Theoretische Festkörperphysik

Tutorium Montag 14-16

PN 561 / PN 203

per email 1. Termin

Sprechstunde Die 13-14

PN 742

0) Einführung in die Vorlesung

Theorie des Festkörpers, quantenfeldtheoretische Behandlung und Methoden

<u>Festkörper</u>: große Anhäufungen atomarer Systeme ($10^2 - 10^3$ Atome, mehr als),

atomare Systeme sollten lokalisiert sein um Gleichgewichtslagen

(im Gegensatz zu Molekülen / Flüssigkeiten, die permanent durchmischt werden)

(Arbeitsdefinition, Grenzfälle?)

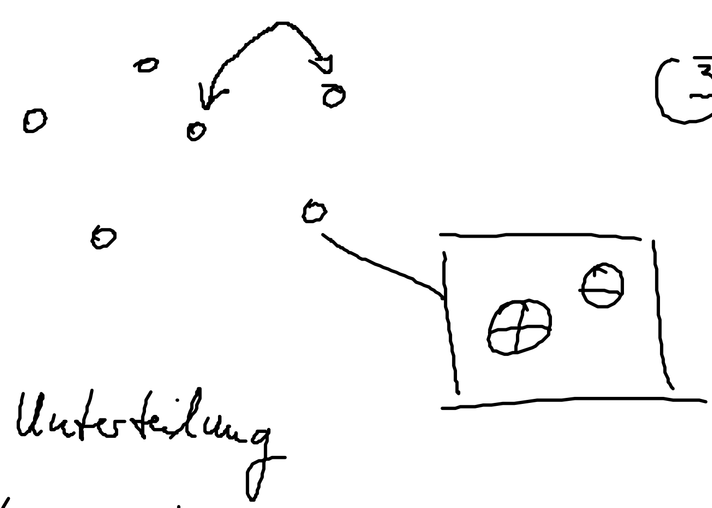
warum spannend?

a) FK als Modell für Quantenfeldtheorie (nichtrelativistisch)

b) Anwendungen auf der Nanoskala durch Materialstrukturierung

<u>Herangehen</u>:

① atomare Systeme



③ Wechselwirkung der Ladungsträger ($\longleftrightarrow$)

② Unterteilung der Ladungsträger in

Rumpfion und Außenelektronen

(„Ion") („Elektron")

- chemische Bindung
- Nichtgleichgewicht

Konsistente Behandlung von Ladungsträgern und elektromagnetischen Feldern

Ladungsträger	elektromagn. Felder
Strom $\vec{j}$	elektrisches Feld $\vec{E}$
Ladung ρ	magnetisches Feld $\vec{B}$
Schrödingergleichung enthält Felder als Quelle / Kräfte	Maxwellgleichungen enthält die Ladungsträger als Quelle der Felder

gekoppelt, zusammen lösen

Schrödingerfunktion $\Psi(\vec{r},t)$ Potentiale $\vec{A}, \phi(\vec{r},t)$

Quantenfeldtheorie : QT der Felder

Lagrangedichte → Hamiltondichte → Bewegungsgl. des Festkörpers

Inhaltlicher Überblick

Hamiltonian $H = H$ (Ionen, Elektronen, Felder)

lokalisierte Objekte (Schwingungen um Ruhelagen)

⇓

kollektive Schwingungen mittels kollektiver Koordinaten: „Phononen"

lokalisiert / beweglich im Potential der Ionen

⇓

Elektronen bekommen eine effektive Masse im Ionengitter „Quasielektronen"

interne Felder, anlegen von externe Felder (Optik, Transport)

Elektron – Phonon – Wechselwirkung

- neues Quasiteilchen: „Polaron“
- anziehende El-El-WW
  „Cooperpaare“
- elektrischer Widerstand

Elektron – Photon – WW

- „Exzitonen“
  (Loch + Elektron)

  \+ Photon

  „Polariton“

- Approximationen sind zentrales Thema der Vielteilchentheorie

kollektive Anregg.

gekoppelte Antwort viele Teilchen

Ion-Ion → Phonon

Quasiteilchen

Originalteilchen + Teile der Umgebung

→ neue Masse / Ladung

aber Bewegg wie freies Teilchen

I) Lagrange / Hamiltontechnik f. Feldquantisierg.

