

Festkörperphysik

Jonas Spinner
26. Oktober 2021

Bitte nicht diese pdf weiterverbreiten,
sondern den Link <https://www.jspinner.de>.
Dort gibts die aktuelle Version!

Dies ist eine privat erstellte Zusammenfassung und richtet sich an einen Studenten, der das Thema bereits aus einer Einführungsvorlesung kennt. Übersichtlichkeit und Struktur sind mir besonders wichtig, deshalb schreibe ich in Stichpunkten. Ich kommentiere die Themen, die ich wichtig finde und zeige die Rechnungen, die ich lehrreich finde. Insbesondere versuche ich, Aussagen zu verallgemeinern und direkt zu formulieren, was sicherlich manchmal schief geht. Ich freue mich über Rückmeldungen!

Im Folgenden eine kleine Liste von Quellen, auf die ich beim Anfertigen dieser Zusammenfassung zurückgegriffen habe. Die Punkte sind nach abnehmender Relevanz geordnet.

- Gross, Marx - Festkörperphysik: Ausführlich, gute Struktur
- Einführungsvorlesung Ex5 2019/20 bei Wernsdorfer
- Hunklinger - Festkörperphysik: Legt Niveau fest, manchmal unvollständig
- Ibach, Lüth - Festkörperphysik: Als Vergleichswerk für spezielle Fragen, macht nur die Grundlagen

Inhaltsverzeichnis

1	Bindungen und Struktur	3
1.0.1	Einordnung von Festkörperphysik	3
1.1	Grundlagen	3
1.1.1	Adiabatische Näherung/Born-Oppenheimer-Näherung	3
1.1.2	Kategorisierung von Festkörpern nach Struktur	3
1.1.3	Molekülphysik	4
1.2	Bindungszustände	4
1.2.1	Grundlagen	4
1.2.2	Van-der-Waals-Bindung	5
1.2.3	Ionische Bindung	5
1.2.4	Kovalente Bindung	5
1.2.5	Wasserstoffbrücken	6
1.2.6	Metallische Bindung	6
1.2.7	Modelle für Elektronen in den Bindungstypen	6
1.3	Kristallstruktur	6
1.3.1	Gitter im Ortsraum	6
1.3.2	Reziprokes Gitter	7
1.3.3	Strukturbestimmung	8
1.3.4	Experimentell: Elastische Streuung zur Strukturbestimmung	9
1.3.5	Experimentell: Mößbauer-Effekt	10
1.4	Strukturelle Defekte	11
1.4.1	Entstehung von Defekten	11
1.4.2	Klassifizierung von Defekten	11
2	Gitterdynamik	12
2.1	Grundlagen	12
2.1.1	Grundbegriffe Schwingungen	12
2.1.2	Elastische Schwingungen	12
2.2	Gitterschwingungen	13
2.2.1	Grundlagen	13
2.2.2	Einatomige Basis	13
2.2.3	Mehratomige Basis	14
2.2.4	Zustandsdichte von Phononen	14
2.2.5	Experimentell: Bestimmung von Phonon-Dispersionsrelationen	15
2.3	Spezifische Wärmekapazität	15
2.3.1	Spezifische Wärmekapazität durch Gitterschwingungen	15
2.3.2	Historische Entwicklung	16
2.3.3	Gesamte spezifische Wärmekapazität	16
2.4	Anharmonische Gitterschwingungen	17
2.4.1	Anharmonische Gitterschwingungen	17
2.4.2	Thermische Ausdehnung	17
2.4.3	Wärmeleitfähigkeit	17

3	Elektronendynamik	18
3.1	Freie Elektronen	18
3.1.1	Drude-Modell	18
3.1.2	Sommerfeld-Modell/Freies Fermigas	18
3.2	Energiebänder durch periodisches Potential	19
3.2.1	Bloch-Theorem	19
3.2.2	Ungebundene Elektronen	19
3.2.3	Schwach gebundene Elektronen	20
3.2.4	Stark gebundene Elektronen	20
3.2.5	Energiebänder	21
3.2.6	Kategorisierung von Festkörpern nach Position der Fermienergie	22
3.2.7	Experimentell: Bestimmung der Fermifläche	22
3.3	Transportphänomene	22
3.3.1	Elektronen und Löcher	22
3.3.2	Strom- und Wärmetransport im Drude-Modell	23
3.4	Halbleiter	23
3.4.1	Grundlagen	23
3.4.2	Dotierung	24
3.4.3	pn-Übergang	25
3.4.4	Experimentell: Anwendungen des pn-Übergangs	26
4	Sonstige Phänomene	27
4.1	Elektrische Eigenschaften von Festkörpern	27
4.1.1	Grundlagen	27
4.1.2	Anregungen von Festkörpern durch Photonen	28
4.1.3	Beschreibung von dielektrische Eigenschaften von Isolatoren	28
4.2	Magnetische Eigenschaften von Festkörpern	29
4.2.1	Grundlagen	29
4.2.2	Atomarer Magnetismus	29
4.2.3	Ferromagnetismus $\chi \gg 1$	29
4.2.4	Magnetische Anisotropie	30
4.2.5	Adiabatische Entmagnetisierung	30
4.3	Supraleitung	31
4.3.1	Phänomenologie	31
4.3.2	Kategorisierung von Supraleitern	32
4.3.3	Shubnikov-Phase in Typ-2-Supraleitern	32
4.3.4	BCS-Theorie für Typ-1-Supraleiter	33
4.3.5	Josephson-Kontakt	34
4.3.6	Experimentell: Schaltkreise mit Josephson-Kontakten	35

Kapitel 1

Bindungen und Struktur

1.0.1 Einordnung von Festkörperphysik

- Festkörper sind makroskopische Anordnungen von Atomen, bei denen abhängig von den Typen der Atome und der Temperatur unterschiedliche Effekte eine Rolle spielen
 - Benötige Zusammenwirken von Teilchen-, Kern- und Atomphysik zur Beschreibung makroskopischer Festkörper
- Energieskala von Festkörperphysik: 1 meV bis 1 eV abhängig vom Effekt
 - Inhalte stark verknüpft mit Atomphysik wegen gleichem Energiebereich

1.1 Grundlagen

1.1.1 Adiabatische Näherung/Born-Oppenheimer-Näherung

- Aussage: Kann Bewegung von Atomkernen und Bewegung von Elektronen im Festkörper getrennt behandeln
 - Formal: Trenne gemeinsame Schrödingergleichung für Elektronbewegung und Atomkernbewegung, Kopplungsterm als kleine Korrektur berücksichtigt
- Begründung: Atomkerne viel schwerer als Elektronen, daher großer Geschwindigkeitsunterschied und Bewegung auf unterschiedlichen Zeitskalen
- Bezeichnung adiabatische Näherung, da aus Perspektive des einen Systems das andere näherungsweise im TD-GG ist
 - Perspektive Atomkerne: Elektronen im TD-GG, da sie sich wegen ihrer schnellen Bewegung schon auf die Atomkern-Bewegung eingestellt haben
 - Perspektive Elektronen: Atomkerne im TD-GG, da sie sich wegen ihrer langsamen Bewegung noch nicht auf die Elektron-Bewegung eingestellt haben
- Gitterdynamik: Untersuche Bewegung der Ionen und vernachlässige Elektronenbewegung
- Elektrondynamik: Untersuche Elektronenbewegung im konstanten Potential der Ionen

1.1.2 Kategorisierung von Festkörpern nach Struktur

- Kristall: Geordnet und periodisch
 - Periodische Struktur \Rightarrow Gitterschwingungen möglich
 - Spezialfall Quasikristall: Geordnet, aber unperiodisch
- Amorpher Festkörper: Ungeordnet
 - Bsp: Glas

1.1.3 Molekülphysik

- Elektron- und Ion-Bewegung
 - Molekül ist Bindungszustand(kovalente Bindung) aus mehreren Ionen \Rightarrow Zusätzlich zur Elektron/Ion-Wechselwirkung (Atomphysik) auch Ion/Ion-Wechselwirkung
- Elektron-Energieniveaus: LCAO(linear combination of atomic orbitals)
 - Idee: Molekülorbital aus Linearkombination von unbesetzten Atomorbitalen
 - * Unterscheide bindende und anti-bindende Molekülorbitale(Endliche oder verschwindende Elektronendichte zwischen Atomen)
 - Rayleigh-Ritz-Prinzip(Variationsmethode): Minimiere Bindungsenergie durch Wahl der Koeffizienten
- Ion-Energieniveaus: Rotation und Schwingung von Ionen relativ zueinander
 - Betrachtung einfach für 2-atomige Moleküle, sonst zunehmend kompliziert
 - Rotation: Modelliere 2-atomiges Molekül als starren Rotator
 - Schwingung: Modelliere 2-atomiges Molekül als Teilchen im Morse-Potential $V = V_0 \left(1 - e^{-a(r-r_0)}\right)^2$
 - * Nicht-äquidistante Energieniveaus $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2\omega^2}{4V_0} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$, nur endlich viele Energieniveaus für $E < V_0 \Rightarrow$ Beschreibt Realität besser als harmonischer Oszillator $V = \frac{m\omega^2}{2}r^2$
 - Franck-Condon-Prinzip: Elektronische Übergänge erfolgen so, dass der Schwingungszustand des Moleküls möglichst nicht geändert wird
 - * Grund: Adiabatische Näherung \Rightarrow Ionenbewegung durch Elektron-Prozess nicht beeinflusst
- Molekülspektrum ist Bandenspektrum
 - Diskrete Energieniveaus für Elektronen sind mit kontinuierlichen Niveaus für Schwingungen und Rotationen überlagert

1.2 Bindungszustände

1.2.1 Grundlagen

- Reale Bindung ist Mischung aus verschiedenen Bindungszuständen
- Bindungsenergie: Nötige Arbeit für Zerlegung des Bindungszustands in seine Komponenten(Atome/Ionen)
 - Komponenten sollen sich nach der Zerlegung im Grundzustand befinden
- Grundbegriffe Elektronaustausch
 - Ionisationsenergie E_I : Nötige Energie für Abgabe eines e^-
 - Elektronenaffinität E_A : Gewonnene Energie bei Aufnahme eines e^-
 - Elektronegativität $E_N = \frac{E_A + E_I}{2}$: Maß für e^- -Anziehung
 - * Elektronegativität ist chemisches Potential für Elektronenaufnahme
$$E_N = \frac{E_A + E_I}{2} = \frac{(E_n - E_{n+1}) + (E_{n-1} - E_n)}{2} = -\frac{E_{n+1} - E_{n-1}}{(n+1) - (n-1)} \approx -\frac{\partial E}{\partial n} \approx -\mu$$
 - Art des Elektronenaustauschs(ionisch/kovalent) abhängig von Differenz der Elektronegativität der Atome
- Abstoßung bei kleinen Abständen durch das Pauli-Prinzip
 - Bei kleinen Abständen überlappen sich Wellenfunktionen \Rightarrow Gemeinsame Zustände für beide Komponenten, die nach dem Pauli-Prinzip besetzt werden müssen
 - Modellierung mit $\frac{1}{r^{12}}$ -Potential
 - * Prinzipiell genügt stark ansteigendes Potential, experimentelle Daten können gut mit $\frac{1}{r^{12}}$ -Potential genähert werden

- Nullpunktbewegung
 - Atom als harmonischer Oszillator hat Nullpunktsenergie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0 \Rightarrow$ Im Grundzustand endliche Auslenkung aus der Ruhelage
 - Nicht vernachlässigbar für leichte Atome (Bsp: He bei $T = 0$ flüssig)

1.2.2 Van-der-Waals-Bindung

- Dominiert bei Atomen/Molekülen mit abgeschlossenen Schalen
 - Schwächster Bindungstyp (Bindungsenergie pro Atom im meV-Bereich)
 - Näherung: Atome/Moleküle mit abgeschlossenen Schalen sind kugelsymmetrisch
 - Nullpunktbewegung liefert nicht-vernachlässigbaren Beitrag
- Prinzip: EM-WW zwischen zwei Dipolen
 1. Fluktuierende Elektronenverteilung verursacht temporäres Dipolmoment
 - Kugelsymmetrisches Atom hat kein permanentes Dipolmoment
 2. Temporäres Dipolmoment induziert temporäres Dipolmoment im Nachbaratom
 - Sekundäres Dipolmoment so ausgerichtet, dass Dipole sich anziehen
- Modellierung mit $V = -\frac{A}{r^6}$
 - Elektrisches Feld eines Dipols $E_1 \propto \frac{p_1}{r^3}$, Stärke des induzierten Dipols $p_2 \propto E_1 \Rightarrow$ Potential zweier Dipole $V \propto -\frac{p_1 p_2}{r^3} \propto -\frac{p_1^2}{r^6}$
 - Lennard-Jones-Potential $V = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$ berücksichtigt zusätzlich Abstoßung wegen Pauli-Prinzip

1.2.3 Ionische Bindung

- Dominiert bei Atomen mit nicht-abgeschlossenen Schalen und großer Elektronegativitätsdifferenz
 - Stärkster Bindungstyp (Bindungsenergie pro Atom im eV-Bereich)
- Prinzip: EM-WW zwischen Ionen unterschiedlicher Ladung
 - Austausch eines Elektrons zwischen zwei Atomen energetisch günstig wegen großer Elektronegativitätsdifferenz
 - Anziehung zwischen entstandenen Ionen durch EM-WW

1.2.4 Kovalente Bindung

- Dominiert bei Atomen mit nicht-abgeschlossenen Schalen und kleiner Elektronegativitätsdifferenz
 - Zweitstärkster Bindungstyp (Bindungsenergie pro Atom im niedrigen eV-Bereich)
- Prinzip: EM-WW durch Trennung von Elektronen und Ionen
 - Elektronen zwischen Atomen lokalisiert, da teilweiser Austausch von Elektronen zu stabilstem Zustand führt
 - Anziehung zwischen lokalisierten Elektronen und Ionen
- Typen von kovalenten Bindungen
 - σ -Bindung: Molekülorbital mit Rotationssymmetrie um Bindungsachse
 - π -Bindung: Molekülorbital ohne Rotationssymmetrie um Bindungsachse

1.2.5 Wasserstoffbrücken

- Prinzip: Besonders starke kovalente Bindung, bei der ein H-Atom an zwei weitere Atome gebunden ist
 - Besonderheit: Kovalente Bindung, aber zwischenmolekulare Anziehung durch EM-WW
 - Elektron fast vollständig vom H-Atom getrennt \Rightarrow Gitter(vgl. NaCl) aus Molekülen mit Wasserstoffbrücken
 - H-Atom hat geringes Volumen \Rightarrow Nur 2 Bindungspartner möglich
- Bekannt von H_2O , aber auch wichtig für NH_3 , HF , H_2S

1.2.6 Metallische Bindung

- Dominiert bei Metallen(Elektronegativität zu gering, um Elektronen zu lokalisieren)
- Prinzip: Gleich wie kovalente Bindung, aber Molekülorbitale über den gesamten Festkörper verteilt
 - Oft genügt Modellierung als freies Elektronengas
- Berechnung deutlich komplizierter als bei anderen Bindungstypen
 - Beiträge zur Bindungsenergie: EM-WW, kinetische Energie der e^- , Austauschwechselwirkung, Spinausrichtung, ausgedehnter Kernrumpf

1.2.7 Modelle für Elektronen in den Bindungstypen

- Ionische Bindung, Van-der-Waals-Bindung: Elektronen fest lokalisiert \Rightarrow Kein Elektronen-Modell nötig
- Metallische Bindung: Freie Elektronen, schwach gebundene Elektronen
 - Elektronen frei im Gitter beweglich bis auf schwache Wechselwirkung mit Ionen
- Kovalente Bindung: Stark gebundene Elektronen
 - Elektronen durch Wechselwirkung mit benachbarten Ionen fest gebunden

