

Theoretische Festkörperphysik

Organisatorisches

VL Di 10¹⁵ - 12⁰⁰ Grundlagen (Malic)
VL Fr 10¹⁵ - 12⁰⁰ Methoden (Knorr)

Übung Mi 14¹⁵ - 16⁰⁰ (Milde)

VL-Skript auf

<http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss09/wpfv/efp/>

Sprechstunden:

Di 13⁰⁰ Prof. Knorr EW 742

Fr 9⁰⁰ Ermin } EW 703
Mi 16⁰⁰ Frank }

Programm

- I. Einführung (Motivation)
 - II. Elektronisches Teilsystem (Bloch-Theorem)
 - III. Teilsystem der Ionen (Phononen, Gitterschw.)
 - IV. Elektron-Phonon-Wechselwirkung (Polaron)
 - V. Elektronischer Transport (Widerstand)
 - VI. Elektron-Elektron-WW (Hartree-Fock-Näherung, Exzitonen, Abschirmung...)

 - VII. Optische Eigenschaften von Festkörpern (Lineare Optik, Absorptionsspektren)
-

I. Einführung

Festkörperphysik - Eigenschaften von Materie im festen Aggregatzustand, insbes. elektronischer und thermische Eigenschaften kristalliner Körper
(periodische Struktur \rightarrow Translationssymmetrie)

Festkörper - große Anhäufungen von atomaren Systemen ($\sim 10^{23}$), die nahe Gleichgewichtspositionen lokalisiert sind (durch chem. Bindung)

Methoden: Quantenmechanik
Statistische Physik

Problem: i. A. Festkörper nicht exakt beschreibbar infolge der WW der vielen Teilchen untereinander

Zentrales Konzept:

Quasiteilchen $\hat{=}$ Originalteilchen + Teil der Umgebung

\Rightarrow neue WW-freie Teilchen mit effektiver Masse oder Ladung

z. B. Polaron (Elektron im Gitter)
Exziton (gebundenes Elektron-Loch-Paar)
Phononen (kollektive Gitterschwingungen)

Vorgehensweise:

Teilaspekte des allg. Problems werden betrachtet
(entscheidend um bestimmte Phänomene zu verstehen)

H Hamilton-Operator allg.
 \Downarrow Näherung

eff. Hamiltonian für das
Teilproblem H_{eff}

Motivation:

Grundlegendes Verständnis physikalischer
Phänomene auf mikroskopischer Ebene

(Materie-Licht-WW, Elektron-Elektron-WW,
Transport, Supraleitung)

