
Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

WS 2009/10



Harald Jeschke
Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt

Quellen und Danksagung

Dieses Skript folgt in weiten Teilen dem sehr guten Lehrbuch “Theoretische Festkörperphysik” von Gerd Czycholl. Einige Teile basieren auf dem Skript “Festkörpertheorie” von Claudius Gros, Universität Frankfurt. Auch das Skript “Theoretische Festkörperphysik I” von Erwin Müller-Hartmann hat stellenweise Verwendung gefunden. Schließlich ist auch die Literatur aus dem Abschnitt 1.2 in unterschiedlichem Maße eingeflossen.

Herzlicher Dank geht an meine Frau Myriam Medina für die Latex-Fassung meines handschriftlichen Manuskripts.

1. Einleitung

1.1 Worum geht es?

Inhalt der theoretischen Festkörperphysik ist es, die

- Struktur der Festkörper,
- die kondensierten Phasen sowie
- die elementaren Anregungen

zu verstehen und fortschrittliche Methoden zu ihrer Beschreibung zu entwickeln. Im Mittelpunkt stehen die elektronischen und thermodynamischen Eigenschaften von Festkörpern. In dieser Vorlesung wird die Betonung auf den theoretischen Konzepten liegen, welche eine Beschreibung von Festkörpern gestatten.

Es ist klar, dass Festkörper ebenso wie Atome und Moleküle nur im Rahmen der Quantentheorie verstanden werden können; diese ist für die Stabilität der Materie (endliche Grundzustandsenergie E_0 , thermodynamische Stabilität $E_0 \simeq N$) sowie für die (chemische) Bindung verantwortlich. Ein großer Unterschied zwischen Festkörper und Molekül liegt in der Zahl der Atome, die bei Molekülen von zwei bis hin zu Tausenden reicht, im makroskopischen Festkörper aber in der Größenordnung von 10^{23} liegt. Da es sich beim Festkörper um ein System aus sehr vielen Atomen handelt, ist er ein Musterbeispiel für ein System, auf das Methoden der Statistischen Physik angewandt werden können. Damit stellen wir fest, dass Festkörpertheorie nichts prinzipiell Neues ist, sondern eine Anwendung von Quantentheorie und statistischer Physik auf ein spezielles physikalisches Problem, d.h. einen speziellen Hamiltonoperator.

Hin und wieder können Eigenschaften kondensierter Materie auch mit klassischer Mechanik und Statistik behandelt werden. Über die Legitimität solcher Zugänge wird man sich im einzelnen Gedanken machen müssen.

Hamilton-Operator

Zunächst befindet man sich in der Festkörperphysik wie in der Atomphysik, aber anders als in der Kernphysik, in der glücklichen Lage, den Hamilton-Operator, der die Dynamik und die Statistik beschreibt, genau zu kennen. Von den vier bekannten elementaren Wechselwirkungen (schwache Wechselwirkung, starke Wechselwirkung, elektromagnetische Wechselwirkung und Gravitation) spielt für die Festkörperphysik (wie für Atom- und Molekülphysik) nur eine einzige eine Rolle: die elektromagnetische Wechselwirkung. Für diese kennen wir das entscheidende Potential genau: das Coulombpotential. Jeder Festkörper besteht aus Elektronen der Masse m und der Ladung $-e$ sowie aus Kernen der Massen M_k und der Ladungen $Z_k e$. Die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Teilchen ist rein elektromagnetisch. Der überwiegende Teil dieser Wechselwirkung ist die Coulomb-Wechselwirkung.

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_k \frac{\vec{P}_k^2}{2M_k} + e^2 \sum_{i < j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + e^2 \sum_{k < l} \frac{Z_k Z_l}{|\vec{R}_k - \vec{R}_l|} - e^2 \sum_{i,k} \frac{Z_k}{|\vec{r}_i - \vec{R}_k|} \quad (1.1)$$

Andere Anteile (relativistischen Ursprungs) können gelegentlich für gewisse Details von Bedeutung sein (Spin-Bahn-Wechselwirkung, bei schweren Kernen Massenformel).

Die einzigen nichttrivialen Parameter, die sich durch eine Skalentransformation nicht beseitigen lassen, sind die Kernladungszahlen Z_k und die Massenverhältnisse m/M_k . Tatsächlich hängen die Massen M_k , von einer meist kleinen Isotopiebreite abgesehen, nur von Z_k ab. Es ist faszinierend, dass so wenige Parameter das ganze Spektrum der Erscheinungsformen von Festkörpern überstreichen. Der Einfluss der Z_k ist wie bei den Atomen (siehe Abb. 1.1) bizarr. Aus den gleichen Gründen (Schaleneffekte) hängt nicht nur die Chemie, sondern auch die FK-Physik empfindlich von Z_k ab.