1.3 Kristallstruktur

1.3.1 Gitter im Ortsraum

- Kristallstruktur bestimmt durch Angabe von Punktgitter(Fernordnung) und Basis(Nahordnung)
- Punktgitter(Fernordnung)
 - Gitter aus Gittervektoren $\vec{r}_{\vec{n}} = \sum_i n_i \vec{a}_i$ (Translationssymmetrie) mit Basisvektoren \vec{a}_i und $n_i \in \mathbb{Z}$
 - Translationsinvarianz: Basisvektoren spannen das Gitter auf
 - Wahl der Basisvektoren nicht eindeutig(gleiche Situation wie Basisvektoren in \mathbb{R}^n)
- Basis: Fundamentale Atomgruppe an jedem Gitterpunkt(Nahordnung)
 - Elementarzelle: Raum kann lücken- und überschneidungslos durch Elementarzellen überdeckt werden
 - Anordnung von Atomen in der Elementarzelle $\vec{r}_{\alpha} = \sum_i n_{\alpha,i} \vec{a}_i$ mit Basisvektoren \vec{a}_i und Lageparameter $n_{\alpha,i}$ für Atom α
 - Primitive Elementarzelle: Elementarzelle mit nur einem Gitterpunkt(minimales Volumen)
 - Wigner-Seitz-Zelle: Geschickte Wahl der primitiven Einheitszelle
 1. Verbindungsfläche vom Gitterpunkt zu Nachbarpunkten einzeichnen
 2. Mittelsenkrechte auf jeder Verbindungsfläche einzeichnen
 3. Minimales eingeschlossenes Volumen ist Wigner-Seitz-Zelle

- Symmetrieeigenschaften
 - Unterscheide Symmetrieeigenschaften des Gitters und Symmetrieeigenschaften der Basis
 - Symmetrieeoperationen: Translation, Punktsymmetrie(Rotation, Spiegelung) und Kombinationen
 - * Diskrete Drehungen: Drehachse mit Zähligkeit n für Invarianz unter Drehungen um $\frac{2\pi}{n}$
 - Nur Zähligkeit $n \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$ erlaubt, da man mit anderer Zähligkeit die entsprechenden n -Ecke keine Fläche abdecken kann
 - Punktgruppe: Symmetriegruppe, die Gitterpunkte invariant lässt und einen Gitterpunkt in sich selbst überführt(nur Punktsymmetrien)
 - Raumgruppe: Symmetriegruppe, die Gitterpunkte invariant lässt(Punktsymmetrien + Translation)
- Klassifizierung von Gittertypen
 - Gitter mit kugelsymmetrischer Basis
 - * 7 Kristallsysteme(Punktgruppe): Ordne primitive Elementarzellen nach Rotationssymmetrie
 - * 14 Bravais-Gitter(Raumgruppe): Ordne Elementarzellen nach Rotations- und Translationssymmetrie
 - Gitter mit beliebiger Basis
 - * 32 Kristallklassen(Punktgruppe)
 - * 230 Raumgruppen
- Größen zur anschaulichen Beschreibung von Gittern
 - Packungsverhältnis: Verhältnis des von Atomen bedeckten Volumen zum Gesamtvolumen einer Elementarzelle
 - * Annahme: Radien der Atome so, dass benachbarte Atome sich berühren
 - Koordinationszahl: Zahl nächster Nachbarn eines Atoms
- Einfache Gitter: Kubisch, hexagonal
 - sc-Gitter(single cubic): 1 Gitterpunkt pro Elementarzelle
 - bcc-Gitter(body centered cubic): 2 Gitterpunkte pro Elementarzelle/zwei verschachtelte sc-Gitter
 - fcc-Gitter(face centered cubic): 4 Gitterpunkte pro Elementarzelle/vier verschachtelte sc-Gitter
 - hcp-Gitter(hexagonal close packed): Wie fcc mit Stapelfolge ABAB statt ABCABC

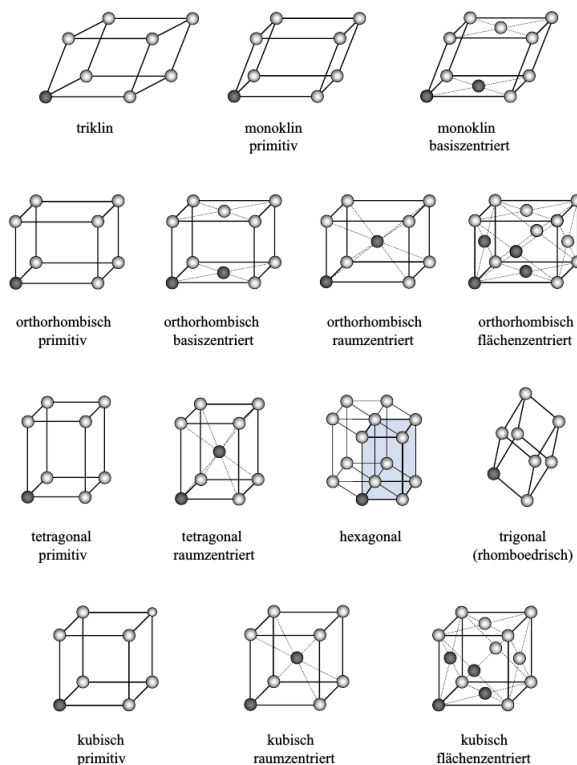
1.3.2 Reziprokes Gitter

- Reziprokes Gitter: Alle Punkte \vec{G} , für die \vec{r} in $e^{i\vec{G}\vec{r}} = 1$ ein Gitterpunkt im Ortsraum ist
 - Reziprokes Gitter besteht aus Gittervektoren $\vec{G}_{\vec{h}} = \sum_i h_i \vec{b}_i$ (Translationssymmetrie) mit Basisvektoren des reziproken Gitters \vec{b}_i und $h_i \in \mathbb{Z}$
 - Kubisches Gitter: Bestimme Basisvektoren des reziproken Gitters aus Basisvektoren des Gitters, beispielsweise $\vec{b}_i = \frac{2\pi}{V_Z} \epsilon_{ijk} \vec{a}_j \vec{a}_k$ mit $V_Z = \epsilon_{ijk} \vec{a}_i \vec{a}_j \vec{a}_k$ (Bedingung: $\vec{a}_i \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$)
 - Reziproker Gitterpunkt(Impulsraum) entspricht Schar von Gitterebenen im Ortsraum mit Normalenvektor $\vec{n}_{\vec{h}} = \sum_i h_i \vec{b}_i$
- 1. Brillouin-Zone: Fouriertransformierte der Wigner-Seitz-Zelle
 - Kann auch Elementarzellen und primitive Elementarzellen für das reziproke Gitter definieren, ist aber nicht anschaulich
 - Konstruktion von Brillouin-Zonen im reziproken Gitter genauso wie für Wigner-Seitz-Zellen im Ortsgitter
 - n te Brillouin-Zone: Bereich, der von genau $n - 1$ Flächen relativ zum Gitterpunkt eingeschlossen ist
 - * Höhere Brillouin-Zonen bestehen aus vielen einzelnen Teilen, die aber dasselbe Volumen wie die 1. Brillouin-Zone einnehmen

Kristallsystem	Gitterkonstanten	Winkel	Zähligkeit
triklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	1
monoklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	2
orthorhombisch	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2 (zwei)
tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	4
hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	6
trigonal (rhomboedrisch)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	3
kubisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3 (vier)

Kristallsystem	Nr.	Gittersymbol	Kristallachsen und -winkel
kubisch	3	P (sc), I (bcc), F (fcc)	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonal	2	P, I	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
orthorhombisch	4	P, C, I, F	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
monoklin	2	P, I	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
triklin	1	P	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$
trigonal (rhomboedrisch)	1	R	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
hexagonal	1	P	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Kristallsysteme. Falls es mehrere Drehachsen gibt wird deren Zahl in Klammern nach der Zähligkeit angegeben. Anzahl von Bravais-Gittern pro Kristallsystem in zweiter Tabelle. Bezeichnungen: Primitiv(P), innen-zentriert(I), flächenzentriert(F), basiszentriert(C), rhomboedrisch(R)



Bravais-Gitter

- Reziprokes Gitter für einfache Gitter
 - bcc-Gitter und fcc-Gitter werden durch Fouriertransformation ineinander umgewandelt
 - scc-Gitter wird durch Fouriertransformation in sich selbst umgewandelt
- Millersche Indizes zur Benennung von Gitterebenen im Ortsraum
 - Millersche Indizes (h, k, l) entsprechen Indizes des reziproken Gitters (h_1, h_2, h_3)
 - * Millersche Indizes nur sinnvoll für kubische Kristallsysteme (Basisvektoren senkrecht aufeinander)
 - * Beschreibe Ebenen mit Normalenvektor $\vec{n}_{h,k,l} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$
 - Durchstoßmethode zur Bestimmung der Millerschen Indizes
 1. $c_i = \frac{1}{a_i}$ für eine Achse mit Achsenabschnitt a_i
 2. Multipliziere alle c_i mit kleinster Zahl p , sodass $c_i p \in \mathbb{N}$ ist \Rightarrow Millersche Indizes $h_i = c_i p$
 - Minimaler Abstand zwischen Ebenen (h, k, l) ist $d = \frac{2\pi}{|\vec{n}_{h,k,l}|}$
 - Millersche Indizes für kubische Kristallsysteme
 - * Basisvektoren für primitive Elementarzelle \Rightarrow Alles funktioniert
 - * Basisvektoren für Bravais-Gitter-Elementarzelle \Rightarrow Benötige Auswahlregeln, da nicht alle Millerschen Indizes reziproken Vektoren entsprechen
 - bcc-Gitter: $h + k + l$ muss gerade sein, fcc-Gitter: h, k, l müssen alle gerade oder alle ungerade sein

1.3.3 Strukturbestimmung

- Matricelement für Streuung $\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \frac{1}{V} \left(\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}} \right) \left(\int_{EZ} d^3x e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}} V(\vec{x}) \right)$
 - Übergangsrate folgt mit Fermis goldener Regel $\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}})$
 - Erster Term beschreibt Interferenz verschiedener Gitterpunkte
 - Zweiter Term (Strukturfaktor) beschreibt Interferenz in der Elementarzelle
- 1. Matricelement in Ortsdarstellung $\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} V(\vec{r})$

2. Zerlegung $\vec{r} = \vec{R} + \vec{x}$ mit Gittervektor \vec{R} und Position \vec{x} in der Elementarzelle

$$- \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{R}} \int_{EZ} d^3x e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R} + \vec{x})} V(\vec{x} + \vec{R}) = \frac{1}{V} \left(\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{R}} \right) \left(\int_{EZ} d^3x e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{x}} V(\vec{x}) \right)$$

• Streubedingung

- Anschaulich: Konstruktive Interferenz nur für bestimmte Einfallswinkel
- Bragg- und Laue-Bedingung sind äquivalent
- Laue-Bedingung(Impulsraum) $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$ mit Vektor \vec{G} des reziproken Gitters

* Folgt aus Term $\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{R}}$ im Matricelement

- Für $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$ kann man Definition $e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1$ des reziproken Gitters verwenden und der Term liefert einen maximalen Beitrag(konstruktive Interferenz)
- Für $\vec{k}' - \vec{k} \neq \vec{G}$ gibt es keine konstruktive Interferenz mit dem Gitter und der Term mittelt sich für ein ideales Gitter weg

* Anschaulich: Ewald-Kugel

- Ewald-Kugel: Kugel mit Wellenvektor der einfallenden Strahlung als Radius
- Lege reziprokes Gitter so hinter die Kugel, dass am Schnittpunkt vom Wellenvektor des einfallenden Strahls mit der Kugeloberfläche ein Punkt des reziproken Gitters liegt
- Alle anderen Punkte des reziproken Gitters, die auf der Kugeloberfläche liegen, erfüllen die Streubedingung $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$

- Bragg-Bedingung(Ortsraum) $n\lambda = 2d \sin \theta$

* Optische Überlegung: Einfallswinkel θ zur Gitterebene \Rightarrow Konstruktive Interferenz von an verschiedenen Gitterebenen gestreuten Strahlen, falls der zusätzliche Weg $2d \sin \theta$ ein Vielfaches der Wellenlänge ist

• Strukturfaktor $S_{hkl} = \int_{EZ} d^3x e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{x}} V(\vec{x})$

- Nur interessant, wenn die Laue-Bedingung $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}_{hkl}$ erfüllt ist
- Modell: Streuung an punktförmigen Dingen(Atom/Atomkern) in der Elementarzelle $V(\vec{x}) = \sum_j f_j \delta(\vec{x} - \vec{x}_j)$ mit Atomen j an Position \vec{x}_j und mit Formfaktor $f_j \Rightarrow$ Finde Strukturfaktor $S_{hkl} = \sum_j f_j e^{i\vec{G}_{hkl}\vec{x}_j}$
- Modell gut für Neutronen, schlecht für Photonen und Elektronen(EM-WW)
 - * Neutronen wechselwirken auf kleiner Skala mit dem Kern, daher sind ihre Formfaktoren nicht \vec{G}_{hkl} -abhängig
 - * Photonen und Elektronen wechselwirken auf ganzem Atombereich, daher sind ihre Formfaktoren evtl stark von \vec{G}_{hkl} abhängig

• Debye-Waller-Faktor $D_{hkl} \approx e^{-\frac{1}{6}G_{hkl}^2 \langle u^2 \rangle}$

- Anschaulich: Thermische Bewegung von Atomen verringert Höhe der Intensitätsmaxima($\langle u^2 \rangle \propto T$)

1. Berücksichtige thermische Auslenkung $\vec{u}(t)$ im Strukturfaktor(Modell Punktwechselwirkung)

$$\sum_i f_i \langle e^{-i\vec{G}_{hkl}(\vec{r}_i + \vec{u})} \rangle = \left(\sum_i f_i e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{r}_i} \right) \langle e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{u}} \rangle$$

2. Entwickle e-Funktion $\langle e^{-i\vec{G}_{hkl}\vec{u}} \rangle \approx 1 - i\langle \vec{G}_{hkl}\vec{u} \rangle - \frac{1}{2}\langle (\vec{G}_{hkl}\vec{u})^2 \rangle \approx 1 - \frac{1}{2}G_{hkl}^2 \langle u^2 \rangle \langle \cos^2 \theta \rangle \approx 1 - \frac{1}{6}G_{hkl}^2 \langle u^2 \rangle$

- Für unabhängig schwingende Atome keine Vorzugsrichtung $\langle \vec{G}_{hkl}\vec{u} \rangle = 0$

- Skalarprodukt $\langle (\vec{G}_{hkl}\vec{u})^2 \rangle = G_{hkl}^2 \langle u^2 \rangle \langle \cos^2 \theta \rangle$ und $\langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{3}$

3. Umschreiben in Exponentialfunktion $1 - \frac{1}{6}G_{hkl}^2 \langle u^2 \rangle \approx e^{-\frac{1}{6}G_{hkl}^2 \langle u^2 \rangle}$

1.3.4 Experimentell: Elastische Streuung zur Strukturbestimmung

• Idee: Messe Streuwinkel und Streuintensität in elastischer Streuung mit Photonen(Rayleigh-Streuung) \Rightarrow Bestimme Gittertyp und Gitterabstände über Strukturfaktor

- Theorie: Intensität $I_{hkl} \propto M_{hkl} |S_{hkl}|^2$ mit Strukturfaktor $S_{hkl} = \sum_j f_j e^{i\vec{G}_{hkl}\vec{x}_j}$ und Multiplizität M_{hkl} der Ebenenschar

