}^K g_{e_i}(\vec{r}'')$$

\uparrow Elektronendichte um i-tes Basisatom

$$\Rightarrow S_{\vec{G}} = \sum_{i=1}^K \int_{\text{EH2}} d^3 \vec{r}''' g_{e_i}(\vec{r}''') e^{i \vec{G} (\vec{r}_i + \vec{r}''')}$$

$$= \sum_{i=1}^K e^{i \vec{G} \vec{r}_i} \underbrace{\int_{\text{EH2}} d^3 \vec{r}''' g_{e_i}(\vec{r}''') e^{i \vec{G} \vec{r}'''}}_{\text{Atomformfaktor (FT von } g_e \text{ eines Atoms)}}$$

$$= \sum_{i=1}^K A_{\vec{G}, i} e^{i \vec{G} \vec{r}_i}$$

Atomformfaktor (FT von g_e eines Atoms)

(4)

Intensität gegeben über Betragssquarat der Streuamplitude

$$I \propto N^2 |S_G|^2$$

Beugungsexperimente: Streuintensität ist das Betragssquarat der Streuamplitude. Wir benötigen umso größere Streuvektoren $\Delta \vec{k} = \vec{G}$ und damit eingehende Wellenvektoren \vec{k}_i , je kleiner die Strukturen sind. $k = \frac{1}{\lambda}$

Bei der Strukturanalyse mittels Beugungsmethoden kann die Form und die Abmessungen der EHZ aus der Höhe der Röntgenreflexe bestimmt werden.

Der Inhalt der EHZ, also die Basis, wird aus den Intensitäten der Röntgenreflexe bestimmt.

a) Fundamentele Streubedingungen

$$\Delta \vec{k} = \vec{k}_s - \vec{k}_i = \vec{G} \quad (\text{hau-Beelingy})$$

$$\vec{k}_s = \vec{k}_i + \vec{G} \quad \vec{G} \approx \vec{G} \quad (\text{nachual } =)$$

$$= \vec{k}_i + \vec{G}$$

$$\text{Quadratur: } \vec{k}_s^2 = \vec{k}_i^2 - 2 \vec{k}_i \cdot \vec{G} + \vec{G}^2$$

$$\text{elastische Streu: } |\vec{k}_i| = |\vec{k}_s|$$

$$\Rightarrow 2 \vec{k}_i \cdot \vec{G} = \vec{G}^2$$

Äquivalente Form der hau-Beelingy

→ Jeder Wellenvektor vom Zentrum zum Rand einer

EHZ erfüllt die von hau-Beelingy.

b) Andere Formulierung: $\vec{k}_s - \vec{k}_i = \vec{G} = \Delta \vec{k}$

$$\Delta \vec{k} \cdot \vec{a}_1 = 2\pi m_1$$

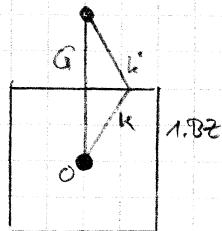
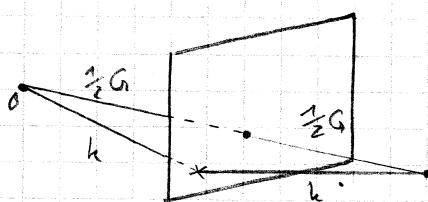
$$|\vec{k}_s| = |\vec{k}_i|$$

$$\Delta \vec{k} \cdot \vec{a}_2 = 2\pi m_2$$

$$m_i \in \mathbb{Z}$$

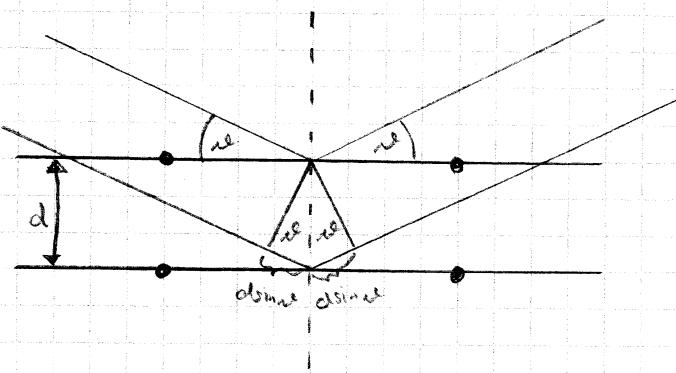
$$\Delta \vec{k} \cdot \vec{a}_3 = 2\pi m_3$$

- Bedingung für konstruktive Interferenz
- Äquivalenz zu $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = 1$
- $g_{\vec{k}}$ ist translationsinvariant bzgl. aller Gittervektoren



c) Bragg-Bedingung

„Atome auf einer Netzebene bilden 'Spiegel' für Röntgenstrahlung“

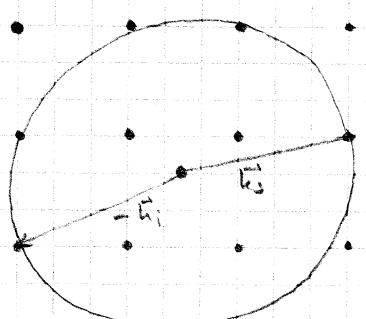


Konstruktive Interferenz, wenn Gangunterschied ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge λ ist

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

Zumhey zw. Bragg/kam als Übungsaufgabe

Ewald-Konstruktion Grafische Darstellung für $\vec{k}_1 - \vec{k}_2 = \vec{k}_{12}$



1. Von beliebigen Pkt des Kippel-Gitters wird $-\vec{k}_1$ eingezeichnet
2. Um den Endpunkt wird ein Kugelwels mit Radius $|\vec{k}_2|$ gezeichnet
3. Wenn auf der Ewald-Kugel ein Gitterpunkt des reciprochen Gitters liegt, dann tritt ein Beugungseffekt auf.

$$2d \sin \alpha = u \lambda$$

5

Im Prinzip ist die Bragg-Bedingung überdeckt und damit sehr selektiv.

λ variabel: hause - Verfahren (al-fest)

ϑ variabel : Drehkristallverfahren
 Intensivierung Röntgenstrahlung Debye - Scherrer

Inestische Störung

je zeitabhängig \Rightarrow Stromamplitude nur die Frequenz der anlaufenden Welle ω_0 enthalten hat

→ Also: Gitterschwingungen, auch bei $T=0$!

\Rightarrow Gestreute Welle $w_s + w_i$

Maintain Position of Atoms:

$$\vec{r}(A) = \vec{R} + \vec{r}_i + \vec{v}(t)$$

↑
Ruhpes. mountain Aschberg

↳ Stochastische

$$\alpha e^{i\omega_0 t} \int g_\epsilon(\vec{r}) e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{R}} e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{v}(t)} d^3 r$$

$$v(t) \ll a$$

$$e^{i\bar{\omega}_c(t)} \approx 1 + i\bar{\omega}_c(t) + \frac{1}{2} [i\bar{\omega}_c(t)]^2.$$

elast. \downarrow inelast. Strongly

Quadr. Term: Reduzierung der elast. und auch

im (rechtsen) Streintensität

Mechanische Stoßbelastungen

$$\vec{\sigma} \vec{u} = \vec{G} \pm \vec{q} \quad \text{Impulserhaltung}$$

$$\omega_i = \omega_s + \omega_g \quad \text{Engieehalting}$$

Gitarre

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{1}{3} G^2 \langle v^2(t) \rangle\right)$$

$$I_{\text{line}} = I_0 \exp\left(-\frac{k_B T}{M\omega^2} G^2\right)$$

26. 10. 17

IV Kristallbindung

$$H = T_e + T_k + \text{Coulomb}$$

repulsive WW: $e-e$
 $k-k$
 attractive WW: $e-k$

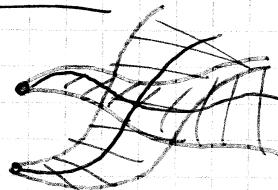
Vor allem T_e und $e-k$ wichtig für Kristallbildung

- Behandlung Coulomb normalweise: Mischverfe

Kerne: - Position im Kristall

$$\text{große Massen } m = \sqrt{\frac{D}{M}}$$

=> oft Behandlung als klass. Teilchen



Elektronen: - QM Behandlung notwendig

- Antisymmetrische Wellenfunktion

↳ (Ununterscheidbarkeit)

2 Elektronen $(\psi_1, \psi_2(\vec{r}_1)) (\chi_1, \chi_2(\text{Spin})) \rightarrow \Psi \text{ AS}$

$$X : \begin{cases} \text{Singulett} & \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow \downarrow_1 - \downarrow \uparrow_2) \quad s=0 \\ & \uparrow \downarrow_2 \\ \text{Triplette} & \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow \downarrow_1 + \downarrow \uparrow_2) \quad s=\begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \quad s=0 \\ & \downarrow \downarrow_2 \end{cases}$$

↳ Ortsraum entspricht X , so dass Ψ antisymmetrisch

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) + \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1))$$

$$V_{ee}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\langle \Psi | V_{ee} | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \left(\frac{e^2 |\psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\psi_2(\vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \frac{e^2 |\psi_1(\vec{r}_2)|^2 |\psi_2(\vec{r}_1)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \right.$$

$$\left. \oplus \frac{e^2 \psi_1^*(\vec{r}_2) \psi_2^*(\vec{r}_1) \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \oplus \frac{e^2 \psi_1^*(\vec{r}_1) \psi_2^*(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1) \psi_1(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right\}$$

$$= \langle \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) | V_{ee} | \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \rangle + \langle \psi_2(\vec{r}_1) \psi_1(\vec{r}_2) | V_{ee} | \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \rangle$$

↳ direkte Coulomb-WW: K

↳ Austausch-WW: J

$$H = -J_{ex} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \leftarrow \text{Theoretisch}$$

exklusive

(6)

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad \vec{S}^2 = t(S(S+1)) \stackrel{t=1}{=} S(S+1)$$

$$\vec{S}_1^2 = S_1(S_1+1) = \frac{3}{4} \quad \vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

$$\vec{S}_2^2 = \frac{3}{4} \quad \Rightarrow 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \vec{S}^2 - \frac{3}{2}$$

$$\rightarrow -(\frac{1}{2} + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) = -(\frac{1}{2} - \frac{3}{2} + \vec{S}^2) = \begin{cases} +1 & S=0 \\ -1 & S=1 \end{cases}$$

\rightarrow Darstellung von \oplus und $\ominus \Rightarrow H = -J \times \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$

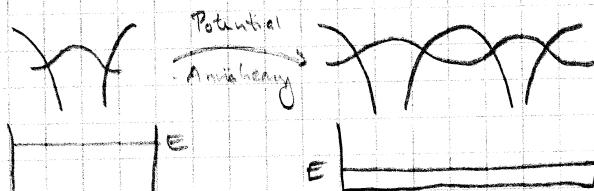
Σ_{AS} : Energieabsenkung (Anziehung Elektronen)

Typen von Kristallbindungen:

Minimierung der Gesamtenergie $E_{min} = H$

2 Möglichkeiten:

(1) Anhebung bzw. Energie der Elektronen T_E durch Erweiterung der Ausdehnung der elektron. Wellenfunktion



\hookrightarrow Quantisierung der Energie setzt ab

$$V_2 \quad V_1 \quad \psi = C_1 \chi_1 + C_2 \chi_2$$

$$x_2 \quad x_1 \quad E = \varepsilon - S \pm t \leftarrow \text{Energieabsenkung}$$

$$S = \langle x_1 | V_2 | x_1 \rangle = \langle x_2 | V_1 | x_2 \rangle$$

$$t = \langle x_2 | V_2 | x_1 \rangle = \langle x_1 | V_1 | x_2 \rangle$$

(2) Umverteilen der elektron. Wellenfunktion mit dem Ziel der Minimierung der repulsiven Wechselwirkungen

Ziel: Eclipsingkonfiguration

$$n = \text{fest} \left(\sum_{m=-e}^e |Y_{em}(\vartheta, \varphi)|^2 \right) R_{ne}(r) = \frac{2(e+1)}{4\pi} R_{ne}(r)$$

\hookrightarrow kein Winkelabhängigkeit mehr \rightarrow Symmetrie (sphärisch)

- Entschieden bei Bindung: Elektronen in äußeren Orbitalen ("Valenzelektronen")
Kern + Elektronen \Rightarrow Rumpf + Valenzelektronen

Sortieren der Bindungsarten nach Grad der e^- -Umverteilung

| | | |
|---------------------------------------|---|--|
| keine Umverteilung | : | van der Waals Bindung |
| Umverteilung zw. nächsten Nachbarn | : | kovalente Bindung symmetr. hochsymmetr. zw. H-Brückebindung |
| totale Umverteilung | : | metallische Bindung ionische Bindung |

Kristallbindungen

1) van der Waals-Bindung

↳ kommt auch bei anderen inner vor, nur schwach

- Edelgaskristalle

$$\vec{p} \uparrow \quad \text{ $\langle \vec{p} \rangle = \langle e \vec{r} \rangle = 0$ } \quad (\text{Dipolmoment})$$

- durch Fluktuationen // entstehend Dipolmoment

↳ spielt eventuell ein anderes nahe Atom

→ Induzierung eines Dipolmomentes

- Kristallbildungs aufgrund Dipol-Dipol-WW

↳ nur bei sehr geringen Temperaturen

- Induzierter Dipol vom Teilchen des ersten Dipoles

$$p_2 = \propto E_{p_1} \sim \frac{1}{R^3} \quad (\text{linear response})$$

Polarisierbarkeit

$$\text{Bindungspotential: } U = -\vec{p} \vec{E}_p - p_2 \vec{E}_{p_1} \sim -\frac{1}{R^6}$$

- bei geringen Abständen: repulsive WW zw. Kernen

→ Lennard-Jones-Potential

$$U(R) = 4 \epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right)$$

→ Barriere die das Molekülkreis verhindert

- für Kristallschwingungen: parabolische Näherung

↳ Annäherung durch Parabel //

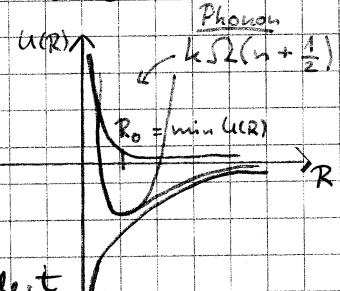
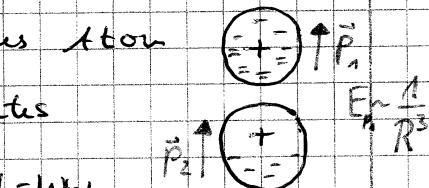
- Vakuumfluktuation: bei beliebiger Abstand bleibt $\frac{1}{2} h \Omega^2$

↳ kein beeinträchtigender Effekt, da $\Omega \sim \sqrt{\frac{1}{m}}$ bei

Helium schon eine große Schwingfrequenz ist

→ selbst bei extrem hohen Temperaturen nicht Kristallin,

aufwärts bei hohen Drücken $p \sim 25$ bar



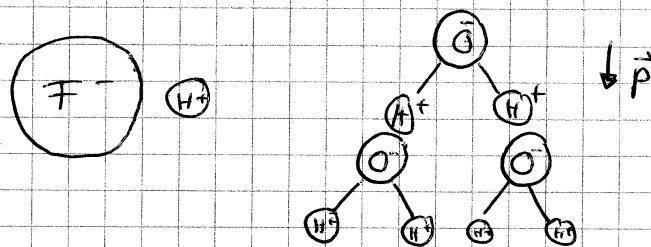
• vorher nur 2-Atom-Probleme → Erweiterung

$$R_{ij} := |\vec{R}_i - \vec{R}_j| = p_{ij} R \quad M \text{ # Atome im Kristall}$$

$$\Rightarrow U(R) = \frac{\mu}{2} 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^M \frac{1}{p_{ij}^{12}} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^M \frac{1}{p_{ij}^6} \right)$$

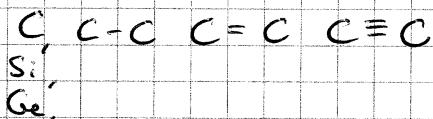
Einschub: Wasserstoff-Brücken-Bindung

• z.Bsp. H_2O , HF permanente Dipole



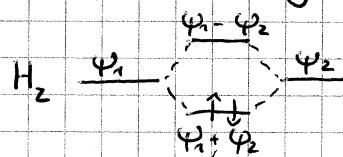
2) Bindungen mit Elektronenübertragung

a) kovalente Bindung



Atome teilen sich Elektronenpaar zu symmetr.

Koeffizientenkonfiguration



bimol. bind.: erhält Koeffizienten zw. Kern → Abschirmung

• Bedeutung der Orbitale in der Chemie:

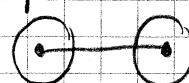
Hybridisierung

+ physikalisch Unschärfefunktion: $Y_m^l(\vartheta, \varphi)$

↳ Eigentl. von Z^2 und $L_z \leftarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

Molekülbinding (hein Sinn bei Dreipulschaltung)

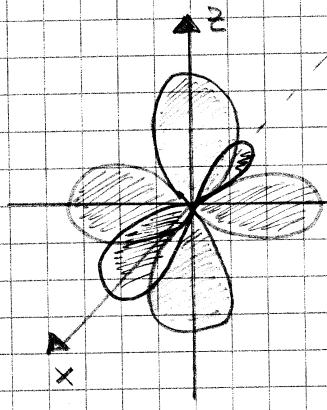
↳ hein isotroper Raum mehr



+ Chemiker wählt andere Darstellung (reelle KFF)

Beispiel: $l=1$: $m=1 \quad \sin \vartheta e^{i\varphi} \quad m=0 \quad \cos \vartheta \quad m=-1 \quad \sin \vartheta e^{-i\varphi}$ } Physiker

$|+1\rangle + |-1\rangle \quad \sin \vartheta \cos \varphi \quad |+1\rangle - |-1\rangle \quad \sin \vartheta \sin \varphi$ } Chemiker



• Kristalle mit kovalenter Bindung

besitzen gerichtete Bindungen

↳ Metallein extrem hart

b) ionische Bindung

- Bindung mit nahezu komplettem Elektronenübergang

Beispiel Natriumchlorid

- WW-Energie durch verschiedene Terme:

$$-\text{Coulomb} \quad \frac{(\pm)q^2}{4\pi\epsilon_0 R_{ij}} \quad -\text{Austausch} \quad \lambda e^{-\frac{R_{ij}}{s}} \quad \lambda > 0 \quad (\text{repulsiv})$$

$$\Rightarrow U = \frac{1}{2} \left(\sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{(\pm)q^2}{4\pi\epsilon_0 R_{ij}} + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \lambda e^{-\frac{R_{ij}}{s}} \right)$$

$M \sum_j \frac{(\pm 1)}{P_j}$

wegen Exponentialfkt. nur der
nächste Nachbar wichtig
Z Koordinationszahl

$$= \frac{1}{2} \left(- \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{(\pm 1)}{P_{ij}} + M Z \lambda e^{-\frac{R}{s}} \right)$$

$$= \frac{M}{2} \left(Z \lambda e^{-\frac{R}{s}} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \alpha \right)$$

$\alpha = \sum_{j=1}^M \frac{(\pm 1)}{P_j}$

Modellung - Konstante

3) metallische Bindung

- vollständige Delokalisierung der Elektronen

↳ Minimalisierung der repulsiven WW zw. Kernen

↳ Abmin. ihrer kinetischen Energie

→ ungerichtete Bindung → reine Metalle weichen Metallionen

⇒ die Stärke zu $U(R)$ unabhängig von Bindungsart

↳ harmonischer Naherw. viel verwendet (Phonon)

$$\Rightarrow U(R) = U(R_0) + \frac{\partial U}{\partial R} \Big|_{R_0} (R - R_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial R^2} \Big|_{R_0} (R - R_0)^2 + \dots$$

G

F

I

J

Kapitel 5 Bohr - Oppenheimer - Nahmung

$$H = T_{el} + T_{Kern} + V_{el-kern} + V_{kk-kern} + V_{eKern}$$

1. Schritt 2 Weges Elektron + Kern \rightarrow Valenzelektron & Atomringpf

Si hat 14 El & ein Kern \rightarrow $(1s^2, 2s^2, 2p^2) + \text{Kern} = \text{Atomringpf}$

15 Teilch \rightarrow 5 Teilch $3s^2, 3p^2 \rightarrow$ Valenzelektron

2. Schritt: $m_e/m_K = 10^{-3} - 10^{-5}$

Konsequenz der schnellen Bewegung des Elektrons

- Aus Sicht der Elektronen: Atomringpf bilden quasi statisch Potential, Elektron nimmt Atomringpf abstandsabhängig adaptativ in
 - Aus Sicht der Atomringpf: Wegen der schnellen Bewegung, das Elektron nimmt die Atomringpf und die Zentrale ihrer Bewegung eine gemittelte Elektronenpotentialwahr
- \rightsquigarrow Idee: Entkopplung von Elektron und Kernbewegung

Entkopplung von Elektron & Kernbewegung:

$$H \Psi(\vec{r}_e, \vec{R}_K) = E \Psi, \Psi(\vec{r}_e, \vec{R}_K) = \phi(\vec{R}_K) \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e)$$

Parameter

$$\phi(\vec{R}_K) \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e) + \sum_j \frac{\vec{p}_j^2}{2M_{Kj}} (\phi(\vec{R}_K) \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e))$$

$$+ V [\psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e) \phi(\vec{R}_K)] = E \phi(\vec{R}_K) \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e)$$

