

Wiederholung: Festkörperphysik

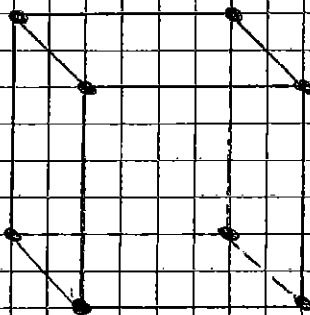
Kristallgitter: Hilfsmittel, um die Symmetrie und Anordnung eines Kristalls zu beschreiben.

- in 3D-Raum beschreibbar 14 Bravais-Gitter (Raumgitter) jede Möglichkeit der Zellbauform
- ein Bravais-Gitter besteht aus einer Teilchenart, d.h. NaCl besteht aus der Translation eines kubisch-flächenzentrierten Na- und Cl-Gitters.
- 14 Gittertypen in 7 Kristallklassen/-systemen:

- rechteckig:
 - kubisch: 1. u.
 - tetragonal: $3 \times 90^\circ$, 2 gleichlange Achsen
 - (ortho-)rhombisch: $3 \times 90^\circ$, keine gleichlangen Achsen
- schiefwinklig:
 - hexagonal
 - rhomboedrisch
 - monoklin
 - trigonal

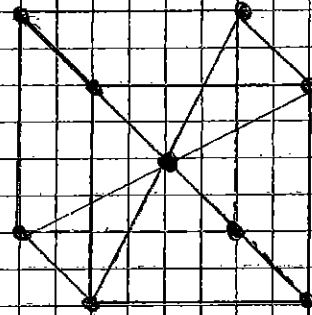
Kubische Gitter:

i) kubisch-primitiv



- je 6 nächste Nachbarn
- Raumerfüllung ca. 52%

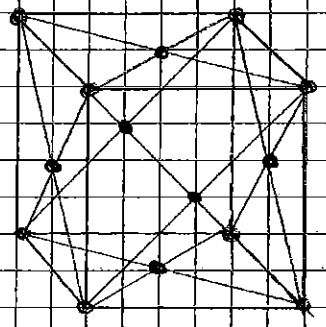
ii) kubisch-raumzentriert (bcc)



- je 8 nächste Nachbarn
- Raumerfüllung 68%
- = Wolfram

Raumerfüllung: für gleich große, sich berührende Kugeln

iii) kubisch-flächenzentriert (fcc)



- je 12 nächste Nachbarn
- ~ 74% Raumerfüllung
- => dichteste Kugelpackung
- => Cu-Gitter

Einheitszelle, Elementarzelle:

- Einheit, aus der durch wiederholte Translation in 3 Richtungen ein Kristallgitter aufgebaut werden kann
- durch 6 Gitterparameter definiert (3 Achsenlängen, 3 Zwiwinkeln)
- enthält alle vorhandenen Symmetrieelemente (Spiegelebene, Drehachse, Inversionszentrum, Drehspiegelebene)
- für ein gegebenes Kristallgitter gibt es unendlich viele Möglichkeiten, seine Elementarzelle aufzubauen.

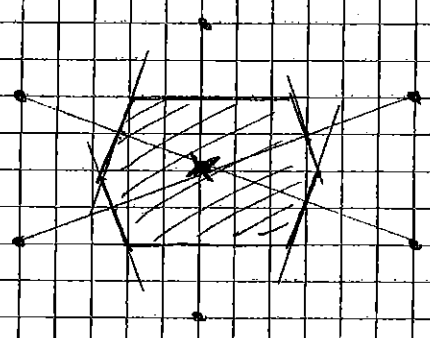
=> primitive Elementarzelle: Elementarzelle kleinstmöglicher Volumen

- oft wird auch größere Elementarzelle gewählt, die folgende Bedingungen erfüllt:
 - gegenüberliegende Flächen sind parallel
 - Elementarzelle ist Parallelepiped (Spat) ($V = |\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})|$)
 - Zelle möglichst klein, enthält aber alle Symmetrie
 - Koordinatenachsen schneiden sich unter 90° oder 120°
 - Koordinatensystem ist Rechtssystem