- Messe Intensitäten verschiedener Interferenzmaxima und schließe auf Gittertyp und Gitterabstände
- Photon-Streuung
 - Röntgenstrahlung(keV) ist im günstigen Energiebereich
 - Laue-Verfahren
 - * Strahlung mit kontinuierlichem Spektrum und fester Richtung
 - * Messe Punktmuster in der Detektorebene \Rightarrow Jeder Punkt für eine Ebenenschar
 - * Anwendung: Kristallsymmetrie bestimmen, Einkristall ausrichten, unpraktisch für Strukturbestimmung
 - Drehkristall-Verfahren
 - * Monochromatische Strahlung auf sich drehenden Kristall
 - * Messe Intensitätsmuster mit festem Detektor \Rightarrow Jeder Peak für eine Ebenenschar
 - * Anwendung: Strukturbestimmung
 - Debye-Scherrer-Verfahren
 - * Monochromatische Strahlung aus fester Richtung auf Kristallpulver(alle Ausrichtungen gleichzeitig)
 - * Strahlen mit konstruktiver Interferenz liegen auf einem Kegelmantel
 - * Anwendung: Strukturbestimmung
- Elektron-Streuung
 - keV-Elektronen sind im günstigen Energiebereich
 - Wechselwirkung mit Hüllenelektronen und Atomkern im Atom-Formfaktor berücksichtigen
 - Elektronen haben geringe Reichweite in Materie \Rightarrow Elektron-Streuung gut für Untersuchung von Oberflächen oder dünnen Schichten
- Neutron-Streuung
 - Thermische Neutronen(eV) sind im günstigen Energiebereich
 - Ausschließliche Wechselwirkung mit Atomkern im Atom-Formfaktor berücksichtigen
 - Neutronen haben großen Wirkungsquerschnitt für Streuung an H-Atomen \Rightarrow Gut für organische Systeme
 - Neutronen haben magnetisches Moment \Rightarrow Kann auch magnetische Eigenschaften untersuchen

1.3.5 Experimentell: Mößbauer-Effekt

- Anschaulich: Quasi-rückstoßfreie Emission von Photonen für Atome im Festkörper ermöglicht Resonanzabsorption
 - Photon-Emission eines freien Atoms
 - * Energie-Impuls-Erhaltung \Rightarrow Atom erhält Rückstoßenergie $\frac{E_\gamma^2}{2mc^2}$
 - * Emittiertes Photon bekommt wegen Rückstoßenergie nicht volle Anregungsenergie des Atoms \Rightarrow Resonanzabsorption des Photons durch anderes Atom nicht möglich
 - Photon-Emission eines Atoms im Gitter
 - * Energie-Impuls-Erhaltung erfüllt durch Phonon-Emission(analog zum Rückstoß)
 - * Besonderheit: Phononimpuls wird wegen Kristallimpuls-Periodizität nicht größer als $\frac{\pi}{a}$ mit Gitterkonstante $a \Rightarrow$ Für große Photonenergien ist Phononimpuls vernachlässigbar
- Mößbauer-Spektroskopie
 - Idee: Mit Resonanzabsorption können Spektrallinien sehr genau vermessen werden, da die Interferenzmaxima schärfer sind
 - Anwendung in Kernspektroskopie(Untersuchung der Energieniveaus von Kernen), da Energieniveaus hier hoch genug sind

1.4 Strukturelle Defekte

1.4.1 Entstehung von Defekten

- Schnelles Abkühlen mit Phasenübergang flüssig/fest (Frieren Unordnung der Flüssigkeit ein)
- Temperaturerhöhung (hohe thermische Energie)
- Beschuss mit hochenergetischen Teilchen
- Plastische Verformung

1.4.2 Klassifizierung von Defekten

- Punktdefekte
 - Leerstelle: Fehlendes Atom auf regulärem Gitterplatz
 - * Schottky-Defekt: Zwei Leerstellen nebeneinander in einem zweiatomigen Gitter
 - * Frenkel-Defekt: Leerstelle und Zwischengitteratom vom gleichen Atomtyp nebeneinander
 - Zwischengitteratom: Zusätzliches Atom auf einem irregulären Gitterplatz
 - Fremdatom: Falsches Atom auf regulärem Gitterplatz
 - Farbzentrum: Defekt, der zu charakteristischer Absorption von sichtbarem Licht führt
 - * Bsp F-Zentrum: Elektron an einem Platz für ein negativ geladenes Ion
 - Punktdefekte können sich durch das Gitter bewegen wegen E -Feld oder Konzentrationsgradient
- Ausgedehnte Defekte
 - Versetzung: Zwei Teile des Gitters entlang einer Linie versetzt
 - Korngrenze: Chaos bei der Verbindung von Kristallen unterschiedlicher Orientierung

Kapitel 2

Gitterdynamik

2.1 Grundlagen

2.1.1 Grundbegriffe Schwingungen

- Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Schwingung
 - Phasengeschwindigkeit $v_P = \frac{\omega}{q}$ ist Geschwindigkeit ebener Wellen
 - * Kann jede Schwingung in ebene Wellen zerlegen
 - Gruppengeschwindigkeit $v_G = \frac{\partial \omega}{\partial q}$ ist Geschwindigkeit der gesamten Welle
 - * Entspricht Gruppengeschwindigkeit für lineare Dispersionsrelation
- Polarisation von Schwingungen
 - Longitudinale Polarisation: Schwingung entlang der Ausbreitungsgeschwindigkeit
 - Transversale Polarisation: Schwingung senkrecht zur Ausbreitungsgeschwindigkeit
 - * Schwingung in 2 Dimensionen \Rightarrow Zerlegung in lineare oder zirkulare Polarisation
 - Ausbreitungsgeschwindigkeiten für longitudinale Schwingungen höher als für transversale Schwingungen

2.1.2 Elastische Schwingungen

- Elastische Schwingung: Schwingung auf Skala deutlich größer als atomare Abstände
 - Auf großen Skalen spielt der atomare Aufbau keine Rolle
 - Große Skala entspricht großer Wellenlänge/geringer Energie
- Lineare Rückstellkraft $\sigma_{ij} = c_{ijkl} e_{kl}$
 - Lineare Rückstellkraft für kleine Auslenkungen
 - Spannungstensor σ_{ij} ist Kraft pro Fläche
 - * Erster Index für Kraftrichtung, zweiter Index für Orientierung der Fläche
 - * Spannungstensor ist symmetrisch $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, da es im Gleichgewicht Gegenkräfte gibt
 - Dehnungstensor e_{ij}
 - * Zusammenhang zwischen Translation $\Delta \vec{r}$ und Verformung $\Delta \vec{u}$ ist $\Delta u_i = \frac{\partial u_i}{\partial r_j} \Delta r_j \Rightarrow$ Definition
$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right)$$
 - * Dehnungstensor ist symmetrisch $e_{ij} = e_{ji}$, da eine Rotation keine Deformation ist
 - Elastizitätstensor c_{ijkl} beschreibt Einfluss von Dehnung auf Spannung
 - * Eigenschaften: $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk}$ aus Eigenschaften von σ_{ij}, e_{kl} , $c_{ijkl} = c_{klij}$ aus Zusammenhang von Elastizitätsenergie und Deformation
 - Elastizitätskoeffizienten s_{ijkl} in Umkehrung $e_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}$

- Voigt-Notation $1 := xx, 2 := yy, 3 := zz, 4 := yz, 5 := zx, 6 := xy$ berücksichtigt Symmetrien
- Bewegungsgleichung für Schallwellen $\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j} = \sum_{jkl} c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial r_j \partial r_k}$ mit Dichte ρ
 - Erweitere 1D-Rückstellkraft auf mehrere Dimensionen durch Elastizitätstensor
 - Finde lineare Dispersionsrelation $\omega = vk$ für alle Schwingungstypen

2.2 Gitterschwingungen

2.2.1 Grundlagen

- Schwingungen in Symmetrierichtungen
 - Symmetrierichtung bedeutet Richtung des Normalenvektors einer Ebenenschar bzw. eines reziproken Gittervektors
 - Kann Schwingung als lineare Kette beschreiben, da Kräfte senkrecht zur Auslenkung sich kompensieren
 - Schwingungen sind rein longitudinal oder rein transversal
- Schwingungen in beliebigen Richtungen(nicht weiter untersucht)
 - Kräfte heben sich nicht aus Symmetriegründen aus \Rightarrow Kräfte auf Atome wirken nicht parallel(longitudinale Schwingung) oder senkrecht(transversale Schwingung) zur Ausbreitungsrichtung der Schwingung
 - * Kann Schwingung nicht als lineare Kette beschreiben
 - Schwingungen sind quasi-longitudinal oder quasi-transversal, je nachdem welcher Schwingungstyp überwiegt
- Harmonische Näherung
 - Nähere Potential der Ionen als quadratisch \Rightarrow Harmonische Wechselwirkung(lineare Rückstellkraft)
- Phononen: Energiequanta $\hbar\omega_s(\vec{q})$ von Gitterschwingungen
 - Quantenmechanik liefert Energieniveaus $E_n = \hbar\omega_s(\vec{q})(n_{\vec{q},s} + \frac{1}{2})$ für jede Schwingungsmode (\vec{q}, s)
- Reduktion auf 1. Brillouin-Zone/Alias-Effekt
 - Aussage: Gitterschwingungen haben $q \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, da $q \rightarrow q + \frac{2\pi}{a}z$ mit $z \in \mathbb{Z}$ die Physik invariant lässt
 - * Folgerung: Phononen haben maximalen Impuls $q_{\max} = \frac{\pi}{a}$
 - Begründung: Wellenverlauf zwischen Atomen nicht sinnvoll, nur Auslenkungen bei den Atomen selbst
 - * Kein physikalischer Unterschied zwischen einer Periode und mehr als eine Periode zwischen benachbarten Atomen
 - Andere Formulierung: Phononen haben Kristallimpuls \vec{q} , der invariant unter $\vec{q} \rightarrow \vec{q} + \vec{G}$ ist mit einem Vektor \vec{G} des reziproken Gitters

2.2.2 Einatomige Basis

- Wechselwirkung mit beliebig vielen Nachbarn $\omega = \frac{2}{\sqrt{M}} \sqrt{|\sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin^2 \frac{qna}{2}|}$
 - Anschaulich: Wechselwirkung mit entfernten Nachbarn führt zu zusätzlichen Maxima innerhalb der 1. Brillouin-Zone
- 1. Bewegungsgleichung $F_s = M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_{n \in \mathbb{N}} C_n (u_{s+n} - u_s)$ mit Atommasse M , Kraftkonstanten C_n
- 2. Ansatz $u_{s+n} = Ae^{-i(\omega t - q(s+n)a)} \Rightarrow M\omega^2 = \sum_{n \in \mathbb{N}} C_n (1 - e^{iqna})$
- 3. Beschränkung auf $n > 0$ liefert Dispersionsrelation $\omega^2 = \frac{4}{M} \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin^2 \frac{qna}{2}$ mit $C_n = C_{-n}$
- Spezialfall: Wechselwirkung mit nächsten Nachbarn $\omega = 2\sqrt{\frac{C_1}{M}} |\sin \frac{qa}{2}|$

- Nächste Nachbarn sind gute Näherung für Molekül- und Edelgaskristalle, bei Metalle sind auch entfernte Nachbarn wichtig
- Langwelliger Grenzfall $q \rightarrow 0$: Lineare Dispersionsrelation $\omega = vq$
 - $\omega = \frac{2}{\sqrt{M}} \sqrt{|\sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin^2 \frac{qna}{2}|} \approx \frac{qa}{\sqrt{M}} \sqrt{|\sum_{n=1}^{\infty} C_n n^2|}$
 - Benachbarte Atome schwingen gleichphasig wegen $qa = 0$
- Kurzwelliger Grenzfall $q \rightarrow \pm \frac{\pi}{a}$: Konstante Dispersionsrelation $\omega = va$
 - Benachbarte Atome schwingen gegenphasig wegen $qa = \pm \pi$
 - Wellen mit $q = \pm \frac{\pi}{a}$, $\lambda = 2a$ sind stehende Wellen ($v_G = 0$)

2.2.3 Mehratomige Basis

- Optische und akustische Schwingungen
 - Akustische Schwingungen $\omega(0) = 0$: Gleichphasigen Schwingungen der Untergitter
 - * Anregungen durch Schallwellen $\omega = c_s k$, da deren Dispersionsrelation Schnittpunkte mit der von akustischen Schwingungen hat
 - * An Schnittpunkten der Dispersionsrelationen gilt Energie- und Impulserhaltung
 - Optische Schwingungen $\omega(0) \neq 0$: Gegenphasigen Schwingungen der Untergitter
 - * Anregung durch Photonen $\omega = c_L k$, da deren Dispersionsrelation Schnittpunkte mit der von optischen Schwingungen hat
 - Andere Perspektive: Erweitertes Brillouin-Zonen-Schema
 - * Akustische Schwingungen in erster Brillouin-Zone
 - * Optische Schwingungen in höheren Brillouin-Zonen als Fortsetzung der Schwingung in der ersten Brillouin-Zone
 - Abweichung vom Verlauf für einatomige Basis durch unterschiedliche Atommassen
 - Basis mit p Atomen in 3D hat $3p$ Zweige: 3 akustische und $3(p-1)$ optische
- Wechselwirkung nächster Nachbarn für Zweiatomige Basis
 1. Bewegungsgleichungen $M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s)$, $M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_s + u_{s+1} - 2v_s)$
 - Kräfte proportional zu den Auslenkungen $v_s - u_2, v_{s-1} - u_s$ zwischen verschiedenen Atomtypen
 2. Ansatz $u_s = U e^{-i(\omega t - qsa)}$, $v_s = V e^{-i(\omega t - qsa)} \Rightarrow \omega^2 = C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{qa}{2}} \right)$
 - Einsetzen liefert $(2C - \omega^2 M_1)U - C(1 + e^{-iqa})V = 0$, $-C(1 + e^{iqa})U + (2C - \omega^2 M_2)V = 0$, eliminiere Koeffizienten U, V und löse quadratische Gleichung in ω
 - Negatives Vorzeichen liefert akustischen Zweig ($\omega(0) = 0$), positives Vorzeichen liefert optischen Zweig ($\omega(0) \neq 0$)
 - Bandlücke für $M_1 \neq M_2$: Bereich von ω zwischen optischem und akustischem Zweig, in dem keine Eigenschwingungen des Gitters liegen

2.2.4 Zustandsdichte von Phononen

- Anschaulich: Anzahl der Eigenschwingungen durch endliche Ausdehnung des Kristalls beschränkt
 - Eigenschwingung k hat konstante Zustandsdichte $\rho(k) = \frac{V}{(2\pi)^3}$, Energie ω hat nicht-triviale Zustandsdichte $\rho(\omega)$
- Für invertierbares $\omega(p)$ gilt $\rho(\omega) = \frac{\Omega_d}{h^d} \left(p(\omega) \right)^{d-1} \left| \frac{\partial p}{\partial \omega} \right|$
- Van-Hove-Singularität in der Zustandsdichte bei $v_G = \frac{\partial \omega}{\partial q} = 0$

- Formal: Singularität folgt aus $\rho(\omega) \propto \left| \frac{\partial \omega}{\partial q} \right|^{-1}$
- Anschaulich: Beliebige Zustände für bestimmte Energien, da Gruppengeschwindigkeit der entsprechenden Schwingungen verschwindet und diese Schwingungen daher den Kristall nicht verlassen
 - * Echte Singularität für eindimensionales System
 - * Keine Singularitäten für mehrdimensionales System, sondern Maxima, Minima, Sattelpunkte (andere Rechnung nötig)

2.2.5 Experimentell: Bestimmung von Phonon-Dispersionsrelationen

- Inelastische Streuung an Phononen
 - Energie- und Impulserhaltung $E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} = \pm \hbar \omega(\vec{q})$, $\vec{k}' - \vec{k} = \pm \vec{q}$
 - * Inelastische Streuung (Energieänderung) \Rightarrow Phonon wird erzeugt oder vernichtet
 - Idee: Messe $E_{\vec{k}'}, E_{\vec{k}}, \vec{k}', \vec{k}$ und bestimmt damit $\omega(\vec{q})$
- Neutron-Streuung
 - Wellenlänge von thermischen Neutronen hat Größenordnung von Gitterabständen
 - Aufbau: Dreiachsenspektrometer (selektiere Photonen durch Streuung)
 - Verbesserung: Gepulste Neutronenquelle
- Photon-Streuung (Elektron-Streuung ähnlich)
 - Kann Photonen mit Wellenlänge im Bereich von Gitterabständen wählen, habe für kleine Wellenlängen aber geringen Energieübertrag (schlecht messbar)
 - Streuung mit Photonen im sichtbaren Bereich
 - * Photonen haben geringe Energie, daher sind Energieverschiebungen gut messbar
 - Kann Dispersionsrelation nur im Bereich etwa $-10^{-3} < \frac{qa}{\pi} < 10^{-3}$ vermessen
 - * Brillouin-Streuung: Photon-Streuung an akustischen Phononen \Rightarrow Hohe Energieauflösung nötig
 - * Raman-Streuung: Photon-Streuung an optischen Phononen \Rightarrow Geringe Energieauflösung nötig