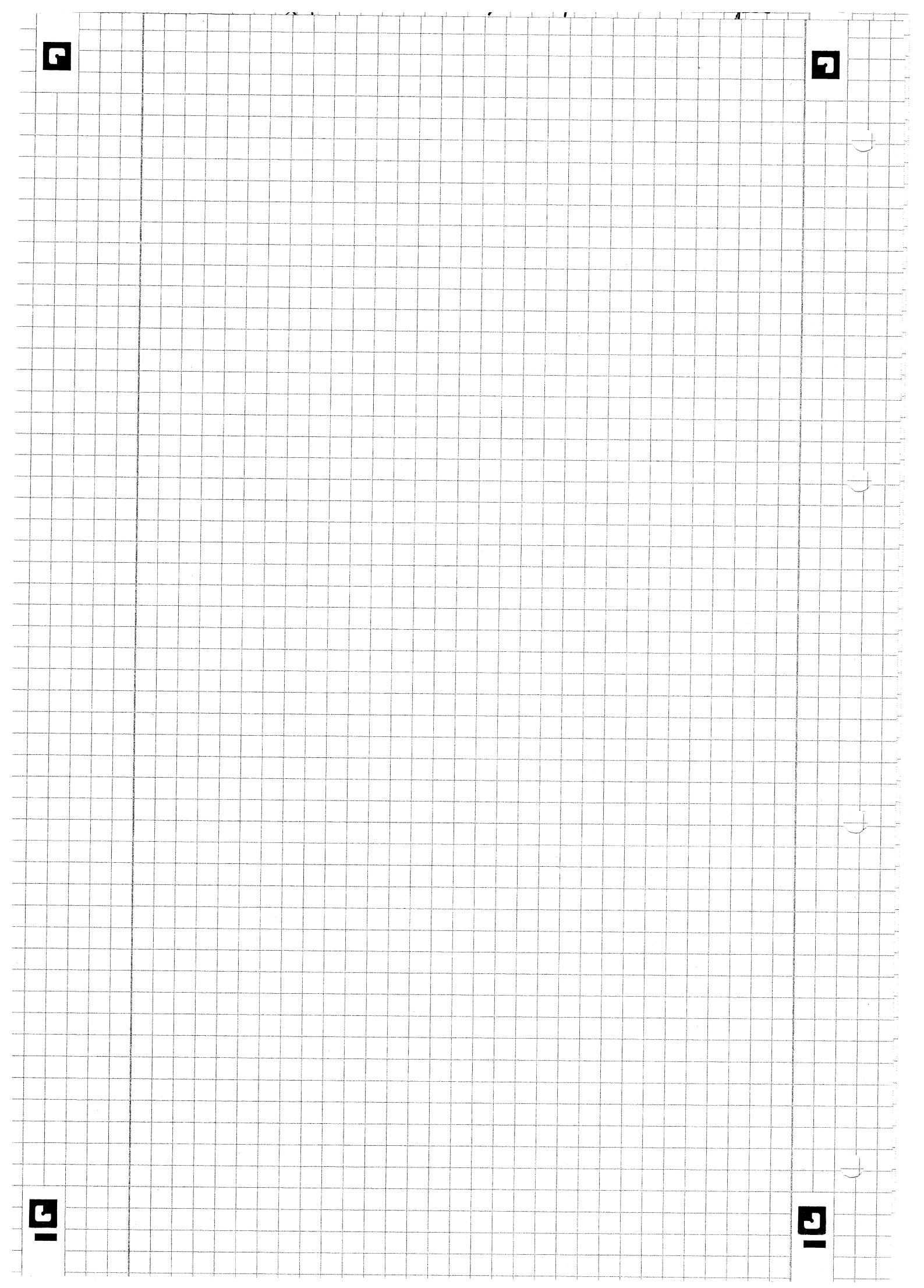
$$\phi(\vec{R}_K) \left\{ \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e) + (V_{ee} + V_{ek} + V_{kk}) \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e) \right\} + \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e) \sum_j \frac{\vec{p}_j^2}{2M_{Kj}} \phi(\vec{R}_K)$$

$$= E \phi(\vec{R}_K) \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e)$$

$$\text{mit } \vec{p}_j = \sum_i \vec{p}_{ij} \vec{R}_{Kj}$$

$$* + \sum_j \frac{\vec{p}_j^2}{2M_{Kj}} (\vec{\nabla}_{\vec{R}_K} \phi(\vec{R}_K) \vec{\nabla}_{\vec{R}_K} \psi_{\vec{R}_K}(\vec{r}_e))$$

\hookrightarrow Kopplung von Elektron & Kernbewegung in der Bo-OP-Nahmung;



$$6) \text{ Gitterdynamik} \quad \Psi(\vec{r}_e, \vec{R}_u) = \bar{\Phi}(\vec{R}_u) \psi_{\vec{R}_u}(\vec{r}_e)$$

Elektronen

$$\sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} \psi_{\vec{R}_u}(\vec{r}_e) + V \psi_{\vec{R}_u}(\vec{r}_e) = U(\vec{R}_u) \psi_{\vec{R}_u}(\vec{r}_e)$$

$$\psi_{\vec{R}_u}(\vec{r}_e) = e^{i\vec{h}\vec{r}_e} u_{\vec{R}_u}(\vec{r}_e)$$

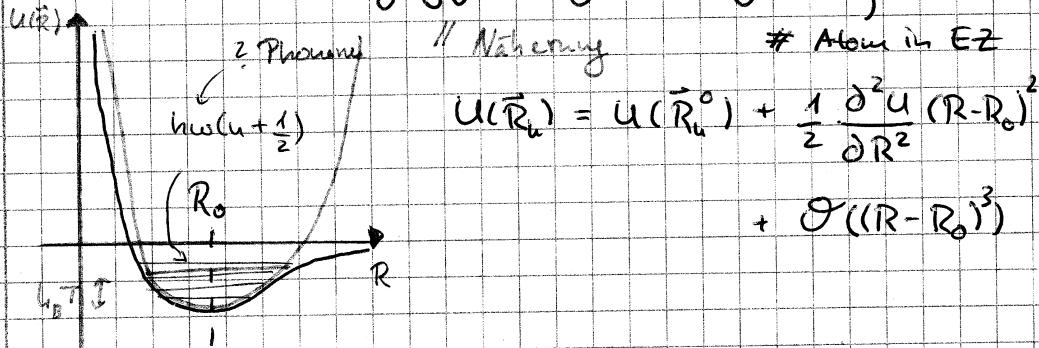
Atomwurf als Peri unter

↳ gitterperiodisch

Gitteratome

$$\sum_j \frac{\vec{p}_j^2}{2M_{kj}} \bar{\Phi}(\vec{R}_u) + U(\vec{R}_u) \bar{\Phi}(\vec{R}_u) = E \bar{\Phi}(\vec{R}_u)$$

↗ # der Einheitszelle

Anzahl der Schwingungsfreiheitsgrade $g = 3 \cdot s \cdot M$ 

$$U(\vec{R}_u) = U(\vec{R}_u^0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial R^2} (\vec{R} - \vec{R}_u^0)^2 + \mathcal{O}((\vec{R} - \vec{R}_u^0)^3)$$

Bestimmung der Schwingungs frequenzen

$$s=1 \quad \vec{R}_i = \vec{R}_i^0 + \vec{u}_i; \quad i=1, \dots, M$$

$$\sum_{i,\alpha} \frac{\vec{p}_{i,\alpha}^2}{2M_{kj}} \bar{\Phi}(\vec{R}_u) + \frac{1}{2} \sum_{i,\beta} \frac{\partial^2 U}{\partial R_i \partial R_{j\beta}} (\vec{R}_{i,\alpha} - \vec{R}_{i,\alpha}^0)(\vec{R}_{j\beta} - \vec{R}_{j\beta}^0) \bar{\Phi}(\vec{R}_u)$$

$\hookrightarrow \alpha = 1, 2, 3 = \beta$

$$= (E - U(\vec{R}_u)) \bar{\Phi}(\vec{R}_u)$$

$$\text{Ehrenfest-Theorem} \quad \frac{d \langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}$$

↓
klassisch

$$\frac{d \langle \vec{p} \rangle}{dt} = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{r}) \rangle$$

 $i=1, \dots, M=j$

$$\text{Bewegsgl.: } M_{kj} \ddot{u}_{i,\alpha} + \sum_{j,\beta} \frac{\partial^2 U}{\partial R_{i,\alpha} \partial R_{j\beta}} u_{j\beta} = 0 \quad \alpha = 1, 2, 3 = \beta$$

$\hookrightarrow 3N$ gekoppelte Bewegsgleichungen, $u_{i,\alpha} \sim e^{i\omega t}$

$$-M_{kj} \omega^2 u_{i,\alpha} = \dots$$

lineares Gleichungssystem der Dimension $3 \times M$

Übergang zu Normalkoordinaten

$$\omega = \omega(\vec{q})$$

- Beschränkung auf kubische Kristalle
- Ausbreitung entlang einer Hochsymmetrierrichtung

$$\vec{q} \parallel [001] \quad \vec{q} \parallel [011] \quad \vec{q} \parallel [111]$$

Atome in Ebenen senkrecht zu diesen Richtungen bewegen sich alle in Phase

→ effektive 1-D Bewegung

mögliche Schwingungsrichtungen (Polarisationen): 3

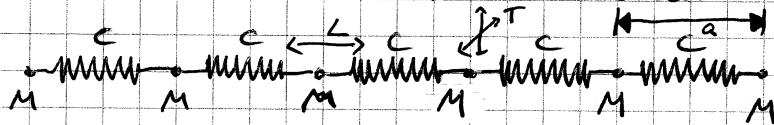
1. longitudinal Polarisation $\vec{u} \parallel \vec{q}$

2. transversal Polarisation $\vec{u} \perp \vec{q}$

photonisch

Einfache Modelle zur Bestimmung der photonischen Bandstruktur $\omega(\vec{q})$

- Lineare Kette aus identischen Atomen



$$M u_i = M \quad K_{\alpha\beta} = c \zeta / T$$

$$-M \omega^2 u_{i,T} = \sum_{j=-n/2}^{n/2} c \zeta / T (u_{i+j,T} - u_{i,T})$$

Wahl der nächsten Nachbarn

$$= c(u_{i+1} - u_i) + c(u_i - u_{i-1})$$

$$= c(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i)$$

$$u_i = u e^{iq(i)} e^{-i\omega t} \quad i = \text{Position des Körpers}$$

a = Periode des Kristalls

$$\vec{v}_g = \vec{\nabla}_{\vec{q}} \omega(\vec{q})$$

$$= \frac{d\omega}{d\vec{q}}$$

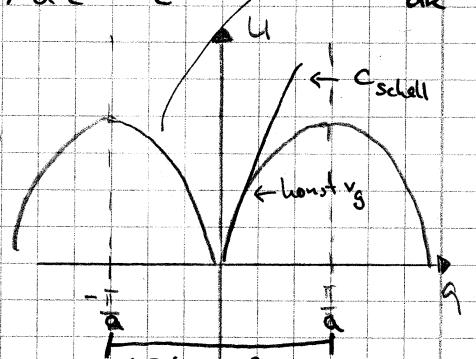
$$-M \omega^2 u_{i,T} = c \zeta \underbrace{(e^{iq} + e^{-iq} - 2)}_{2 \cos(qa)} u e^{-i\omega t} e^{iq(i)}$$

$$\Rightarrow \omega_{L,T}^2 = \frac{2c\zeta}{M} \underbrace{\left(1 - \cos\left(\frac{qa}{2}\right)\right)}_{2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}$$

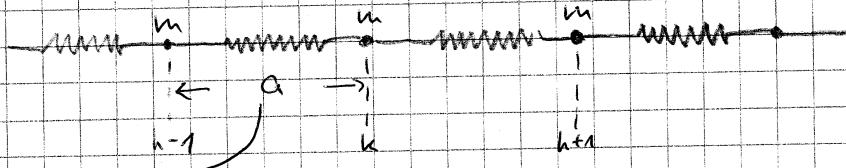
Realraum: $n \cdot a$

$$\text{repr. Raum: } m \cdot \frac{2\pi}{a} \omega_{L,T} = 2 \sqrt{c\zeta} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right|$$

→ an jedem Knoten muss ein Atom sitzen → λ_{min} vorhanden



lineare Kette mit einatöngiger Basis

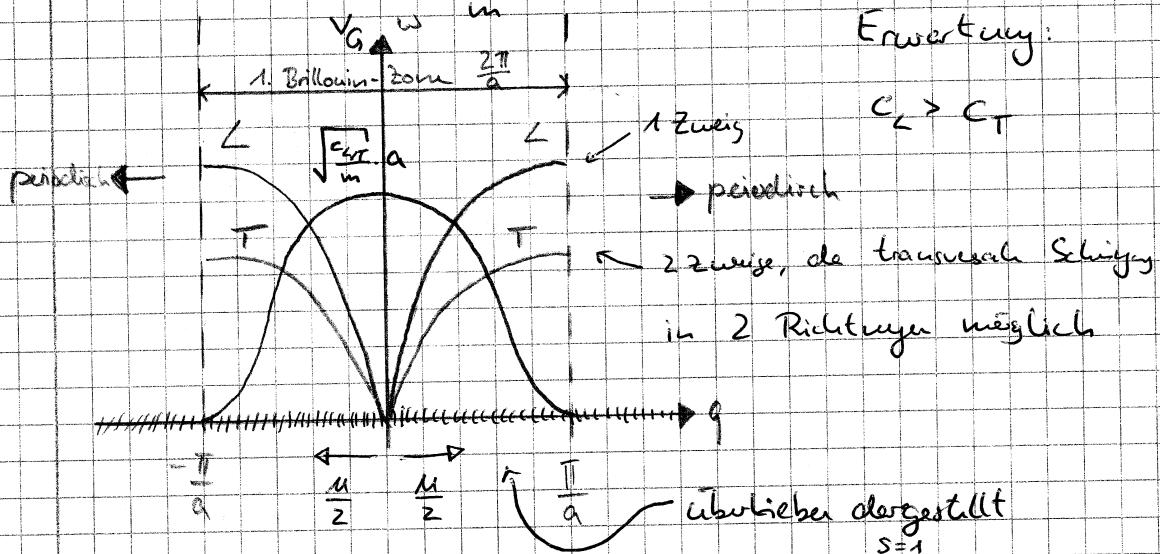


↪ im reciproken Raum Periode $\frac{2\pi}{a}$
ist

$$mc^2 u_{LT} = m \quad \frac{d^2 u_{LT}}{dt^2} = c_{LT} (u_{n+1} - u_n) - c_{LT} (u_n - u_{n-1})$$

$$\omega_{LT}^2 = \frac{2c_{LT}}{m} (1 - \cos(\varphi))$$

$$= 4c_{LT} \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)$$



$$\text{Anzahl der Freiheitsgrade } g = 3sM = 3M$$

bisw. q kontinuierliche Variable, offener aber dicht

Randbedingungen: Born-von Karman'sche Randbedingungen

$$\text{Länge der Kette: } L = M \cdot a, e^{i q Ma} = 1$$

$$\hookrightarrow u(x+L) = u(x) \Rightarrow qMa = m \cdot 2\pi \quad m \in \mathbb{Z}$$

$$\hookrightarrow q = \frac{m \cdot 2\pi}{Ma} = m \cdot \frac{2\pi}{L}$$

→ für Experimentator q so dicht, dass als

kontinuierlich betrachtet

↪ komplett Info in der

$$q_m = \frac{a}{2} = \pm \frac{M \cdot 2\pi}{2 \cdot Ma} = \pm \frac{\pi}{a}$$

1. Brillouin-Zone

\Rightarrow 1. Brillouin-Zone (BZ) ist ausreichend

$$e^{iqa} \xrightarrow{q' = q \pm \frac{2\pi}{a}} e^{iq'a} = e^{iqa} \cdot e^{i(\pm \frac{2\pi}{a}) \cdot a} = e^{iqa}$$

4 Atom \rightarrow Alkene:

$$\lambda_{\min} = 2a \quad \text{wege } \# \text{ benötigter Kreuzen}$$

$$\lambda \geq 2a$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} = 1/q \leq \frac{2\pi}{2a} = \frac{\pi}{a}$$

$$(1) \omega(-q) = \omega(q) \quad (2) \omega(q) \neq \omega(q + M \frac{2\pi}{a})$$

Coppergeschwindigkeit

$$\vec{v}_G = \vec{\nabla}_{\vec{q}} \omega(\vec{q}) \Rightarrow v_G = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \sqrt{\frac{c_{st}}{m}} a \cos\left(\frac{q_G}{z}\right)$$

Vorsicht: $\vec{q}, \vec{\dot{q}}$ sind keine Impulse, denn wir betrachten Schwingungen um die Gleichgewichtslage

Gleichwohl: Bei Betrachtung von Störprozessen treten oft Ausschlagsregeln bestimmt durch

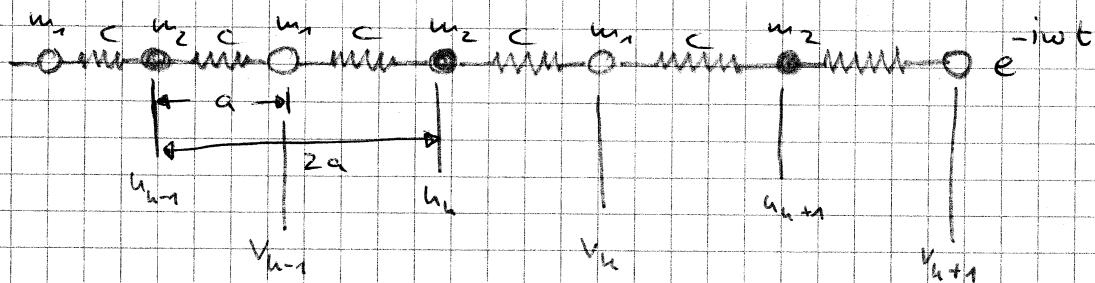
Übergangsstrukturen auf, in dem g bzw.

\vec{q} wie ein Impuls auftritt

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ $\left[\begin{array}{c} \text{Kristallstrukturanalyse} \\ \text{sieht Streug in X-ray} \end{array} \right] \quad \vec{h}_2 - \vec{h}_1 = \vec{G}$

Anregung von Phonon $\vec{h}_{1g} \vec{h}_{1g} = \vec{G} + \vec{q}$
inert.

↳ tr. lässt que die Impulse wirken, die tritt Impuls, aber nur quasimpuls



$$-\omega^2 m_1 u_n = c(v_n - u_n) - c(u_n - v_{n-1}) \\ = c(v_n + v_{n-1} - 2u_n) \quad u_n = e^{iq(ka)}$$

$$-\omega^2 m_2 v_n = c(u_{n+1} - v_n) - c(v_n - u_n) \\ = c(u_{n+1} + u_n - 2v_n) \quad v_n = e^{iq(ka)}$$

Oder Einsetzen + Lösen des Gleichungssystems

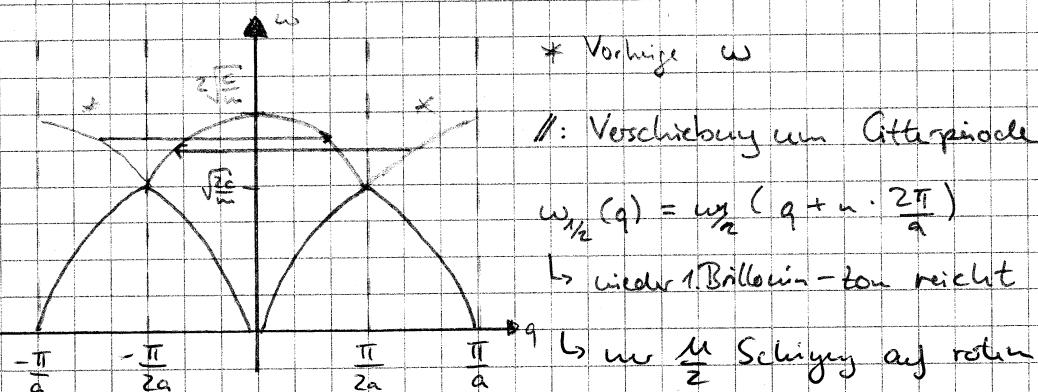
$$m_1 m_2 \omega^4 - 2c(m_1 + m_2)\omega^2 + 2c^2(1 - \cos(qa)) = 0$$

$$\omega_{1/2}^2 = \frac{2c(m_1 + m_2)}{2m_1 m_2} \pm \frac{2c}{2m_1 m_2} \sqrt{(m_1 + m_2)^2 - 2m_1 m_2(1 - \cos(qa))}$$

→ zurück auf los: Linien Kette mit $s=1$ und Periode a

hier: Linien Kette mit $s=2$ und Periode $2a$

$$m_1 = m_2: \omega_{1/2}^2 = \frac{2cm}{m^2} \pm \frac{c}{m^2} \sqrt{4m^2 - 2m^2(1 - \cos(qa))} \\ = \frac{2c}{m} \pm \frac{2c}{m} \sqrt{1 - \frac{1}{2}(1 - \cos(qa))} \\ = \frac{2c}{m} \pm \frac{2c}{m} \sqrt{1 - \sin^2(qa)} \\ = \frac{2c}{m} (1 \pm \cos(qa))$$



$$\omega_{1/2}(q) = \omega_{1/2}(q + n \cdot \frac{2\pi}{a})$$

↪ wieder 1 Brillouin-Zone reicht

$$\text{Ast} \rightarrow \text{orange Ast. fasset auch } \frac{M}{2}$$

$$\Rightarrow \frac{M}{2} + \frac{M}{2} = M \quad \checkmark$$

- umso größer die Periode im Ortsraum, umso kleiner ist

die 1.BZ im kippel Raum → Komposition durch mehr Äste

$$\hookrightarrow M = e \cdot \frac{M}{e}$$

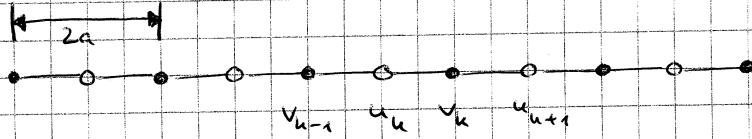
Phasenverschiebung \hookrightarrow # Schwingen

G

F

C

I



$$v_n = v e^{-i\omega t - iqL(2a)} \quad u_n = u e^{-i\omega t - iqL(2a)}$$

$$m_1 \ddot{v}_n = c(v_n - u_n) - c(u_n - v_{n-1})$$

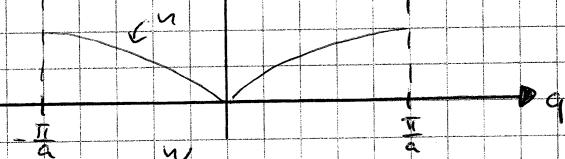
$$m_1 \ddot{u}_n = c(u_{n+1} - v_n) - c(v_n - u_n)$$

$$-\omega^2 \begin{pmatrix} m_1 & u_n \\ m_2 & v_n \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} v_n + v_{n-1} \\ u_{n+1} + u_n \end{pmatrix} - 2c \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} \quad (*) \text{ next Seite}$$

$$\omega_{1/2}^2 = \frac{c}{m_1 m_2} ((m_1 + m_2) \pm \sqrt{(m_1 + m_2)^2 - 2m_1 m_2 (1 - \cos(qL))})$$

$$m_1 = m_2$$

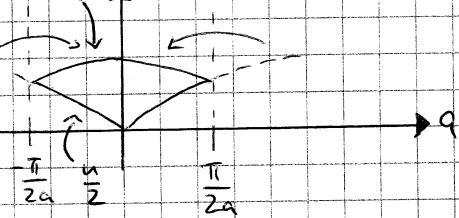
$$s=1 \quad a$$



$$\Delta q = \frac{2\pi}{L} \quad \text{nach}$$

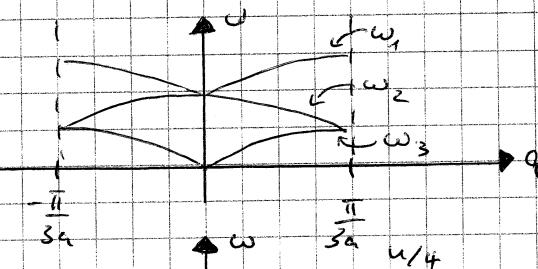
hier muss eigentlich
ne 4 stehen (nicht mehr klug)

$$s=2 \quad 2a$$



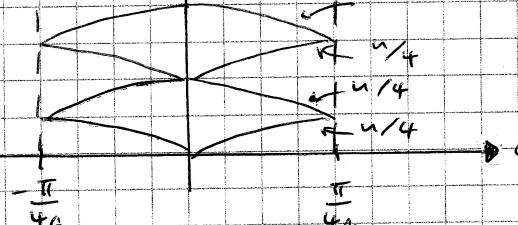
nicht mehr
Maßstabsgetreu

$$s=3 \quad 3a$$



nicht
Maßstabsgetreu

$$s=4 \quad 4a$$



$$m_1 \neq m_2 \quad (2a) \rightarrow a \quad \text{echte primitive Periode}$$

$$g = \frac{s=2}{3} s n = 6n$$

nicht 2a sondern
o.B.d. A: $m_1 > m_2$ um a, sieh links

$$\Rightarrow \omega_{1/2}^2 = \frac{c}{m_1 m_2} ((m_1 + m_2) \pm \sqrt{(m_1 + m_2)^2 + 2m_1 m_2 \cos(qa)})$$

