Physik der Kondensierten Materie 2

Rudolf Gross SS 2021

SS 2021

Vorlesungszeit: Mo. 12. April – Di. 08. Juni 2020

Montag,	10:15 – 11:45h	Hörsaal 2
Montag,	12:30 – 14:00h	Hörsaal 2
Dienstag,	08:30 – 10:00h	Hörsaal 2
Dienstag,	12:15 – 13:45h	Hörsaal 2

Tutorium zu KM 2, SS 2021

Mittwoch, 10:15 – 11:45h Hörsaal 2



SS 2021

Vorlesung: asynchrones E-Learning

32 Doppelstunden ein File pro Doppelstunde

Tutorium: synchrones E-Learning

Zoom-Meeting (Link wird via Email zugeschickt)

Übungsgruppen KM 2, SS2021

	Zeit	Raum
Übungsgruppe 1	Mo 08:30-10:00 Uhr	Zoom-Meeting
Übungsgruppe 2	Di 16:15-17:45 Uhr	Zoom-Meeting
Übungsgruppe 3	Do 10:15-11:45 Uhr	Zoom-Meeting
Übungsgruppe 4	Do 12:30-14:00 Uhr	Zoom-Meeting

Übungsgruppenleitung: Dr. Stephan Geprägs, <u>Stephan.Gepraegs@wmi.badw.de</u>



Physik der Kondensierten Materie 2

Rudolf Gross SS 2021 Teil 1 Vorlesungsstunde: 12.04.2021-1

Physik der Kondensierten Materie 1

...eine kurze Wiederholung



Themen

• 1 Aufbau von Kristallen:

Klassifizierung von Kristallstrukturen, Richtungen und Ebenen, Defekte, Oberflächen

• 2 Reziprokes Gitter und Strukturanalyse:

Brillouin-Zonen, von Laue- und Bragg-Bedingung, Struktur- und Atomformfaktor, Debye-Waller-Faktor

• 3 Bindungskräfte:

Van der Waals, ionische, kovalente und metallische Bindung, Wasserstoffbrückenbindung

• 4 Elastische Eigenschaften:

Kontinuumsmechanik, Spannung, Dehnung, Elastizitätstensor, elastische Wellen

• 5 Gitterdynamik:

klassische Theorie des Kristallgitters, Dispersionsrelation der Gitterschwingungen, Phononen

• 6 Thermische Eigenschaften des Kristallgitters:

spezifische Wärme (klassisch, quantenmechanisch), Debye- und Einstein-Näherung, thermische Ausdehnung, Wärmeleitfähigkeit



Physik der Kondensierten Materie 1

Themen

• 7 Das freie Elektronengas:

Fermi-Gas, Fermi-Energie, Dispersionsrelation, spezifische Wärme, elektrische und thermische Leitfähigkeit, Hall-Effekt

• 8 Elektronen im periodischen Potenzial:

Bloch-Wellen, Dispersionsrelation und Bandstruktur, Näherung von schwach und stark gebundenen Elektronen, Metalle/Halbmetalle/Isolatoren, Fermi-Flächen

• 9 Dynamik von Kristallelektronen:

Semiklassiche Beschreibung, Bewegung in elektrischen und magnetischen Feldern, Streuprozesse, Boltzmann-Transportgleichung, thermoelektrische und thermomagnetische Effekte

Fortsetzung: quantenmechanische Beschreibung der Elektronenbewegung

Kapitel 9

Dynamik von Kristallelektronen

9.10 Quantisierung von Elektronenbahnen

- Bewegung von Elektronen im Orts- und k-Raum
- **bisher**: *semiklassische Beschreibung* der Elektronenbewegung
 - → Quantenmechanik liefert $\varepsilon(\mathbf{k})$ und damit $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})$ Bahnen in Orts- und k-Raum
 - \rightarrow klassische Bewegungsgleichungen

• jetzt:

- quantenmechanische Beschreibung der Elektronenbewegung
 - → Elektronen auf geschlossenen Bahnen müssen die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung erfüllen
 - → Phase darf sich nur um $n \cdot 2\pi$ bei einem Umlauf ändern
 - → Quantisierung der Bahnen