Obwohl wir mit Gl. (1.1) den vollständigen Hamiltonoperator des Festkörpers vorliegen haben, ist das Problem der Festkörperphysik schwierig und nicht allgemein lösbar. Der Grund liegt in der großen Teilchenzahl, weshalb auch statistische Physik erforderlich ist. Diese ist aber nur dann einfach, wenn es sich um wechselwirkungsfreie Teilchen handelt (wie fast immer in der Vorlesung Thermodynamik und Statistische Physik). Die Teilchen,

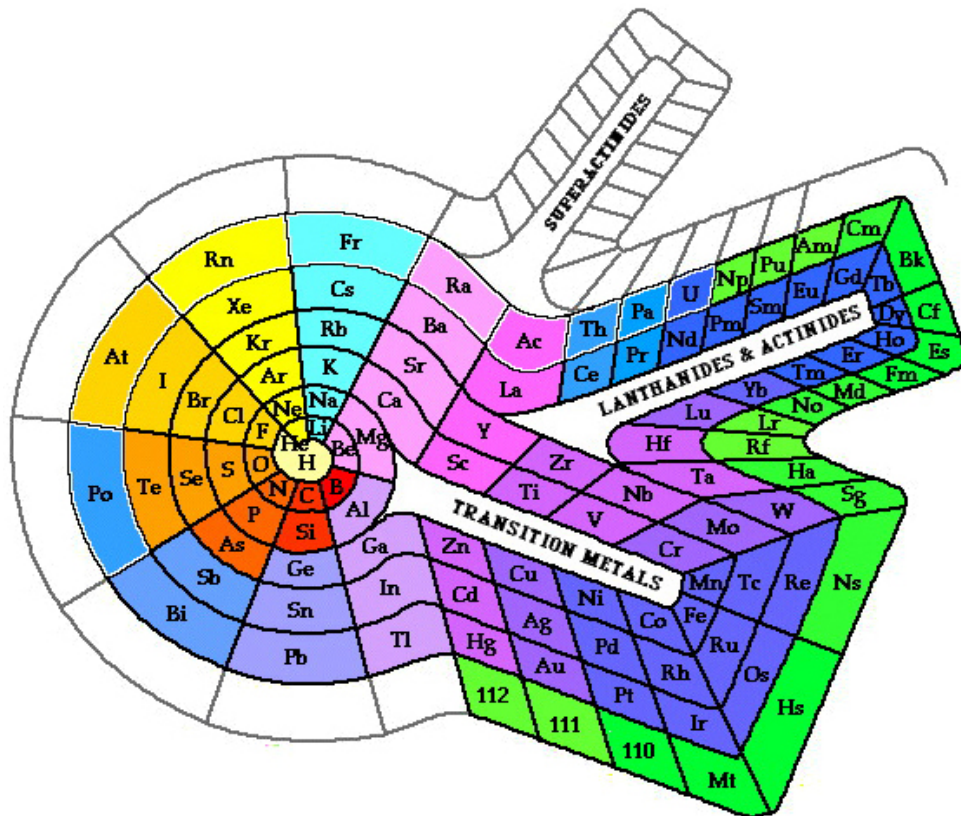


Abbildung 1.1: Spiraltabelle der Elemente (nach Theodor Benfey).

die den Festkörper bilden (Elektronen und Atomkerne) sind aber alles andere als wechselwirkungsfrei; sie wechselwirken über die langreichweitige Coulombwechselwirkung. Dadurch erscheint das Problem von 10^{23} wechselwirkenden Teilchen zunächst geradezu hoffnungslos.