Indicates wrong
T hier auch exakt
Faktor 4, wenn man nicht
muss $(\cos(qa) + 1)$ stimmt

$$q \rightarrow 0 : (-) \quad \omega_1 = 0$$

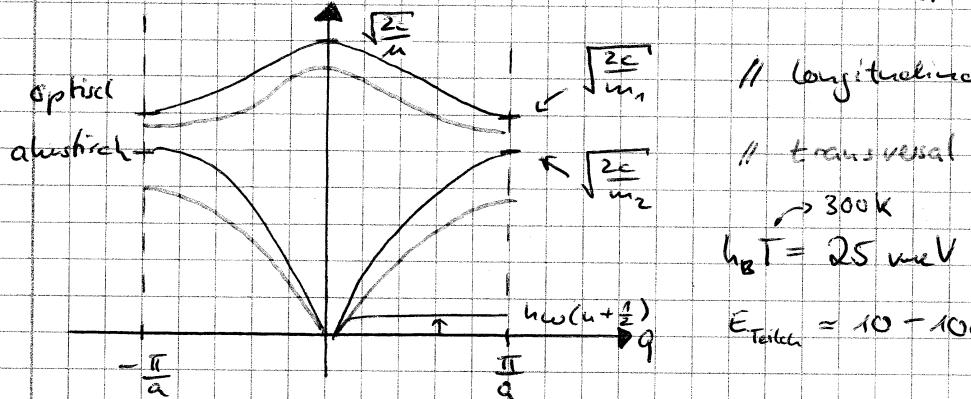
$$(+) \quad \omega_2 = \sqrt{2c \frac{(m_1+m_2)}{m_1 m_2}} \xrightarrow{\mu} \frac{1}{\mu} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)$$

für Baye nicht einsetzlich ausrechnet:

$$\begin{aligned} \omega_{1/2}^2 &= \frac{c}{m_1 m_2} ((m_1+m_2) \pm \sqrt{(m_1+m_2)^2 - 2m_1 m_2 (1-\cos(qa))}) \\ &= \frac{c}{m_1 m_2} ((m_1+m_2) \pm \sqrt{(m_1-m_2)^2 + 2m_1 m_2 (1+\cos(qa))}) \end{aligned}$$

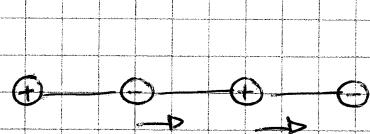
$$q \rightarrow \frac{\pi}{a} : \quad \omega_1^2 = \frac{c}{m_1 m_2} (m_1 + m_2 + m_1 - m_2) = \frac{2c}{m_2}$$

$$\omega_2^2 = \frac{c}{m_1 m_2} (m_1 + m_2 - m_1 + m_2) = \frac{2c}{m_1}$$

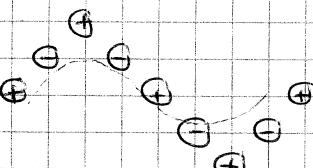


$$(*) -\omega^2 \left(\frac{u_n u_n}{m_2 v_n} \right) = c \left(\frac{(1+e^{-iqn}) v_n}{(e^{iqn}+1) u_n} \right) - 2c \left(\frac{u_n}{v_n} \right)$$

$$q \rightarrow 0 \quad \omega \rightarrow 0 \quad 0 = \left(\frac{2v_n}{2u_n} \right) - 2c \left(\frac{u_n}{v_n} \right) \Rightarrow v_n = u_n$$



$$\omega \rightarrow \sqrt{\frac{2c}{\mu}} \quad 1. \text{ Gleichung}$$



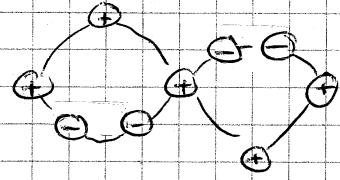
C rückwärts versetzen
unterschärfer

$$-\frac{2c}{\mu} m_1 u_n = 2c v_n - 2c u_n \quad \curvearrowright v_n = -\frac{m_2}{m_1} u_n$$



osz. Dipolmoment

$$-m_2 v_n = m_1 u_n$$



E-Feld kann die
Schwingung erregen

- Schwingfrequenz im Terrahertz-Bereich

- der Masse können Schwingungen ausgelöst werden
- tiefste Temperatur an der TU: 50 mK

↳ Phononenenergie kann nicht ausgefordert werden (Gesetz)

$$\langle u \rangle = \frac{1}{e^{\frac{h\nu_B T}{k_B T}} - 1} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \langle u \rangle = 0 \Rightarrow E = \frac{\hbar \omega}{2}$$

Übergang auf 3D $\omega(\vec{q}) \sim \omega(\vec{q})$

$$n = n_x \cdot n_y \cdot n_z \rightarrow g = \frac{3s}{\text{Ats}} n^3 \# \text{ Schwinggs pro Ats}$$

$\omega(\vec{q})$ hängt von der Ausbreitungsrichtung ab

 $\xrightarrow{\text{akustisch } (\omega(0) = 0)}$

 $\xrightarrow{\text{3s-3 optisch Ats } (\omega(0) \neq 0)}$

 richtung ab

→ Bsp. Platin auf den Tischen

$[0_{qq}]$, $[00_q]$ etc. Ausbreitungsrichtung

- alle Punkte innerhalb einer BZ werden mit gleichem Buchstaben abgekürzt

↳ alle Punkte auf der Kante einer Brillouin-Zone werden mit lateralem Buchstaben abgekürzt

Zustandsdichte

Information in Dispersionsrelationen ist oft zu viel.

Sie sind nur dann interessant, wie viele Zustände bei einer bestimmten Frequenz/Energie vorliegen

$$\text{Planck-Strahlung } g(\nu(T)) d\nu = \frac{8\pi k_B T^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu$$

$$2 \cdot h\nu \cdot \frac{4\pi\nu^2}{c^3} \leftarrow \text{Zustandsdichte}$$

Polarisation Energie Photon Lichtfelder im Volumen

$$2\pi u = \omega = c \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2} \rightarrow \omega = 0 : h_x = h_y = h_z = 0$$

C

C

C

C

Zustandsdichten

$\omega(\vec{q})$

Bose-Einstein: $\frac{n}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$

Anz. der Schwingungen mit $\omega(\vec{q})$

Planck'sches Strahlungsgesetz

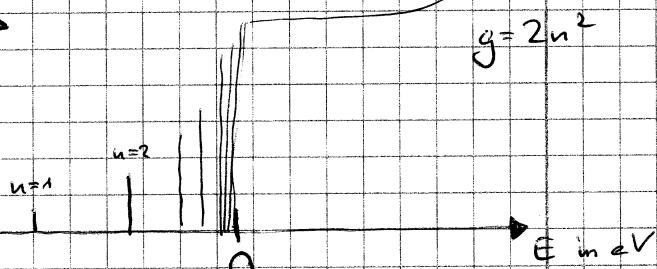
$$2 \ h \nu \frac{4\pi \nu^2}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Photonen Zustandsdichte, die das Volumen für Realisierung von Licht der Frequenz ν ausfüllt.

Elektronen im H-Atom: $\frac{\text{Anz. Zust.}}{\text{Sp}}$

$g = 2n^2$

$$\begin{aligned} D(E) &= \frac{dn}{dE} = \text{Tr}[S(EH-H)] \\ \text{Basis der Energie-EZ} &\quad \downarrow \quad \uparrow \quad \text{Sp} \\ &= \sum_i S(E - E_i) \end{aligned}$$



Phononen: $E = \hbar\omega(\vec{q}) = E_{q_x, q_y, q_z}$

$$\begin{aligned} D(E) &= \sum_{q_x, q_y, q_z} S(E - E_{q_x, q_y, q_z}(\vec{q})) \Delta_{q_x} \Delta_{q_y} \Delta_{q_z} \\ &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{q_x, q_y, q_z} \delta(E - E(\vec{q})) \Delta_{q_x} \Delta_{q_y} \Delta_{q_z} \end{aligned}$$

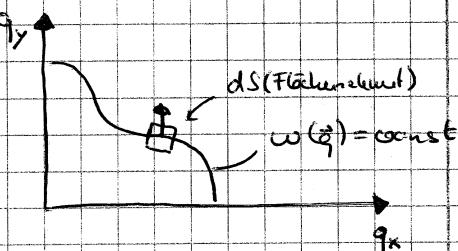
Born-von-Karman
 $q_i = \frac{2\pi}{L} n_i$

$\Delta q_i = \frac{2\pi}{L} \Delta n_i$

$\Delta n_i = \frac{L}{2\pi} \Delta q_i$

$$\boxed{= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \iiint dq_x dq_y dq_z \delta(E - E(\vec{q}))} \quad \vec{q} \text{ liegen dicht!}$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_S dS \int dq'_1 \delta(E - E(S, q'_1))$$



$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i)$$

x_i : Nullstellen von $f(x)$

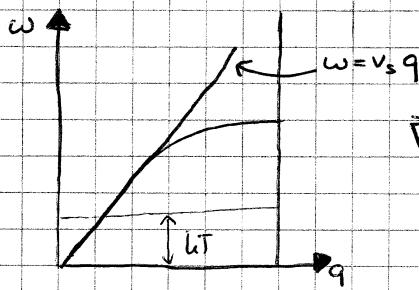
$$\boxed{D(E) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_S dS \int \frac{1}{|\vec{p}_k|} \delta(k' - k'_1) dk'_1 \quad \boxed{k = q}}$$

$$\boxed{= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_S dS \frac{1}{|\vec{p}_k|} \quad \text{allgemeingültige Dispersionstheorie}}$$

\hookrightarrow Zustandsdichte

Dispersionsrealisation im Volumen: $2\pi v = \omega = ck$

↳ innere Zustandsdichte $\frac{4\pi v^2}{c^3}$ ergeben



$$\vec{\nabla}_q (\hbar \omega(\vec{q})) = \hbar v_s \vec{\nabla}_q (\sqrt{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2})$$

$$= \hbar v_s \frac{2\vec{q}}{2\sqrt{...}} = \hbar v_s \frac{\vec{q}}{|\vec{q}|}$$

$$\begin{aligned} \text{↳ } D(E) &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int dS \frac{1}{\hbar v_s} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{1}{\hbar v_s} 4\pi q^2 \\ &= \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{1}{\hbar v_s} \frac{E^2}{\hbar^2 v_s^2} = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{1}{v_s^3} E^2 \left(=\frac{dn}{dE}\right) \end{aligned} \quad E = \hbar \omega = \hbar v_s q \quad q = \frac{E}{\hbar v_s}$$

$$\begin{aligned} D(v) &= \frac{dn}{dv} = \underbrace{\frac{dn}{dE}}_{\textcircled{1}} \underbrace{\frac{dE}{dv}}_{\textcircled{2}} = \left(\frac{L^3}{2\pi^2}\right) \underbrace{\frac{(2\pi)^3 h^2 v^2}{L^3 v_s^3}}_{\textcircled{3}} h \\ &= L^3 \frac{4\pi \cdot v^2}{v_s^3} \quad L^3 = \text{Vol. Würfel} \end{aligned}$$

Aufzählreihe in Literatur

$$\langle q \rangle = \frac{dn}{dq} \stackrel{\text{Isotropie}}{=} \frac{L^3}{8\pi^3} 4\pi q^2 \quad \text{Dispersion}$$

$$dn = \frac{4\pi q^2}{(2\pi)^3} dq$$

$$E = \left(\hbar \omega\right) \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \text{Energiequant} \leftrightarrow \text{Teilchencharakter}$$

Bemerkung:

Phonon ist das erste Beispiel eines Quasi-Teilchens, zu dessen Entstehung viele andere Teilchen zusammenwirken.

In dynamischen Prozessen tragen diese Anregungen über Auswirkungen so bei, dass sie wie Teilchen "aussehen".

$$E(\vec{u}') = E(\vec{u}) \pm \hbar \omega(\vec{q}) \quad [\text{Energieerhaltung}]$$

$$\vec{u}' = \vec{u} \pm \vec{q} + \vec{G} \quad [\text{"Quasi"-Impuls-Erhaltung}]$$

Phonon: Spin 0

2. Teil von Born-Oppenheimer

elektron. Bewegung

$$\sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} \psi_{R_h}(\vec{r}_e) + \underbrace{(V_{ee} + V_{eh} + V_{hh})}_{\textcircled{1}} \psi_{R_h}(\vec{r}_e) = U(\vec{R}_h) \psi_{R_h}(\vec{r}_e)$$

$$\vec{R}_h = \text{const.} \quad U = \text{const.} \quad \rightarrow$$

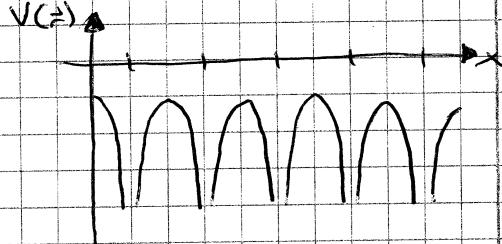
$$\textcircled{1}: V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) \quad E$$

Ein-Elektronen-Näherung

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_e} + V(\vec{r}) \right) \psi_{R_h}(\vec{r}_e) = E \psi_{R_h}(\vec{r}_e)$$

$$|\psi(\vec{r}_e)|^2 = |\psi(\vec{r}_e + \vec{R})|^2$$

$$\text{Abschalten von } V \quad \psi \sim e^{i\hbar \vec{k} \cdot \vec{r}_e}$$



Bloch'sches-Theorem: Wellenfunktion eines Elektrons in einem periodischen Potentiel ist gegeben durch:

$$\psi_{n,h}(\vec{r}_e) = e^{i\vec{k}_h \cdot \vec{r}_e} \cdot u_{n,h}(\vec{r}_e) \quad \text{mit } u_{n,h}(\vec{r}_e) = u_{n,h}(\vec{r}_e + \vec{R})$$

$$\psi_{n,h}(\vec{r}_e + \vec{R}) = e^{i\vec{k}_h \cdot \vec{R}} \psi_{n,h}(\vec{r}_e)$$

$$\text{Beweis: } T_{\vec{R}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R})$$

$$\begin{aligned} T_{\vec{R}}(H \psi(\vec{r})) &= H(\vec{r} + \vec{R}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) \quad \xrightarrow{\text{Satz gen. Eigenfunktionen}} \\ &= H(\vec{r}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) \quad \Rightarrow (T_{\vec{R}} H - H T_{\vec{R}}) = 0 \\ &= H(\vec{r}) T_{\vec{R}} \psi(\vec{r}) \quad [T_{\vec{R}}, H] = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{\vec{R}_1} T_{\vec{R}_2} \psi(\vec{r}) &= \psi(\vec{r} + \vec{R}_2 + \vec{R}_1) = \psi(\vec{r} + \vec{R}_1 + \vec{R}_2) = T_{\vec{R}_2} T_{\vec{R}_1} \psi(\vec{r}) \\ &\Rightarrow [T_{\vec{R}_1}, T_{\vec{R}_2}] = 0 \end{aligned}$$

$$H \psi_{n,h}(\vec{r}) = E_{n,h} \psi_{n,h}(\vec{r})$$

$$\xrightarrow{\text{1}} T_{\vec{R}} \psi_{n,h}(\vec{r}) = c(\vec{R}) \psi_{n,h}(\vec{r})$$

$$\xrightarrow{\text{2}} T_{\vec{R}_1} T_{\vec{R}_2} \psi_{n,h}(\vec{r}) = T_{\vec{R}_1} c(\vec{R}_2) \psi_{n,h}(\vec{r}) = c(\vec{R}_1) \cdot c(\vec{R}_2) \psi_{n,h}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow c(\vec{R}_1) \cdot c(\vec{R}_2) = c(\vec{R}) = c(\vec{R}_1 + \vec{R}_2)$$

Die einzige Funktion, die diese Gleichung erfüllt

$$\text{ist } c(\vec{R}) = \exp(i\hbar \vec{R})$$

q.e.d.

C

C

C

C

Teilchen im periodischen Potential

$$\psi_{nh}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nh}(\vec{r})$$

Bloch-Theorem: $u_{nh}(\vec{r}) = u_{nh}(\vec{r} + \vec{R})$

$n \hat{=} \text{"Bandindex" zum Abzählen der Bänder}$

$\vec{k} \hat{=} \text{Wellenzahlvektor (zu jeder } \vec{k} \text{ existieren so viele}$
 hsg. als S-GC)

Im Fall eines freien Elektrons

$$\hat{p} \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) = \hbar \vec{k} \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) \text{ mit } \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

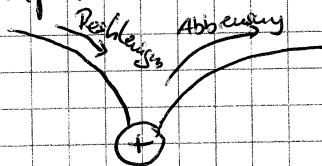
Kristallelektronen: kein einfacher Zusammenhang

$$\hat{p} (\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) \cdot u_{nh}(\vec{r})) = \hbar \vec{k} \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) u_{nh}(\vec{r}) + \frac{\hbar}{i} \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) \nabla u_{nh}(\vec{r})$$

Abweichung $\neq \text{const } \psi_{nh}(\vec{r})$

\Rightarrow Bloch-Wellen sind keine Eigenzustände des Impulsoperators

Impuls der Elektronen wird durch das Kristallpotential modifiziert



Ausführliche Beschreibung



\Rightarrow Wie viele unterschiedliche Werte können dann die Kombinationen der Quantenzahlen annehmen?

Jeder Satz an QZ $\begin{pmatrix} n \\ m_e \end{pmatrix} \rightarrow$ Jedes Kristallinean

$\begin{pmatrix} h \\ m_s \end{pmatrix}$ geht aus Atomorbitale
hervor

Jedes Atom hält einen solchen Zustand bereit

Entsprechend einer Raumrichtung i kann N Atome den Kristall auf

Gesamtzahl der Atome: $N = N_1 + N_2 + N_3$

$\hat{=}$ Gesamtzahl der Zustände, die sich beim Anfügen
eines Bandes beteiligen können

→ Einschränkung der Wkt von \vec{h} !

Für den Wertebereich von \vec{h} stehen nur N .

Möglichkeiten zur Verfügbg

→ Impuls stellt kein gute Quantenzahl dar, da die kontinuierliche Translationsinvarianz durch das Kristallpotenzial auf eine diskrete heruntergesunken wird.

wieder weiter bei: $*^1$

$\vec{t}\vec{h}$ wird dennoch als Kristallimpuls bezeichnet "zu Befreiung der Ähnlichkeit"

$$\Psi_{\vec{h},\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{h}\cdot\vec{r}) \cdot u_{\vec{h},\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\hat{H} \Psi_{\vec{h},\vec{k}}(\vec{r}) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \cdot \Psi_{\vec{h},\vec{k}}(\vec{r})$$

$$p\psi = e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} u + t\vec{h}u \right)$$

$$p^2\psi = p \left[e^{i\vec{h}\cdot\vec{r}} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} u + t\vec{h}u \right) \right] = \left[\frac{\hbar^2}{2m} (p+t\vec{h})^2 + V \right] u$$

$$\hat{H} \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla} + i\vec{h})^2 + V(\vec{r}) \right] u_{\vec{h},\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{h},\vec{k}} u_{\vec{h},\vec{k}}(\vec{r})$$

Mit den Randbedingungen

$$u_{\vec{h},\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{h},\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

Alle Energie-Eigenwerte $E_{\vec{h},\vec{k}} = E_n(\vec{h})$ werden zw.

als Bandstruktur berechnet

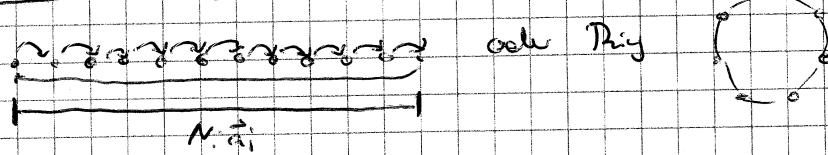
Allgemein gilt: Eigenwerte werden über die RB festgelegt

RB von Born und van Vleck (BvV)

q: Sei die kleinste mögliche Periode im Kristallgitter entlang einer Richtung

$N_{\vec{q}}$ ist die Translation von Anfang bis zum Ende der periodischen Anordnung

$$\text{BvV-RB: } \Psi(\vec{r} + N_{\vec{q}}) = \Psi(\vec{r})$$

Anschaulich

Einsetzen der Brk-RB in das Bloch-Theorem

$$\psi_{nh}(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \underbrace{\exp(i \vec{h} \cdot \vec{N}_i \vec{a}_i)}_{=1} \psi_{nh}(\vec{r}) \doteq \psi_{nh}(\vec{r})$$

$$\Rightarrow h_i a_i = m_i \frac{2\pi}{N_i} \text{ mit } m_i \in \mathbb{Z}$$

Mit der Länge des Kristalls $L_i = N_i a_i$

$$\text{Breite einer Wellenvektorenzustand: } \Delta h_i = \frac{2\pi}{N_i a_i} = \frac{2\pi}{L_i}$$

$$\text{In 3D: } \Delta h_1 \Delta h_2 \Delta h_3 = (2\pi)^3 \cdot \underbrace{\frac{1}{L_1 L_2 L_3}}_{\text{Volumen des Kristalls}}$$

Volumen des Kristalls

Ein Zustand des Wellenvektors nimmt im h-Raum
das Volumen $(\frac{2\pi}{\sqrt{3}})^3$ an.

Bemerkung:

Für ein freies Teilchen sind natürlich alle h-Werte erlaubt.

Formal kann der freie Raum als periodisches System

mit Periode "∞" aufgefasst werden.

$$\Rightarrow \Delta h_i \rightarrow 0 \Rightarrow \text{alle h-Werte erlaubt!} \quad \diamond$$

In der Praxis liegen wegen der Anschluss der Kästchen die h-Werte sehr dicht, so dass sie oft "guten Gewissens" als kontinuierliche Variable aufgefasst werden können.