Wigner-Seitz-Zelle:

- bezeichnet spezielle Elementarzelle eines Kristallgitters, die nur 1 Gitterpunkt in ihrem Inneren enthält.
- alle Orte im Raum liegen diesem Gitterpunkt näher als dem nächsten Gitterpartner.
- Konstruktion:
 - verbinde Gitterpunkte
 - halbiere alle Verbindungen zu Mittelbaren durch Drorieren

=> geometrischer Körper, von Normal-Ebenen eingeschlossen
Wigner-Seitz-Zelle



=> häufig verwendet bei Beschreibung
mechanischer und elastischer
Eigenschaften von Festkörpern.

Reziprokes Gitter:

=> Gitter das entsteht, wenn man die Gittervektoren des realen Kristallgitters in einer anderen Basis darstellt: reziproke Gittervektoren

- alte Basisvektoren: $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

- neue Basisvektoren $\vec{a}' = \frac{2\pi}{V_E} \vec{b} \times \vec{c}$ Einheit: inverse Länge

$$\vec{b}' = \frac{2\pi}{V_E} \vec{c} \times \vec{a}$$

$$\vec{c}' = \frac{2\pi}{V_E} \vec{a} \times \vec{b}$$

$V_E = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$: Volumen der Einheitszelle

- Reziprokes Gitter existiert nicht im Ortsraum (\vec{r} -Raum), sondern im k-Raum (\vec{k} -Raum). (\vec{k} : Wellenvektor einer Welle)

- Regelmäßigkeit des Kristallgitters & Regelmäßigkeit des reziproken Gitters

- primitiv-kubisch -> primitiv-kubisch

kubisch-flächenzentriert -> kubisch-raumzentriert

kubisch-raumzentriert -> kubisch-flächenzentriert

- wichtig bei Beugungsexperimenten am Kristallgitter

=> Die Wigner-Seitz-Zelle des Reziproken Gitters heißt Brillouin-Zone

Brillouin - Zone:

- allg. unregelmäßiges Polyeder im k-Raum (k-Raum)
- Kristallimpuls eines Teilchens oder Quasiteilchens (Elektron, Loch etc.) wird als Vektor im reziproken Gitter angegeben.
- ein Quasiteilchen mit einem bestimmten Kristallimpuls \vec{k}_1 verhält sich exakt genauso wie eines, dessen Kristallimpuls \vec{k}_2 sich von \vec{k}_1 nur um einen Gittervektor des reziproken Gitters unterscheidet.
- für festes, aber vom Kristallimpuls abhängiges ω müssen nur alle Werte für Kristallimpulse innerhalb der 1. Brillouinzone bestimmt werden.

Gitterschwingung:

- ein Teil des Energieinhalts fester Körper steckt in der ständigen Bewegung des Atoms oder Moleküls.
- mit wachsender Temperatur steigt die mittlere Amplitude dieser oszillierenden Bewegungen an.
- Kristalle: einzelne Atome können sich nicht unabhängig voneinander bewegen.
- Gesamtenergie: Summe der Energie einer Schallwelle bestimmter Frequenz die den Kristall durchzieht → Gitterschwingungen
- thermische Eigenschaften (spez. Wärmekapazität, Wärmeleitkoeff, elektrischer Widerstand als Energie- und Impulsvertransport zwischen Elektronen und Phononen) können beschrieben werden, indem man den Gitterschwingungen Teilchen-Eigenschaften zurechnet → Phononen.

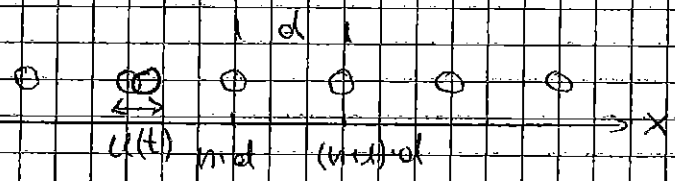
⇒ $E_{Phonon} = h \cdot \nu$

Phonon: - Quasiteilchen zur Beschreibung der gesamten mechanischen Gitterschwingungen im Kristall.