Um hier weiterzukommen beschreitet man im wesentlichen zwei Wege. Zum einen werden neue Methoden und Näherungen im Rahmen der Quantentheorie entwickelt. Zum anderen sind Abstraktion und Modellbildung wichtig: Je nach Fragestellung werden nur Teilaspekte des allgemeinen Festkörper-Problems in Betracht gezogen, von denen man durch physikalische Überlegungen annimmt, dass sie die richtigen Beiträge zu einem Effekt oder Phänomen enthalten. Mathematisch bedeutet das, dass Vereinfachungen und Näherungen im allgemeinen Festkörper-Hamiltonoperator vorgenommen werden mit dem Ziel, einen geeigneten effektiven Hamiltonian zu erhalten, den man behandeln, vielleicht sogar lösen kann. Ein wichtiges Konzept ist dabei die Vereinfachung des Hamiltonoperators in der Weise, dass gewisse Elementaranregungen formal als wechselwirkungsfreie Quasiteilchen (mit Fermi- oder Bose-Charakter) dargestellt werden

können. Am Beispiel von Phononen ist die Vorgehensweise wie folgt: Man separiert Gitter- und Elektronenanteile im allgemeinen Hamiltonoperator und führt eine harmonische Näherung für den Gitteranteil durch, d.h. eine Entwicklung bis zur 2. Ordnung um die Gleichgewichtspositionen; man erhält einen effektiven Hamiltonoperator, der gekoppelte harmonische Oszillatoren beschreibt; dieser kann durch Hauptachsentransformation diagonalisiert werden. Anschließend führt man Oszillator-Auf- und Absteigeoperatoren ein und erhält einen Hamiltonoperator für wechselwirkungsfreie (Quasi-)Bosonen, die Phononen heißen. Den Phononenhamiltonoperator kann man mit Quantenstatistik behandeln und verstehen. Weitere Beispiele für Quasiteilchenbeschreibungen sind: Magnonen zur Beschreibung von Spinwellen, Polaronen (zusammengesetzt aus Elektronen und Gitterpolarisation), Exzitonen (gebundene Elektron-Loch-Paare), Polartonen, Plasmonen, usw. Im Konzept der wechselwirkungsfreien Elektronen werden auch die Elektronen zu fermionischen Quasiteilchen, wobei man die starken Wechselwirkungen in effektive Parameter eines wechselwirkungsfreien Einteilchenmodells steckt.

Phänomene

Die unzähligen Möglichkeiten, die Elemente des Periodensystems zu kombinieren, ist nur eine Erklärung für die Vielfalt der in der Festkörperphysik vorkommenden Phänomene. Diese Reichhaltigkeit ist schon sehr erstaunlich und ist ein Teil der Gründe für die Bedeutung und der Faszination dieses Faches. Einige (wenige) Beispiele:

- Kristallisation
- Halbleiter: Transistoren, integrierte Schaltkreise.
- Halbleiter: Anderson Lokalisierung der Elektronen durch Unordnung.
- Supraleitung: Meissner Effekt, Josephson Effekt, magnetische Flussschläuche, Hoch-Temperatur-Supraleitung.
- Spektroskopie: Atomphysik, Kurzzeitspektroskopie, Nicht-lineare Optik (optische Schalter), Magnetooptik.
- Transport: elektrische und Wärme-Leitfähigkeit, Leitwertquantisierung in mesoskopischen Systemen.
- Quanten-Hall-Effekt: ganzzahlig (Unordnung) und fraktionell (Coulomb-Abstoßung), Quantisierung des magnetischen Flusses.

- Magnetismus: Anti- und Ferromagnete (Isolatoren/Metalle), Riesemagnetowiderstand.
- Bose-Einstein Kondensation: ^3He , ultrakalte Gase.

Es ist klar, dass in dieser Vorlesung nur die Grundlagen erarbeitet werden. Diese Grundlagen sollten jedoch im Prinzip ausreichen, um sich gegebenenfalls in weitere Gebiete der Festkörperphysik einarbeiten zu können.

1.2 Literatur

- G. Czycholl, *“Theoretische Festkörperphysik”*, Springer 2008.
- N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *“Solid State Physics”*, Holt-Aunders, 1976.
- U. Rössler, *“Solid State Theory”*, Springer 2004.
- H. Ibach, H. Lüth, *“Festkörperphysik”*, Springer 2002.
- P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *“Principles of condensed matter physics”*, Cambridge Univ. Press 1995.
- W. A. Harrison, *“Solid State Theory”*, McGraw-Hill 1970.
- J. M. Ziman, *“Principles of the Theory of Solids”*, Cambridge Univ. Press 1979.
- P. W. Anderson, *“Basic Notions of Condensed Matter Physics”* (reprint), Perseus Press, 1997.
- J. Callaway, *“Quantum Theory of the Solid State”, Part A+B*, Academic Press 1974.
- C. Kittel, C. Y. Fong (Contributor), *“Quantum Theory of Solids”*, 2nd Revised Edition John Wiley 1987.