Zum Fazit: freie Elektron

Kristallelektron

Wellenfunk: $\psi_h(\vec{r}) \propto e^{i \vec{h} \cdot \vec{r}}$

Bloch-Th.: $\psi_h \propto e^{i \vec{h} \cdot \vec{r}} u_{nh}(\vec{r})$

\vec{h} -Impuls $\hat{=} \text{ kontinuierlich}$

\vec{h} -Kristallimpuls: quasi-kontinuierlich

Energie: $E(\vec{h}) = \frac{\hbar^2 \vec{h}^2}{2m}$

$$E_h(\vec{h}) = E_h(\vec{h} + \vec{G})$$

\rightarrow Energiebandstruktur

Dispersionsrelation

"Impuls": $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} + \frac{\hbar}{i} \nabla u_{nh}(\vec{r})$$

R

C

I

J

Mittlere Geschwindigkeit eines Elektrons im Bereich mit Wirkungspotenzial

$$\bar{v} : \vec{v}_n(\bar{h}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\bar{h}} E_n(\bar{h}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \bar{h}}$$

zeitunabhängig, stationär

Überraschung: Es gibt Zustände in einem periodisch Potenziell, in den sich Elektronen ungestört mit $\vec{v}_n(\bar{h})$ bewegen können, trotz der Gitteratome!
(Normalerweise stoße diese immer mit den Elektronen)

→ Gegensatz → klassischen Behandlung der Widerstände in Metallen (Stopprozesse von Elektronen mit gebundenen Ionen im Metallgitter (Drude-Modell))

Beweis: Gefragt wird nach Geschw. an einem Punkt \bar{h}_0 der Dispersionssrelation.

$$\vec{v} = \langle \frac{\vec{P}}{m} \rangle = \frac{d \langle \vec{r} \rangle}{dt} \leftarrow \text{Erlaufst-Theor.} \quad [\text{klass. Bew. Gl. kann für die Mittelwerte der QM gelten}]$$
$$\frac{d \langle \vec{r} \rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\vec{r}, \vec{H}] + \langle \frac{d \vec{r}}{dt} \rangle$$

Zusammenhang zwischen der Dispersionssrelation und der Gruppengeschwindigkeit über starke theoretische Betrachtung:

Taylor-ELW von $E_n(\bar{h})$:

$$E_n(\bar{h}) = E_n(0) + \sum_i \frac{\partial E_n}{\partial h_i} h_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_n}{\partial h_i \partial h_j} h_i h_j + \dots$$
$$\rightarrow \hat{H} = \underbrace{H_0}_{=\frac{p^2}{2m}} - i \underbrace{\frac{t^2}{m} \bar{h} \vec{\nabla}}_{=\vec{V}} + \frac{\bar{h}^2}{2m}$$

Bei einer schwachen externen Störung ist der führende Term linear in \bar{h} :

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n(0) | -i \frac{\hbar^2}{m} \bar{h} \vec{\nabla} | \psi_n(0) \rangle$$

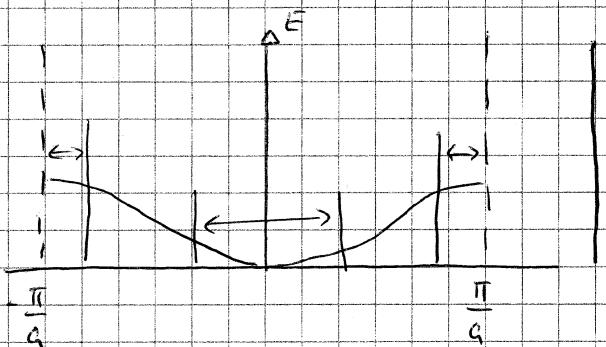
$$= \sum_i \frac{\hbar h_i}{m} \langle \psi_n(0) | \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{x_i} | \psi_n(0) \rangle = \sum_i \hbar h_i \langle \frac{\vec{p}_i}{m} \rangle$$

→ Vergleich mit 1. Term der Taylor-Entwicklung:

$$\frac{\partial E_n}{\partial h_i} = \hbar \langle \frac{\vec{p}_i}{m} \rangle \Leftrightarrow v_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial h_i}$$

„Effektive Masse“ folgt aus dem 2. Term der Taylor-Entw.

$$\frac{1}{m_{ij}^{(1)}} = \frac{\partial^2 E_n}{\partial h_i \partial h_j}$$



• mächtiges Konzept, Einfluss 24
auf alle Teile zu einem Übergang
von Energieniveaus kontinuierlich

Bem: bei einem Elektronen in einem perfekt periodischen Kristall

ist kein Stromtransport möglich \rightarrow in Natur kein

perfekten Kristallen (Brugg-Strom bei $k = \pm \frac{\pi}{a}$)

\rightarrow Fortbewegung durch Streuungen

• durch künstliche Kristalle können oszillierende

Elektronen herangezogen werden (kein Transport)

• lineares Dispersionsschema $\rightarrow v_{\text{app}} = 0$

$$\text{Zustandsdichte: } D(E) = \frac{\partial n}{\partial E} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \iint_{E=\text{const}} \frac{dS_h}{|\nabla_h E(h)|}$$

$$\text{Phononen: } E = \hbar \omega = \hbar v_s q$$

$$D(E) \sim E^2$$

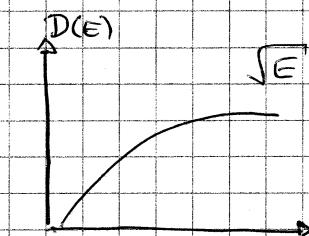
Elektronen an Bandgrenzen

$$E(\vec{h}) = \frac{\hbar^2 \vec{h}^2}{2m_{\text{eff}}} \quad \nabla_h \{E(\vec{h})\} = \frac{\hbar^2}{m_{\text{eff}}} \vec{h}$$

$$D(E) = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \iint_{\substack{E=\text{const} \\ h^2 = \frac{2m_{\text{eff}} E}{\hbar^2}}} \frac{dS_h}{k} = \frac{L^3}{4\pi^3} \frac{m_{\text{eff}}}{\hbar^2} \frac{4\pi \hbar^2}{h} = \frac{L^3}{\pi^2} \frac{m_{\text{eff}}}{\hbar^2} h$$

$$\text{Spin } E=\text{const} \quad \rightarrow h = \sqrt{\frac{2m_{\text{eff}}}{\hbar^2} E} \quad \leftarrow \text{mit } h = \text{const.}$$

$$D(E) = \frac{L^3}{\pi^2} \sqrt{2} \left(\frac{m_{\text{eff}}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$$



Viel Elektronensystem (viele freie Elektronen)

Atomorbitale

$$\begin{pmatrix} n \\ e \\ rme \\ S, m_s \end{pmatrix}$$

Festkörperorbital

$$\left(\begin{array}{c} \vec{h} \\ S, m_s \end{array} \right)$$

$h < 2N$



Fermienergie: Minimalen Energie aller besetzten Zustände

$$\mu = \frac{\partial U}{\partial N} \quad \text{Energie pro Teilchenzahl des Systems und zu erhöhen}$$

↳ chemisches / TD - Potential

$$H = U + pV \quad \left(\begin{array}{l} U(V, S, N) \\ F(V, T, N) \end{array} \right) \quad \rightarrow G(P, T, N)$$

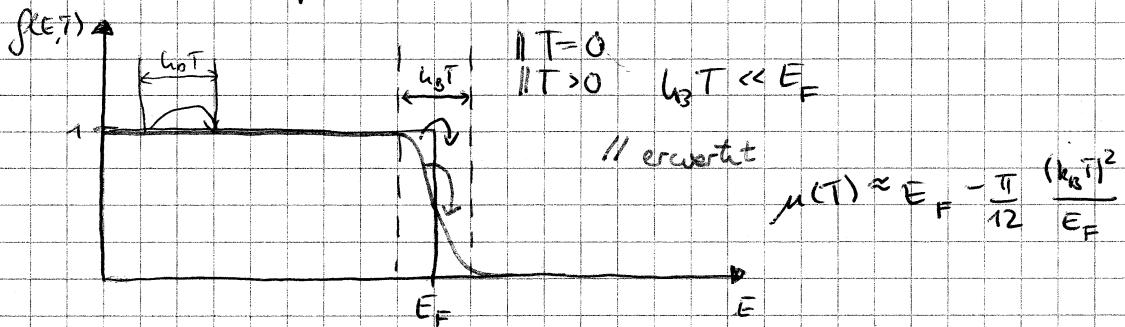
$$H(p, S, N)$$

$$\boxed{\mu = E_F \quad |_{T=0}}$$

mittlere Besetzungsfunktion:

mittlere Besetzung eines Zustandes der Energie E

bei der Temperatur T



• Fermi - Dirac - Statistik

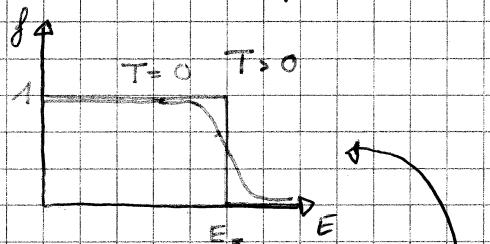
$$f(E, T) = \frac{1}{\exp(\frac{E - \mu}{k_B T}) + 1} \leq 0 \quad \boxed{f(E=\mu, T) = \frac{1}{2}}$$

• Bose - Einstein

$$f_{BE}(E, T) = \frac{1}{\exp(\frac{E - \mu}{k_B T}) - 1}$$

Elektronen

$$f_{FD} = \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{k_B T}} + 1}$$



$$n = \int_{-\infty}^{\infty} D(E) \cdot f(E, T) dE$$

muss für versch T gleich sein

Phonenen

$$f_{BE} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$



- alle Teilchen im Grundzustand
- bei f_{FD} durch Pauli-Prinzip verhindert
- ↪ bei Phonen nicht geltend

Gesamtenergie: $U(t) = \int E D(E) f(E, T) dE$

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V \quad \rightarrow \text{harmonische Näherung (Oszillation} \rightarrow \text{keine Anschwingung des Körpers)}$$

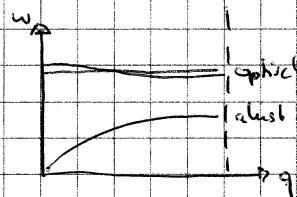
$$C_p = \left. \frac{\partial U}{\partial P} \right|_P \quad \text{Gee.: } C_p - C_V = R = Nk_B$$

Festkörper: $C_p \approx C_V \rightarrow$ konstanter Abstand zw.
Atomnukleus und Coulomb

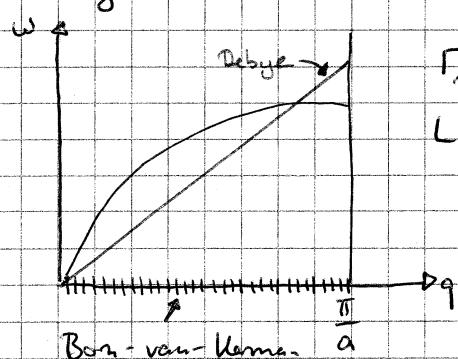
Phonon Beitrag zu C_V

Allgemein schwing → Molekille

- Debye $\hbar\omega = \hbar v_s q$ akustische Phonenen bei tiefer Temperatur
- Einstein $\hbar\omega = \text{const.}$ optische Phonenen die bei hoher konstant



Debye-Modell

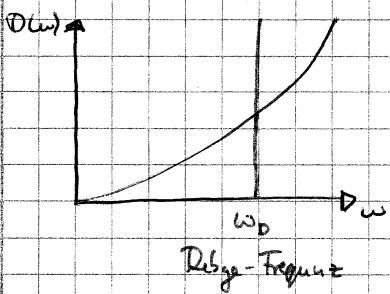


$$\hbar\omega = \hbar v_s q \quad D(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{1}{\hbar^3 v_s^3} E^2$$

$$D(\omega) = \frac{dn}{dq} = \frac{dn}{dq} \frac{dE}{dE} \frac{dE}{d\omega} \frac{d\omega}{dq} = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{1}{\hbar^3 v_s^3} \hbar^2 \omega^2 \frac{1}{\hbar}$$

$$N \text{ Oszillatoren LA} = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{\omega^3}{v_s^3}$$

transversal



$D(\omega)$

$$\int_0^{\omega_0} D(\omega) d\omega = N = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{1}{v_s^3} \int_0^{\omega_0} \omega^2 d\omega$$

$$= \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{1}{v_s^3} \omega_0^3 \Rightarrow \omega_0^3 = G\pi^2 N v_s^3 \frac{L^3}{C}$$

$$\omega_0 = \sqrt[3]{G\pi^2 N v_s^3 / L^3}$$

$$U = \int_0^{\omega_0} \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3} \hbar\omega \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega/k_B T}{v_s}} - 1} d\omega$$

$$= \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{1}{v_s^3} \int_0^{\infty} \frac{(\hbar\omega) \omega^2}{e^{\frac{\hbar\omega/k_B T}{v_s}} - 1} d\omega \cdot \frac{k_B^3 (k_B T)^4}{(k_B T)^4 + k_B^3}$$

$$\downarrow \text{subst } x = \frac{\hbar\omega}{k_B T} \rightarrow x_0 = \frac{\hbar\omega_0}{k_B T}$$

$$= \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{(k_B T)^4}{v_s^3} \int_0^{x_0} \frac{(\frac{\hbar\omega}{k_B T})(\frac{\hbar\omega}{k_B T})^2}{e^{\frac{\hbar\omega/k_B T}{v_s}} - 1} d\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$$

$$= \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{(k_B T)^4}{v_s^3} \int_0^{x_0} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \sim C_V$$

Grenzfälle:

$$1) T \rightarrow 0 : x_0 \rightarrow \infty \quad = \frac{\pi^4}{15} \text{ & Stefan-Boltzmann}$$

$$U = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{(k_B T)^4}{v_s^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

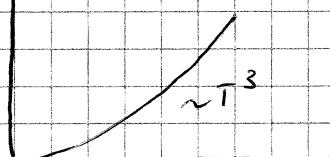
$$U = \frac{1}{30} \pi^2 L^3 (k_B T)^4$$

$$\Rightarrow C_V = \frac{2}{15} \pi^2 \frac{L^3}{v_s^3} k_B^4 T^3 \quad \begin{array}{l} \text{für LA } V_s = V_s LA \\ \text{für TA } V_s = V_s TA \end{array}$$

$$C_V = C_V^{LA} + 2C_V^{TA} = \frac{2}{15} \pi^2 \frac{L^3}{v_s^3} k_B^4 T^3 \underbrace{\left(\frac{1}{V_{s,LA}^3} + \frac{3}{V_{s,TA}^3} \right)}_{\frac{3}{V_s^3} \text{ bei fij}}$$

$$\rightarrow C_V = \frac{2}{5} \pi^2 L^3 k_B^4 \frac{T^3}{v_s^3} \quad \begin{array}{l} \text{für } T=0 \\ \rightarrow 0 \end{array}$$

\hookrightarrow



Dega-Temperatur ϑ

$$k_B T = \hbar \omega_0$$

$$C_V = \frac{12}{5} N k_B \frac{T^3}{v_s^3}$$

\hookrightarrow später Erweitert

2) $T \gg \frac{\hbar\omega_0}{k}, \frac{\hbar\omega}{k} \rightarrow e^x - 1 \approx 1 + x - 1 \propto x$

in diesem Fall $\int_0^{x_0} \frac{x^3}{e^x - 1} = \int_0^{x_0} \frac{x^3}{x} dx = \int_0^{x_0} x^2 dx = \frac{1}{3} x_0^3$

26

$$U = \frac{L^3}{2\pi^2} \frac{(k_B T)^4}{v_s^3 \hbar^3} \frac{1}{3} \frac{\hbar^3 \omega_0^3}{k_B T^3} = \frac{L^3}{6\pi^2} \frac{\omega_0^3}{v_s^3} k_B T$$

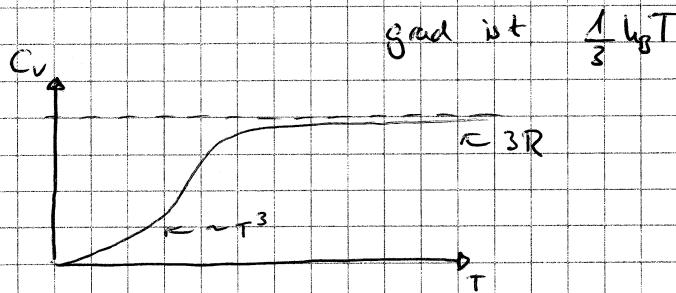
$$\downarrow \omega_0^3 = 6\pi^2 \frac{N}{L^3} v_s^3$$

$$U = N k_B T \text{ pro At}$$

$$\text{alle Atm. } U = U_{\text{EA}} + 2U_{\text{TA}} = 3N k_B T$$

$$C_V = 3N k_B = 3R$$

Aquipartition theorem: mittl. therm. Energie pro quadratischen Freiheitsgrad ist $\frac{1}{3} k_B T$



b) Einsteinmodell

$$D(\omega) = \underbrace{N \delta(\omega - \omega_{\text{c0}})}_{\text{optisch}} + 2N \delta(\omega - \omega_{\text{r0}})$$

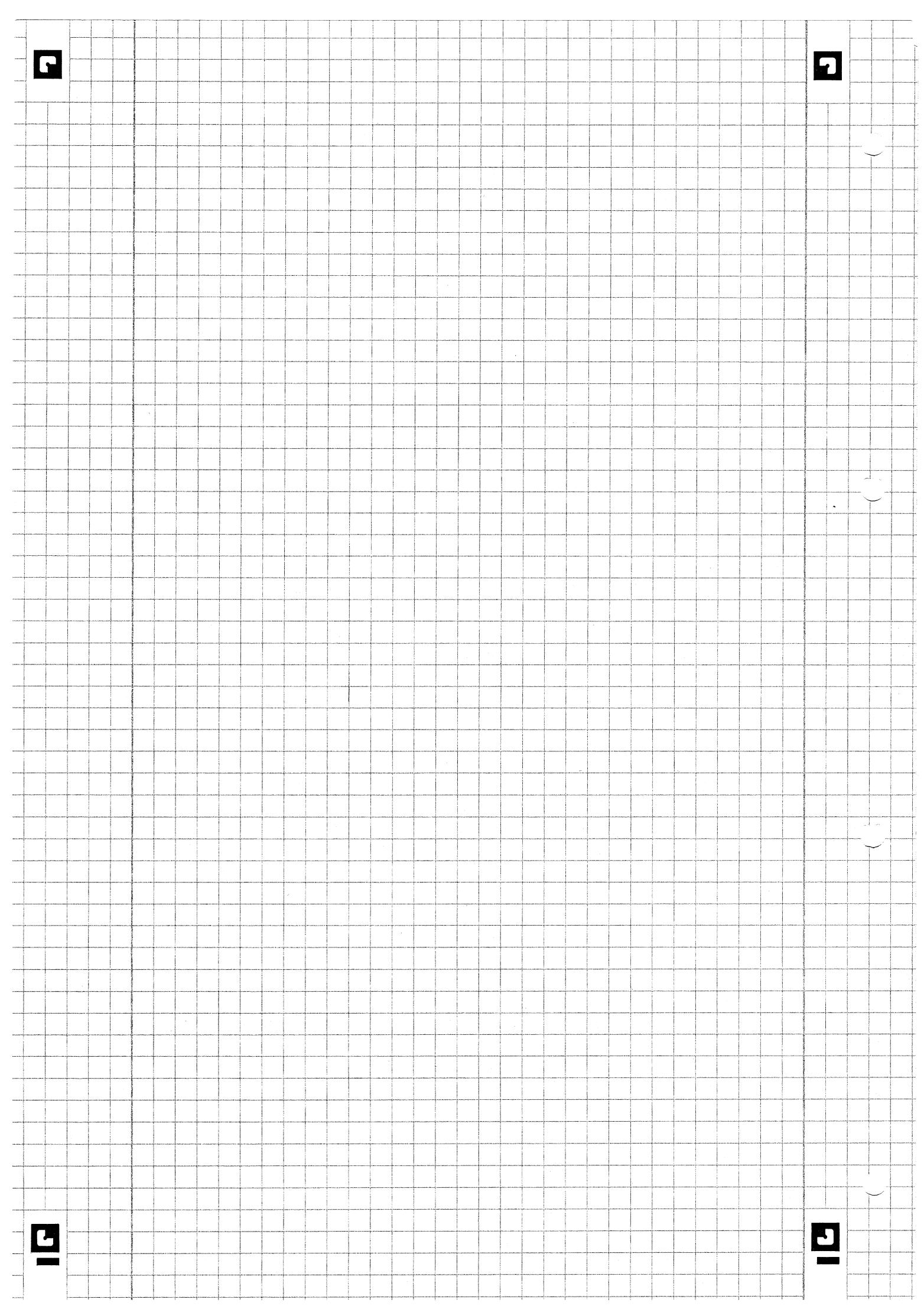
$$\text{pro Atm.: } U_{\text{c0}}(T) = \int_0^{\infty} N \delta(\omega - \omega_{\text{c0}}) \frac{\hbar \omega_{\text{c0}}}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} d\omega$$

$$U_{\text{c0}}(T) = N \hbar \omega_{\text{c0}} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{\text{c0}}}{k_B T}} - 1} \sim C_V = N \frac{(\hbar \omega_{\text{c0}})^2}{k_B T^2} \frac{e^{\frac{\hbar \omega_{\text{c0}}}{k_B T}}}{(e^{\frac{\hbar \omega_{\text{c0}}}{k_B T}} - 1)^2}$$

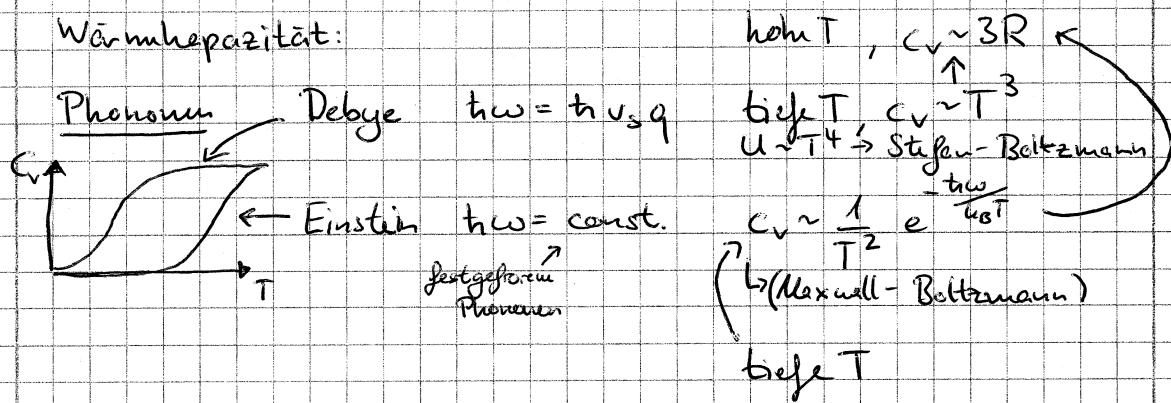
Grenzfälle:

$$1) T \rightarrow 0 \quad U(T) \sim e^{-\frac{\hbar \omega_{\text{c0}}}{k_B T}}$$

$$2) T \rightarrow \infty \quad e^{-\frac{\hbar \omega_{\text{c0}}}{k_B T}} \approx 1 \quad C_V(T) = \frac{k_B T^2 N (\hbar \omega_{\text{c0}})^2 k_B}{k_B T^2 (\hbar \omega_{\text{c0}})^2} = N k_B$$