2.3 Spezifische Wärmekapazität

2.3.1 Spezifische Wärmekapazität durch Gitterschwingungen

- Definition der spezifischen Wärmekapazität
 - Wärmekapazität bei konstantem Volumen $c_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V$ (theoretisch gut zugänglich)
 - Wärmekapazität bei konstantem Druck $c_p = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_p$ (experimentell gut zugänglich)
 - Zusammenhang $c_p - c_V = 9 \frac{\alpha^2}{\kappa} VT$
 - * $c_p - c_V$ groß bei Gasen und klein bei Festkörpern \Rightarrow Für Festkörper $c_p \approx c_V$
- Allgemeine Rechnung
 1. Gitterschwingungen sind harmonische Oszillatoren $E_{k,s} = \hbar \omega_s(k) (n_{k,s} + \frac{1}{2})$ mit Bose-Besetzungszahl $n_{k,s} = (e^{\beta \hbar \omega_s(k)} - 1)^{-1}$
 2. Spezifische Wärmekapazität pro Mode $C_{k,s} = \frac{\partial E_{k,s}}{\partial T} = k_B (\beta \hbar \omega_s(k))^2 \frac{e^{-\beta \hbar \omega_s(k)}}{(1 - e^{-\beta \hbar \omega_s(k)})^2}$
 3. Gesamte Spezifische Wärmekapazität $C = \sum_{k,s} C_{k,s} = k_B \sum_s \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k (\beta \hbar \omega_s(k))^2 \frac{e^{-\beta \hbar \omega_s(k)}}{(1 - e^{-\beta \hbar \omega_s(k)})^2}$
 4. Integriere nur über Phononen in der ersten Brillouin-Zone $k \leq k_D = \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{N}{V}}$
 - Begründung: Reduktion auf 1. Brillouin-Zone
 - Maximaler Wellenvektor k_D bestimmen: $N = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k \leq k_D} d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k_D^3}{3}$

- Präfix Debye- für Größen ausgewertet am Rand der Brillouin-Zone

- Schwierigkeit: Integral lösen für gegebene Dispersionsrelationen

- Modell optische Phononen $\omega_s(k) = \omega_{\text{opt}} \Rightarrow c_V = 3k_B(\beta\hbar\omega_{\text{opt}})^2 \frac{e^{-\beta\hbar\omega_{\text{opt}}}}{(1-e^{-\beta\hbar\omega_{\text{opt}}})^2} N = 3k_B N \left(\frac{T_D}{T}\right)^2 \frac{e^{-T_D/T}}{(1-e^{-T_D/T})^2}$
für 3 Polarisationen mit Temperaturäquivalent $T_D = \frac{\hbar\omega_{\text{opt}}}{k_B}$

- $T \ll T_D: c_V \propto e^{-T_D/T} \rightarrow 0$

- * $(1 - e^{-T_D/T})^2 \approx 1, \left(\frac{T_D}{T}\right)^2 e^{-T_D/T} \approx e^{-T_D/T}$

- $T \gg T_D: c_V = 3k_B N$

- * Entwickle $e^{-T_D/T} \approx 1 - \frac{T_D}{T}$ für $\frac{T_D}{T} \ll 1$

- Modell akustische Phononen $\omega_s(k) = ck \Rightarrow c_V = 3k_B \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_D} dk k^2 (\beta\hbar ck)^2 \frac{e^{-\beta\hbar ck}}{(1-e^{-\beta\hbar ck})^2}$
 $= 9k_B N \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \int_0^{T_D/T} du \frac{u^4 e^{-u}}{(1-e^{-u})^2}$ für 3 Polarisationen mit Temperaturäquivalent $T_D = \frac{\hbar ck_D}{k_B} = \frac{\hbar c}{k_B} \sqrt{6\pi^2 \frac{N}{V}}$

- $T \ll T_D: c_V = \frac{12\pi^4}{5} k_B N \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \propto T^3$

- * Nehme vernachlässigbaren Beitrag durch $u > \frac{T_D}{T}$ im Integral dazu, um das Integral $\int_0^\infty du \frac{u^4 e^{-u}}{(1-e^{-u})^2} = \frac{4\pi^4}{15}$ benutzen zu können

- $T \gg T_D: c_V = 3k_B N$

- * Entwickle Integrand für $u < \frac{T_D}{T} \ll 1: \int_0^{T_D/T} du \frac{u^4 e^{-u}}{(1-e^{-u})^2} \approx \int_0^{T_D/T} du u^2 = \frac{1}{3} \left(\frac{T_D}{T}\right)^3$

- Ehrliche Rechnung: Benutze realistische Zustandsdichte und berechne Integrale numerisch

2.3.2 Historische Entwicklung

- Boltzmann-Modell(1896)
 - Ziel: Erkläre Dulong-Petit-Gesetz $c_V = 3k_B N$
 - Modell: Gleichverteilungssatz $E_{\text{kin}} = E_{\text{pot}} = \frac{k_B T}{2}$ für kinetische und potentielle Energie \Rightarrow Für 3 Dimensionen $E = 3 \times 2 \times \frac{k_B T}{2} = 3k_B T$ und $c_V = 3k_B$
- Einstein-Modell(1907): Dispersionsrelation $\omega(k) = \omega_0$ und statistische Physik
 - Ziel: Erkläre exponentielle Abnahme von c_V für $T \rightarrow 0$
 - Beschreibt starken Abfall von c_V für $T \rightarrow 0$
- Debye-Modell(1912): Dispersionsrelation $\omega(k) = ck$ und statistische Physik
 - Beschreibt $c_V \propto T^3$ für tiefe Temperaturen
 - Probleme: $c_V \propto T$ für Metallen fehlt, Annahme $\omega = ck$ gilt nicht immer

2.3.3 Gesamte spezifische Wärmekapazität

- Beiträge durch Gitterschwingungen und Elektronenbewegung
- Große Temperaturen
 - $c_V = 3k_B N$ durch Gitterschwingungen
 - Beitrag durch Elektronen vernachlässigbar
- Kleine Temperaturen
 - $c_V \propto T$ durch Elektronenbewegung(dominant in Metallen, kleiner Effekt in anderen Festkörpern)
 - $c_V \propto T^3$ durch akustische Phononen

- Schottky-Anomalie
 - Anschaulich: Peak in c_V für kleines T , wenn Näherung als 2-Niveau-System gut ist
 - Erklärung: Wärmekapazität maximal, wenn thermische Energie für Anregung in nächsten Zustand passt
 - Statistische Mechanik liefert $c_V = Nk_B(\beta E)^2 \frac{e^{\beta E}}{(e^{\beta E} + 1)^2}$ für 2-Niveau-System mit Energieunterschied E

2.4 Anharmonische Gitterschwingungen

2.4.1 Anharmonische Gitterschwingungen

- Potential der Gitterschwingungen
 - Modelliere Gitter-Potential durch Lennard-Jones-Potential $V = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$
 - Kann Potential im Bereich des Minimums beliebig genau entwickeln
- Bedeutung anharmonischer Terme $V \approx V_0 + \alpha r^2 - \beta r^3 - \gamma r^4 + \dots$
 - $\beta \neq 0$ berücksichtigt Asymmetrie der Wechselwirkung
 - $\gamma \neq 0$ berücksichtigt Abschwächung der Schwingung bei großen Amplituden
 - Term $\propto r^n$ steht für n -Phononen-Prozess
- Kann DGLs mit Wechselwirkungstermen prinzipiell lösen, ist aber unübersichtlich

2.4.2 Thermische Ausdehnung

- Grundlagen
 - Thermischer Ausdehnungskoeffizient $\alpha_L = \frac{1}{L} \frac{\partial L}{\partial T} \Big|_p$
 - Volumenausdehnungskoeffizient $\alpha_V = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} \Big|_p$
 - * Für isotrope Festkörper $\alpha_V = 3\alpha_L$, da Dimensionen faktorisieren
- Mittlere thermische Ausdehnung $\langle r \rangle = \frac{\int dx x e^{-\beta V(x)}}{\int dx e^{-\beta V(x)}} = \frac{3\beta}{4\alpha^2} k_B T$ aus $V(r) = \alpha r^2 - \beta r^3$
 - Nur antisymmetrische Beiträge zu $V(r)$ beeinflussen thermische Ausdehnung

2.4.3 Wärmeleitfähigkeit

- Grundlagen
 - Wärmeleitfähigkeit κ in $\vec{j}_Q = -\kappa \vec{\nabla} T$ mit Wärmestrom \vec{j}_Q
 - * Minuszeichen, damit Wärme vom warmen zum kalten Ende der Probe fließt
 - Wärmeleitung ist kein Gleichgewichtsprozess
 - Wärmetransport durch Elektronen und Phononen
- Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit in Nichtleitern
 - Phonon-Defekt-Streuung für $T \ll T_D$
 - * Modell: Kinetische Gastheorie für Streuung eines Phonongases an Defekten $\Rightarrow \kappa \propto c_V \propto T^3$
 - Phonon-Phonon-Streuung für höhere Temperaturen
 - * Phonon-Phonon-Streuung nicht möglich in harmonischer Näherung
 - * Erwarte $\kappa \propto l \propto \frac{1}{\langle n \rangle} \propto e^{T_D/T} - 1 \approx \begin{cases} e^{T_D/T} & T \ll T_D \\ \frac{T_D}{T} & T \gg T_D \end{cases}$

Kapitel 3

Elektronendynamik

3.1 Freie Elektronen

3.1.1 Drude-Modell

- Klassisches Modell: Kinetische Gastheorie für Elektronengas
 - Ziel: Modell für Transporteigenschaften von Metallen
 - Atomrümpfe(Kerne und Rumpfelektronen) sind fest lokalisiert(adiabatische Näherung)
 - Valenzelektronen/Leitungselektronen sind alle gleichberechtigt und stoßen mit Atomrümpfen(falsch)
 - * Relaxationszeitnäherung: Stoß mit Atomkern bremst Elektron instantan auf $\vec{p} = 0$ ab
 - * Elektronen werden durch externe Kraft wieder beschleunigt
- Bewegungsgleichung $\partial_t \vec{p} + \frac{1}{\tau} \vec{p} = \vec{F}$ mit externer Kraft \vec{F}
 - Begründung: $\vec{p}(t + dt) = (1 - \frac{dt}{\tau})\vec{p}(t) + 0 \frac{dt}{\tau} \Rightarrow \partial_t \vec{p} = -\frac{1}{\tau} \vec{p}$ ohne externe Kraft
 - Term $-\frac{1}{\tau} \vec{p}$ wirkt wie Reibungskraft
- Fehler des Drude-Modells: Elektronen sind Fermionen und können deshalb nicht boltzmannverteilt sein
 - Boltzmannverteilung ist Grundannahme der kinetischen Gastheorie
 - * In Wirklichkeit sind Elektronen nicht alle im gleichen Zustand, sondern besetzen Niveaus nach Pauli-Prinzip
 - Zwei Fehler des Drude-Modells heben sich manchmal auf: In der Realität ist c_V viel kleiner(Faktor 100) und $\langle v^2 \rangle$ viel größer(Faktor 100)

3.1.2 Sommerfeld-Modell/Freies Fermigas

- Quantenmechanik-Modell: Freies Elektronengas
 - Elektronen sind Fermionen mit Verteilungsfunktion $n(\beta(E - \mu)) = \frac{1}{e^{\beta(E - \mu)} + 1}$ und nichtrelativistischer Dispersionsrelation $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ in einem Potential $V = 0$
 - * Potential $V = V_0$ mit konstantem V_0 liefert selbes Ergebnis mit verschobenen Energieniveaus
 - Spezifische Wärme und Transporteigenschaften besser als im Drude-Modell, aber nicht optimal
- Fermi-Fläche
 - Fläche $E(\vec{k}) = E_F = \mu(0)$ im Impulsraum, bis zu der im Grundzustand Elektron-Zustände \vec{k} besetzt sind
- Spezifische Wärmekapazität $c_V \approx \frac{\pi^2}{3} V \rho(\omega) k_B^2 T = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} \propto T$
 - Interpretation: Elektronbewegung verursacht Beitrag $c_V \propto T$ zusätzlich zu den Beiträgen durch Gitterschwingungen

1. Zustandsdichte $\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}^3 \sqrt{\omega}$
 2. Spezifische Wärmekapazität $c_V = \frac{\partial}{\partial T} (U - \mu N)$
 - Ziel: Berechne $c_V(T, V, \mu) = T \frac{\partial S(T, V, \mu)}{\partial T}$ in Variablen des großkanonischen Potentials (T, V, μ)
 - Problem: $T \frac{\partial S(T, V, \mu)}{\partial T}$ über bekanntes Potential $U(T, V, \mu)$ ausdrücken
 - $\frac{\partial U(T, V, \mu)}{\partial T} = \frac{\partial U}{\partial S} \frac{\partial S(T, V, \mu)}{\partial T} + \frac{\partial U}{\partial N} \frac{\partial N(T, V, \mu)}{\partial T} = T \frac{\partial S(T, V, \mu)}{\partial T} + \mu \frac{\partial N(T, V, \mu)}{\partial T} \Rightarrow c_V = T \frac{\partial S(T, V, \mu)}{\partial T} = \frac{\partial U(T, V, \mu)}{\partial T} - \mu \frac{\partial N(T, V, \mu)}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} (U - \mu N)$
 3. $c_V = V \int d\omega \rho(\omega) \frac{(\omega - \mu)^2}{k_B T^2} \frac{e^{\beta(\omega - \mu)}}{(e^{\beta(\omega - \mu)} + 1)^2} \approx V \rho(\mu) k_B^2 T \int dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{3} V \rho(\mu) k_B^2 T$
 - $U - \mu N = \sum_k n(k)(\omega(k) - \mu) = V \int d\omega \rho(\omega) n(\omega)(\omega - \mu)$
 - $c_V = \frac{\partial}{\partial T} (U - \mu N) = V \int d\omega \rho(\omega) \frac{(\omega - \mu)^2}{k_B T^2} \frac{e^{\beta(\omega - \mu)}}{(e^{\beta(\omega - \mu)} + 1)^2}$
 - Im Integral tragen nur Terme $\omega \approx \mu \pm k_B T$ bei, $\rho(\omega)$ ist für $\omega \approx \mu$ konstant \Rightarrow Ziehe $\rho(\omega)$ aus dem Integral
 - * Anschaulich: Thermische Anregungen nur in der Nähe der Fermifläche möglich
 - Benutze Integral $\int_{\mathbb{R}} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{3}$
- Anwendung des Modells
 - Freies Elektronengas ist gute Näherung für Alkalimetalle und Kupfer, Silber, Gold
 - * Hier nur s -Elektronen als Valenzelektronen
 - Keine gute Näherung für Übergangsmetalle
 - * Hier gibt es außer s -Elektronen auch d - und f -Elektronen
 - Probleme des Modells
 - Kann Größen für $T > 0$ nur numerisch berechnen, da Fermi-Verteilungsfunktion kompliziert ist
 - Vernachlässige Elektron-Elektron-Wechselwirkung \Rightarrow Besser in Landau-Fermi-Liquid-Theorie