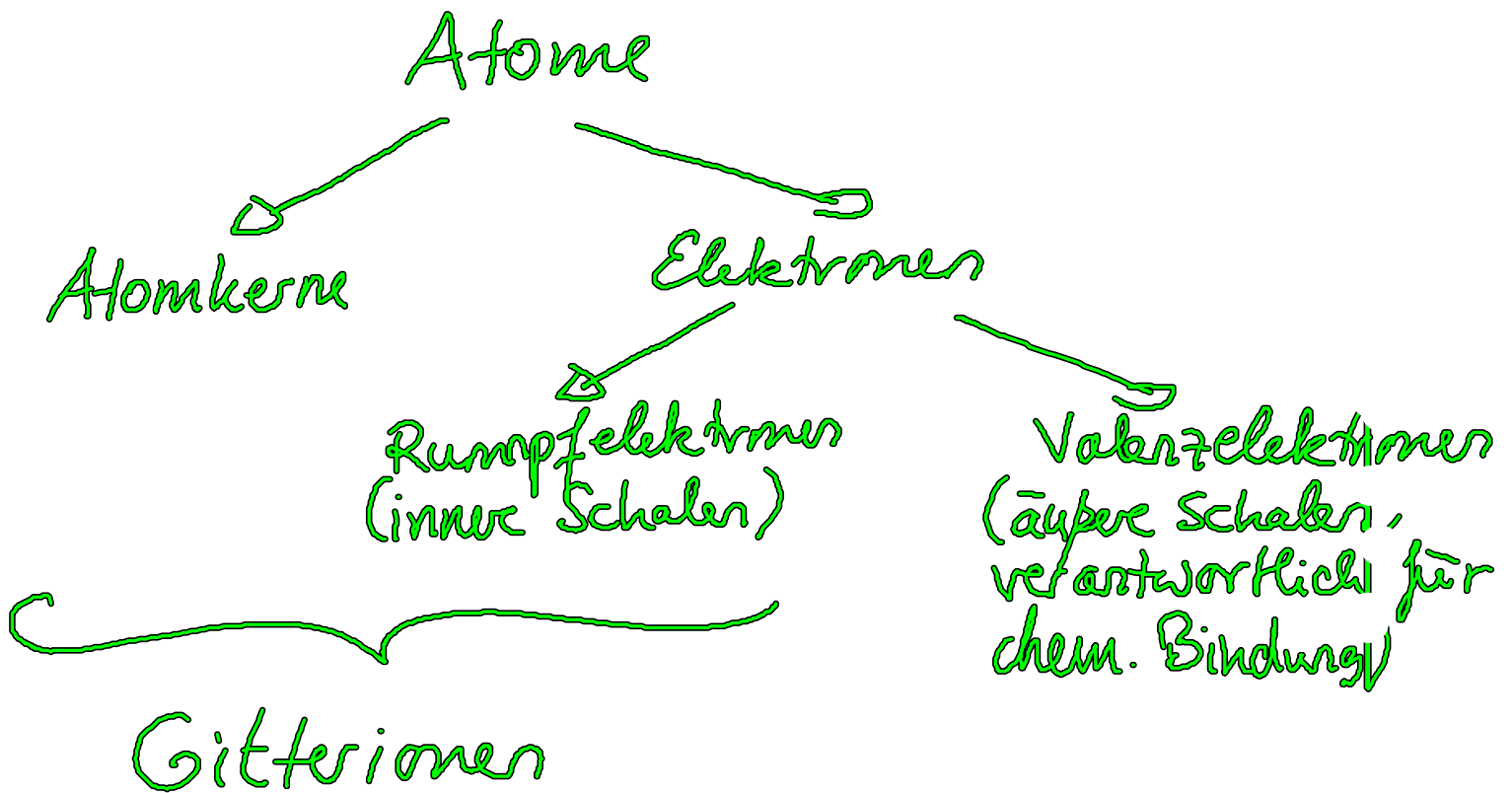
\Rightarrow Anwendung (Laser, Verstärker)

Übertragung der theoretischen Methoden
auf niederdimensionalen Nanostrukturen,
z.B. Quantenfilme (2D), Nanotubes (1D),
Quantenpunkte (0D)