Wärmekapazität:



$$\text{hoch } T, C_V \sim 3R$$

$$\text{tief } T, C_V \sim T^3$$

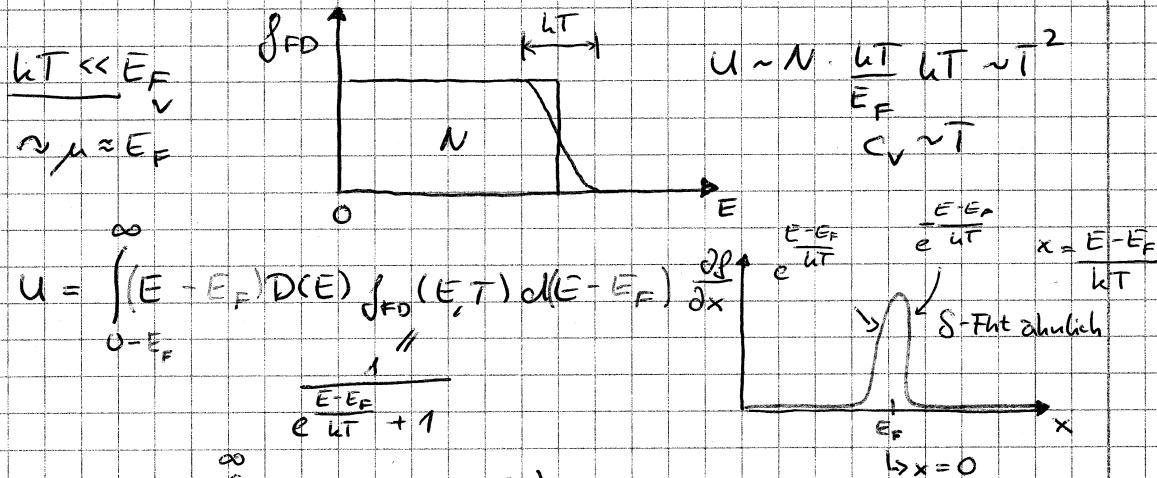
$$U \sim T^4 \rightarrow \text{Stefan-Boltzmann}$$

$$C_V \sim \frac{1}{T^2} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$$

(Maxwell-Boltzmann)

tief T

Elektronen Beitrag: $U = \int (E D(E)) f_{FD}(E, T) dE$



$$\begin{aligned} C_V &= \frac{\partial U}{\partial T} = \int_{-E_F}^{\infty} (E - E_F) D(E) \left(\frac{\partial}{\partial T} f_{FD}(E, T) \right) d(E - E_F) \\ &= \frac{k}{k} \int_{-E_F}^{\infty} (E - E_F) D(E) \left(\frac{\frac{e^{(E-E_F)/kT}}{kT} \left(\frac{E-E_F}{kT^2} \right)}{\left(\frac{e^{(E-E_F)/kT}}{kT} + 1 \right)^2} \right) d(E - E_F) \\ &= T k^2 \int_0^{\infty} D(E) \frac{e^x x^2}{(e^x + 1)^2} dx \\ &= k^2 T D(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} dx = \frac{\pi^2 k^2 T D(E_F)}{3} \end{aligned}$$

8. Elektronische Eigenschaften von Halbleitern

Entstehungsart: Besetzung der Bänder mit Elektronen

Pauli-Prinzip

Folgen: Liegen Max/Min unterhalb oberer Bänder nicht direkt

über einander, ist es ein indirekter Halbleiter

→ wenn überhandende p-n-schottky-Dioden optimal

(direkt: optischer Übergang möglich)

Valenzband: VB

Leitungsband: CB

1. Klasse: VB voll, CB leer $\left\{ \begin{array}{l} \text{Isolatoren} \\ T=0 \end{array} \right.$ (Halbleiter)

- Diamant durchsichtig, weil Photonen die Beobachtung nicht überbrücken können (bei nicht sichtbarem λ)

2. Klasse: teilbesetzte Bänder Metalle / Halbmetalle

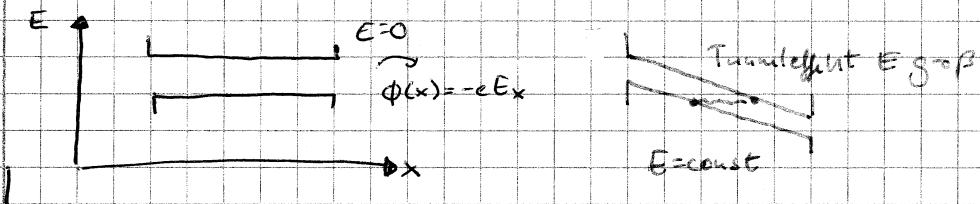
[8.1] Metalle \hookrightarrow Transporteigenschaften

Erfassung von allen mgl. Phänomene

- extern Felder (E -Feld, B -Feld, Druck, ...)
- Diffusion
- Stoßprozesse
 - ee^- - Streuung
 - e - Phonon - WW

Bereich schwach Feld
Bandstruktur bleibt
unverändert \Rightarrow Transport
imhalb dieser Bandstrukturen

Nicht betrachtet: Phänomene bei starken Feldern, z.Bsp. E-Feld



e^- - Phonon - WW \hookrightarrow vernachlässigbarer Term in der
Born-Oppenheimer-Näherung

a^+ : Teilchenerzeugung a^- : Teilchenvernichtung

e^- - Phonen - WW \quad Emission eines Photons

Streuung der e^- von \vec{h} $\rightsquigarrow \vec{h} + \vec{q} + \vec{G}$ \quad Absorption eines Photons

"Quasi-Erlangensatz"

Energie-Erlangensatz $E(\vec{h} + \vec{q} + \vec{G}) - E(\vec{h}) = \hbar\omega(\vec{q})$

"Impulserhaltung"
 $\vec{h}' = \vec{h} + \vec{q} + \vec{G}$

"Schwache WW"
 $\langle \vec{h}' | \text{Phonen-WW} | \vec{h} \rangle$

starke WW: Elektronentransport führt zu Gitterverzerrung

in "polari" Kristallen \rightarrow Quasiteilchen: "Polaron"

\rightarrow Elektron + Gitterverzerrung

Transportphänomene

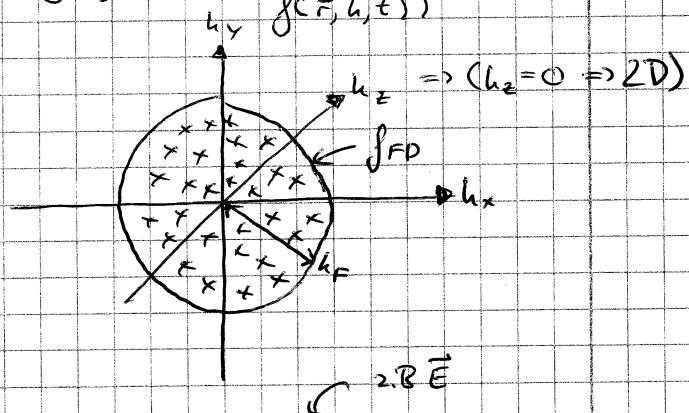
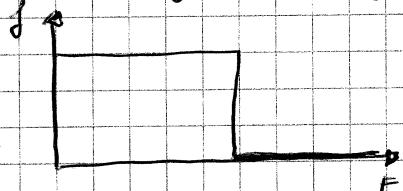
mitroskopische Beschreibung
 → Einteilchenbild

makroskopische Größe
 → viele Teilchen + viele Wechselwirkungen

⇒ statistische Beschreibung ist notwendig!
 (→ Boltzmann-Gleichung für die Verteilungsfunktion

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

im Gleichgewicht $f = f_{FD}$



Q: Wie ändert sich f_{FD} unter einer Stromquelle?

→ wenn f bekannt ist, kann man daraus die Stromdichte einer Größe G ermitteln

Strom:
 Ungleichheit der e, die sich in einer Richtung bew.

$$\bar{j} = \int \frac{d^3 h}{(2\pi)^3} G f \cdot \vec{v}(h)$$

$$= -e \quad \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_h E(h)$$

Mittelw.: Elektronen sind in guter Näherung klassisch beschreibbar
 (→ Newton)

(Mittel falsch: Elektronen werden nicht klassisch aufgrund einer großen mittleren freien Weglänge, da dies zu einer Wellen-Beschreibung (QM) führt)

Elektronen werden intensiv gestoppt (ee-Stöße)

$T = 300 \text{ K}$ mittlere Stoßzeit: Zeit zw. zwei Stößen: $\tau \approx 10^{-14} \text{ s}$

→ Ein QM-Zustand kann sich nicht ausbilden, da Wellenfunktionen sich durchgebaut verhindern

Drücke: $\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}(t) - \frac{\vec{P}}{\tau}$ $\tau = \text{const.}$

DC Strom $\vec{p} = 0 \quad \vec{p} = \vec{F}\tau = -e\vec{E}\tau$

$$\vec{j} = -e \left(-\frac{e\vec{E}\tau}{m} \right) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f$$

$$= \frac{e^2 \tau}{m} \underbrace{\frac{1}{L^3} \int_N}_{\text{Schuf}}$$

$$\vec{E} = \underbrace{\frac{ne^2 \tau}{m}}_{\sigma: \text{Häufigkeit}} \vec{E}$$

Resistivität: $\sigma = 1/\rho$

Sommerfeld klassik = QM

Klass. Beschreibung ist angemessen:

- Elektron bleibt in einem Band
- \vec{h} bleibt in der 1. BZ
- Bewegungsgl.: $\vec{r} = \vec{v} = \frac{1}{m} \nabla_{\vec{h}} E(\vec{h})$
 $\vec{h} \cdot \vec{h} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$
- Pauli - Prinzip

Bloch-Elektron \Rightarrow Klass. Elektron

vollst. delokalisiert vollst. lokalisiert
im Kristall

Beschreibung als Wellenpaket

Ausdehnung des Wellenpakets soll so sein, dass sie

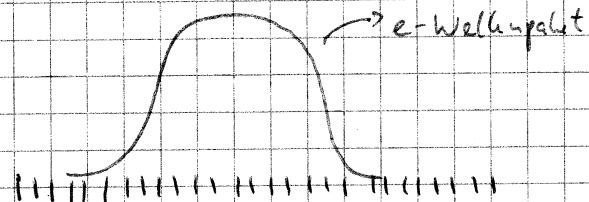
(a) deutlich größer als die Gitterkonstante sein soll.

starke Hebelisierung \rightarrow Ausdehnung im \vec{h} -Raum

\vec{h} heim brauchbar Quantenzahl

nur dann macht Konzept der eff. Masse Sinn!

(b) Wechselwirkung mit Feldern, die eine charakteristisch
Wellenlänge deutlich größer als die Ausdehnung
des Wellenpakets haben



in dieser Situation: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (\underbrace{T + V_{\text{crystal}} + V_{\text{feld}}}_{E_n(\vec{h})}) \psi$

schwach
Feld

$$\hookrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(\frac{1}{2} + V_{\text{feld}} \right) \psi \quad \text{Lösung mit mess}$$

$\frac{\vec{p}}{2m_{\text{eff}}}$

hier zweit
 $T + V_{\text{feld}}$ klein
des Gesamt
 \Rightarrow geht nur
bei schwach
Feldern \rightarrow Einheit
von mess

$V_{\text{feld}}: \psi = e^{i\hbar\vec{r}} u_{\vec{h}}(\vec{r}) \rightsquigarrow \psi = e^{i\hbar\vec{r}}$

Bewegungsgleichung:

$$\vec{F} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{h}} E(\vec{h}) \quad \ddot{\vec{F}} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \vec{\nabla}_{\vec{h}} E(\vec{h})$$

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial h_i} \frac{d}{dt} E(\vec{h}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial h_i} \left(\vec{\nabla}_{\vec{h}} E(\vec{h}) \right) \vec{h} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_{j=1}^2 \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} E(\vec{h}) \ddot{h}_j \end{aligned}$$

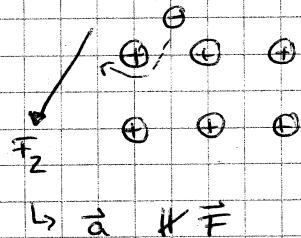
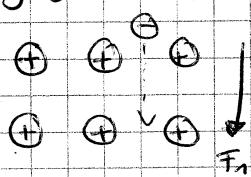
$$\begin{aligned} \vec{h} \ddot{\vec{h}} &= \vec{F} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} E(\vec{h}) \ddot{h}_j \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \ddot{\vec{F}} = \underline{\underline{M}}^{-1} \vec{F} \quad \underline{\underline{M}}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial h_i \partial h_j}$$

isotropes $E(\vec{h})$ (Draht) $E = \frac{\hbar^2 \vec{h}^2}{2m_{\text{eff}}}$ $\underline{\underline{M}}^{-1} = \frac{1}{m_{\text{eff}}} \cdot \underline{\underline{1}}$

i. A

Beschleunigung nicht mehr parallel zur Kraft (F_{el})



$$\hookrightarrow \vec{a} \neq \vec{F}$$

Boltzmann-Gleichung unter externen Störungen

- E-B-Feld

- Diffusion

- Stöße

$$f(\vec{r}, \vec{h}, t) \quad \text{ohne Störung } f = f_{FD}$$

$$f(\vec{r}, \vec{h}, t) \quad \text{Liouville } f(\vec{r}, \vec{h}, t) d\vec{s} \rightarrow f(\vec{r} + d\vec{r}, \vec{h} + d\vec{h}, t) d\vec{s}'$$

Störung

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Feld}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (\vec{\nabla}_{\vec{r}} f) \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + (\vec{\nabla}_{\vec{h}} f) \frac{\partial \vec{h}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

↓

\vec{r} : fragt nach $\frac{\partial \vec{r}}{\partial t}$
inhomogenität

\vec{h} : liest im \vec{h} -Raum

Diffusion \vec{E}, \vec{B} -Felder

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Stöße}} = + \int \frac{d^3 h'}{(2\pi)^3} f(\vec{h}') (1 - f(\vec{h})) W_{\vec{h} \rightarrow \vec{h}'}$$

$$- \int \frac{d^3 h'}{(2\pi)^3} f(\vec{h}) (1 - f(\vec{h}')) W_{\vec{h}' \rightarrow \vec{h}}$$

$$W_{\vec{h} \rightarrow \vec{h}'} = W_{\vec{h} \rightarrow \vec{h}'} = \frac{2\pi}{h} \delta(E_I - E_F) \left| \langle \vec{F} | \vec{V} | \vec{I} \rangle \right|^2$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Stören}} = - \frac{f - f_{FD}}{\tau(\vec{r}, \vec{h}, t)}$$

DC-Strom $\vec{E} = \text{const}$ räuml. homogen $\vec{\nabla}_{\vec{r}} f = 0$

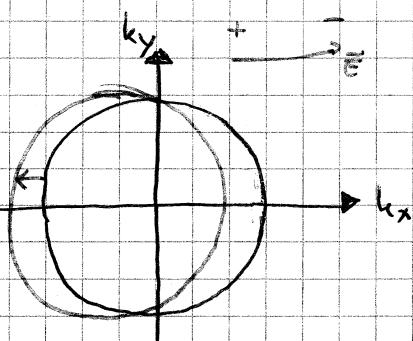
$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (\vec{\nabla}_{\vec{h}} f) \left(-e \frac{\vec{E}}{h} \right) - \frac{f - f_{FD}}{\tau} = 0$$

↑ setze als f_{FD}

↳ hsg:

Verschiebung der
 f_{FD} Kugel



Wert von p_{PG} aus

$$\Gamma \quad p_{PG} (v_B - v_A) = -\frac{1}{N} (F(v_B) - F(v_A))$$

P_{PG} Steigt
ob gen. Tatsache

$$= -\frac{1}{N} \int_{v_A}^{v_B} \frac{\partial F}{\partial v} dv = \int_{v_A}^{v_B} p(\omega) dV$$

p_{PG} so, dass Fläche unter Isotherm auf $[v_A, v_B]$ unverändert, \rightarrow Maxwell-Konstruktion

Folien: Nebelzettel

$$f(T, v) = \frac{v_B - v}{v_B - v_A} f(T, v_A) + \frac{v - v_A}{v_B - v_A} f(T, v_B)$$

7.6 Gibbische Phasenregel

mehrkomponentige System

mit K Komponenten = Teilchen

1) zunächst eine Phase

N_1, \dots, N_K Teilchenzahlen

$N = \sum_i N_i$ Gesamtteilchenzahl

$$\Gamma \quad c_i = \frac{N_i}{N} \quad \underbrace{\text{Konzentration der } i\text{-ten Komponente}}_{\text{(inaktiv)}}$$

$$\text{mit } \sum_{i=1}^K c_i = 1$$

Jede Komponente i hat ein eigenes chemisches Potential

\rightarrow statt μdN nun $\sum_{i=1}^K \mu_i dN_i$

Frei Enthalpie

$$\Gamma \quad G = G(T, p, N_1, \dots, N_K)$$

$$1. \text{ Hauptsatz: } dE = T dS - p dV + \sum_{i=1}^K \mu_i dN_i$$

$$G = E - TS + pV$$

$$\Gamma \quad dG = -SdT + Vdp + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$\text{Gibbs-Duhem} \quad G = \sum_{i=1}^k \mu_i N_i$$

$$g = \frac{G}{N} = \sum_i \mu_i c_i$$

$$dg = -s dT + v dp + \sum_i \mu_i dc_i$$

$$\Rightarrow g = g(T, p, c_1, \dots, c_h)$$

$h+1$ wechs. Variablen (und intensive)

2) P hoexistierende Phasen im Gleichgewicht

$$\Rightarrow T_1 = \dots = T_p = T$$

$$P_1 = \dots = P_p = P$$

$$\mu_{i,1} = \mu_{i,2} = \dots = \mu_{i,p}$$

\forall Komp.

$\mu_{ij} = \text{chem. Pot von Komp } i \text{ in Phase } j \quad (i=1, \dots, h)$

\rightarrow Phase $j \quad (j=1, \dots, p)$

Variablen: $T, p, c_{i,j} = \text{Konz von Komp } i \text{ in Phase } j$

$$\text{mit } \sum_{i=1}^h c_{i,j} = 1$$

$$\# \text{ intensive Variablen} = 2 + hP - P = 2 + (h-1)P$$

Gleichgewichtsbedingungen

$$\mu_{i,1} = \mu_{i,2} = \dots = \mu_{i,p} \quad \forall \text{ Komp } i$$

$$h(P-1) \quad \text{Gleichgewichtsbed.$$

Zahl f der frei wählbaren intensiven Parameter

$$f = \underbrace{2 + (h-1)P}_{\# \text{ Variab}} - \underbrace{h(P-1)}_{\# \text{ Bed.}} = 2 - P + h$$

Gibbsche Phasenergye

$$i\hbar \partial_{\vec{r}} \psi = (T + V_G + V_{\text{Feld}}) \psi$$

Nachst. $V_G \gg V_{\text{Feld}}$ gute Näherg.

$V_{\text{Feld}} = 0 \rightarrow E_n(\vec{h})$ Bänder bestimmen

$$E_n(\vec{h}) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{eff}}} \quad (\text{nur am Extrem})$$

$$\Rightarrow \psi = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_h(\vec{r}) \rightsquigarrow \psi = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

$$\vec{F} = \underline{\underline{M}^{-1}} \vec{F} \underline{\underline{M}^{-1}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$$

$$T = \frac{1}{2} \vec{p}^T M^{-1} \vec{p}$$

Boltzmann-GC

$f(\vec{r}, \vec{h}, t)$ im Gleichgewicht $f = f_{FD}$

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{Stör}} + \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{Feld}} = 0 \quad \vec{t} \cdot \vec{h} = \vec{F}$$

$$\left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{Feld}} = (\vec{\nabla}_{\vec{r}} f) \vec{r} + (\vec{\nabla}_{\vec{h}} f) \vec{h} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$\vec{E} = \text{const} \rightarrow \vec{j} = \sigma \vec{E}, \sigma = \frac{ne^2 c}{m}$$

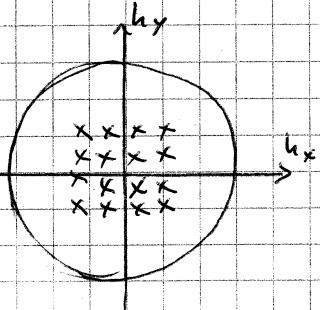
$$\hookrightarrow \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{Feld}} = 0 \cdot \vec{r} + (\vec{\nabla}_{\vec{h}} f) \left(-\frac{e \vec{E}}{m} \right) + 0 = -\frac{(f - f_{FD})}{t} = \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{Stör}}$$

$$f = f_{FD} + \frac{e \vec{E} c}{m} \vec{\nabla}_{\vec{h}} f \quad \text{Näherg. } f \approx f_{FD} + \frac{e \vec{E} c}{m} \vec{\nabla}_{\vec{h}} f_{FD}$$

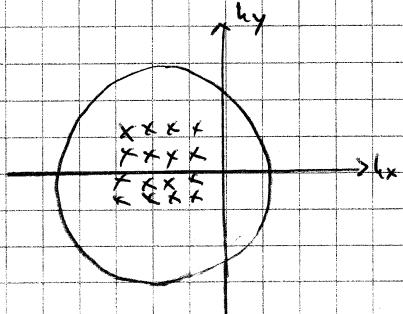
Begründung für Näherg.: kurze Stoßzeit, geringe Störung der Fermionen

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E \\ 0 \end{pmatrix}, f = f_{FD} + \frac{e \vec{E} c}{m} E \partial_{h_k} f_{FD} \stackrel{1.0}{\underset{\text{Tayler}}{=}} f_{FD} \left(h_k + \frac{e \vec{E} c}{m} E \right)$$

$$\vec{E} = 0$$



$$\vec{E} \neq 0$$



\rightarrow Fermionen wird verschoben

$$f = f_{FD} + \frac{e \vec{E} c}{m} \vec{\nabla}_{\vec{h}} f_{FD} = f_{FD} + e \vec{E} c \frac{\partial f_{FD}}{\partial E} \left(\frac{1}{m} \vec{\nabla}_k E(\vec{h}) \right) \xrightarrow{\text{Coulengeschr.}}$$

$$\vec{j} = \int \frac{d^3 h}{(2\pi)^3} G f \cdot \vec{v} = - \int \frac{d^3 h}{(2\pi)^3} e \left(f_{FD} + \frac{e \vec{E} c}{m} \vec{v} \cdot \vec{E} \frac{\partial f_{FD}}{\partial E} \right) \vec{v}$$

$$G = -2e$$

Beitrag verschwindet, da im Gleichgewicht kein Strom fließt

$$\vec{j} = -e^2 \tau \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} (\vec{v} \cdot \vec{E}) \frac{\partial f_{FD}}{\partial E} \vec{v}$$

isotropes Material: $\vec{v}, \vec{j} \parallel \vec{E}$

$$\vec{j} = - \left\{ e^2 \tau \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} \vec{v} \cdot \vec{v} \frac{\partial f_{FD}}{\partial E} \right\} \vec{E}$$

$$= \left\{ e^2 \tau \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} \vec{v} \left(\frac{1}{h} \vec{\nabla}_h E \cdot \frac{\partial f_{FD}}{\partial E} \right) \right\} = [\vec{v} f_{FD}]_{1. \text{BZ}} - \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} \left(\frac{1}{h} \vec{\nabla}_h \vec{v} \cdot f_{FD} \right)$$

$$= - \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} \left(\frac{1}{h^2} \vec{\nabla} (\vec{\nabla}_h E(h)) f_{FD} \right) \checkmark \sigma$$