1) Wiederholung Lagrangetechnik f. Teilchen

betrachte 1 Teilchen in Potential V

Koordinaten $\vec{r}(t) = (x_1, x_2, x_3)$

Verallgemeinerung auf mehrere Teilchen $\hat{=}$ 1 Index mehr

$$L = L(x_i, \dot{x}_i) = T - V$$

gilt in konservativem System, T = kinet. Energie

$$L = \frac{m}{2}\left(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2\right) - \underbrace{\frac{k}{2}\left(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2\right)}_{\text{Oszillator}}$$

Schema: bestimme $\ddot{x}_i$ durch Lagrange gl.

$$\boxed{\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial L}{\partial x_i}}, \quad p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}$$

Lagrange gl. f. Massenpunkt, p_i ist Impuls

f. unser Bsp.:

$$\frac{d}{dt}(m\dot{x}_1) + k x_1 = 0, \quad p_1 = m\dot{x}_1$$

Bewegungsgl. f. Oszillator reproduziert

Hamilton funktion

$$\boxed{H = \sum_i \dot{x}_i p_i - L = H(x_i, p_i) = T + V}$$

In der QFT des Festkörpers wird statt Teilchen der Lagrangeformalismus auf Felder angewendet:

Schrödingerfeld $\longrightarrow$ Elektronen / Ionen

Maxwellfeld $\longrightarrow$ Photonen

Lagrangetechnik ist wichtig um eine Quantentheorie über die Vertauschungsrelationen von konjugierten Variablen aufzustellen

$\underbrace{\text{konjugierten Variablen}}_{x_i,\ p_i}$

$x_i, p_i \longrightarrow$ quantisiert durch Kommutator

$\psi \,,\ \Pi_\psi \longrightarrow$ — '' —

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}}$$

2. Lagrangetechnik f. Felder

betrifft $\phi, \vec{A}, \psi \rightarrow$ Funktion $(\vec{r}, t)$

Teilchentheorie $\vec{r}_i(t) \longrightarrow$ Feldtheorie $\phi_\alpha(\vec{r}, t)$

ϕ_α enthält $(\phi, \vec{A}, \psi)$

Lagrangefunktion L — Lagrangedichte $\mathcal{L}$

$$L = \int d^3r \, \mathcal{L}$$

$$L = L(\vec{r}_i, \dot{\vec{r}}_i) \longrightarrow \mathcal{L} = \mathcal{L}\Big(\phi_\alpha, \underbrace{\phi_{\alpha|t}}_{\frac{\partial}{\partial t}\phi_\alpha}, \underbrace{\phi_{\alpha|i}}_{\frac{\partial}{\partial x_i}\phi_\alpha}\Big)$$

heuristisch Übertragung:

$$t \rightarrow t, \vec{r}$$
$$i \rightarrow \alpha$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial x_{i|t}} = \frac{\partial L}{\partial x_i} \longrightarrow \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_{\alpha|t}} + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_{\alpha|i}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_\alpha}}_{\text{analog zu Lagrangegl. aus einem Minimalprinzip ableitbar}}$$

$$H = \sum_i \dot{x}_i p_i - L \longrightarrow H = \int d^3r \left(\sum_\alpha \phi_{\alpha|t} \Pi_\alpha - \mathcal{L} \right)$$

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \longrightarrow \Pi_\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_{\alpha|t}}$$

Quantik

$[x_i, p_i] \neq 0$	$[\phi_\alpha, \Pi_\alpha] \neq 0$
Teilchen quantisiert	Felder quantisiert

3. Lagrangegleichungen für freie Felder

Schrödingerfeld Ψ, Maxwellfelder $\phi, \vec{A}$ (Vakuum) aber ohne Wechselwirkung zwischen den beiden

3.1. Das freie Schrödingerfeld (Ion, Elektronen)

Ziel: $\mathcal{L}_S$ finden + Schrödingergl. reproduzieren

$$\mathcal{L}_S\left(\psi^{(*)}, \psi_{,t}^{(*)}, \psi_{,i}^{(*)}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla\psi^* \nabla\psi} - \frac{i\hbar}{2}\left(\underline{\psi^*_{,t}\psi} - \underline{\psi^*\psi_{,t}}\right)$$

wird geraten analog wie wir L für harmon. Oszillator „geraten" haben, zeigen Gültigkeit Schrödingergl.

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{,t}} + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{,i}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = -\frac{i\hbar}{2}\psi^*_{,t}, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{,t}} = \frac{i\hbar}{2}\psi^*$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{,i}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial \psi_{,i}}\sum_k \psi^*_{,k}\psi_{,k} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_k \psi^*_{,k}\delta_{ik}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi^*_{|i}$$

Einsetzen in Lagrange Feldgl.

$$\frac{i\hbar}{2}\,\partial_t \psi^* - \frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\,\psi^*_{|i} = -\frac{i\hbar}{2}\,\psi^*_{|t}$$

$$-i\hbar\,\partial_t \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i}\,\psi^*$$

ergibt also die Schrödingergl.

$\longrightarrow$ $\mathcal{L}_S$ ist richtig