3.2 Energiebänder durch periodisches Potential

3.2.1 Bloch-Theorem

- Aussage: Für $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ mit $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$ für einen Gittervektor \vec{R} hat man die Quantenzahl \vec{k} und Wellenfunktionen haben die Eigenschaft $\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{R}}$
 - Allgemein erfüllt durch Bloch-Funktion $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$ mit $u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$
 - Explizite Darstellung $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G}\vec{r}}$ mit Vektor des reziproken Gitters \vec{G} wegen $\vec{G}\vec{R} = 2\pi n$
- Reduktion auf die 1. Brillouin-Zone wegen $\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$
 - $\psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \left(\sum_{\vec{Q}} c_{\vec{k}+\vec{G}-\vec{Q}} e^{-i\vec{Q}\vec{r}} \right) e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} = \left(\sum_{\vec{Q}-\vec{G}} c_{\vec{k}-(\vec{Q}-\vec{G})} e^{-i(\vec{Q}-\vec{G})\vec{r}} \right) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$

3.2.2 Ungebundene Elektronen

- Modell: Vernachlässigbares periodisches Potential
- Dispersionsrelation $E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}+\vec{G}} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2$ mit Vektoren \vec{G} des reziproken Gitters
 - Anschaulich: Superposition aus Parabeln mit Ursprung bei $\vec{k} = -\vec{G}$
 - * 3D-Gitter: Dispersionsrelationen liegen auf Kugeln ausgehend von $\vec{k} = -\vec{G}$
 - * Eindimensionale Darstellung von 3D-Dispersionsrelationen durch Wege im reziproken Raum
 - Dispersionsflächen schneiden sich (Entartung) am Rand der Brillouin-Zone
 - * 3D-Gitter: Gitterkonstante a ist richtungsabhängig

3.2.3 Schwach gebundene Elektronen

- Modell: Kleine Störung durch periodisches Potential $V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$
 - Prinzipieller Verlauf der Dispersionsrelation gleich wie bei freien Elektronen
 - Finde Aufspaltung von sich kreuzenden Dispersionsrelationen am Rande der Brillouinzone wegen Entartung
- Dispersionsrelation hat Bandlücke am Rand der Brillouin-Zone \Rightarrow Energiebänder zwischen den Bandlücken
 1. Wechselwirkung $\langle \vec{k} | V | \vec{k} + \vec{G} \rangle = V_{-\vec{G}} = V_{\vec{G}}, \langle \vec{k} + \vec{G} | V | \vec{k} \rangle = V_{\vec{G}}, \langle \vec{k} | V | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k} + \vec{G} | V | \vec{k} + \vec{G} \rangle = 0$ zwischen benachbarten Zuständen $|\vec{k}\rangle, |\vec{k} + \vec{G}\rangle$
 - Näherung: Berücksichtige nur Wechselwirkung mit nächstem Atom $\Rightarrow \vec{G}$ ist kleinster reziproker Gittervektor in Richtung \vec{k}
 - * Eigentlich muss Wechselwirkung mit Zuständen $|\vec{k} + \vec{G}\rangle$ mit beliebigem \vec{G} berücksichtigt werden
 - Am Rand der Brillouin-Zone sind alle Energieniveaus $E_{\vec{k}+\vec{G}}$ mit $\vec{k} \parallel \vec{G}$ entartet
 - * In der verwendeten Näherung nur 2 entartete Energieniveaus
 2. Diagonalisiere Störung im entarteten Unterraum
 - Problem: Suche Eigenwerte und Eigenvektoren von $V_{\vec{G}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
 - Lösung: Eigenvektoren $|\vec{k}\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\vec{k}\rangle + |\vec{k} + \vec{G}\rangle)$ (symmetrisch), $|\vec{k}\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\vec{k}\rangle - |\vec{k} + \vec{G}\rangle)$ (antisymmetrisch), $V_{\pm} = \pm V_{\vec{G}}$
 3. Finde Bandlücke: Keine erlaubten Zustände zwischen $E_- = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_{\vec{G}}$ und $E_+ = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_{\vec{G}}$
- Dispersionsrelation in der Nähe des Rands
 - Stetiger Anschluss von Bandlücke an Verhalten weit entfernt vom Rand
 - Für kleine Abweichungen $k = \frac{n\pi}{a} \pm \delta$ gilt $E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \pm V_{\vec{G}} + \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \left(1 \pm \frac{\hbar^2}{m V_{\vec{G}}} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \right)$
 - * Diagonalisiere Energieniveaus für kleine Abweichungen $k = \frac{n\pi}{a} \pm \delta$ von der Entartung (Zustände sind noch näherungsweise entartet)
 - * Finde effektive Masse $m_{\pm}^* = \frac{m}{1 \pm \frac{\hbar^2}{m V_{\vec{G}}} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2}$ der Zustände
- Dispersionsrelation weit entfernt vom Rand
 - Keine Entartungen, daher verursacht periodisches Potential nur konstante Verschiebungen

3.2.4 Stark gebundene Elektronen

- Modell: Eindimensionales periodisches Potential $\tau^\dagger(a)V(r)\tau(a) = V(r+R) = V(r)$ und damit $[H, \tau(a)] = 0$ mit einem Minima von $V(r)$ in jedem Abschnitt
 - Definiere Grundzustände $|n\rangle$ der n ten Senke des Potentials durch $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$
 - Modell starker Bindung: $H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta(|n+1\rangle + |n-1\rangle)$
 - * Anschaulich: Wechselwirkung mit nächsten Nachbarn
- Energieband $E = E_0 - 2\Delta \cos \theta, \theta \in (0, 2\pi)$ mit $E \in (E_0 - 2\Delta, E_0 + 2\Delta)$
 1. Definiere geschickt $|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta} |n\rangle$ mit $\theta \in (0, 2\pi)$
 - Suche Eigenzustände von H und $\tau(a)$ wegen $[H, \tau(a)] = 0$ (nicht erfüllt durch $|n\rangle$)
 2. Eigenwertgleichungen der $|\theta\rangle$
 - $\tau(a)|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta} \tau(a)|n\rangle = \sum_n e^{in\theta} |n+1\rangle = \sum_n e^{i(n-1)\theta} |n\rangle = e^{-i\theta} |\theta\rangle$
 - $H|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta} H|n\rangle = \sum_n e^{in\theta} (E_0|n\rangle - \Delta(|n+1\rangle + |n-1\rangle)) = (E_0 - \Delta(e^{-i\theta} + e^{i\theta})) |\theta\rangle = (E_0 - 2\Delta \cos \theta) |\theta\rangle$

- Folgerungen aus dem Modell
 - Potentialstärke Δ nimmt mit zunehmendem Atomabstand ab
 - * Metall-Isolator-Übergang: Bei geringem Abstand zum Atom verschwinden Energiebänder
 - Quadratische Dispersionsrelation(vgl freies Elektron) für kleine k : $E_k = C + \Delta a^2 k^2$
 - * Finde effektive Masse $m^* = \frac{\hbar^2}{2\Delta a^2}$
 - * Problem symmetrisch in Elektronen und Löchern(gleiche Dispersionsrelation/Bandkrümmung)
 - Atom mit mehreren Orbitalen \Rightarrow Für jedes Orbital ein Band

3.2.5 Energiebänder

- Herleitung von Energiebändern
 - Entartete Störungstheorie liefert Bandlücken am Rand der Brillouin-Zone als kleine Abweichung von freien Elektronen
 - Exakte Rechnung liefert ein Band pro Ionen-Wechselwirkung
 - Ehrliche Rechnung: Schrödingergleichung numerisch lösen für realistisches Potential
- \vec{k} -Abhängigkeit der Energiebänder
 - Dispersionsrelationen sind Gleichungen $\Rightarrow \omega(\vec{k})$ fest
 - Dispersionsrelationen können sich nicht schneiden
 - * Jeder Schnittpunkt liegt an einer Brillouinzone, an der es eine Wechselwirkung mit Ionen gibt, die die Energiebänder trennt
 - In Anwendungen meist \vec{k} -Abhängigkeit unwichtig, daher spricht man von Energiebändern(\vec{k} -unabhängig)
 - Überlappung von Bändern im \vec{k} -Raum möglich
- Bandstruktur aus Eigenschaften der Gitteratome
 - Ein Energieband für jedes Orbital
 - Für N Gitteratome haben wegen möglichen Spinausrichtungen Bänder für s -Orbitale $2N$ Zustände, Bänder für p -Orbitale $6N$ Zustände etc
- Energiebänder füllen
 - Fermienergie E_F bestimmt durch Zustandsdichte(folgt aus Dispersionsrelation) und Elektronendichte
 - * Falls E_F in einer Bandlücke liegt, spielt genaue Position von E_F keine Rolle, da E_F nur von der Anzahl besetzter Zustände mit geringerer Energie abhängt
 - Im Grundzustand $T = 0$ sind alle Zustände $E < E_F$ besetzt
- Valenz- und Leitungsbänder
 - Valenzband: Oberstes vollständig besetztes Energieband
 - Leitungsband: Unterstes nicht vollständig besetztes Energieband
- Energieband im elektrischen Feld
 - Fermifläche verschiebt sich abhängig von \vec{E}
 - Leiter: Strom kann fließen, da Fermifläche sich verschieben kann(freie \vec{k} -Zustände)
 - Isolator: Strom kann nicht fließen, da Fermifläche sich nicht verschieben kann

3.2.6 Kategorisierung von Festkörpern nach Position der Fermienergie

- Leiter: Fermienergie innerhalb eines Energiebands
 - Spezialfall Halbmetall: Fermienergie innerhalb eines Energiebands mit Bänderüberlappung im \vec{k} -Raum
- Halbleiter: Fermienergie in einer kleinen Bandlücke $\Delta E < 4 \text{ eV}$
- Isolator: Fermienergie in einer großen Bandlücke $\Delta E > 4 \text{ eV}$

3.2.7 Experimentell: Bestimmung der Fermifläche

- Fermifläche wichtig für Transporteigenschaften und optische Eigenschaften
- Idee: Untersuche nur bestimmte Elektronen auf der Fermifläche
 - Kontrolliere Orientierung des Kristalls relativ zum äußeren Magnetfeld
- Zyklotron-Resonanz: Absorption von Mikrowellenstrahlung bei der Zyklotronfrequenz
 - Nur Elektronen auf der Fermifläche bewegen sich frei
 - Bestimme über Zyklotronfrequenz $\omega = \frac{eB}{m}$ die Zyklotron-Masse von Elektronen auf der Fermi-Fläche (nicht direkt die Fermifläche)
- De Haas-van Alphen-Effekt: Magnetisierung oszilliert bei geändertem Magnetfeld
 - Lage der Landau-Niveaus und damit Besetzung der Zustände und Orientierung der Spins ändert sich mit dem Magnetfeld
- Shubnikov-de Haas-Effekt: Elektrische Leitfähigkeit oszilliert bei geändertem Magnetfeld
 - Elektrischer Widerstand proportional zur Zustandsdichte an der Fermifläche, diese ist proportional zur Ableitung der Magnetisierung, Magnetisierung oszilliert wegen De Haas-van Alphen-Effekt

3.3 Transportphänomene

3.3.1 Elektronen und Löcher

- Besetzter(unbesetzter) Zustand oberhalb(unterhalb) der Fermifläche heißt Elektron(Loch)
 - Im Gegensatz zu freien Elektronen sind Elektronen und Löcher hier als Bindungszustände definiert
- Effektive Masse $m^*(k)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \right)^{-1}$
 - Idee: Nähere Dispersionsrelation $\omega(k) \approx \alpha k^2$ in der Nähe eines Extremums und definiere effektive Masse $m^* = \frac{\hbar^2}{2\alpha}$
 - * Effektive Masse für Bindungszustände in Analogie zum einfachsten Bindungszustand(freies Elektron)
 - * Anschaulich: Große effektive Masse für schwache Krümmung des Energiebands
 - Konzept sinnvoll, wenn Band fast leer bzw fast gefüllt sind(Minima bzw Maxima)
 - * Für halb gefüllte Bänder bekommt $m^*(k)$
- Elektronen und Löcher in externen Feldern
 - Externes \vec{E} -Feld \Rightarrow Gesamte Fermifläche entlang des äußeren Felds verschoben
 - * Anschaulich: Zusätzlicher Term $-eEz$ im Hamiltonian mit Translationsoperator z im Impulsraum
 - Externes \vec{B} -Feld \Rightarrow Gesamte Fermifläche dreht sich um Magnetfeldachse(Besetzung der Zustände ändert sich)

3.3.2 Strom- und Wärmetransport im Drude-Modell

- Gleichstrom-Leitfähigkeit σ im Ohmschen Gesetz $\vec{j}_E = \sigma \vec{E}$
 1. Im Gleichgewicht $\partial_t \vec{p} = 0 \Rightarrow \vec{p} = m\vec{v} = -e\tau \vec{E}$
 2. Elektrische Stromdichte $\vec{j}_e = -en\vec{v} = \frac{e^2\tau n}{m} \vec{E} =: \sigma \vec{E}$
- Wärmeleitfähigkeit κ in $\vec{j}_Q = \kappa \vec{\nabla} T$
 - Kinetische Gastheorie liefert $\kappa = \frac{1}{3} n c_V \langle v^2 \rangle \tau$, $c_V T = \frac{m}{2} \langle v^2 \rangle$ mit $c_V = \frac{3}{2} k_B$
 - Wärmekapazität $\kappa = \frac{3}{2} k_B^2 \frac{nT\tau}{m}$
 - Lorenz-Zahl $L = \frac{\kappa}{T\sigma} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \approx 1.1 \times 10^{-8} \frac{\text{W}\Omega}{\text{K}^2}$
 - Drude-Modell nahe am empirischen Wiedemann-Franz-Gesetz $L \approx (2-3) \times 10^{-8} \frac{\text{W}\Omega}{\text{K}^2}$ für viele Metalle
 - * Grund: Größe so konstruiert, dass sich die Fehler in c_V und $\langle v^2 \rangle$ kürzen
- Peltier-Effekt: Umwandlung zwischen Wärme und Strom
 - Peltier-Koeffizient Π in $\vec{j}_Q = \Pi \vec{E}$
 - * Vorhersage des Drude-Modells $\Pi = -\frac{k_B T}{2e}$
 - Seebeck-Koeffizient $S = \frac{\Pi}{T}$ in $\vec{j}_E = S \vec{\nabla} T$
 - Experimentelle Werte unterscheiden sich um Faktor 100 und Vorzeichen
- Wechselstrom-Leitfähigkeit $\sigma = \frac{1}{1-i\omega\tau} \frac{ne^2\tau}{m}$
 1. $\partial_t \vec{p} = -\frac{1}{\tau} \vec{p} - e\vec{E}$ mit Wechselstrom $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$
 2. Ansatz $\vec{p} = \vec{p}_0 e^{-i\omega t} \Rightarrow \vec{p}_0 = -\frac{1}{1-i\omega\tau} e\tau \vec{E}_0$
 3. Umstellen liefert $\vec{j} = -\frac{en}{m} \vec{p} = \frac{1}{1-i\omega\tau} \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E}$
- Hall-Effekt
 1. Im Gleichgewicht $\partial_t \vec{p} = 0 \Rightarrow \vec{E} = \frac{1}{en} \vec{j} \times \vec{B} + \frac{m}{ne\tau} \vec{j}$
 2. Umkehrung des Ohmschen Gesetz $E_i = \rho_{ij} j_j$
 - Widerstandsmatrix ρ ist Inverse der Leitfähigkeit
 - Für $\vec{B} \parallel \hat{z}$ liefert Ablesen $\rho_{ii} = \frac{m}{ne^2\tau}$, $\rho_{12} = -\rho_{21} = \frac{B}{ne}$
 3. Hall-Widerstand $R_H := \frac{E_2}{j_1 B} = -\frac{1}{ne}$
 - Drude-Modell liefert richtige Größenordnung für Hall-Widerstand, aber oft falsches Vorzeichen