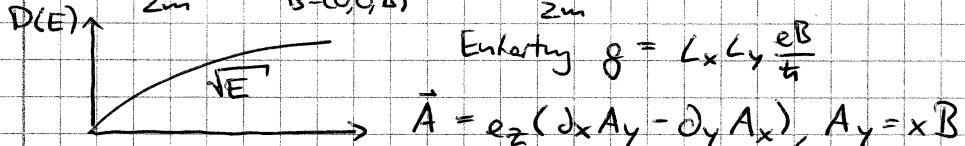
$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{e^2 \tau}{m} \left(\int \frac{d^3 h}{4\pi^3} f_{FD} \right) \vec{E} = \left(\frac{ne^2}{m} \right) \vec{E}$$

$$\gamma = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{ne^2 \tau} \quad \text{spez. Wiedemann} \quad \leftarrow \text{Phonon}$$

$$\text{Methiensch'sche Regel: } \gamma = \gamma_1 + \gamma_2(T) \quad \begin{matrix} \uparrow \\ \text{Dreh} \end{matrix} \quad \begin{matrix} \downarrow \\ \text{Elektronen} \end{matrix}$$

Elektronen im Magnetfeld

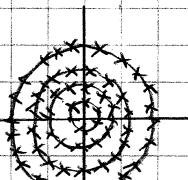
$$E = \frac{\hbar^2 h_z^2}{2m} \xrightarrow{\vec{B}=(0,0,B)} E = \frac{\hbar^2 h_z^2}{2m} + \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})$$



$$\text{Entartung } \gamma = L_x L_y \frac{eB}{\hbar}$$

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m_{\text{eff}}} = \frac{p_x^2}{2m_{\text{eff}}} + \frac{p_z^2}{2m_{\text{eff}}} + \frac{(p_y - eBx)^2}{2m_{\text{eff}}}$$

$[h, p_y] = 0 \Rightarrow y\text{-Anteil: } e^{ih_y y}$, aber h_y taucht nicht in E auf



$$\frac{\hbar^2 h_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 h_y^2}{m} \xrightarrow{\text{Spin}} \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})$$

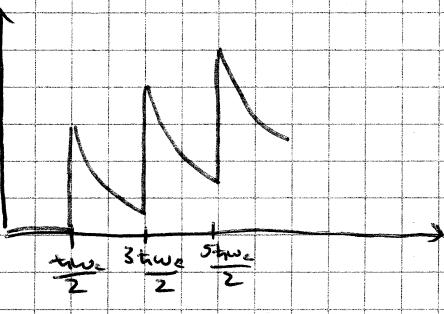
$$\frac{\hbar^2 h_y}{2m} = \hbar \omega_c (n - 1), \quad h_y = \sqrt{2} \frac{eB(n + \frac{1}{2})}{\hbar}$$

$$D_0(E) = \sum_{i=h_{2,n}} \delta(E - E_i) = 2 \sum_n \int \frac{dh_z}{2\pi} \delta(E - \left(\frac{\hbar^2 h_z^2}{2m} - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2}) \right))$$

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i) \quad \text{Methiensch'sche } \delta\text{-Distr.}$$

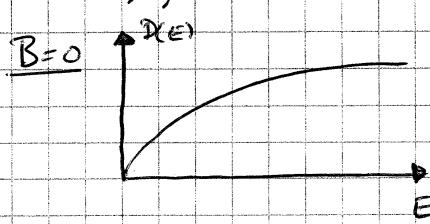
$$\left| \frac{d}{dh_z} (x) \right| = 1 - \frac{\hbar^2 h_z}{m} = \frac{\hbar^2 h_z}{m} \quad \text{NST: } h_z = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2}))}$$

$$D(E) = 2 \sum_n \frac{1}{2\pi \hbar E} \xleftarrow{E}$$



Landau niveaus

$$\vec{B} = (0, 0, B)^T$$



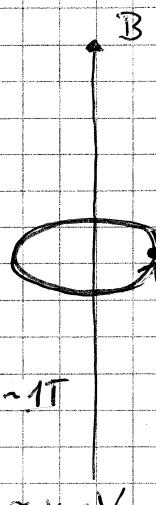
$$E_n = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$

$$B \neq 0$$



$$g = L_x L_y \frac{eB}{\hbar}$$



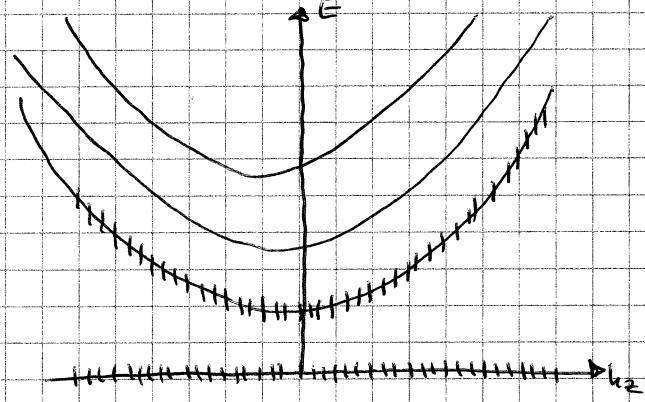
$$B \approx 1T$$

$$\rightarrow \hbar \omega_c \approx \text{meV}$$

$$T = \frac{2\pi}{\hbar \omega_c} \approx 10^{-12} \text{ s}$$

$$T = 300 \text{ K: Stopzeit } 10^{-14} \text{ s}$$

$$D(E) \sim \sum_n \frac{1}{E - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})}$$



Häufig: $T = 2 \text{ K oder } 50 \text{ mK} \rightarrow \text{Stopzeit } \sim 10^{-9} \text{ s}$

↳ Landau niveaus beobachtbar

[Proben müssen best. Größe haben um sie stark zu kühlen:
 $T = 50 \text{ mK} \rightarrow \lambda \approx 1 \text{ cm} \rightarrow \text{Probegröße min } 1 \text{ cm}]$

Spektroskopie mit Licht:

abstimmbares Licht: $\hbar v = \hbar \omega_c \quad \omega_c = \frac{eB}{\hbar} \rightarrow \text{eff. Messen}$

Spektroskopie im Transport:

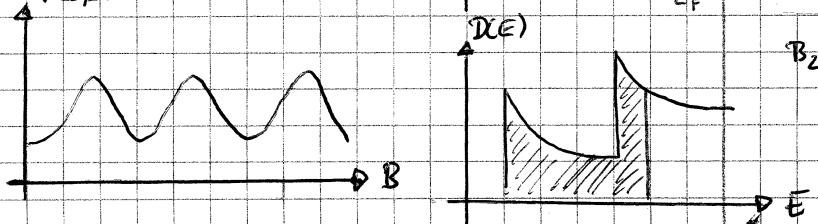
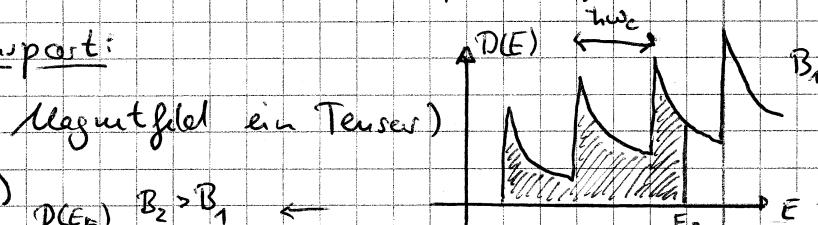
(Hüftfähigkeit im Magnetfeld ein Tenser)

$$\sigma \sim f(B) \cdot D(E_F)$$

$$N = \text{fix}$$

quasiperiodisches Verhalten der

Zustandsdichte bei var B



$$\Delta(\frac{1}{B}) = (2\pi)^2 \frac{e}{\hbar} \frac{1}{A_e(B_F)} \quad A_e = \text{Fläche der Fermiellipse} \perp \vec{B}$$

spezifischer Widerstand: Shubnikov - de Haas - Effekt

Magnetisierung: $M = -\frac{\partial U}{\partial B}$; de Haas - van Alphen Effekt

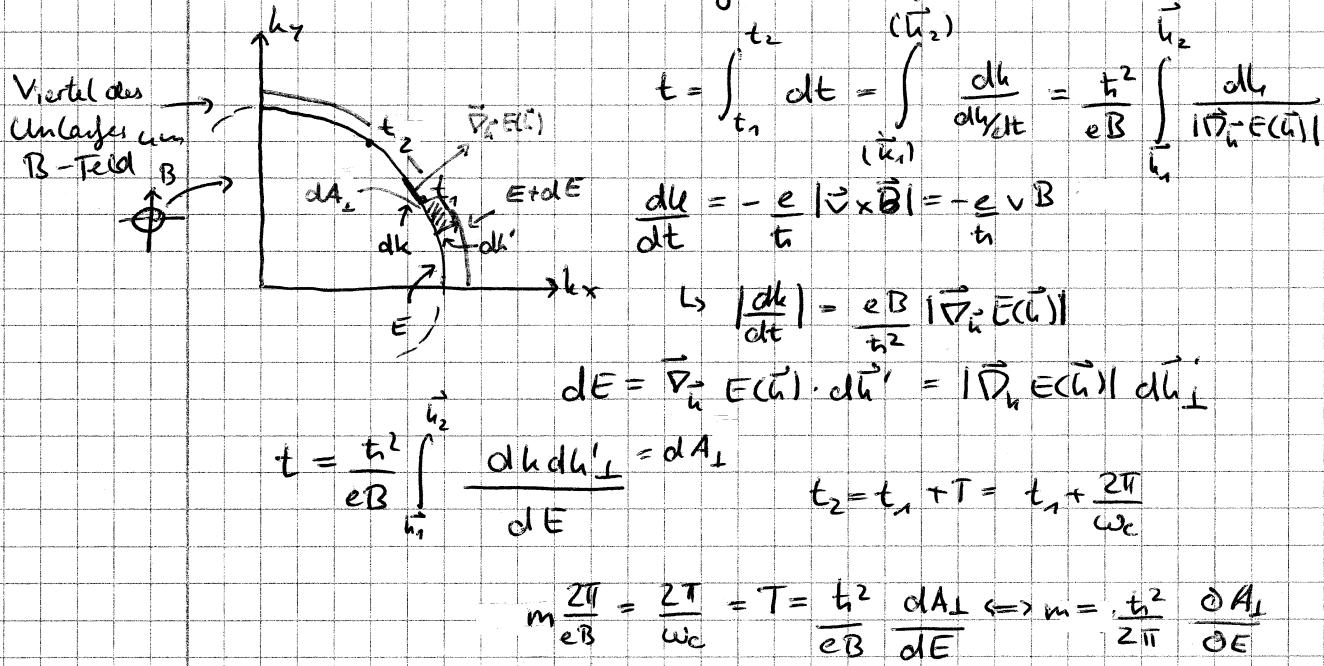
alle zeigen dieses
Quasiperiodicität

Quasiklassische Beschreibung im Magnetfeld

$$t \frac{dk}{dt} = -e(\vec{v} \times \vec{B}) \quad \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k E(k) \perp E(k) = \text{const.}$$

→ Bewegung auf Isaeigungsfäche, eben auf

die Fermifläche



G. Halbleiter

einstellbar Leitfähigkeit

intrinsisch

CB []

$T=0$

Isolato.

$\downarrow E_{gap}$

VB []

$T=300K$

$$\sigma = \sigma_{CB} + \sigma_{VB}$$

$$\frac{N_e, CB}{N_e, VB} \approx e^{-E_{gap}/k_B T}$$

$$\vec{J} = \vec{J}_{CB} + \vec{J}_{VB} \quad \vec{J} = -e \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} f \vec{v}$$

$$\vec{J}_{VB} = -e \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} (1 - 1 + f) \vec{v}$$

$$= -e \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} 1 \vec{v} - e \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} (f - 1) \vec{v}$$

vollst. Band

$$\vec{J} = 0$$

$$(+e) \int \frac{d^3 h}{4\pi^3} (1 - f) \vec{v}$$

\hookrightarrow Besetzungsfunction

[hoch / leer]

für abwesende Elektron

↑ neue Quantenzahlen

effektive positive Ladung

Eigenschaften:

- Quantenimpuls vollst. besetztes Band $\sum \vec{h} = 0$

$$\sum_{\vec{h}} \vec{h} = (\sum_{\substack{\text{vollst.} \\ \text{besetztes} \\ \text{Band}}} \vec{h}) - \sum_{\substack{\text{Fehlquant.} \\ \vec{h}}} = \sum_{\substack{\text{hochw.} \\ \vec{h}}} - \sum_{\substack{\text{hochw.} \\ \vec{h}}} = \sum_{\substack{\text{hochw.} \\ \vec{h}}} \vec{h}_h = -\vec{h}_e$$

- Energie $E = \sum_{\text{vollst.}} E_e(\vec{h}) = \text{const} = 0$

$$\begin{aligned} E &= \sum_{\vec{h}} E_e(\vec{h}) \\ &= \sum_{\text{vollst.}} E_e(\vec{h}) - \sum_{\text{Fehlquant.}} E_e(\vec{h}) = \sum_{\text{hochw.}} (-E_e(\vec{h})) \end{aligned}$$

hoch hat die my Energie ein Elektron

Eigenschaften der hochw.:

heg: +e

$$\vec{v}: \vec{v}_h = \vec{v}_e$$

$$\text{Input: } \vec{h}_h = -\vec{h}_e$$

$$m: m_h = -m_e$$

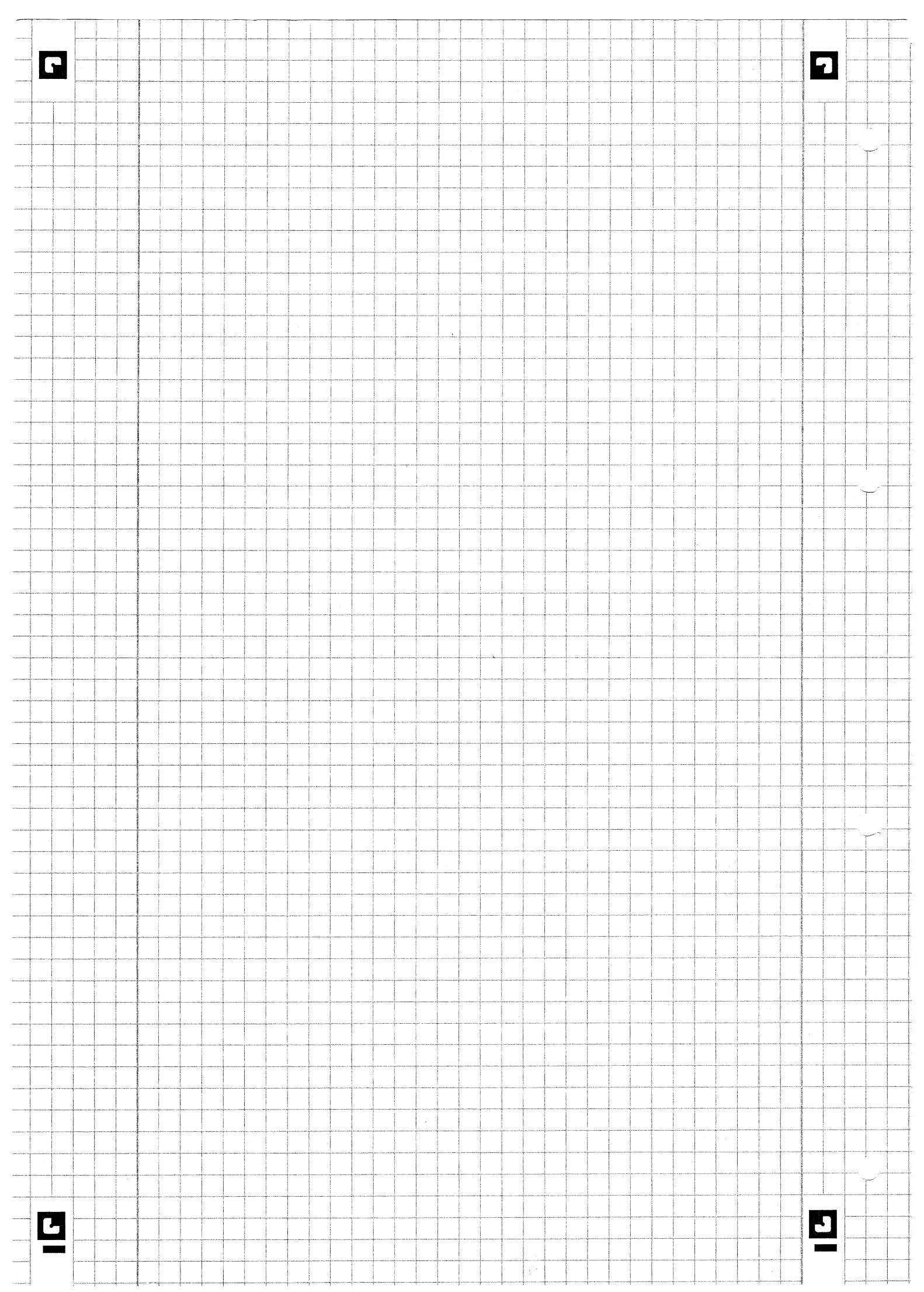
$$\text{Energie: } E_h(\vec{h}_h) = -E_e(\vec{h}_e)$$

lichtabsorption: $\vec{h}' = \vec{h} + \vec{h}_0 \rightarrow$ Photonenwelle zahlt

$$\vec{h}' = \vec{h} \text{ vernachlässigen}$$

direkte HL für Lampen / LED's etc.

indirekte HL für Elektronik



Oberkant

$$n_{CB} = \int_{E_{CB}}^{\infty} D(E) f_{FD}^n(E, T) dE = 2 \left(\frac{kt m_e}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{(E_{CB}-E)}{kT}}$$

negativer
Bereich
positive Bereiche
 E_{CB} \hookrightarrow Zustandsdichte

35

$$P_{VB} = \int_{-\infty}^{E_{VB}} D_{VB}(E) f_{FD}^p(E, T) dE = 2 \left(\frac{kt m_h}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{(E_{VB}-E)}{kT}}$$

$$1 - f_{FD}(E, T) = \frac{e^{-\frac{E_{VB}/kT}{m_h}}}{e^{-\frac{E_{VB}/kT}{m_h}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{E_{VB}}{kT}} + 1}$$

$$\rightarrow n_{CB} \cdot P_{VB} = 4 \left(\frac{kt}{2\pi\hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} \underbrace{e^{-\frac{(E_{CB}-E_{VB})}{kT}}}_{e^{-\frac{E_{gap}}{kT}}}$$

- μ kann verschoben werden, hat aber bei Geltung der Nernst-Gleichung keinen Einfluss auf $n_{CB} P_{VB}$ \rightarrow Nernst-Wilrys-Gesetz

- mit obigen Beisp. kein Halbleiter (Transistoren etc.), da

- schlechte Leitfähigkeit
- T - Abhängigkeit \rightarrow intrinsische HL

- Möglichkeit vom Materialen insbes. zu erzeugen

\Rightarrow gezielte Zugabe von Druck zu Untersuchung

Verbesserung: Einbringen von Druck (Dotierung)

Bsp.: Gruppe IV - HL:

C, Si, Ge 4 Valenzelektronen

[Donatoren] Druck: Gruppe V - Atome: P, As, Sb 5 Valenzelektronen

\hookrightarrow 4 werden eingebunden, Restelektronen kann zum Stromtransport genutzt werden

[Akzeptoren] Gruppe III - Atome: B, Al

3 Valenzelektronen

3 \rightarrow chem. Bindung \hookrightarrow ein hoch \rightarrow Abgabe an das VB

eff-Beschreibung - Bsp: Phosphor:

$$P = \underbrace{P^+}_{\text{Bindungsenergie}} + e^- \quad (\text{nicht im Bindegitterstand})$$

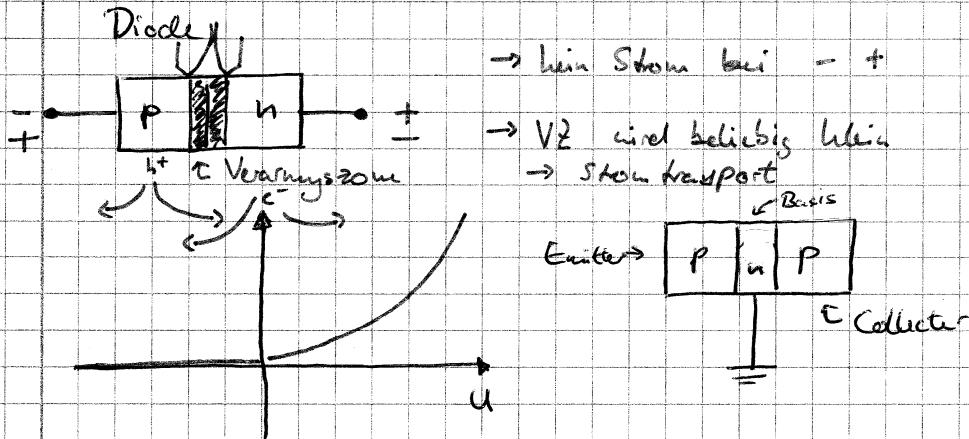
unverschaffbar Komplex

$$\text{Bindungsenergie } E_B = -\frac{1}{n^2} Ryd \quad Ryd = \frac{meff}{m_0} \frac{Ryd}{\epsilon^2}$$

Die Wirkungsstärke

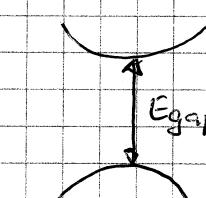
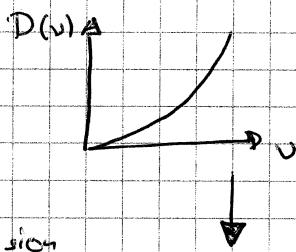
\hookrightarrow Rydbergenergie wird abgesenkt $\rightarrow \approx$ per meV

→ perfekte Blockierung zuerst bei V_D , da Ryd* auch
 bei unterschiedlichen Temperaturen gleich aufgebracht
 wird → fast alle e^- springen über Δ durch th. Schwellenwerten

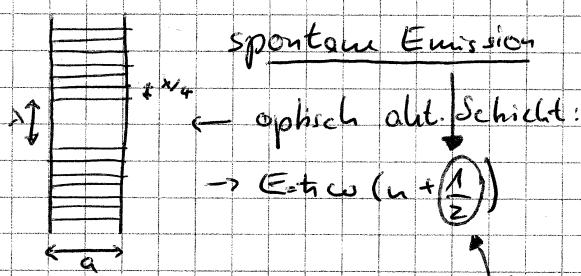


Halbleiteroptik

$$g(v, T) = \frac{8\pi k v^3}{c^3} f_{BE}$$



• Bandeckenspektrum



- deshalb nur nicht bei Wellenlänge λ \rightarrow Effizienz
- wenn $a = \lambda \rightarrow$ quanteneffiziente (spontane Emission)

O = Vakuum-Lichtfeld

$$\int \left(\frac{1}{2} \epsilon |E|^2 + \frac{1}{2} \frac{B^2}{\mu_0} \right) d^3 r \approx aV = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

\downarrow

$$u = \epsilon_0 E^2$$

$\Rightarrow E \sim \sqrt{\frac{1}{u}}$

- \rightarrow bei kleiner "Box" wird die Amplitude sehr groß (vom Volumefeld)
- \Rightarrow Spontane Emission nimmt zu
- wird für hohe verneutet, nur mit $\lambda \approx 100 \cdot \lambda_{\text{licht}}$
- wenn man QM rechnet, dann plant die Rechte Länge, aber Ergebnis bis auf kleinen Modifikationsfaktor gleich

phänomenologischer Ansatz

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$$

\uparrow

\uparrow Materie

oder $\vec{D} = g_{\text{ff}}$

- \vec{P} nicht unbedingt durch \vec{E} (auch ferromagnet. Materialeff.)