- **zuerst**: Bewegung von **freien Ladungsträgern** mit Ladung q in Magnetfeld $\mathbf{B}||\hat{\mathbf{z}}|$
- später: Bewegung von Bandelektronen mit Ladung q in Magnetfeld $\mathbf{B}||\hat{\mathbf{z}}$
- Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q \mathbf{A} \right)^2 \Psi = \varepsilon \Psi$$

2

Eichung:
$$\mathbf{A} = (0, Bx, 0) \rightarrow \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B)$$

B-Feld in *z*-Richtung

(Elektronen: q = -e)

Operator des kinematischen Impulses $\hbar \mathbf{k}$:

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} + q\mathbf{A} \rightarrow \hbar \mathbf{k} = \mathbf{p} - q\mathbf{A} = \frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}$$

• mit $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ lautet die Schrödinger-Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial y} - \frac{qB}{\hbar}x\right)^2\Psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} = \varepsilon \Psi$$

• Lösungsansatz:

 $\Psi(x, y, z) = u(x) \exp[i(\beta y + k_z z)]$

→ freie Bewegung in z-Richtung parallel zu B, keine Kraftwirkung von B → modifizierte Bewegung in xy-Ebene

• Einsetzen von
$$\Psi(x, y, z) = u(x) \exp[i(\beta y + k_z z)]$$
 in $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{qB}{\hbar}x\right)^2 \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \varepsilon \Psi$

 $\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\beta - \frac{qB}{\hbar}x\right)^2 u = \tilde{\varepsilon} \ u \qquad \text{mit } \tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \text{ (Energie ohne freie Bewegung in z-Richtung)}$

、 2

• Vergleich mit Bewegungsgleichung eines 1D harmonischen Oszillators

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega_c^2 \tilde{x}^2 u(x) = \tilde{\varepsilon} u(x) \qquad \Rightarrow \quad \tilde{x} = x - \frac{\hbar\beta}{qB} = x - \frac{m}{qB}\frac{\hbar\beta}{m} = x - x_0$$
$$\Rightarrow \omega_c = \frac{qB}{m}$$

 \rightarrow u(x) beschreibt Bewegung eines **1D** harmonischen Oszillators

Schwingungsfrequenz
$$\omega_c = \frac{eB}{m} = 1.758\ 820\ 174\ (71) \times 10^{11}\ s^{-1} \times B$$
 [Tesla]Schwerpunktkoordinate $x_0 = \frac{m}{eB}\frac{\hbar\beta}{m} = \frac{1}{\omega_c}\frac{\hbar\beta}{m}$ Zyklotronfrequenzmit $(q = e)$

Eigenenergien des 1D harmonischen Oszillators: ٠

 $\tilde{\varepsilon}_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c$ Gesamtenergie:



Kreisbewegung in Ebene $\perp B$ um Schwerpunktkoordinate x_0 Hinweis: Spin wird nicht berücksichtigt,

freie Bewegung || B

erfolgt später bei Diskussion der magnetischen Eigenschaften

→ parabelförmige Energiebänder der freien Elektronen spalten in Subbänder (Landau-Niveaus) mit Abstand $\hbar \omega_c$ auf

Besetzung der Subbänder bei T = 0 bis zur Fermi-Energie $\varepsilon_{\rm F}$



- Wie viele Zustände gibt es pro Landau-Niveau, wie groß ist die Entartung des Landau-Niveaus ?
 - Fall B = 0: freie Elektronen in Potenzialkasten mit Abmessungen $L_x, L_y, L_z \rightarrow V = L_x \cdot L_y \cdot L_z$ Randbedingungen: $k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z$ $n_{x,y,z} =$ ganze Zahl Zustand nimmt in k-Raum Volumen $(2\pi)^3/V$ ein \rightarrow Zustandsdichte für eine Spin-Richtung: $1/(2\pi)^3$
 - Fall $B \neq 0$:z-Richtung:alles gleich \rightarrow Quantisierung von k_z in Einheiten von $2\pi/L_z$ in Ebene $\perp B$:Kreisbewegung um Schwerpunktkoordinate $x_0 = \frac{m}{eB} \frac{\hbar\beta}{m} = \frac{1}{\omega_c} \frac{\hbar\beta}{m}$ Randbedingung: x_0 muss innerhalb des Festkörpers liegen $\rightarrow 0 < x_0 < L_x$