3.4 Halbleiter

3.4.1 Grundlagen

- Halbleiter = Festkörper, bei dem die Fermienergie in einer kleinen Bandlücke liegt (typisch $\Delta E < 4 \text{ eV}$)
 - Im TD-GG wenige Elektronen durch thermische Anregung im Leitungsband
 - Grenze Isolator/Halbleiter/Metall schwammig, da thermische Anregungen temperaturabhängig sind
 - Typische Halbleiter in 4. Hauptgruppe des Periodensystems: Si, Ge, GaAs
- Dichte thermisch angeregter Elektronen $n_e \approx \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2}}^3 e^{-\beta(E_L - \mu)}$ mit Minimum des Leitungsbands E_L
 - Gleiche Beziehung für Löcher $n_h \approx \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2m_h^* k_B T}{\pi \hbar^2}}^3 e^{-\beta(\mu - E_V)}$ mit Maximum des Valenzbands E_V
 - Temperaturabhängig in $\frac{1}{4} \sqrt{\frac{2m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2}}^3$ ist schwach \Rightarrow Zwei Energieniveaus bei E_V, E_L ist gute Näherung

- Konstante $n_e n_h = \frac{1}{2} \left(\frac{k_B T}{\pi \hbar^2} \sqrt{m_e^* m_h^*} \right)^3 e^{-\beta \Delta E}$ mit $\Delta E = E_L - E_V$ unabhängig von Dotierung bzw μ

1. $n_e(T) = \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} = \frac{1}{V} \int_{E_L}^{\infty} d\omega \rho(\omega) n(\beta(\omega - \mu))$

- Thermisch angeregte Elektronen sind Elektronen im Leitungsband $E > E_L$

2. $n_e(T) \approx \frac{\sqrt{2m_e^*}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_L - \mu)} \int_{E_L}^{\infty} d\omega \sqrt{\omega - E_L} e^{-\beta(\omega - E_L)}$

- Quadratische Dispersionsrelation $E_e = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$ am Bandextrema $\Rightarrow \rho(\omega) = \frac{\sqrt{2m_e^*}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\omega - E_L}$

- Besetzungsfunktion $n(\beta(\omega - \mu)) = \frac{1}{e^{\beta(\omega - \mu)} + 1} \approx e^{-\beta(\omega - \mu)}$ für Raumtemperatur

3. Integral berechnen $n_e(T) = \frac{\sqrt{2m_e^*}}{2\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_L - \mu)} \sqrt{k_B T}^3 \int_0^{\infty} du \sqrt{u} e^{-u} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2}}^3 e^{-\beta(E_L - \mu)}$

- Intrinsischer Halbleiter: Gleich viele Elektronen wie Löcher

- Chemisches Potential $\mu = \frac{E_L + E_V}{2} + \frac{3}{4} k_B T \log \frac{m_h^*}{m_e^*}$ aus $n_e = n_h$ bzw $E_F = \frac{E_L + E_V}{2}$

3.4.2 Dotierung

- Verunreinigungen in jedem realen Kristall

- Verunreinigung hat nur Einfluss, wenn sie Energieniveaus in der Bandlücke hat
- Kann zufällige Verunreinigung durch Zugabe von Donatoren/Akzeptoren kompensieren (keine effektiven freien Ladungsträger)

- n/p-Dotierung: Verunreinigung des Halbleiters mit Donatoren/Akzeptoren

- Donator/Akzeptor: Fremdatom, das mehr/weniger Valenzelektronen hat als die Gitteratome

- * Bsp Donator: 5 Valenzelektronen in einem Gitter mit 4 Valenzelektronen (P, As, Sb)

- * Bsp Akzeptor: 3 Valenzelektronen in einem Gitter mit 4 Valenzelektronen (B, Al, Ga, In)

- Dotierung verschiebt Fermienergie zum Leitungsband/Valenzband

- * Position der Fermienergie abhängig vom Temperaturbereich (siehe unten)

- Durch n/p-Dotierung Überschuss an freien Elektronen/Löchern

- Dotierung ist schwach und beeinflusst Energiebänder deshalb nicht

- Wasserstoff-Modell für zusätzliche Ladungsträger

- Modell: Einzelne zusätzliche Ladungsträger wie im H-Atom an ihr Atom gebunden

- * Unterschied zum H-Atom: Effektive Masse m^* durch Energiebänder, Abschirmung ϵ_r durch andere Gitteratome

- Energieniveaus $E_n = -\frac{mc^2}{2\epsilon_r^2} \frac{\alpha^2}{n^2}$ (für n-Dotierung)

- * $E_{\text{H-Atom}} \approx 10^3 E_{\text{Halbleiter}}$, $a_{\text{Halbleiter}} \approx 50 a_{\text{H-Atom}}$

- Dotierung liefert neue Energieniveaus in der Bandlücke

- * Grundzustand am Wichtigsten für Halbleitereigenschaften, da er am Tiefsten in der Bandlücke liegt

- Bei Raumtemperatur sind Donatoren/Akzeptoren durch thermische Energie ionisiert (in einem Energieband)

- Ladungsträgerdichte in einem n-dotierten Halbleiter

- Allgemeine Beschreibung des Systems

- * Elektronkonzentration $n_e \approx n_{e,0} e^{-\beta(E_L - E_F)}$ im Leitungsband mit $n_{e,0} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2m_e^* k_B T}{\pi \hbar^2}}^3$, analog für Löcher

- * Verunreinigung in jedem realen Kristall \Rightarrow Habe Donatoren und Akzeptoren

- Donatoren/Akzeptoren können neutral oder ionisiert (geladen) sein \Rightarrow Aufspaltung $n_D = n_D^0 + n_D^+$, $n_A = n_A^0 + n_A^-$

- * Besetzung im Grundzustand $\frac{n_D^0}{n_D} = \left(\frac{1}{g_D} e^{\beta(E_D - E_F)} + 1 \right)^{-1}$, $\frac{n_A^0}{n_A} = \left(g_A e^{\beta(E_F - E_A)} + 1 \right)^{-1}$ mit Donatorturniveau E_D , Akzeptorturniveau E_A
 - Berücksichtige Entartung der Störstellenniveaus mit g_A, g_D (im Folgenden $g_A = g_D = 1$)
 - * Ladungserhaltung $n_e + n_A^- = n_h + n_D^+$
 - * Betrachte n -Dotierung ($n_D \gg n_A$) $\Rightarrow n_D^+ \gg n_h, n_A^0 = 0$
 - * Finde $n_e = n_D^+ - n_A = n_D - n_D^0 - n_A = n_D \left(1 - \frac{1}{e^{\beta(E_D - E_F)} + 1} \right) - n_A$ und $\frac{n_e(n_A + n_e)}{n_D - n_A - n_e} = n_{e,0} e^{-\beta(E_L - E_D)}$
1. Kompensationsbereich $n_e \ll n_A \ll n_D$
 - $n_e \approx \frac{n_D}{n_A} n_{e,0} e^{-\beta(E_L - E_D)}$, $E_F \approx E_D + k_B T \log \frac{n_D}{n_A}$
 - $T = 0$: Freie Ladungsträger optimal kompensiert \Rightarrow Nur Elektronen von Donatoren
 - $T > 0$: Donatoren geben Elektronen durch thermische Aktivierung ans Leitungsband ab
 2. Störstellenreserve $n_A \ll n_e \ll n_D$
 - $n_e \approx \sqrt{n_D n_{e,0}} e^{-\frac{1}{2}\beta(E_L - E_D)}$, $E_F \approx \frac{E_L + E_D}{2} - \frac{k_B T}{2} \log \frac{n_{e,0}}{n_D}$
 - Störstellenreserve, da viele Donatoren noch nicht ionisiert sind
 3. Erschöpfungszustand $n_A \ll n_e \approx n_D$
 - $n_e \approx n_D = \text{const}$, $E_F = E_L - k_B T \log \frac{n_{e,0}}{n_D}$
 - Bereich $k_B T \approx E_L - E_D$ (Raumtemperatur) \Rightarrow Alle Donatoren sind ionisiert ($n_e \approx n_D$)
 4. Eigenleitung $n_A \ll n_D \ll n_e, n_h$
 - Hohe Wahrscheinlichkeit für Anregung von Ladungsträgern vom Valenzband ins Leitungsband \Rightarrow Dotierter Halbleiter verhält sich wie intrinsischer Halbleiter bei hoher Temperatur

3.4.3 pn-Übergang

- Idee: Interessante Physik mit abruptem Übergang zwischen n - und p -Dotierung (Verarmungszone, $\mathcal{O}(100 \text{ nm})$)
 - Betrachte pn -Übergang immer im Erschöpfungszustand (Raumtemperatur)
- Energiebänder im pn -Übergang verbogen
 - Naiv: Fermienergie identisch im gesamten System, aber unterschiedliche relative Lage der Fermienergie in n - und p -Dotierung \Rightarrow Verbogene Bänder am pn -Übergang
 - Gleiche Bandstruktur in n - und p -Dotierung, aber unterschiedlicher Energie-Nullpunkt wegen unterschiedlichem elektrischen Potential
- Verarmungszone: Stromfreies Gleichgewicht von Diffusionsspannung und Feldspannung
 - Diffusionsspannung/Rekombinationsspannung V_D
 - * Freie Ladungsträger der einen Dotierung diffundieren durch Verarmungszone und rekombinieren mit freien Ladungsträgern entgegengesetzter Ladung in der anderen Dotierung
 - Bändermodell: Freie Ladungsträger besetzen niedrigere, unbesetzte Zustände in der anderen Dotierung
 - Am pn -Übergang minimale Zahl freier Ladungsträger, da Rekombination an derselben Stelle möglich ist
 - Mit zunehmendem Abstand vom pn -Übergang nimmt Dichte freier Ladungsträger zu, da zunehmend thermische Energie für Rekombination nötig ist
 - * Lage der Fermienergien bestimmt $eV_D = E_{F,n} - E_{F,p} = E_L - E_V - k_B T \log \frac{n_{e,0} n_{h,0}}{n_D n_A} \approx E_L - E_V$
 - * In Verarmungszone erzeugen übrige gebundene Ladungsträger eine Raumladungszone
 - Feldspannung/Driftspannung V_F
 - * Ladungstrennung durch Diffusionsstrom baut E -Feld in Verarmungszone auf, das der Diffusionsspannung entgegengerichtet ist
 - Im Gleichgewicht heben sich Diffusionsspannung und Feldspannung auf und es gibt keinen Ladungstransport

- * Gleichgewicht: Alle energetisch niedrigeren Zustände in der anderen Dotierung besetzt
- Schottky-Modell der Verarmungszone
 - Näherung: Thermische Diffusionslänge viel größer als Ausdehnung der Verarmungszone
 - Modell: Raumladungsverteilung ist Rechteckfunktion $\rho(x) = -en_A\Theta(x+d_p)\Theta(-x) + en_D\Theta(x)\Theta(d_n-x)$
 - * Ausdehnung der Raumladungsverteilungen d_i so, dass Gesamtladung erhalten ist: $n_D d_n = n_A d_p$
- pn-Übergang im externen E-Feld
 - Fermienergie in n- und p-Dotierung unterschiedlich durch unterschiedliches Potential(Spannung)
 - * Spannung fällt wegen geringer Ladungsträgerdichte fast komplett in Verarmungszone ab
 - * Kann Krümmung der Bänder mit externer Potentialdifferenz(Spannung) anpassen
 - Durchlassrichtung: Negative Polung am n-dotierten Halbleiter \Rightarrow Geringere Potentialdifferenz
 - * Strom $I = I_0 (e^{\beta e U} - 1)$ mit $I_0 \propto e^{-\beta(E_L - E_V)}$
 - * Bänder wegen geringerer Potentialdifferenz näher beieinander \Rightarrow Kleinere Verarmungszone
 - Sperrrichtung: Negative Polung am p-dotierten Halbleiter \Rightarrow Größere Potentialdifferenz
 - * Bänder wegen größerer Potentialdifferenz weiter entfernt \Rightarrow Größere Verarmungszone
 - * Zener-Durchbruch für $U \approx 2\text{ V}$: Leitungsband der n-Dotierung niedriger als Valenzband der p-Dotierung
 - Elektronen im p-Valenzband können durch Verarmungszone in das n-Leitungsband tunneln
 - Spezialfall Rückwärtsdiode: Starke Dotierung \Rightarrow Schmale Verarmungszone \Rightarrow Starker Zener-Durchbruch(stärker als Strom in Durchlassrichtung)
 - * Lawinen-Durchbruch für $U \approx 10\text{ V}$: Freie Ladungsträger ionisieren Halbleiter durch starkes Feld in der Verarmungszone

3.4.4 Experimentell: Anwendungen des pn-Übergangs

- Photodiode: pn-Übergang ohne externes Feld
 - Idee: Erzeuge Strom durch Ladungstrennung im E -Feld des pn-Übergangs
 - 1. Photon mit ausreichender Energie erzeugt e^-h^+ -Paar in Verarmungszone(optischer Übergang)
 - 2. Freie Ladungsträger im E -Feld des pn-Übergangs separiert \Rightarrow Strom fließt
 - Gleiches Prinzip: Solarzelle, Halbleiterdetektor in Teilchenphysik
- Diode: pn-Übergang mit externem Feld
 - Idee: pn-Übergang mit externer Spannung als Gleichrichter

Kapitel 4

Sonstige Phänomene

4.1 Elektrische Eigenschaften von Festkörpern

4.1.1 Grundlagen

- Elektrische Suszeptibilität χ in $\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}$ mit elektrischem Feld \vec{E} und Polarisation \vec{P}
 - Anschaulich: Beschreibt, wie ein Material auf ein äußeres E -Feld reagiert
- Lokales E -Feld $\vec{E}_{\text{loc}} = \vec{E}_{\text{ext}} + \vec{E}_N + \vec{E}_L = \vec{E}_{\text{ext}} - \frac{N}{\epsilon_0} \vec{P} + \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P}$
 - Anschaulich: Polarisationsladungen verändern E -Feld im Festkörper
 - Lorentzfeld $\vec{E}_L = \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{P}$
 - * Anschaulich: Verstärkung des E -Felds durch Polarisationsladungen in der Nähe des Atoms
 - * Modell: E -Feld auf ein typisches Atom durch Aufteilen des Festkörpers in einen Teil innerhalb einer Kugel um das Atom und einen Teil außerhalb der Kugel
 - Kugel hat Ausdehnung, für die Fluktuationen des E -Felds vernachlässigbar sind
 - Innerhalb der Kugel konstante Ladungsdichte wegen vernachlässigbarer Fluktuation des E -Felds \Rightarrow Lokale Polarisierungen heben sich auf
 - Außerhalb der Kugel sind mikroskopische Effekte vernachlässigbar und das Problem kann makroskopisch beschrieben werden (konstante Polarisation, Stärke abhängig von der Position)
 - * Herleitung: Integriere elektrische Felder $dE_L = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{dq}{a^2} \cos \theta$ durch Ladungen $dq = -(P \cos \theta)(2\pi a \sin \theta)(a d\theta)$ auf der Kugelschale (Radius a) auf für äußeres Feld in \hat{z} -Richtung
 - Entelektrisierungsfeld $\vec{E}_N = -\frac{N}{\epsilon_0} \vec{P}$
 - * Anschaulich: Abschwächung des E -Felds durch Polarisationsladungen am Rand der Probe
 - * Gleicher Effekt wie für Lorentzfeld, aber Polarisationsladungen haben entgegengesetztes Vorzeichen und Oberfläche hat andere Geometrie
- Typen von Elektrizität (analog zum Magnetismus)
 - Dielektrizität $\chi < 0$: Keine permanenten elektrischen Dipole
 - Paraelektrizität $\chi > 0$: Material enthält permanente elektrische Dipole
 - Ferroelektrizität: Spontane Polarisation ohne äußeres E -Feld unterhalb einer kritischen Temperatur
 - * Material hat permanente elektrische Dipole, die sich in Ferroelektrizität-Phase wegen Austauschwechselwirkung ausrichten
 - * Benötige genau eine polare Achse (Kristall nicht symmetrisch bei π -Drehung um irgendeine zur polaren Achse senkrechte Achse)
 - * Pyroelektrizität: Spontane Polarisation, aber nötiges E -Feld für Polarisationsänderung nicht erreichbar (führt zu elektrischem Durchbruch)
 - * Ferri- und Antiferroelektrizität analog zum Magnetismus
 - Piezoelektrizität: Mechanische Deformation erzeugt Polarisation
 - * Material mit mehreren polaren Achsen \Rightarrow Kann Ferroelektrizität erzeugen durch Verformung des Materials (Reduktion auf eine polare Achse)