\hookrightarrow hier vernachlässigen $\rightarrow P_i = \epsilon_0 (x_{ij}^{(1)} E_j + x_{ijk}^{(2)} E_j E_k + x_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l + \dots)$

• $x^{(2),(3)}$ hier vernachlässigen, aber

zum Beispiel $x^{(2)}$ nutzen bei grünen Lasern ($\lambda = 1064 \text{ nm}$)

$$(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = DC + e^{i2\omega t} + e^{-i2\omega t}$$

$E_j \quad E_k$

\uparrow
rot
 2ω

\Rightarrow Licht bei doppelter Frequenz ($\frac{1}{2}$) $\rightarrow 1064 \text{ nm} \xrightarrow{x^{(2)}} 532 \text{ nm} \xrightarrow{\text{grünes Licht}}$

• Linearer Betrachtung:

$$\vec{P} = \underline{\epsilon} \underline{\chi} \vec{E} ; \vec{D} = \epsilon_0 \underbrace{(1 + \underline{\chi})}_{\underline{\epsilon}} \vec{E}$$

\leftarrow Materialspez.

($\underline{\epsilon}$ für Volumen und Gläser durch Skalar annahbar)

$\epsilon(\omega, h) = \epsilon_1(\omega, h) + i\epsilon_2(\omega, h)$ id.R nicht direkt messbar

Messbar sind: Reflexion $R(\omega)$; Absorption $A(\omega)$

Transmission $T(\omega)$; Brechungsindex $\tilde{n}(\omega)$

schw. Eingfall

Fresnelsche Formeln: $R(\omega) = \left| \frac{\tilde{n}-1}{\tilde{n}+1} \right|^2 \quad \tilde{n} = n + ik$ Extinktionskoeffizient
 Brechungsindex

Transmission: $e^{(qx-wt)} = e^{\frac{i\omega x}{c} - iwt} =$
 $= e^{\frac{i\omega \tilde{n}x}{c} - iwt} \quad \downarrow c = \frac{c_0}{\tilde{n}}$
 $= e^{\frac{i\omega n x}{c_0} - iwt} - \frac{\omega h x}{c_0}$
 $= e^{i(qx-wt)} - \frac{\omega h x}{c_0} \quad \left. \begin{array}{l} q = \frac{\omega}{c_0} \tilde{n} \\ \tilde{q} = \frac{\omega}{c_0} n \end{array} \right\}$

• mit Messung von Reflexions- und Transmission verträglicherweise $R(\omega)$ bestimmt werden

\rightarrow Rückschluss auf $\epsilon(\omega) = (\tilde{n}(\omega))^2 \quad \epsilon_1(\omega) = n^2 - h^2$
 $\epsilon_2(\omega) = 2nh$

█ Einschub: $\alpha(\omega) = \alpha_1(\omega) + i\alpha_2(\omega)$ █

Bed.: 1) Pole von α_1 neg.

2) $\int \frac{\alpha_1(\omega)}{\omega} d\omega = 0$

3) α_1 genet. bzgl. Reell ω

α_2 ungew. def.

$$\alpha_1(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{s \alpha_2(s)}{s^2 - \omega^2} ds$$

█ $\alpha_2(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\alpha_1(s)}{s^2 - \omega^2} ds$ █

Verknüpfung von ϵ mit Materie

37

$$\text{klass. Oszillator: } m\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + m\omega_0^2 x = \vec{F} = -e\vec{E}_0 e^{i\omega t}$$

$$\ddot{x} = \ddot{x}_0 e^{i\omega t}$$

$$(-m\omega^2 - 2i\gamma\omega + m\omega_0^2) \ddot{x}_0 = -e\vec{E}_0$$

$$\ddot{x}_0 = \frac{-e\vec{E}_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2) - 2i\gamma\omega} \rightarrow \vec{p} = -e\vec{x}$$

* Polarisation = makroskopischer Dipolmoment pro Volumeneinheit

$$\vec{P} = n_e \cdot \vec{p} = n_e \frac{e^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2) - 2i\gamma\omega} \vec{E}$$

Dichte der Elektronen

$$\Rightarrow \text{Oszillatorenstahl } f = \langle \vec{F}(\omega + \omega_0) | \vec{E} | I(\omega) \rangle_{\text{real}}$$

\Rightarrow Ergebnisse für $\epsilon(\omega)$ und f erhalten

L: Vergleich mit \vec{P} von oben und $\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}$

$$\rightarrow \chi = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega}$$

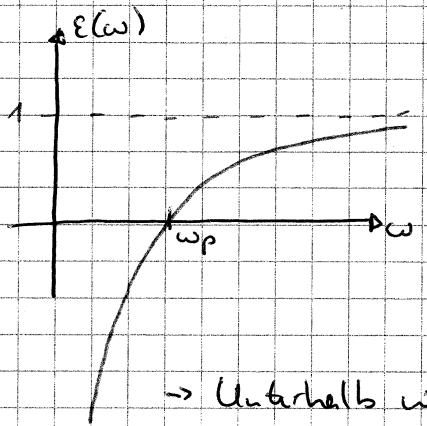
$$\epsilon = 1 + \chi(\omega) = 1 + \frac{ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - 2i\gamma\omega}$$

Bsp. Metallophilic

$$\gamma = 0 \quad \omega_0 = c \quad \epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \rightarrow \text{Plauefrequenz}$$

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad \omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}$$

$$R(\omega) = \left| \frac{n-1}{n+1} \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{\epsilon}-1}{\sqrt{\epsilon}+1} \right|^2$$



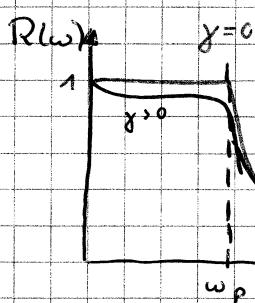
$$\epsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$$\tilde{n} = n + ik = n = \sqrt{\epsilon}$$

$$\epsilon_2(\omega) = 0 = 2ik \rightarrow k = 0$$

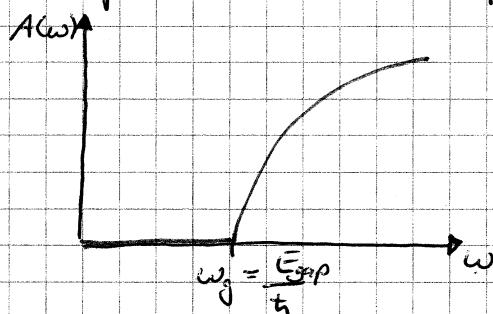
\Rightarrow Unterhalb $\omega_p \quad \epsilon < 0 \Rightarrow R(\omega) = 1$

$\omega < \omega_p \quad \sqrt{\epsilon} \text{ rein imaginär} \quad R(\omega) = 1$



ω_p liegt im UV-Bereich

2. Bsp Halbleiter Absorption



Oberhalb der Bandlücke
Übergangswahrscheinlichkeit

$$A(\omega) \sim W_{VR-OCB}$$

$$\rightarrow = \frac{2\pi}{h^2} |\langle F | e^{-i\vec{E} \cdot \vec{I}} | I \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - (E_F - E_I))$$

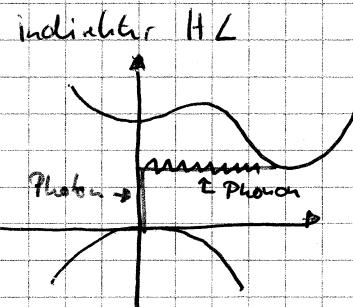
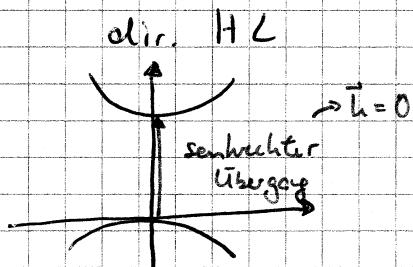
$$A(\omega) \sim \frac{2\pi}{h^2} \sum_i |\langle F_{C_0} | H_{W_F} | I_{V_B} \rangle|^2 \cdot \delta(\hbar\omega - (E_{C_0} - E_{V_B}))$$

$$= \frac{2\pi}{h^2} |\langle F | H_m | I \rangle|^2 \sum_i \underbrace{\delta(\hbar\omega - \omega_i)}_{\text{Zustandsdichte } D(E) = \sum_i \delta(E - E_i)}$$

\leftarrow vorher bzw. ohne ganze Zeit werden

direkter Halbleiter betrachtet

Unterschied:



Mehr Element \rightarrow Auswahlregeln

$$\hbar\omega = E_F - E_I$$

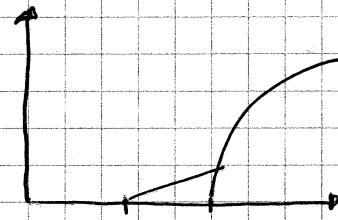
$$\vec{k}_F = \vec{k}_I + \vec{k}_{\text{Photon}}$$

\hookrightarrow schlecht geeignet für
Diode/Phaser

Absorptionspektren

Bsp. GeAs

Absorptionspektrum

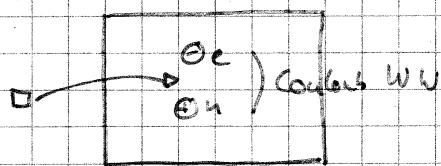
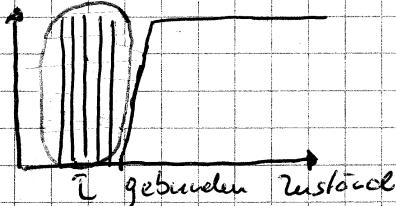


\Rightarrow so steht es in den Lehrbüchern

\rightarrow ist aber alles falsch und es
noch nie beobachtet worden

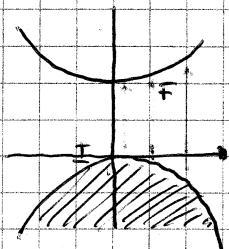
Wie funktioniert Absorption?

-real



Exzitation!

- Solartemperatur: Übergangsspektrum \approx Sonnenstrahlung
- Absorption \approx Wahrscheinlichkeit Übergang



$$\alpha(t, \omega) \sim W_{I \rightarrow F}$$

$$W_{I \rightarrow F} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{I,F} |c_F|^2 |H_{int}|^2 |I>^2 \delta(t, \omega - (E_F - E_I))$$

$$\alpha \sim D(E - (E_F - E_I))$$

\rightarrow Realität anders, da WW von

Elektron und Loch vereinigt

\Rightarrow Wasserstoff-ähnlichkeit (Excitons $e^- \leftrightarrow \text{Loch}$)

$$\underline{\text{Exciton: H-2D:}} \quad E = -R_{\text{Yd}} \cdot \left[n - \frac{1}{2} \right]^2$$

- dielektrische Flugung setzt Ryd um ϵ^2 ab, multipliziert aber mit m_e

\rightarrow aber: $m_e \approx 0,065 \cdot m_0$ } in GaAs \rightarrow Unterschied
 $m_h \approx 0,35 \cdot m_0$ } zu H

$$\mu^{-1} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \approx \frac{1}{0,05 m_0} \quad \hookrightarrow \text{gebundener Exciton}$$

- auch oberhalb Egap Streuzustände (Streuamplitudenskala \sqrt{E} -Abhängigkeit)

\rightarrow BEC \rightarrow durch Dreh eingefangene Excitonen

\rightarrow charakteristische Serie für jedes Material

\hookrightarrow an der TU: $\text{Cu}_2\text{O} \Rightarrow m_e \approx m_0, m_h \approx 0,57 m_0$

- Exciton postuliert von Fröhlich 1931

\hookrightarrow nachgewiesen von Coose 1952

- beobachtbar bei $kT < \text{Ryd}$ (GaAs: $4,2 \text{ meV} = \text{Ryd}$)

\hookrightarrow bei $kT > \text{Ryd}$ werden Teilchen thermisch auseinandergezogen

- bei Cu_2O $\text{Ryd} \approx 86 \text{ meV}$ (berichtet nicht bei $T \approx 20^\circ\text{C}$)

- mehrere Excitonen können aneinander binden

3.1 Magnetismus

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad \text{Hermittl. Energie}$$

$$\vec{rot} \vec{H} = \vec{j} + \vec{D}$$

$$M = -\frac{\partial U}{\partial B} \quad \text{Abh. von } B, M$$

$$\rightarrow \text{Suszeptibilität } \chi = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B}$$

- Annahme im 2. Sem.: $\vec{M} = \chi \vec{H}$ (linear) (pos./negativ)

$$\Rightarrow \text{dann } \vec{B} = \mu_0(1+\chi)\vec{H} = \mu_0 \mu_r \vec{H}$$

- Ursache von \vec{M} : magnetisches Moment
↳ mit Drehimpulsen verknüpft

$B=0$: 1) kein magnetisches Moment vorhanden

2) magnetisches Moment vorhanden

→ Diamagneten (unabh. mag. Moment)

→ Ferrimagneten (magnetische Momente gekoppelt)

[auch Antiferrimagneten: mag. Momente antiparallel ausgerichtet] {ex. weitere Materialien?}

→ mit Hepply nicht Dipol-Dipol-WW gewinnt, dicker ist viel zu schwach.

↳ Hauptursache ist QM-Austausch-WW

- | | |
|-----------------|--|
| ehermal wichtig | <ul style="list-style-type: none"> • <u>Diamagneten</u>: $\chi < 0$ ($\chi \ll 1$) → Feld-Abschirmung ↳ Supraleiter ($\chi = -1$) • <u>Paramagneten</u>: $\chi > 0$ • <u>Ferrimagneten</u>: $\chi \gg 0$ |
|-----------------|--|

→ betrachte ehemal gebunden Elektronen

gebundenen Elektronen:

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m_e} + V(\vec{r}) = H_0 + H_1$$

$$\frac{\omega^2}{2m} + V(r)$$

39

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} = \text{rot } \vec{A} \Rightarrow \vec{A} = \frac{1}{z} B \begin{pmatrix} -y \\ +x \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$[\vec{p}, \vec{A}] = 0$$

$$H_1 = -\frac{e}{m_e} \vec{A} \cdot \vec{p} + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2m_e} = +\frac{eB}{2m_e} (\underbrace{y p_x - x p_y}_{L_z} \underbrace{+ \frac{e^2 B^2 (x^2 + y^2)}{8m_e}}_{H_{12}})$$

$$H_{11} = \frac{\mu_B}{m_e} \frac{1}{t_1} \underbrace{L_z B}_{H_{11}} = -\vec{\mu} \vec{B}$$

$$\text{Pauli} \rightarrow \vec{\mu}_c = -\frac{\mu_0}{t_1} \vec{L} \quad \vec{j} = \vec{L} + \vec{S} \quad g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$\text{Spin/Bahn} \rightarrow \vec{\mu}_s = -2 \frac{\mu_B}{2} \vec{S} \quad \vec{\mu}_J = -g \frac{\mu_B}{t_1} \vec{j}$$

Diamagnetismus eines Elektrons: H_{12}

$$\text{mag. Moment: } \mu = -\frac{\partial H_{12}}{\partial B} = \frac{e^2}{4m_e} (x^2 + y^2) \cdot B$$

$$\text{Suszeptibilität: } \chi = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = -\frac{e^2 \mu_0}{4m_e} (x^2 + y^2)$$

→ können auch klassisch hergeleitet werden ↑

Mittelwert:

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = \frac{\langle r^2 \rangle}{3}$$

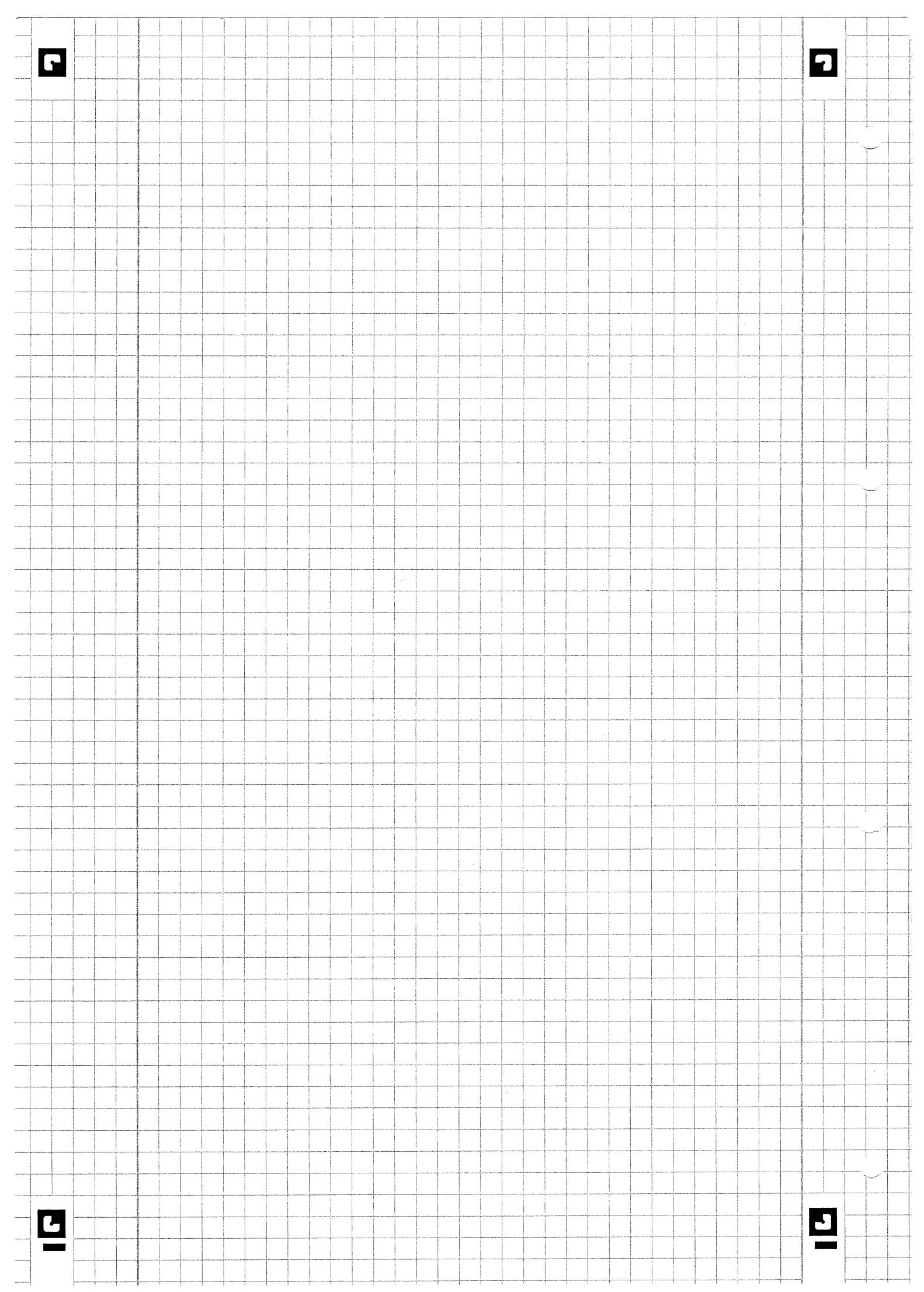
Anziehung oder Abstoßung
↓ Magnetenfeld

→ Test hier per mit N Elektronen $\chi = -\frac{Ne^2 \mu_0}{6m_e} \langle r^2 \rangle$

$$\text{Bsp.: He: } \chi = 0,0024 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$$

$$\text{Xe: } \chi = -0,57 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$$

→ in vielen Lehrbüchern auch klassische Erklärung





Kopplung eines Magneten an ein Elektron

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\vec{p}} - e\hat{\vec{A}})^2 + g \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{B}} + V(\vec{r})$$

Magnetenfeld gebundene Elektronen

$$\vec{B} = (0, 0, B)^T \quad \vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{v}) = \frac{1}{2} (-B_y, B_x, 0)^T$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})}_{\hat{H}_c} + \underbrace{\frac{\mu_B}{\pi i} (L_z + g_s S_z) B + \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2)}_{\hat{H}_1}$$

Ziel: Bestimmung der magnetischen Suszeptibilität

→ Störungsthemie 2. Ordnung

(höchstens quadratische Terme)

Energieeinsparung & En. einer Lastanheb. ins

$$\Delta E_n = \langle u | H_1 | u \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u | H_1 | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}}$$

$$\Rightarrow \Delta E_n = \frac{\mu_B B}{\pi} \langle n | \vec{L}_z + g_s \vec{S}_z | n \rangle \Rightarrow \rightarrow \text{Paramagnetismus}$$

$$+ \frac{e^2 B^2}{8m} \langle u | x^2 + y^2 | u \rangle \rightarrow \text{Diamagnetic}$$

$$+ \frac{\mu^2 B^2}{\hbar^2} \sum_{n \neq n'} \frac{|c_{n'l} c_{n'g} + g_{n'n} c_{l'n'}|^2}{E_n - E_{n'}} \rightarrow \text{Van-Vleck Pararegularis I}$$

I und II 4 bis 5 Gänge kleiner als III

III: $\sim 10^{-4}$ eV (1K)

Magnetische Suszeptibilität

→ Freie Energie F eines Systems aus N unabhängigen

Teilchen, das sich in einem starken Magnetfeld befindet

$$F = U - TS$$

$$dF = dU - SdT - TdS = -SdT - pdV - V\bar{m}d\bar{B} \quad , \quad \bar{B} = \mu_c \bar{H}$$

$$\delta T = 0, \quad \delta V = 0 \quad (\text{isothermer Prozess})$$

$$\Rightarrow M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial B}$$

$$\chi = \mu \frac{\partial M}{\partial B} = -\frac{\mu_0}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial B^2}$$

\hookrightarrow statische magnetische Suszeptibilität (isotherm)

Weiterhin gilt:

$$F = -k_B T \ln \sum_n \exp(-\beta E_n) \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial B} = -\frac{1}{V} \frac{1}{\sum_n \exp(-\beta E_n)} \sum_n \frac{\partial E_n}{\partial B} \exp(-\beta E_n)$$

$$\begin{aligned} \chi &= \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = \mu_0 \sum_n \left(\beta \left(\frac{\partial E_n}{\partial B} \right)^2 - \frac{\partial^2 E_n}{\partial B^2} \right) e^{-\beta E_n} \\ &\quad - \frac{\mu_0}{Z^2 k_B T} \left(\sum_n \frac{\partial E_n}{\partial B} e^{-\beta E_n} \right)^2 \quad \text{mit } Z = \sum_n \exp(-\beta E_n) \end{aligned}$$

$$\left. \frac{\partial E_n}{\partial B} \right|_{B=0} = \frac{\mu_B}{t} \langle n | L_z + g_s S_z | n \rangle$$

$$\left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial B^2} \right|_{B=0} = \frac{e^2}{4m} \langle n | x^2 + y^2 | n \rangle + \frac{2\mu_B^2}{t^2} \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle n | L_z + g_s S_z | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}}$$

\rightarrow magnetische Suszeptibilität setzt sich aus

3 Beiträgen zusammen:

$$\chi = \chi_{\text{dia}} + \chi_{\text{para}} + \chi_{\text{vv}}$$

$$\chi_{\text{dia}} = -\frac{\mu_0 e^2}{4\pi V} \langle x^2 + y^2 \rangle = -\frac{\mu_0 e^2}{6\pi V} \langle r^2 \rangle < 0$$

$$\chi_{\text{para}} = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{k_B T t^2 V} \frac{\sum_n (\langle n | L_z + g_s S_z | n \rangle)^2}{\sum_n e^{-\beta E_n}} e^{-\beta E_n} > 0$$

$$\chi_{\text{vv}} = -\frac{2\mu_B^2 \mu_0}{t^2 Z V} \sum_{n \neq n'} \frac{|\langle n | L_z + g_s S_z | n' \rangle|^2}{E_n - E_{n'}} e^{-\beta E_n} > 0$$

* angester. Zustand $|n'\rangle$ energetisch höher als $|n\rangle$

Thermodynamische Erweiterung der Magnetisierung bei Abwesenheit eines Magnetfelds verschwindet, da die Zustände mit positivem und neg. magn. Moment mit gleicher Wahrscheinlichkeit angenommen werden

$$\rightarrow M = -\frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_n \frac{\partial E_n}{\partial B} e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_n \mu_0 \langle n | L_z + g_S S_z | n \rangle e^{-\beta E_n} \quad 41$$

$$= 0 = \langle \mu \rangle$$

I.) Diamagnetismus

↳ fällt auf, wenn die Atome im Grundzustand

10) vollkommen gefüllte Elektronenschalen haben,
so dass $\vec{j} = \vec{L} = \vec{S} = 0$ ← Kugelsymmetrie

X dies ist Temperaturunabh., magnetisch und wird
dominiert durch Elektronen in den äußeren
Schalen/Orbitalebenen

→ Bohr-van-Leeuwen-Theorem

Es gibt keinen klassischen Diamagnetismus!

