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

Festkörper: große Anhäufunge atomarer Systeme ($10^2 - 10^3$ Atome, mehr als),
atomar Systeme sollten lokalisiert sein

um Gleichgewichtslagen

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

(Arbeitsdefinition, Grenzfälle?)

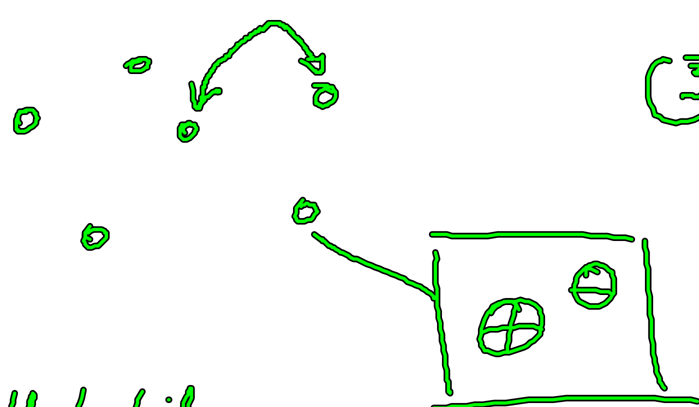
Warum spannend?

a) FK als Modell für Quantenfeldtheorie
(nichtrelativistisch)

b) Anwendungen auf der Nanoskala
durch Materialstrukturierung

<u>Herangehen:</u>

① atomare Systeme



③ Wechselwirkung der Ladungsträger
(⟷)

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)

$\Downarrow$

kollektive Schwingungen mittels kollektiver Koordinaten: „Phononen"

lokalisiert / beweglich im Potential der Ionen

$\Downarrow$

Elektronen bekommen eine effektive Masse im Ionengitter „Quasielektronen"

interne Felder, anlegen von externen Feldern (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 vieler 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.

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

Lagrange gl. f. Massenpunkt, p_i ist Impuls

f. unser Bsp.:

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

Bewegungsgl. f. Oszillator reproduziert

Hamiltonfunktion

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

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

Schrödingerfeld $\rightarrow$ Elektronen / Ionen

Maxwellfeld $\rightarrow$ Photonen

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

$x_i, p_i \rightarrow$ quantisiert durch Kommutator

$$\psi\,,\ \Pi_\psi \longrightarrow \quad - \quad '' \quad -$$

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

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 $\mathcal{L}$

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

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

heuristische 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

$$[x_i, p_i] \neq 0 \qquad\qquad [\phi_\alpha, \Pi_\alpha] \neq 0$$

Teilch. 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, Elektron)

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

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

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

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

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

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi_{,i}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial\psi_{,i}}\sum_n \psi^*_{,n}\psi_{,n} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_n \psi^*_{,n}\delta_{in}$$

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

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