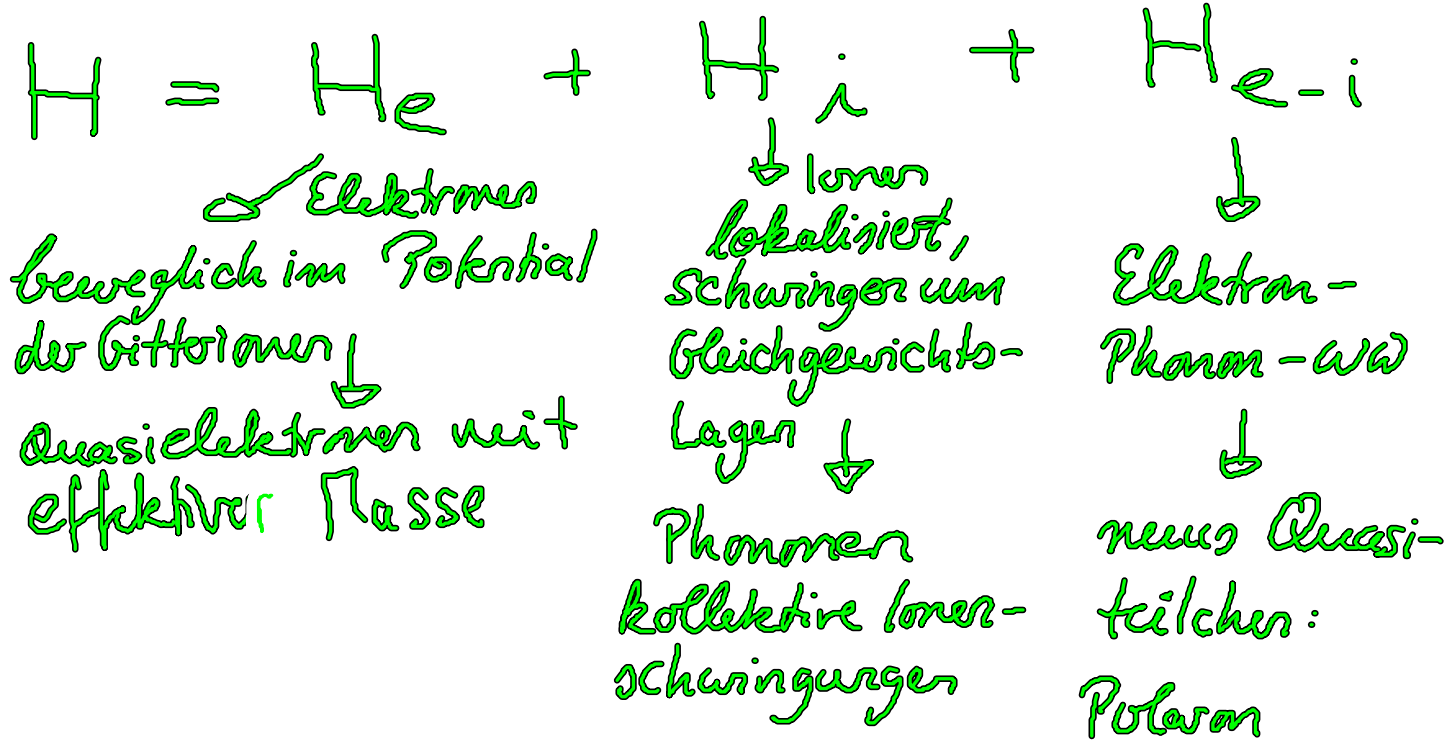
⇒ neue, leistungsstarke
Anwendungen (molekulare Schalter,
Biosensoren etc.)

2. Born-Oppenheimer-Näherung:

Entkopplung der Elektronen- und Gitterdynamik



Aufteilung des Gesamtsystems (FK) in
Teilsysteme: Gitterionen und (Valenz-)Elektronen



Polaron: Elektronbewegung im Kristall

\rightarrow Polarisation in der Umgebung infolge
 der Ladung des Elektrons

\rightarrow Verzerrung des Gitters

Die Polarisationswolke bewegt sich zusammen
 mit dem Elektron und bewirkt eine Veränderung
 der effektiven Masse

"nacktes" Elektron + Polarisationswolke $\hat{=}$ Polaron

Teilsystem der Elektronen

$$H_e = H_{e,kin} + H_{e-e} = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{p_i^2}{2m_e} + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{(i \neq j)} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|}$$

$N_e \hat{=}$ Zahl der Valenzelektronen

Teilsystem der Ionen

$$H_i = H_{i, \text{kin}} + H_{ii} = \sum_{\alpha=1}^{N_i} \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V_{ii}(R_{\alpha} - R_{\beta})$$