Diamagnetismus ist ein reiner Quanteneffekt für $\vec{j} = 0$

II.) Paramagnetismus

↳ Betrachtung von gebundenen/lokalisierten magnet.

Momenten im System mit $\vec{j} = \vec{L} + \vec{S} \neq 0$

→ $\vec{j} \neq 0$ gilt nur für teilweise gefüllte Schalen

pro Schale: $2(2e+1)$ Zustände

Wegen z.B. der Spin-Bahn-Kopplung ($\hat{H} \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$) ist die
Entartung der Zustände aufgehoben und die Zustände
werden gemäß der Hund'schen Regel besetzt.

A) Hund'sche Regeln:

- 1) Maximierung des Gesamtspins }
2) Maximierung des Bahndrehimpulses } Energyminimierung!
} \uparrow

=> beide berücksichtigen Coulomb-WW / Pauli Prinzip

- 3) Kopplung von \vec{L} und \vec{S} zu \vec{j}

↳ Minimierung der Spin-Bahn-WW

B) Russel - Sanders - Hopfield:

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i, \quad \vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$$

$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ Für die Berechnung μ_j muss beachtet werden, dass g_c und g_e unterschiedlich sein können.

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

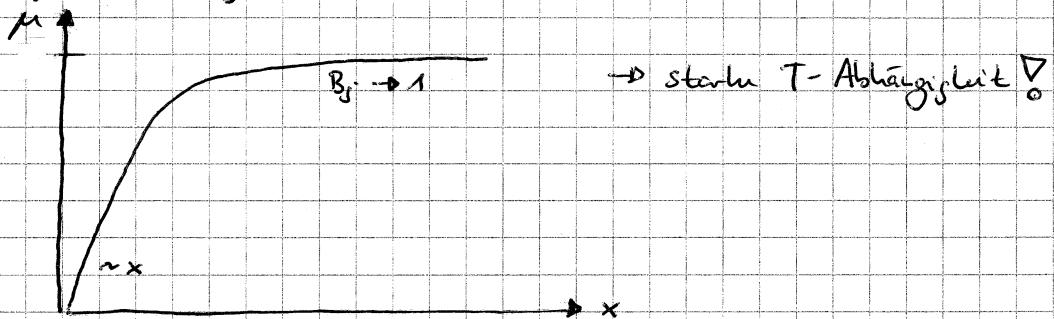
$$\vec{\mu}_j = -g_J \frac{\mu_0}{k_B T} \vec{J}$$

$$\begin{aligned} M &= \frac{N}{V} \langle \mu \rangle = n g \mu_0 \langle \mu_j \rangle, \quad \mu_j = \frac{J}{\pi} \\ &= n g \mu_0 \sum_{m_j=j}^J m_j \exp\left(-\frac{g \mu_0 m_j B}{k_B T}\right) \\ &\quad \sum_{m_j=j}^J \exp\left(-\frac{g \mu_0 m_j B}{k_B T}\right) \end{aligned}$$

$$= n g \mu_0 j B_j(x), \quad x = \frac{g \mu_0 J B}{k_B T}$$

Brillouin-Funktion

$$B_j(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J} x\right)$$



Für $x \ll 1$ (sehr hohe Temperatur):

Curie-Konstante

$$\coth(x) \approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + O(x^2) \Rightarrow \frac{M}{B} = \frac{C}{T}$$

$$\text{Curie-Gleichung mit } C = \frac{n \cdot n \cdot J(J+1) g^2 \mu_0^2}{3 k_B}$$

$$\chi = \frac{\mu_0 \cdot \mu^2}{k_B T} > 0 \quad (\vec{\mu} \parallel \vec{B})$$

III) Van-Vleck-Parmagnetismus

42

$$\chi_{VV} > 0$$

\rightarrow Kopplung zwischen Atomzustand ($\mu=0$) mit magnetischen Anregungszuständen. Dafür muss $\langle 0 | L_z + g_s S_z | \alpha \rangle \neq 0$
für kein Temp $\chi_{VV} \propto \frac{1}{T}$

25.01.17

Fernmagnetismus: Bsp. für Phänomene, die aus starken Korrelationen entstehen

Wechselwirkung zwischen den Elektronen ist Hauptursache
Spontan Magnetisierung auch ohne ex. Magnetfeld

\Leftarrow thermische Orderung

Natur der e-e-WW: nicht die regul. Dipol-Dipol-WW
sondern: Spin-Spin-WW $B \sim 0,01 T$

entschieden:

Austausch WW (wegen Antisymmetrie der Wellenfunkts.):

$$\text{Zwei Elektronen } \Psi_{1,2} \sim \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) - \psi_1(q_2)\psi_2(q_1))$$

würde Pauli-Prinzip nach
nicht erfüllen

mit Coulomb-Matrixelementen:

$$\langle \Psi_{12} | \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \Psi_{12} \rangle \sim \text{dir. Coulomb-WW}$$

$\rightarrow \oplus$ Austausch WW "Überlappungsrel"
Spinorientierung

$$\text{Austausch-WW: } \langle \Psi_{12} | \psi_2(q_1)\psi_1(q_2) | \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \Psi_{12} \rangle \approx 1 \text{ eV}$$

\hookleftarrow exchange $\rightarrow B_{ex} \leq 1000 \text{ T}$

$J \leftarrow \text{alles } =$

\Rightarrow Fernmagnetismus überlebt auch Raumtemperatur
nur die WW zw. nächsten Nachbarn ist wichtig!

3d, 4f Elektronen (meist gelocalisiert, kein ausgetilchener WW)

$$\pm \sim \frac{1}{2} (1 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$$

→ Ursache: Heisenberg-WW

$$H = -2J \sum_{i,j} S_i S_j$$

I sing-WW: $H = -2J \sum_{i,j} S_{i+} S_{j-}$

$$\rightarrow \sim (S_{1x} S_{2x} + S_{1y} S_{2y} + S_{1z} S_{2z})$$

$$\rightarrow \text{mit } S_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (S_x \pm i S_y)$$

$$\Rightarrow = (S_{1+} S_{2-} + S_{1-} S_{2+} + S_{1z} S_{2z})$$

↳ Spin-Tflip-Tflip-Prozess

↳ 1. Spin klappt mutig und 2. hoch etc.

$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ mit $\vec{\mu} = \frac{g \mu_B}{n} \vec{S}$

$$\rightarrow H = -2J \sum_{i,j} S_i S_j \left(\frac{g \mu_B}{n} \right)^2 \frac{\hbar^2}{(g \mu_B)^2} = -\vec{B}_{\text{ex}} \cdot \vec{\mu}_2$$

mit $\vec{B}_{\text{ex}} = +2J \frac{\hbar}{g \mu_B} \vec{S}_1 = -2J \frac{\hbar^2}{(g \mu_B)^2} \vec{\mu}_1$

→ sieht aus wie Dipol-Dipol-WW ($\vec{\mu}_1 \leftrightarrow \vec{\mu}_2$) aber falsch!

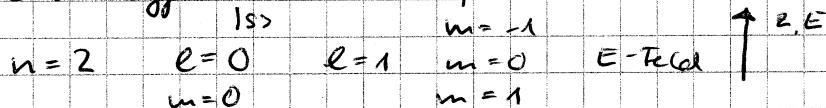
Anstauschintegral: $J < 0$ Ferromagnet

$J > 0$ Antiferromagnet

thermisch Unordnung $\begin{cases} \ll J & \text{Sättigungsmagnetismus} \\ \gg J & \text{Paramagnetismus, da Koppplage aufgebrochen werden zw. Spins} \end{cases}$

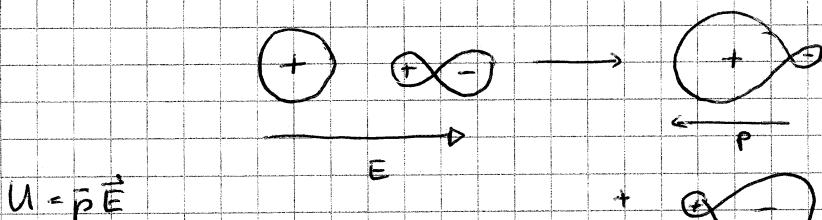
$$\mu B_{\text{ex}} \approx \mu_B T_c + Curie-Temperatur: T_{c,F} \approx 1013 \text{ K}, T_{c,C} \approx 1388 \text{ K}$$

Stark-Effekt



m gute Quantenzahl (± 1)

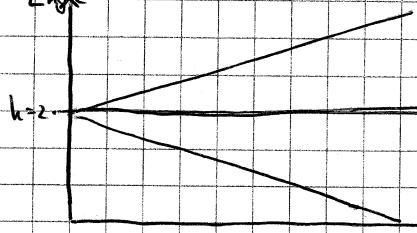
teilweise Mischung → neue Eigenzustände: $1s > \pm 1p_0 >$



↳ bei $m \neq 1$ sehr gut → kleine WW-Energie

→ linearer Stark-Effekt

Engie



→ Mischy $\nu_0 = 1 >$ die ν_0

sich nur Dipolhafen bewegen

entsteht durch externes E ein Dipolmoment

$$\chi = \frac{M}{H} = \mu_0 \frac{M}{B_{ext}}$$

$$\chi = \frac{C}{T} \quad \text{Curie-Gesetz}$$

Ferro magnet: a) $T \gg T_c$ $M = \chi \frac{1}{\mu_0} (B_{ext} + B_{ex})$

$$\Rightarrow \mu_0 M T = C (B_{ext} + \lambda \bar{M}) \quad \left| \begin{array}{l} \xrightarrow{\text{Ls}} B_{ex} = \lambda \bar{M} \quad \chi = \frac{C}{T} \text{ (Versich 18)} \\ \xrightarrow{T \approx 1} \text{ bei } T \approx 1 \text{ genügt Annahme} \end{array} \right.$$

$$\mu_0 (T - \frac{C \lambda}{\mu_0} \bar{M}) = C B_{ext} \quad T_c = \frac{1}{\mu_0} C \lambda \quad \rightarrow M = \frac{C}{T-T_c} \frac{B_{ext}}{\mu_0} \approx \chi$$

Suszeptibilität oberhalb der Curie-Temperatur

$$\tilde{\chi} = \frac{C}{T-T_c} \quad \text{Curie-Weiss-Gesetz}$$

→ exp. Messy liefert: $\tilde{\chi} = \frac{C}{(T-T_c)^{1.33}}$

b) $T < T_c$ Erinnerung Parameter $S = 1/2$

$$M = n \cdot \mu_B \tanh \left(\frac{\mu_B B}{k_B T} \right) \quad B = B_{ex} = \lambda M$$

Dipolare Dipole

$$= n \mu_B \tanh \left(\frac{\mu_B \lambda M}{k_B T} \right)$$

$$\text{im Experiment: } \frac{M(T=0) - M(T)}{M(T=0)} = AT^{3/2}$$

Was passiert bei therm. Anregung eines Ferromagneten:

$$T=0 \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \quad | \quad T>0 \quad \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow$$

$$H = -2 \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$$

$$\text{Wiss. Behanlly: } \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = \vec{S}^2$$

$$E = -2JN\vec{S}^2 \quad T=0$$

$$E = -2JN\vec{S}^2 + \underbrace{4JNS^2}_{\text{energetisch}} + \underbrace{4JNS^2}_{\text{kinetisch}} \quad T>0$$

energetisch Strafo bei 1 Umlapp: $8J\vec{S}^2$ (hech)

\rightarrow sehr tief \rightarrow im Material stehende Welle

Zustand mit Präzession \Rightarrow Spin-Welle

ähnlich zu Phononen

FhP 30.01.18

$\rightarrow N-1^2$ sonst wie überzählt?

$$\text{Heisenberg: } H = -2J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

$$\text{linear krit. : } H = -2J \sum_{p=1}^N \vec{S}_p \vec{S}_{p+1} \quad \text{Wiss. Behanlly: } \vec{S}_p \cdot \vec{S}_{p+1} = \vec{S}^2$$

$$= -2JN\vec{S}^2 \quad \rightarrow \text{nur Beziehung der WW zw.}$$

nächsten Nachbar.

\rightarrow was passiert wenn einer Spin umgedreht wird?

$$\text{elementar Anregung: } E = -2JN\vec{S}^2 + 8J\vec{S}^2$$

\Rightarrow hoher energetischer Preis

statt drehen: Ausbildung einer Spinwelle

$$\text{Betrachte Spin } p: \vec{S}_p \rightsquigarrow \vec{M}_p = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}_p$$

$$\frac{d\vec{M}_p}{dt} = \gamma \vec{M}_p \times \vec{B}_{\text{Exch.}}$$

$$\rightarrow \text{Bew. GL. beginnt sich aus: } E = -\vec{M}_p \vec{B}_{\text{Exch.}}$$

bei Parton links u. rechts:

$$E = -2J(\vec{S}_p \vec{S}_{p-1} + \vec{S}_p \vec{S}_{p+1})$$

$$= -\underbrace{(-g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}_p)}_{\vec{M}_p} \underbrace{(-\frac{\hbar}{g \mu_B} 2J (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}))}_{\vec{B}_{\text{Exch.}}}$$

$$\Rightarrow \frac{d\vec{M}_p}{dt} \sim \vec{S}_p \times (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}) \sim \frac{d\vec{S}_p}{dt}$$

enthält Verfaktoren

$$\left| \begin{array}{c} S_p^x \\ S_p^y \\ S_p^z \end{array} \right| \quad \frac{dS_p}{dt} \sim \left(\begin{array}{c} S_p^y S_{p+1}^{-2} - S_{p-1}^{-2} S_p^2 \\ S_p^2 S_{p+1}^{-2} - S_{p-1}^{-2} S_p^2 \\ S_p^2 S_{p+1}^{-2} - S_{p-1}^{-2} S_p^2 \end{array} \right)$$

44

\hookrightarrow nicht wirklich lösbar: Näherung: $S_p^x = S_{p-1}^x = S_{p+1}^x = S = \text{const}$
 $\Rightarrow \dot{S}_p^2 = 0 \quad (\text{I})$

\rightarrow Bsp. bei Präzession bzgl. Projektion auf Winkelrichtung immer

in selbe Richtung \rightarrow gezeitigte Näherung

$$\frac{dS_p^x}{dt} = S(2S_p^y - S_{p-1}^y - S_{p+1}^y) \quad (\text{II}) \quad \left. \begin{array}{l} \text{ähnlich zu Bew-Gl} \\ \text{bei gel. Phasen} \end{array} \right\}$$

$$\frac{dS_p^y}{dt} = S(-2S_p^x + S_{p-1}^x + S_{p+1}^x) \quad (\text{III}) \quad \left. \begin{array}{l} \text{rechte Seite identisch zu Linien (Kette)} \\ \text{bei Fürterschwingungen (aber linke Seite anders (nu 1. Abt.))} \end{array} \right\}$$

\rightarrow mitte idenl. Lsg.-Ansatz: $S_p^{xy} = S_{p,0} e^{i(k(pz) - \omega t)}$

\rightarrow Dispersionrelation: $\omega(\vec{q}) \approx JS(1 - \cos(qa))$

(\rightarrow nachträgliche Quantisierung)

haw als Anregungsenergie (alle Spins gekoppelt \rightarrow wichtige Phaseabhängigkeit)

\Rightarrow Magnon (Besonderes Teilchen)

$\hookrightarrow T^{3/2}$ -Abhängigkeit der Magnonisierung

• bei Ferromagnetismus: $\frac{1}{T+T_c} \quad J > 0$

AFM: $\frac{1}{T+T_N} \quad J < 0$

Supraleitung

Einsatz Hg: He^4 Bosonsch $T_{\text{Fermi}}: T = 4,2 \text{ K}$ \rightarrow ähnlich Waff. parken

$\text{He}^4 \hookrightarrow$ durch Kryotemperatur max $T = 1,25 \text{ K}$

(unterhalb 2,1 K wird Helium superfluid)

He^3 (wir ein Neutron) Fermionsch $T_{\text{Fermi}} \approx 2 \text{ K}$

\hookrightarrow durch Pumpen $T \approx 0,3 \text{ K}$ Gerüst auf ca. 50 nm

Charakteristika: • $T < T_c$: $\chi = 0$ idealer Widerstand

• idealer Diamagnet

Kernmagnetoochsenfeld-Effekt

$$\text{im SL: } \vec{B} = \mu_0 \frac{\mu}{\sigma} \vec{H} = 0 \rightarrow \chi = -1$$

\Rightarrow zwei unabhängige Kriterien

$$\vec{J} = 0 \quad \vec{E} = \frac{1}{\sigma} \vec{J} = 0 \quad \chi = 0$$

$$\text{mit } \vec{E} = 0 = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \rightarrow \vec{B} \text{ const.} \neq \text{Supraleiter}$$

Ursache ist die Ausbildung von Cooper-Paaren:

↳ Elektron löst Gitterverzerrung aus, zieht p-:

Atom zu sich

→ Elektron + Gitterverzerrung \equiv Polaron $m_{\text{pol}} \gg m_e$

Gitterverzerrung kann effektiv attraktive WW zw. e⁻ erzeugen,

nur bei Elektronen mit entgegengesetzten Gitterimpuls sofern

$$\text{Spins: } \vec{h}_1 = -\vec{h}_2, \vec{s}_1 = -\vec{s}_2$$

01.02.18 FUP

Supraleitung: T_c : Al 1,14 K
Rh 0,001 K } SL 1. Art

Ba₂YCu₃O₈ 35 K \leftarrow liquid N₂ ~77 K

→ Met. mit kleinen T_c müssen sehr rein sein

• SL bricht bei hohem Feldstärke H_c zusammen (SL 1. Art)

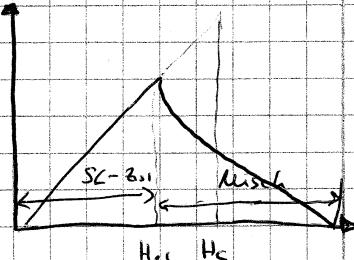
- bei SL 2. Art Grenze schwer verschoben

(Niedrigtemperatur, 2. Art hohes Feldstärke)

↳ \vec{B} dringt etwas in Probe ein

→ es ex. immer noch supraleitende Bereiche

• Bsp) Pb ist 1. Art / Pb-Iodid Gemisch 2. Art



• bei Nicht-Leitern: $C_V = AT^3 + BT$

↑ ↑
Gitter Elektron

• SL: exponentielle Abhängigkeit \propto analog $T \cdot w_{\text{phot.}} = \text{const}$

• normalweise bei Metallen wie Al keine Bedeutung

\hookrightarrow in SL bildet sich in Energiehöhe aus bei E_F

\rightarrow Energie wird abgesenkt \rightarrow darüber verbotene Zone (Normalleiterin)

• Energiedurchgang $E_{\text{gap}}^{\text{SC}} \rightarrow \frac{E_{\text{gr}}^{\text{SC}}}{E_F} \approx 10^{-4}$

Isotopeneffekt

• Quellsilberisotope mittels Zentrifuge getrennt, dann untersucht

$\hookrightarrow T_c$ abh. von der Masse $M \propto T_c \approx \text{const}$

Atommasse
der Isotope

$$\alpha = \frac{1}{2} \xrightarrow{\text{BCS-Theorie}}$$

$\rightarrow T_c = 1,14 \cdot \Theta_0 \exp\left(-\frac{1}{n D_c(E_F)}\right)$

Debye-T \uparrow \downarrow \rightarrow elektronisch
Photonisch \rightarrow ultrav. Ww

\rightarrow Ladungsträger und Gitter wirken zusammen (entgegen BCS-Opposition)

magnetischer Fluss durch SL-Ring

$$\oint \vec{A} d\vec{l} = \Phi_M = \iint_G \vec{B} \cdot d\vec{A} = n \cdot \frac{\hbar}{q} \xrightarrow{\text{Plank WQ}} \rightarrow \text{gemessen: } q = -2e$$

\downarrow

$\vec{B} = \vec{B}_{\text{ext}} + \vec{B}_{\text{int}}$

\rightarrow Nachweis für Cooper-Paare

\hookrightarrow Möglichkeit Naturkonstanten genau zu bestimmen