4.1.2 Anregungen von Festkörpern durch Photonen

- Idee: Optische Übergänge(Absorption, stimulierte Emission, spontane Emission) wie in Atomphysik
 - Neue Effekte für Multi-Photon-Absorption für hohe Intensitäten(höhere Ordnung Störungstheorie)
- Elektronischer Übergang zwischen verschiedenen Bändern
 - Bedingung: Photonenergie größer als Bandlücke
 - Direkte Bandlücke: Maximum des Valenzbands und Minimum des Leitungsbands bei selbem \vec{k}
 - * Keine Impulsänderung bei Abregung eines Elektrons \Rightarrow Hohe Wahrscheinlichkeit für spontane Emission, da kein Phonon beteiligt sein muss
 - * Kennzeichen: Lichtabsorption abhängig von Frequenz hat Kante beim Frequenzäquivalent zur Bandlücke
 - Indirekte Bandlücke: Maximum des Valenzbands und Minimum des Leitungsbands bei unterschiedlichem \vec{k}
 - * Direkter Übergang auch möglich, aber wegen höherer Energiedifferenz unwahrscheinlicher
 - * Impulsänderung bei Elektron-Übergang, die durch zusätzliches Phonon aufgefangen werden muss \Rightarrow Geringe Wahrscheinlichkeit für spontane Emission
 - * Kennzeichen: Lichtabsorption abhängig von Frequenz hat keine scharfen Kanten
- Elektronischer Übergang innerhalb eines Bands(nur Leiter)
 - Klassisch: Beschleunigung von Ladungsträgern durch äußeres Feld(Photon)
 - Übergang einzelner Elektronen durch Photon- und Phonon-Emission
 - * Benötigt im Allgemeinen Emission von Photon(viel Energie, wenig Impuls) und Phonon(wenig Energie, viel Impuls) für Energie-Impuls-Erhaltung
 - Longitudinale Plasmaschwingungen(Energiequanta: Plasmonen)
 - * Anschaulich: Kollektive Schwingung quasi-freier Elektronen(Elektronen-Plasma) durch Coulombkraft(wollen homogene Ladungsverteilung wiederherstellen), Bindungsenergie $\mathcal{O}(10 \text{ eV})$
 - * Elektronendichte oszilliert mit Plasmafrequenz ω_p um mittlere Dichte
 - Transversale Plasmaschwingungen(Energiequanta: Plasmon-Polaritonen)
 - * Anschaulich: Von Elektronen übertragene elektromagnetische Welle
 - * Nur für hohe Anregungsenergien $\omega > \omega_p$ mit Plasmafrequenz ω_p möglich
- Erzeugung von Exzitonen
 - Exziton: Gebundener Zustand(EM-WW) aus Elektron und Loch(vgl H-Atom)
 - Erzeugung eines Exzitons, wenn Summe aus Photonenergie und Bindungsenergie des Exzitons größer als Bandlücke ist, Photonenergie alleine aber nicht
 - Exzitonen können sich durch Tunneleffekt frei im Festkörper bewegen
 - Frenkel-Exzitonen(Isolatoren): Bindungsenergie $\mathcal{O}(1 \text{ eV})$
 - Mott-Wannier-Exzitonen(Halbleiter): Bindungsenergie $\mathcal{O}(1 \text{ meV})$
- Kollektiver Zustandsübergang(nur Ferroelektrika)
- Erzeugung von Störstellen

4.1.3 Beschreibung von dielektrische Eigenschaften von Isolatoren

- Idee: Verschiebbare Ladungen(Elektronen, Ionen) bilden elektrische Dipole, die dem äußeren Feld entgegengerichtet sind
- Elektronen-Polarisation
 - Modell: Elektronen sind gedämpfte und durch äußeres E -Feld getriebene Oszillatoren $m\partial_t^2 x + m\gamma\partial_t x + m\omega_0^2 x = -E_0 e^{-i\omega t}$ und schwingen relativ zu den Ionen

* Mehrere erlaubte Anregungen(Übergänge zwischen Elektron-Zuständen) \Rightarrow Summiere über Beiträge der einzelnen Resonanzfrequenzen

- Finde $\chi = \frac{e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$ für jede Resonanzfrequenz ω_0

- Ionen-Polarisation

- Modell: In 2-atomiger Basis schwingen Untergitter aus positiv und negativ geladenen Ionen gegeneinander
- Polarisation nur durch optische Phononen

4.2 Magnetische Eigenschaften von Festkörpern

4.2.1 Grundlagen

- Magnetische Suszeptibilität χ in $\vec{M} = \chi \vec{H}$ mit Magnetisierung \vec{M} , äußerem Magnetfeld \vec{H}
 - Anschaulich: Beschreibt, wie ein Material auf ein äußeres Magnetfeld reagiert: Verstärkend $\chi > 0$ oder abschwächend/aufhebend $\chi < 0$
- Lokales Magnetfeld $\vec{H}_{\text{loc}} = \vec{H}_{\text{ext}} + \vec{H}_N + \vec{H}_L = \vec{H}_{\text{ext}} - N\vec{M} + \frac{1}{3}\vec{M}$
 - Entmagnetisierungsfeld \vec{H}_N mit geometrieabhängigem Entmagnetisierungsfaktor N und Lorentzfeld \vec{H}_L wie beim lokalen E -Feld
 - Für Para- und Diamagnete ist \vec{H}_L vernachlässigbar

4.2.2 Atomarer Magnetismus

- Betrachte Reaktion eines Atoms auf äußeres Magnetfeld
 - Atom ist in günstigem Zustand, wenn es selbst ein Magnetfeld aufbaut
- Diamagnetismus $\chi < 0$: Magnetisierung antiparallel zum Magnetfeld
 - Grund: Lenzsche Regel induziert Strom im Atom, das entgegengesetztes Magnetfeld erzeugt
 - Larmor-Diamagnetismus(isolierte Spins) $\chi = \text{const}$
 - Landau-Diamagnetismus(freie Elektronen) $\Rightarrow \chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3}\chi_{\text{Pauli}}$
- Paramagnetismus $\chi > 0$: Magnetisierung parallel zum Magnetfeld
 - Grund: Drehimpulse des Atoms im äußeren Magnetfeld ausgerichtet
 - Kein Paramagnetismus, wenn Atome keinen Drehimpuls haben oder Drehimpulse sich aufheben
 - Langevin-Paramagnetismus(isolierte Spins) \Rightarrow Curie-Weiß-Gesetz $\chi \propto \frac{1}{T}$
 - Pauli-Paramagnetismus(freie Elektronen) \Rightarrow Verschobene Zustandsdichte für \uparrow und \downarrow , $\chi_{\text{Pauli}} \propto \rho(E_F)$

4.2.3 Ferromagnetismus $\chi \gg 1$

- Anschaulich: Energieminimierung durch spontane Magnetisierung ohne Einfluss eines äußeren Magnetfelds
 - Im Magnetfeld werden Drehimpulse im Festkörper wegen Paramagnetismus ausgerichtet
 - Beschreibung mit Heisenberg- oder Ising-Modell
- Klassifizierung
 - Ausbildung von Ferro- oder Ferrimagnetismus abhängig von Verhältnis von Energie des Singulett E_0 und Triplett E_1 in der Drehimpulsaddition
 - Ferromagnetismus: Parallel ausgerichtete Spins bevorzugt($E_0 < E_1$)
 - Ferrimagnetismus: Antiparallel ausgerichtete Spins bevorzugt($E_0 > E_1$)

- * Im Allgemeinen haben benachbarte Spins unterschiedlichen Betrag und die Gesamt-Magnetisierung verschwindet nicht
- * Antiferromagnetismus: Benachbarte Spins haben selben Betrag \Rightarrow Gesamt-Magnetisierung verschwindet
- Frustration: Ferrimagnet mit nicht-trivialer Kristallstruktur \Rightarrow Ideale Anordnung von Spins nicht eindeutig
- Weißsche Bezirke: Bereiche mit spontaner Ordnung
 - Konkurrierende Prozesse: Größere Bezirke führen zu Energieabsenkung durch Ordnung und Energieanhebung durch geringere Entropie
 - Magnetisierungskurve: Magnetisierung(Ausrichtung der Weißschen Bezirke) abhängig vom äußeren Magnetfeld
- Grenzen zwischen weißschen Bezirken
 - Bloch-Wand in 3D-Strukturen: Spins während Umklappprozess alle Parallel zur Grenz wand(2D-Struktur)
 - Néel-Wand in 2D-Strukturen: Spins während Umklappprozess senkrecht zur Grenz wand(in 2D-Ebene der Struktur)
 - * Spins können nicht parallel zur Grenz wand sein, da die Grenz wand eine 1D-Struktur ist
- Spin-Schwingungen(Energiequanta: Magnonen)
 - Anschaulich: Schwingung aller Spins gegeneinander als kollektive Anregung
 - Beschreibung gleich wie bei Phononen(Gitterschwingungen)
 - Anderer Anregungszustand: Einzelne Spins umklappen

4.2.4 Magnetische Anisotropie

- Anschaulich: Magnetisierung hat Vorzugsrichtungen
 - Terme $\propto S_i^2$ im Hamiltonian \Rightarrow Nicht-äquidistante Energieniveaus(guter Qubit)
- Ursachen für magnetische Anisotropie
 - Magnetokristalline Anisotropie: Kristallfelder führen zu Vorzugsrichtung für Bahndrehimpuls, wegen LS-Kopplung auch Vorzugsrichtung für Spins
 - Formanisotropie: Vorzugsrichtung durch Entmagnetisierungsfelder
 - Induzierte Anisotropie: Elastische Verspannungen im Gitter

4.2.5 Adiabatische Entmagnetisierung

- Adiabatische Entmagnetisierung durch magnetokalorischen Effekt(Umwandlung magnetische Entropie/thermische Entropie)
 1. Kühlung auf $\mathcal{O}(1\text{ K})$ durch flüssiges He
 2. Lege Magnetfeld adiabatisch(kein Wärmefluss) an Probe an \Rightarrow Entropie nimmt ab(weniger besetzbare Zustände) und Temperatur nimmt zu
 3. Kühle erhitzte Probe bei angelegtem Magnetfeld ab
 - Bei der erhöhten Temperatur möglich, bei der Ausgangstemperatur nicht
 4. Magnetfeld adiabatisch entfernen \Rightarrow Entropie nimmt zu und Temperatur nimmt ab
- Alternative Kühlmethode: $^3\text{He}/^4\text{He}$ -Mischkryostat
 1. Mischung aus ^3He und ^4He macht für $T < 0.87\text{ K}$ Phasenübergang in zwei flüssige Phasen
 - Konzentrierte Phase, 93.5% $^3\text{He} \Rightarrow$ Schwimmt oben, da ^3He höhere Dichte als ^4He hat
 - Verdünnte Phase, 6.5% ^3He
 - ^4He ist suprafluide Quantenflüssigkeit \Rightarrow ^3He -Atome bewegen sich reibungslos

2. ^3He wird von verdünnter Phase in konzentrierte Phase gepumpt
3. Wegen Phasendiagramm darf ^3He -Anteil in verdünnter Phase nicht kleiner als 6.5% werden \Rightarrow ^3He -Atome gezwungen zu umgekehrtem Phasenübergang von konzentrierter in verdünnte Phase
 - Phasenübergang entspricht Verdampfung: Entropie nimmt zu \Rightarrow Temperatur muss abnehmen

4.3 Supraleitung

4.3.1 Phänomenologie

- Bei $T_C = 4.2\text{ K}$ und 10^5 bar verschwindet Widerstand von Hg(Onnes, 1911) \Rightarrow Supraleiter sind ideale Leiter
 - Später: Fast alle elementaren Metalle und viele Legierungen werden supraleitend (typisch: $T_C < 10\text{ K}$)
 - Keine Evidenz gegen $I = 0$ -Hypothese (Strom fällt um mindestens 14 Größenordnungen ab)
 - Idealer Leiter: Beschrieben durch Maxwellgleichungen mit $R = 0$
- Meissner-Ochsenfeld-Effekt(1933) \Rightarrow Supraleiter sind ideale Diamagnete
 - Idealer Diamagnet: Beschrieben durch Maxwellgleichungen mit $\chi = -1 \Rightarrow$ Magnetfelder im Inneren für $T < T_C$ verdrängt
 - * $\chi = \frac{M}{H}$ mit Magnetisierung M und angelegtem Feld $H \Rightarrow$ Feld im Leiter $B = \mu_0(H + M) = 0$
 - Normaler Leiter im veränderten Magnetfeld: Eingeschlossener magnetischer Fluss ändert sich
 - * Induktionsgesetz: Verändertes Magnetfeld induziert Abschirmstrom (Lenzsche Regel), der aber wegen $R > 0$ abklingt \Rightarrow Magnetfeld dringt in Probe ein
 - Idealer Leiter im veränderten Magnetfeld: Eingeschlossener magnetischer Fluss unverändert
 - * Induktionsgesetz: Verändertes Magnetfeld induziert E -Feld (Abschirmstrom) entlang des Rands des Leiters
 - * Idealer Leiter: E -Felder im Leiter perfekt kurzgeschlossen (Abschirmströme erhalten) \Rightarrow Eingeschlossener magnetischer Fluss unverändert
- Kritische Magnetfeldstärke $B_C = B_{C,0} \left(1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^2\right)$
 - Phasendiagramm für Supraleitung abhängig von (B, T)
- London-Gleichungen \Rightarrow Makroskopische Beschreibung von Supraleitern in der Meissner-Phase
 - Zusatz zu Maxwellgleichungen durch besondere Eigenschaften von Supraleitern
 - Hier noch nicht klar, welches Objekt im Supraleiter den Strom trägt
- 1. London-Gleichung $\partial_t j_i = \frac{ne^2}{m} E_i$ (idealer Leiter)
 - Modifiziertes Ohmsches Gesetz $\partial_t j_i \propto E_i$
 - * Im Gleichgewicht ist $R = 0 \Rightarrow \vec{E} = 0 \Rightarrow \vec{j} = \text{const}$
 - * Für $\vec{E} \neq 0$ nimmt \vec{j} immer weiter zu und Supraleitung bricht irgendwann zusammen
 - Herleitung: Drude-Modell $m\partial_t v_i = -eE_i - m\frac{v_i}{\tau}$ ohne Stöße ($\tau \rightarrow \infty$) und $j_i = -env_i$
- 2. London-Gleichung $\epsilon_{ijk} \partial_j j_k = -\frac{ne^2}{m} B_i$ (idealer Diamagnet)
 - B -Feld erzeugt elektrische Wirbelströme $\text{rot} \vec{j} \neq 0$ und umgekehrt
 - Herleitung: 1. London-Gleichung in Maxwell-Gleichung $\epsilon_{ijk} \partial_j E_k = -\partial_t B_i$ einsetzen
 $(\partial_t (\epsilon_{ijk} \partial_j j_k + \frac{ne^2}{m} B_i) = 0)$ und $\vec{B}_i = 0$ (idealer Diamagnet) verwenden
- London-Eindringtiefe $\lambda_L = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 ne^2}}$
 - * Anschaulich: Wegen 2. London-Gleichung (Elektrischer Wirbelstrom erzeugt Magnetfeld) muss Magnetfeld wegen Abklingstrom in Supraleiter eindringen

- * Herleitung: Für $\vec{B} \parallel \hat{z}$ 2. London-Gleichung in Maxwell-Gleichung $\epsilon_{ijk} \partial_j B_k = \mu_0 j_i$ einsetzen ($\partial_x^2 B_z - \frac{\mu_0 n e^2}{m} B_z = 0$) und DGL lösen: $B_z = B_0 e^{-x/\lambda_L}$

- Magnetische Flußquantisierung (1961)
 - Magnetischer Fluss ist quantisiert $\Phi = \oint \vec{A} d\vec{s} = p \frac{h}{2e}, p \in \mathbb{N}$ mit Flussquanten $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$
 - Nachweis durch Experimente von Doll/Nähbauer und Deaver/Fairbank