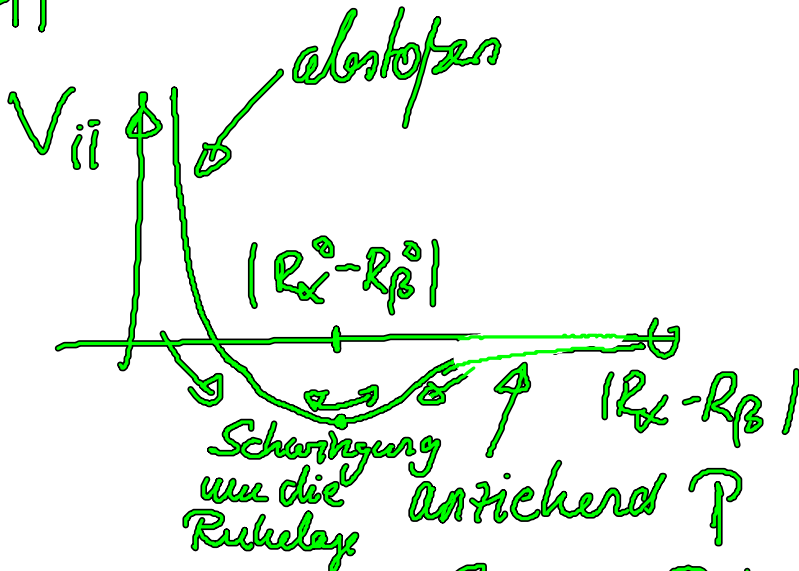
$N_i \hat{=}$ Zahl der Ionen

Falls nur Atomkerne (ohne Rumpfelektronen) betrachtet werden:

$$V_{ii}(R_{\alpha} - R_{\beta}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{|R_{\alpha} - R_{\beta}|}$$

mit Kernladungszahlen Z_{α}, Z_{β}

Rumpfelektronen führen zu einem abgeschirmten effektiven Potential



Um einen stabilen Kristall zu beschreiben, muss V_{ii} ein stabiles Minimum als Fkt. des Abstandes zweier Ionen

z. B. Lennard-Jones - Potential

Vorgehensweise, um V_{ii} zu bestimmen

Annahme: kleine Auslenkungen

⇒ Taylorentwicklung um die Ruhelage $U_{\alpha\beta}^n U_{\alpha\beta}^m$

$$H_{ii} = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} V_{ii}(R_{\alpha\beta}^0)}_{\text{Coulomb-WW zwischen ruhenden Ionen} \cong \text{Bindungsenergie}} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{1}{2!} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{n,m} \frac{\partial^2 V_{ii}(R_{\alpha\beta})}{\partial R_{\alpha\beta}^n \partial R_{\alpha\beta}^m}}_{\Phi_{\alpha\beta}^{nm}} \bigg|_{R_{\alpha\beta}^0}$$

H_{ii} lässt sich als quadratische Form der Auslenkung der Ionen darstellen → Beitrag der potentiellen Energie gekoppelter harmonischer Oszillatoren mit $\Phi_{\alpha\beta}^{nm}$ als Kraftkonstante

Die quadratische Form kann diagonalisiert werden ⇒ H_i Summe kollektiv ungekoppelter Oszillatoren: Phononen

WW der beiden Teilsysteme

$$H_{e-i} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{e-i}(r_i - R_{\alpha})$$

Im Falle "nachts" Atomkerne: $V_{ei} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|}$

Genauer Taylorentwicklung:

$$H_{e-i} = \underbrace{\sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{ei}(|r_i - R_\alpha|)}_{\text{Elektronenbewegung im statischen Potential der Ionen He-⁽⁰⁾-i}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} \vec{u}_\alpha \cdot \vec{\nabla}_{R_\alpha} V(|r_i - R_\alpha|)}_{\text{WW der Elektronen mit dem zeitabh. Potential der Ionen } \psi_\alpha(t)}$$

Elektronenbewegung im statischen Potential der Ionen He-⁽⁰⁾-i

WW der Elektronen mit dem zeitabh. Potential der Ionen $\psi_\alpha(t)$

\Rightarrow Gitterverzerrungen

He-p

Exakte Lösung des Gesamtsystems nicht möglich.

Born-Oppenheimer Näherung: Entkopplung der Elektronen- und Atomkern-Bewegung

Begründung: Infolge der viel größeren Masse der Ionen ($\sim 10^4$) ist die Ionenbewegung so langsam, daß sich die Elektronen fast instantan an die neuen Konfigurationen anpassen können.