→ Randbedingung für β:
$$0 < \beta < \frac{m\omega_c}{\hbar} L_x$$
→ Anzahl p der möglichen β-Werte:
$$p = \left(\frac{m\omega_c}{\hbar} L_x\right) / \left(\frac{2\pi}{L_y}\right) = \hbar\omega_c D_{2D} = L_x L_y B \cdot \frac{e}{2\pi\hbar} = \frac{\Phi}{2\Phi_0}$$

$$D_{2D} = \frac{m}{2\pi\hbar^2} L_x L_y$$

$$D_{2D} = \frac{m}{2} L_y$$

$$D_{2D} =$$

- Zusammenfassung der wichtigen Fakten
 - i. jedes Landauniveau/Energieniveau mit Quantenzahl *n* ist *p*-fach entartet
 - ii. Entartung p nimmt mit B und Probengröße $L_x L_y \perp B$ zu
 - iii. Entartung p entspricht 2 x Zahl der Zahl der Flussquanten durch Probenfläche $\perp B$

(Faktor 2 wegen Verwendung des Flussquants aus der Supraleitung h/2e)

16

Darstellung der p Niveaus mit Eigenenergie $arepsilon_n=\left(n+rac{1}{2}
ight)\hbar\omega_c$ für ein 2D-System ($k_z=0$)



• Im Dreidimensionalen kommt noch freie Bewegung || B dazu:

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





Lev Dawidowitsch Landau (1908 - 1968) Nobelpreis für Physik 1962

Entartung *p*:

 $p = \frac{\Delta S}{(2\pi)^2 / L_x L_y}$

 $p = \frac{2\pi eB}{\hbar} \cdot \frac{L_x L_y}{4\pi^2}$

 $p = L_x L_y B \frac{e}{h} = \frac{\Phi}{2\Phi_0}$

 $p = \frac{\text{Fläche in } k - \text{Raum}}{\text{Zustandsichte in } k - \text{Raum}}$

• die von den Landau-Kreisen/Zylindern umschlossenen Flächen $S_n = \pi k_{\perp,n}^2$ sind quantisiert



aus
$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c = \frac{\hbar^2 k_{\perp,n}^2}{2m}$$
 folgt Kreisradius

$$k_{\perp,n} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c} = \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2eB}{\hbar}}$$

• die Flächendifferenz $\Delta S = S_{n+1} - S_n$ ist konstant



9.10.2 Zustandsdichte im Energieraum

Wie wird Zustandsdichte $D(\varepsilon)$ durch Magnetfeld modifiziert ?



2D freies Elektronengas

B = 0: $D(\varepsilon) = \frac{L_{\chi}L_{\chi}}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) = const.$ (eine Spin-Richtung) B > 0: $D(\varepsilon)$ = Summe von δ -Funktionen mit Gewicht p und Abstand $\hbar\omega_c$



3D freies Elektronengas

$$B = 0: \qquad D(\varepsilon) = \frac{L_{\chi}L_{y}L_{z}}{4\pi^{2}} \left(\frac{2m}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \propto \sqrt{\varepsilon} \text{ (eine Spin-Richtung)}$$

 $D(\varepsilon) =$ Überlagerung der Zustandsdichte von 2D-B > 0: System $\perp B$ und 1D-Zustandsdichte $\propto 1/\sqrt{\varepsilon}$ durch freie Bewegung || B



9.10.3 Kristallelektronen

- Jetzt: Ladungsträger im periodischen Potenzial des Kristallgitters
 - Bahnen sind jetzt keine Kreisbahnen mehr (Abweichungen durch Wirkung des Kristallpotenzials)

Ausgangspunkt: Bohr-Sommerfeld-Quantisierung

Quantisierungsregeln:

$$\frac{1}{2\pi} \oint p_{\varphi} \, d\varphi = \hbar(\ell+1), \ \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\frac{1}{2\pi} \oint p_r \, dr = \hbar (n + \gamma), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$