4.3.2 Kategorisierung von Supraleitern

- Kategorisierung nach Phasenübergang: Typ-1- und Typ-2-Supraleiter
 - Typ-1-Supraleiter: 1 Phasenübergang zwischen Meissner-Phase und Normalleiter
 - * Meissner-Phase: Idealer Leiter, idealer Diamagnet \Rightarrow Magnetfeld vollständig verdrängt
 - Typ-2-Supraleiter: 2 Phasenübergänge zwischen Meissner-Phase, Shubnikov-Phase, Normalleiter
 - * Shubnikov-Phase: Normalleitende Bereiche (Flussschläuche, Vortices) mit je einem Flussquant im Supraleiter
 - * Effektiv: Supraleitung bei deutlich höheren Magnetfeldern als im Typ-1-Supraleiter möglich
- Kategorisierung nach T_C
 - Niedrigtemperatur-Supraleiter $T_C = \mathcal{O}(10 \text{ K})$
 - Hochtemperatur-Supraleiter $T_C = \mathcal{O}(100 \text{ K})$
 - * Typisch: Kuprate (komplizierte chemische Zusammensetzung, $l = 2$)
 - * Noch nicht gut verstanden (keine mikroskopische Theorie für Hochtemperatur-Supraleiter)
- Kategorisierung nach Bahndrehimpuls l der Cooper-Paare
 - Konventionelle Supraleiter $l = 0$: Gut verstanden
 - Unkonventionelle Supraleiter $l \neq 0$: Spannendes Forschungsgebiet

4.3.3 Shubnikov-Phase in Typ-2-Supraleitern

- Flussschläuche/Vortices
 - Flussschläuche sind normalleitende Kanäle im Supraleiter
 - * Mikroskopisch: Flussschläuche sind Elektronen in der Normalleiter-Phase
 - Jeder Flussschlauch enthält ein Flussquant $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$
 - * Flussquantisierung wichtig: Falls magnetischer Fluss eines Flussschlauhes beliebig nahe an 0 sein kann, gibt es keine Meissner-Phase
 - Flussschläuche sind in einem hexagonalen 2D-Gitter (Abrikosov-Struktur) angeordnet
 - Anordnung der Flussschläuche bewegt sich im äußeren Magnetfeld durch Lorentzkraft, kann Flussschläuche mit Störstellen fixieren
- Grenzflächenenergie für Meissner- und Shubnikov-Phase
 - Modell: B -Feld dringt Kohärenzlänge ξ_{GL} in den Supraleiter ein und verschwindet dann (Rechteck-Verlauf)
 - * Kohärenzlänge ξ_{GL} aus Ginzburg-Landau-Theorie ist Radius von Flussschläuchen/Länge, auf der lokale Störungen der Supraleitung abklingen
 - Kondensationsenergie $E_C \approx A \frac{B^2}{2\mu_0} \xi_{GL}$
 - * Grenzflächenenergie durch weniger Oberfläche verringert, da an der Oberfläche weniger Cooper-Paare sind und es so insgesamt weniger Cooper-Paare gibt
 - * Kondensationsenergie E_C unabhängig vom anliegenden Magnetfeld B , nur abhängig vom kritischen Magnetfeld B_C (Meissner-Supraleitung bricht zusammen)

- Verdrängungsenergie $E_V \approx -A \frac{B^2}{2\mu_0} \lambda_L$
 - * Grenzflächenenergie bei starkem Magnetfeld durch mehr Oberfläche verringert, da an der Oberfläche weniger Verdrängungsarbeit geleistet werden muss
 - * Grenzflächenenergie abhängig vom anliegenden Magnetfeld B
- Energiegewinn durch Grenzflächen $\Delta E = E_C + E_V = A \frac{B_c^2}{2\mu_0} \left(\xi_{GL} - \left(\frac{B}{B_c} \right)^2 \lambda_L \right)$
 - * Typ-1-Supraleiter haben $\xi_{GL} > \lambda_L$ und $\Delta E > 0 \Rightarrow$ Grenzflächen sind nie energetisch günstig
 - * Typ-2-Supraleiter haben $\xi_{GL} < \lambda_L$ und es wird für ein $B < B_c$ energetisch günstiger, eine große Oberfläche zu haben \Rightarrow Übergang in Shubnikov-Phase
- Quantitative Beschreibung mit Ginzburg-Landau-Theorie(Feldtheorie)

4.3.4 BCS-Theorie für Typ-1-Supraleiter

- Anschaulich: Phasenübergang eines Metalls in den Supraleiter-Zustand
 - Phase bei hohen Temperaturen(Leiter): Elektronen besetzen Energieniveaus(Bänder)
 - Anziehende Wechselwirkung zwischen Elektronen bei niedrigen Temperaturen
 - * Anziehende Wechselwirkung kann durch Bildung von verschiedenen Bosonen erklärt werden(Cooper-Paare(Elektronen), Löcher-Paare, Magnonen, Polaronen)
- Cooper-Paar
 - Kurzlebiger gebundener Zustand aus 2 Elektronen wegen schwacher anziehender WW zwischen Elektronen
 - * Anziehende Wechselwirkung überwiegt abstoßende EM-WW
 - * Effekt nur wichtig bei niedrigen Temperaturen, da sonst wegen thermischen Effekten die anziehende WW schwach wird und die abstoßende EM-WW dominiert
 - * Gute Metalle(hohe elektrische Leitfähigkeit) sind schlechte Supraleiter, da sie schwache Elektron-Phonon-Kopplung haben
 - Anschaulich: Anziehung von Elektronen bei niedrigen Temperaturen durch verzögerte Wechselwirkung mit Gitter
 1. Freies Elektron versetzt benachbarte Ionen in Schwingung, da das Elektron die Ionen elektrisch anzieht
 2. Positive Ladungsverteilung maximal nach $\frac{1}{4}$ der Schwingungsperiode der Ionen
 - * Auslöser-Elektron hat sich in der Zwischenzeit weiterbewegt und stört positive Ladungsverteilung daher nicht
 3. Sekundäres Elektron wird von der positiven Ladungsverteilung angezogen \Rightarrow Effektive Anziehung zwischen Elektronen
 - Formal: Anziehende Wechselwirkung durch Austausch eines virtuellen Phonons
 - * Virtuelles Phonon entspricht Gitterschwingung der Ionen im anschaulichen Bild
 - Impulserhaltung \Rightarrow Elektronen im Cooper-Paar haben meist entgegengesetzten Impuls $(\vec{k}, -\vec{k})$
 - * Infragekommende Elektronen im Energiebereich $(E_F, E_F + \hbar\omega_D)$
 - Freie Elektronen haben $E > E_F$, Phonon hat maximal $\hbar\omega_D$ (Reduktion auf 1. Brillouin-Zone)
 - * Phasenraum für Elektronen \vec{k}_1, \vec{k}_2 , die Cooper-Paare (\vec{k}_1, \vec{k}_2) bilden können, aus Schnittbereich der Schalen $E \in (E_F, E_F + \hbar\omega_D)$ (Impulserhaltung)
 - Phasenraum für Cooper-Paare $(\vec{k}, -\vec{k})$ mit Impulsübertrag $\vec{K} = 0$ maximal
 - Für beliebig schwache anziehende Wechselwirkung $\langle \vec{k} | V | \vec{k}' \rangle = \begin{cases} -V_0 & k_F < k, k' < k_F + \frac{m\omega_D}{\hbar k_F} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$ zwischen 2 Elektronen folgt $E = 2E_F - 2\hbar\omega_D \frac{1}{e^{\frac{4}{V_0\rho(E_F)}} + 1} \approx 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{-\frac{4}{V_0\rho(E_F)}} < 2E_F$
 - * Energieniveau niedriger als im Normalleiter-Grundzustand $2E_F \Rightarrow$ Übergang in neuen Grundzustand(Supraleitung) mit gebundenen 2-Elektron-Systemen(Cooper-Paaren)

- Cooper-Paare sind Bosonen
 - * Spin-Statistik-Theorem: System aus 2 Fermionen(halbzahlgiger Spin) hat ganzzahligen Spin und ist daher ein Boson
 - * Cooper-Paare sind alle im selben Energieniveau(BCS-Grundzustand)
- Anregungszustände: Quasiteilchen
 - Anregungszustände sind ungepaarte Elektronen/Löcher im Supraleiter
 - * Mit jedem angeregten Elektron entsteht ein angeregtes Loch
 - * Nicht selbe Dispersionsrelation wie freie Elektronen/Löcher, daher heißen sie Quasiteilchen
 - * Lücke Δ zwischen BCS-Grundzustand und angeregten Niveaus mit $\Delta(0) \approx 1.764k_B T_C$
 - * Nötige Energie für Aufbrechen eines Cooper-Paars 2Δ (rege 2 Quasiteilchen an)
 - Dispersionsrelation $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}$ mit Energielücke Δ zwischen BCS-Grundzustand(Cooper-Paare) und Anregungszuständen und Normalleiter-Dispersionsrelation $\xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F$
 - * Für $\xi_k \approx 0$ sind Anregungen Mischung aus Elektronen und Löchern
 - Zustandsdichte $\rho(\omega) = \rho_0(\xi_k) \frac{d\xi_k}{dE_k} = \Theta(E_k - \Delta) \rho_0(\xi_k) \frac{E_k}{\sqrt{E_k^2 - \Delta^2}}$ mit Normalleiter-Zustandsdichte $\rho_0(\xi_k)$
 - Quasiteilchen besetzen Zustände und verhindern so den Austausch von virtuellen Phononen \Rightarrow Anziehende WW abgeschwächt und Supraleitung bricht irgendwann zusammen
- BCS-Grundzustand bei $T = 0$
 - Alle Elektronen zwischen BCS-Grundzustandsenergie und alter Fermifläche bilden Cooper-Paare
 - Keine thermischen Anregungen(Quasiteilchen)
- BCS-Zustand bei $0 < T < T_C$
 - Quasiteilchen schwächen anziehende WW ab und destabilisieren damit Cooper-Paare
 - Energielücke Δ nimmt mit zunehmender Temperatur ab mit $\Delta(T_C) = 0$

4.3.5 Josephson-Kontakt

- Idee: 2 Supraleiter getrennt durch dünne Isolator-Schicht \Rightarrow Cooper-Paare tunneln durch Isolatorschicht und Supraleiter sind gekoppelt(Wellenfunktionen überlagern sich)
 - Dünne Isolator-Schicht realisieren: Oxidationsschicht, Punktkontakt, Mikrobrücke
 - Effekte durch Supraleitung \Rightarrow Strom durch Josephson-Kontakt, den man klassisch nicht erwartet
 - Supraleitungs-Effekte messbar, da beim Übergang Supraleiter/Normalleiter der Cooper-Paar-Strom zu einem messbaren Elektronenstrom wird
- Beschreibung des Systems
 1. Kopplung der Schrödingergleichungen der Supraleiter $i\hbar\partial_t\psi_1 = E_1\psi_1 + K\psi_2$, $i\hbar\partial_t\psi_2 = E_2\psi_2 + K\psi_1$
 - Spannung U fällt am Isolator ab $\Rightarrow E_2 - E_1 = -2eU$
 2. Makroskopische Wellenfunktion in Schrödingergleichung einsetzen $\Rightarrow \partial_t n_i = \frac{2K}{\hbar} \sqrt{n_i n_j} \sin(\phi_j - \phi_i)$, $\partial_t \phi_i = -\frac{K}{\hbar} \sqrt{\frac{n_j}{n_i}} \cos(\phi_j - \phi_i) - \frac{E_i}{\hbar}$
 - Makroskopische Wellenfunktion eines Supraleiters $\psi = \sqrt{n} e^{i\phi(\vec{r})}$ mit Cooper-Paar-Dichte n und Phase $\phi(r)$
 3. Gleichungen umstellen $\Rightarrow \hbar\partial_t(\phi_2 - \phi_1) = E_1 - E_2 = 2eU$, $\partial_t n_1 = -\partial_t n_2 = \alpha \sin(\phi_2 - \phi_1)$
 - Vereinfachung: Supraleiter aus demselben Material $n_1 = n_2 = n$
- Spannung am Josephson-Kontakt
 - Interpretation: Wellenfunktionen der Supraleiter interferieren zeitlich miteinander
 - * Differentialgleichung enthält Zeit-Ableitung

- Grundlage: $\partial_t \phi = \frac{2eU}{\hbar}$, $I = I_0 \sin \phi$ mit Phasendifferenz ϕ der Supraleiter
- Josephson-Gleichstrom-Effekt $U = 0 \Rightarrow \phi = \phi_0$
 - * Anschaulich: Wenn keine Spannung anliegt, fließt Gleichstrom durch den Kontakt
- Josephson-Wechselstrom-Effekt $U \neq 0 \Rightarrow \phi = \frac{2eU}{\hbar} t + \phi_0$
 - * Anschaulich: Wenn eine Spannung anliegt, fließt Wechselstrom durch den Kontakt
 - * Wechselstrom hat sehr hohe Frequenz $\propto \frac{e}{\hbar}$ und ist deshalb schwer detektierbar
 - * Kann Josephson-Wechselstrom-Effekt benutzen, um präzise Spannungen über eine Frequenzmessung zu bestimmen
- Josephson-Kontakt im Magnetfeld
 - Interpretation: Wellenfunktionen der Supraleiter interferieren räumlich miteinander
 - Grundlage: $\partial_i \phi = \frac{1}{\Phi_0} d \epsilon_{ijk} B_j \hat{x}_k$ mit Einheitsvektor \hat{x}_i und effektive Dicke des Josephson-Kontakts d
 - * Effektive Dicke d ist Länge, auf der das Magnetfeld eindringen kann: Echte Dicke des Kontakts und London-Eindringtiefen für beide Supraleiter

4.3.6 Experimentell: Schaltkreise mit Josephson-Kontakten

- RCSJ-Modell(resistively capacitively shunted junction model)
 - Idee: Schalte Widerstand R , Kondensator C und Josephson-Kontakt mit Phase φ parallel und lasse Strom I durchfließen
 - Strom durch das System $I = I_0 \sin \phi + \frac{\Phi_0}{2\pi R} \partial_t \phi + \frac{C\Phi_0}{2\pi} \partial_t^2 \phi$ mit Flussquant $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$
 - * Setze Josephson-Gleichungen $I_J = I_0 \sin \phi$, $\partial_t \phi = \frac{2\pi}{\Phi_0} U$ in $I = I_J + \frac{U}{R} + C \partial_t U$ ein
 - * Interpretation: Gedämpftes Teilchen im Waschbrett-Potential $U(\phi) \propto \cos \phi + \phi \frac{I}{I_0}$
- SQUID(Superconducting quantum interference device)
 - Idee: Präzise Magnetfeldmessung mit Josephson-Kontakten durch Betrachtung der Interferenz der Wellenfunktionen der Supraleiter
 - * Gleiches Prinzip wie beim Doppelspalt in der Optik
 - DC-SQUID: Zwei parallelgeschaltete Josephson-Kontakte, bei denen Gleichstrom fließt
 - * Unterschiedliche Phasenverschiebung der Supraleiter im Magnetfeld für Uhrzeigersinn- und Gegen-Uhrzeigersinn-Umlaufrichtung
 - * Finde Stromfluss $I = I_0 \sin \phi_1 + I_0 \sin \phi_2 = 2I_0 \sin \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \cos \frac{\phi_1 - \phi_2}{2} = 2I_0 \sin \left(\phi_1 + \pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \cos \left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)$
 - Finde $\phi_2 - \phi_1 = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}$ mit magnetischem Fluss Φ durch die Schleife
 - * Wegen Abhängigkeit von $\frac{\Phi}{\Phi_0}$ ist Messung von I sensitiv auf kleine Werte von Φ
 - Bestimme B aus Φ und der durchflossenen Fläche
 - RF-SQUID: RCSJ-Schaltkreis \Rightarrow Komplizierte Zeitabhängigkeit beim Strom