- delokalisiert existieren im gesamten Kristallgitter (≠ best. Ort)
- "optische Phononen": Atome der Einheitszelle ~~finden~~ gegeneinander
- "akustische Phononen" — " — — — — — gleichphasig

Gitterschwingungen: Modell der eindimensionalen Linearen Kette

- N identische Atome linear angeordnet, um Abstand a festgelegt



- Atome können nur um die Gittergitterpositionen X_n^0 hin- und herbewegen
- zeitabhängige Position: $X_n(t) = n \cdot a + u_n(t)$
↳ beschreibt Schwingung
- Rückstellkraft durch Hooke'sches Gesetz gegeben

$$F_{n,n+1} = -D(u_{n+1} - u_n); \quad F_{n,n-1} = D(u_{n-1} - u_n)$$

- Gesamtkraft auf Atome n :

$$F_n = D(u_{n+1} - u_n) + D(u_{n-1} - u_n)$$

- Wenn man die lineare Kette an einem Atome anstößt, breitet sich eine Welle entlang der Kette aus: alle Atome schwingen auf gleicher Frequenz (Ausbreitung).

- Bewegungsgleichung: $M \ddot{u}_n = D \cdot (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$

Ausatz für Schwingung: $u_n = \hat{u}_n \cdot e^{-i\omega t}$
 $\hat{u}_n = u \cdot e^{ikna}$

$e^{-i\omega t}$ = Atompозиtionen "fester" Welle e^{ikx} ab

$$\rightarrow -M\omega^2 u e^{ikna} = D \cdot u (e^{ik(n+1)a} + e^{ik(n-1)a} - 2e^{ikna})$$

$$\Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{4D}{M}} \cdot \left| \sin \frac{ka}{2} \right|; \quad X_n(t) = n \cdot a + u \cdot e^{i(kna - \omega t)}$$

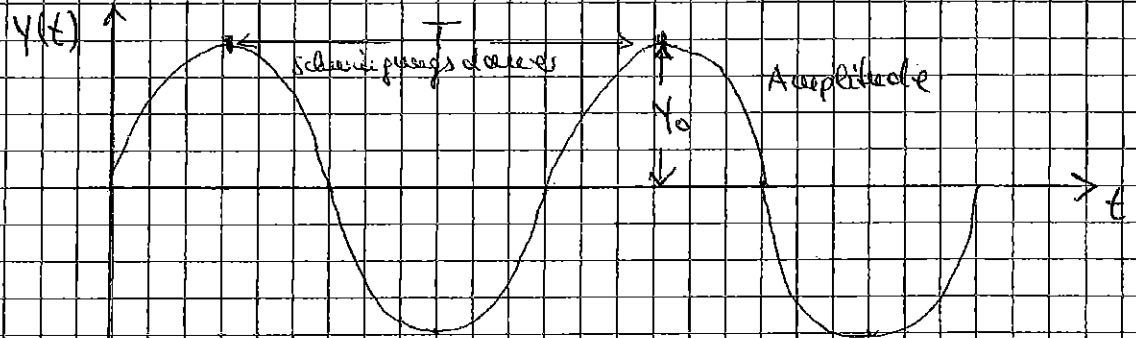
Phase

→ zur Phase $(k \cdot a)$ kann ein ganzzahliges Vielfaches von 2π addiert werden, ohne dass Wert von $X_n(t)$ zu verändern.

→ Dabei kann $(k \cdot a)$ auf dem Wertebereich $-\pi \leq k \cdot a \leq \pi$ eingeschränkt werden: 1. Brillouin-Zone

Phasengeschwindigkeit

- v_{ph} gibt an, mit welcher Geschwindigkeit sich die Phase einer Welle ausbreitet:



$$y(t) = A \cdot \sin(\omega t + \varphi) \quad ; \quad \varphi: \text{Phase}$$

$$\Rightarrow v_{ph} = \frac{\lambda}{T} = \lambda \cdot f = \frac{\omega}{k} \quad k = 2\pi/\lambda$$