(adiabatische Näherung)

Näherung nur exakt für $M_\alpha \rightarrow \infty$
unendlich schwere, ruhende Atomkerne

Herangehensweise:

- 1) Beschreibung der Elektronenbewegung im starren Ionengitter $H = H_e + H_{e-i}^{(0)}$
- 2) Beschreibung der Atomkernbewegung im homogenen "Elektronensee" $H = H_i$
- 3) Störungstheoretische Behandlung der Elektron-Phonon-WW $H = H_{e-p}$

Math. Begründung der Born-Oppenheimer-Näherung

Infolge der schweren Masse wird die kin. Energie der Atomkerne als Störung aufgefasst

$$H = H_0 + H_1$$

$$\text{mit } H_0 = H_{e,kin} + H_{e-e} + H_{e-i}$$

$$H_1 = H_{i,kin}$$

Annahme: Die zu H_0 zugehörige Schrödingergl. lösbar

$$* \quad H_0 \Phi_\alpha^R(r) = \epsilon_\alpha^R \Phi_\alpha^R(r)$$

H_0 beschreibt das Problem von N_e WW Elektronen im statischen Potential, das von N_i Atomkernen an

fixierten Positionen R erzeugt wird.

In $\Phi_\alpha^R(r)$ gehen Kernpositionen als Parameter ein. $\{\alpha\} \hat{=}$ vollständiger Satz von elektr. Quarkszahl

Allg. Wellenfkt. $\psi(r, R)$ kann nach den $\Phi_\alpha^R(r)$ für jedes R entwickelt werden

$$\psi(r, R) = \sum_{\alpha} \underline{\chi_{\alpha}(R)} \Phi_{\alpha}^R(r)$$

Ziel ist die Lösung des Gesamteigenwert-Problems

$$H \psi(r, R) = E \psi(r, R)$$

χ_{α} sollen bestimmt werden

$$\begin{aligned} (H - E) \psi(r, R) &= \sum_{\alpha} (H_0 + H_S - E) \chi_{\alpha}(R) \Phi_{\alpha}^R(r) \\ &\stackrel{*}{=} \sum_{\alpha} (\epsilon_{\alpha}^R + H_S - E) \chi_{\alpha}(R) \Phi_{\alpha}^R(r) = 0 \end{aligned}$$

$$\sum_{\beta} \int \Phi_{\beta}^{R*}(r) \left[\epsilon_{\alpha}^R - E - \sum_{i=1}^{N_1} \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_{R_i}^2 \right] \chi_{\alpha}(R) \Phi_{\alpha}^R(r) dr = 0 \quad \left| \begin{array}{l} \Phi_{\beta}^{R*}(r) \\ \int dr \end{array} \right.$$

$$\left(\Phi_{\alpha}^R(r) \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} \chi_{\alpha}(R) \right) + \chi_{\alpha}(R) \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} \Phi_{\alpha}^R(r) + 2 \frac{\partial}{\partial R_1} (\Phi_{\alpha}^R(r)) \frac{\partial}{\partial R_1} \chi_{\alpha}(R) \int \Phi_{\beta}^{R*} \Phi_{\alpha} dr = \delta_{\beta\alpha}$$

$$(\epsilon_{\beta}^R - E + H_S) \chi_{\beta}(R) - \sum_{\alpha} A_{\alpha\beta}(R) \chi_{\alpha}(R) = 0 \quad \text{orthonormal}$$

$$A_{\alpha\beta} = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \int dr \left[\phi_{\beta}^{2\alpha}(r) \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} \phi_{\alpha}^R(r) + \phi_{\beta}^{2\alpha}(r) \frac{\partial}{\partial r_i} (\phi_{\alpha}^R(r)) \frac{\partial}{\partial r_i} \right]$$

$\hat{=}$ Übergangsmatrixelemente zwischen verschiedenen elektron. Zuständen α, β der Ionenbewegung

\Rightarrow Schrödingergl. nur für die Atomkerne, die sich im effekt. Potential ϵ_{β}^R befinden

$$(H_S + \epsilon_{\beta}^R) \chi_{\beta}(R) = E \chi_{\beta}(R)$$

für $A_{\alpha\beta} \rightarrow 0$