(Quantisierung des Dreimpulses)

hierbei sind φ , $p_{\varphi} = mr^2 \dot{\varphi}$ und r, $p_r = m\dot{r}$ **Paare von kanonisch konjugierten Orts- und Impulsvariablen** (die Korrektur γ muss durch mit Näherungsverfahren ermittelt werden, für harmonischen Oszillator ist $\gamma = 1/2$)

$$\frac{1}{2\pi}\oint \mathbf{p}\cdot d\mathbf{r} = \hbar(n+\gamma), \qquad n = 0,1,2,3,...$$

mit kanonischem Impuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} + q\mathbf{A} = q\mathbf{r} \times \mathbf{B} + q\mathbf{A}$ erhalten wir:

(wir benutzen $\hbar \dot{\mathbf{k}} = q \mathbf{v} \times \mathbf{B} = q \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}$ und integrieren über Zeit)

$$\frac{1}{2\pi} \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \frac{1}{2\pi} \oint (q\mathbf{r} \times \mathbf{B} + q\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{r} = \hbar(n+\gamma), \qquad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$





Insgesamt erhalten wir

 $\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = -q\Phi = -q BA = 2\pi \hbar (n+\gamma), \qquad n = 0,1,2,3, \dots$

→ von Bahnen umschlossene Flächen und der von ihnen eingeschlossene magnetische Fluss sind quantisiert !

$$A_n = \frac{2\pi\hbar(n+\gamma)}{qB}, \qquad \Phi_n = BA_n = (n+\gamma)\frac{h}{q} = (n+\gamma)\,2\Phi_0 \qquad (\text{mit }\Phi_0 = h/2e)$$

9.10.3 Kristallelektronen

P Zusammenhang zwischen quantisierten Flächen A_n im Ortsraum und S_n im k-Raum

aus $\hbar \dot{\mathbf{k}} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} = q\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}$ erhalten wir durch Zeitintegration $\hbar \mathbf{k} = q\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ bzw. $|d\mathbf{r}| = \frac{\hbar}{qB} |d\mathbf{k}|$ und somit

$$A_n = \left(\frac{\hbar}{qB}\right)^2 S_n$$

mit
$$|A_n| = \frac{\Phi_n}{B} = (n+\gamma)\frac{h}{|q|}$$
 folgt $|S_n| = \frac{(n+\gamma)2\pi qB}{\hbar}$ und damit für die Flächendifferenz $\Delta S = S_{n+1} - S_n$
 $\Delta S = S_{n+1} - S_n = [n+1+\gamma - (n+\gamma)]\frac{2\pi qB}{\hbar}$
 $\Delta S = \frac{2\pi qB}{\hbar} = \frac{2\pi m_c}{\hbar} \hbar \omega_c$
 \Rightarrow gleiches Ergebnis wie
für freie Ladungsträger !! mit $\omega_c = qB/m_c$, $m_c = Zyklotronmasse$

• für Experiment interessant: Welche Feldänderung ist notwendig, um S_n gleich groß wie S_{n+1} zu machen?

$$\operatorname{aus} S_{n+1} = (n+\gamma+1)\frac{2\pi q B_{n+1}}{\hbar} = S_n = (n+\gamma)\frac{2\pi q B_n}{\hbar} = S \operatorname{folgt} \frac{1}{B_{n+1}} = (n+\gamma+1)\frac{2\pi q}{\hbar S} \operatorname{und} \frac{1}{B_n} = (n+\gamma)\frac{2\pi q}{\hbar S}$$

$$\Delta = \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n}\right) = \frac{2\pi q}{\hbar S}$$

→ gleiche Zunahmen in 1/B führen zu gleichen Bahnen in k-Raum
 → viele physikalsiche Größen zeigen 1/B – Periodizität

Quantenoszillationen

9.10.3 Kristallelektronen

• Wann können wir Phänomene, die mit Quantisierung der Bahnen zusammenhängen, experimentell beobachten?