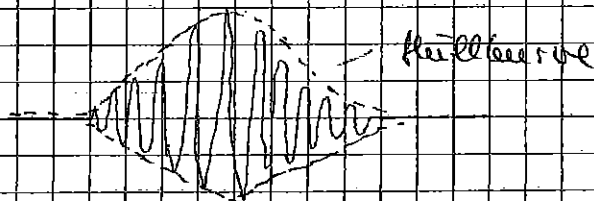
- Phasengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeit (S.G.) sind im Vakuum für elektromagnetische Wellen gleich der Lichtgeschwindigkeit:

$$v_{ph} = v_{gr} = c \quad (\text{im Vakuum})$$

- in Materie ist die Phasengeschwindigkeit frequenzabhängig
- \Rightarrow Dispersion

Gruppengeschwindigkeit

- Geschwindigkeit, mit der sich ein Wellenpaket als Ganzes fortbewegt
- Wellenpaket: Welle, deren Amplitude nur in einem begrenzten Raumgebiet \neq Null ist.



- mathematische Beschreibung:
über Fouriers-Reihe als Überlagerung von vielen Einzelwellen mit jeweils leicht verschiedenen Frequenzen.

- jede der Einzelwellen breitet sich mit einer bestimmten Phasengeschwindigkeit aus, die frequenzabhängig sein kann.
- die Wellenvektore bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit fort
- Form der Wellenvektore kann sich bei Dispersion während der Fortbewegung des Wellenpakets ändern:

$$v_{gr.} = \frac{d\omega}{dk} \neq v_{ph.} = \frac{\omega}{k} = \lambda \cdot f$$

↳ Geschwindigkeit an Stellen gleicher Phase

$$\Rightarrow v_{gr.} = \frac{d}{dk} (k \cdot v_{ph.})$$

$$= v_{ph.} + k \cdot \frac{dv_{ph.}}{dk} \quad (\lambda = 2\pi/k)$$

$$= v_{ph.} - \lambda \cdot \frac{dv_{ph.}}{d\lambda} \quad \left| \begin{array}{l} \text{da: } k \cdot \frac{dv_{ph.}}{dk} = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{-1} \cdot \frac{dv_{ph.}}{d(2\pi/\lambda)} \\ = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{-1} \cdot \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{dv_{ph.}}{d\lambda} \cdot \frac{d\lambda}{d(1/\lambda)} \\ = \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{dv_{ph.}}{d\lambda} \cdot \left\{ \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{1}{\lambda} \right) \right\}^{-1} \\ = \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{dv_{ph.}}{d\lambda} \cdot (-\lambda)^2 = -\lambda \cdot \frac{dv_{ph.}}{d\lambda} \end{array} \right.$$

- Vorstellung: $v_{gr.}$ = Geschwindigkeit, mit der das Wellenpaket ausbreitet oder Informationen durch den Raum transportiert (= Signalgeschwindigkeit des Wellenpakets)

⇒ korrekte Vorstellung, solange keine Verluste auftreten

- beachte: in Medien mit starken Verlusten kann $v_{gr.} > v_{ph.}$ werden, sogar $v_{gr.} > c$ (vgl. mit Vakuum) ist möglich.

⇒ seine Signalgeschwindigkeit bewegt aber immer $< c$ sein!

- $\omega(k)$: "Dispersionsrelation"

$$\omega \sim k \quad \wedge \quad v_{ph.} = v_{gr.}$$

⇒ am besten "zerfließt" die Wellenvektore des Wellenpakets während der Ausbreitung aufgrund der Dispersion.

Überblick über wichtige Größen!

Bezeichnung	Symbol	Beziehungen
Amplitude	A_0	$A_0 \perp k$: transversalwelle $A_0 \parallel k$: Longitudinalwelle
Wellenvektor	\vec{k}	in Ausbreitungsrichtung
Wellenzahl	k	$k = \vec{k} $
Wellenlänge	λ	$\lambda = 2\pi/k$
(Kreis-) Frequenz	ω	$\omega(\vec{k})$: Dispersionsrelation
Frequenz	f	$f = \omega / 2\pi$
Phasengeschwindigkeit	v_{ph}	$v_{ph} = \omega/k = \lambda \cdot f$
Gruppengeschwindigkeit	v_{gr}	$v_{gr} = d\omega/dk$
Phase	φ	$\varphi = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$