→ der energetische Abstand von Landau-Niveaus muss größer als die thermische Energie sein

$$\hbar\omega_c = \frac{\hbar qB}{m_c} > k_{\rm B}T$$
 $\frac{B}{T} > \frac{m_c k_{\rm B}}{q\hbar} = 0.78 \left[\frac{\rm T}{\rm K}\right]$ \rightarrow hohe B und niedrige T

→ die energetische Verbreiterung der Landau-Niveaus durch die endliche Streuzeit τ der Ladungsträger muss kleiner als $\hbar\omega_c$ sein

 $\Delta \varepsilon \simeq \frac{\hbar}{\tau} < \hbar \omega_c$

$$\omega_c \tau = \frac{qB}{m_c} \tau >$$

 \rightarrow hohe B und reine Proben



Zusammenfassung: Teil 1a, 12.04.2021/1

• Quantisierung der Bahnen freier Ladungsträger (q=+e) im Magnetfeld

Wellen auf geschlossenen Bahnen müssen Bohr-Sommerfeld-Quantisierung erfüllen

- Schrödinger-Gleichung: $\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - qA\right)^2 \Psi = \varepsilon \Psi$ Eichung: $A = (0, Bx, 0) \rightarrow B = \nabla \times A = (0, 0, B)$ Operator des kinematischen Impulses: $p = \hbar k + qA \rightarrow \hbar k = p - qA = \frac{\hbar}{i} \nabla - qA$ - Lösung ergibt Eigenenergien: Subbänder: Landau-Niveaus Kreisbewegung in Ebene senkrecht zu B freie Bewegung || B Zyklotron-Frequenz: $\omega_c = \frac{eB}{m} = 1.758\ 820\ 174\ (71) \times 10^{11}\ s^{-1} \times B$ [Tesla]

• Entartung der Landau-Niveaus (für eine Spin-Richtung)





Zusammenfassung: Teil 1b, 12.04.2021/1

• Bahnquantisierung für Kristallelektronen (q = +e)

- Quantisierungsbedingung wie für freie Ladungsträger:

ger: $\frac{1}{2\pi} \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \hbar (n + \gamma), \qquad n = 0, 1, 2, 3, ...$

mit kanonischem Impuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} + q\mathbf{A} = q\mathbf{r} \times \mathbf{B} + q\mathbf{A}$ erhalten wir:

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = -q\Phi = -q BA = 2\pi \hbar (n + \gamma), \qquad n = 0, 1, 2, 3, ...$$

von Bahnen umschlossene Flächen und der von ihnen eingeschlossene magnetische Fluss sind quantisiert !

 \rightarrow hohe B/T

Korrekturfaktor γ

$$A_n = \frac{2\pi\hbar(n+\gamma)}{qB}, \qquad \Phi_n = BA_n = (n+\gamma)\frac{h}{q} = (n+\gamma)\,2\Phi_0 \quad (\text{mit } \Phi_0 = h/2e)$$

aus
$$\hbar \mathbf{k} = e\mathbf{r} \times \mathbf{B}$$
 folgt $|dr| = \frac{\hbar}{eB} |dk|$ folgt:

- Fläche zwischen benachbarten Landau-Zylindern:

$$A_{n} = \left(\frac{\hbar}{qB}\right)^{2} S_{n} \qquad S_{n} = \frac{(n+\gamma)2\pi qB}{\hbar}$$
$$\Delta S = \frac{2\pi qB}{\hbar} = \frac{2\pi m_{c}}{\hbar} \hbar \omega_{c}$$

• Welches ΔB führt zu gleichen Flächen aufeinanderfolgender Landau-Zylinder?

aus
$$(n+\gamma+1)\frac{2\pi q B_{n+1}}{\hbar} = S_n = (n+\gamma)\frac{2\pi q B_n}{\hbar} = S$$
 folgt: $\Delta = \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n}\right) = \frac{2\pi q}{\hbar S}$

- → gleiche Zunahme in 1/B führt zu gleichen Bahnen im k-Raum
 → 1/B -Oszillationen von physikalischen Größen
- Voraussetzungen für experimentelle Beobachtung von 1/B Oszillationen
 - Abstand benachbarter Landau-Niveaus groß gegen $k_{\rm B}T$: $\hbar\omega_c > k_{\rm B}T \rightarrow \frac{B}{T} > \frac{m_c k_{\rm B}}{\hbar a} = 0.78 \text{ T/K}$
 - genügend lange Streuzeit τ : $\Delta \varepsilon \simeq \frac{\hbar}{\tau} < \hbar \omega_c \rightarrow \omega_c \tau = \frac{qB}{m_c} \tau > 1$

→ hohe B, tiefe T und reine Proben