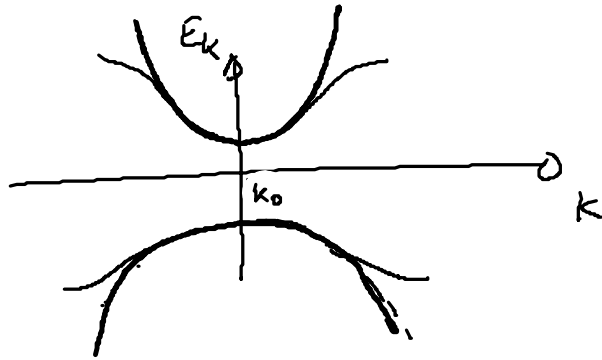


2.3. Effektive Masse - Näherung



- Sprechstunderänderung
Fr 13⁰⁰-14⁰⁰ EW 703
- 3. Zettel ab Donnerstag
im Netz

Elektronische und optische Eigenschaften

→ kleiner Bereich um das Bandextremum wichtig

Parabolische Näherung um k_0 herum

↓
Beschreibung von freier Elektronen. Einfluß des Gitters drückt sich in einer effektiven Masse aus \Rightarrow Krümmung des Bandes

Taylorentwicklung um das Bandextremum

$$\bar{E}_\lambda(k) = \bar{E}_\lambda(k_0) + \left. \frac{\partial \bar{E}_\lambda(k)}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0)$$

↙
0 da Minimum bei k_0

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \bar{E}_\lambda(k)}{\partial k_i \partial k_j} (k_i - k_{i0}) (k_j - k_{j0})$$

$$= E_{\lambda}(k_0) + \sum_{ij} \frac{\hbar^2}{2m_{ij}^*} (k_i - k_{i0})(k_j - k_{j0})$$

mit der effektiven Masse $\frac{1}{m_{ij\lambda}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E_{\lambda}(k)}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{k_0}$

Im Falle eines isotropen Kristalls und $k_0 = 0$

$$E_{\lambda}(k) = E_{\lambda}(k_0 = 0) + \frac{\hbar^2}{2m_{\lambda}^*} k^2$$

Je größer die effektive Masse, desto kleiner die Krümmung des Bandes.

3. Zustandsdichte

Bandstruktur \Rightarrow volle Dispersionsrelation für Elektronen
Häufig nur wichtig, in welchem Energiebereich Zustände möglich

$$g(E) = \frac{1}{N} \sum_{\lambda k} \delta(E - E_{\lambda k}) \quad \text{Zustandsdichte}$$

$g(E) \Delta E \cong$ Zahl der Zustände im Energieintervall zwischen E und $E + \Delta E$

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad \text{freie Elektronen}$$

für ein Band λ

3D

$$g(\bar{E}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{N} \frac{1}{2} \int d^3k \delta(E - E_k)$$

$$= \frac{V}{N} \frac{1}{4\pi^3} \frac{m}{\hbar^2} 4\pi \int_0^\infty dE_k k \delta(E - E_k)$$

$$= \frac{V}{N} \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$$

2D

$$\sum_k \rightarrow \frac{L^2}{(2\pi)^2} \int d^2k$$

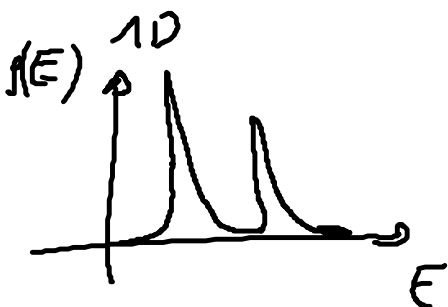
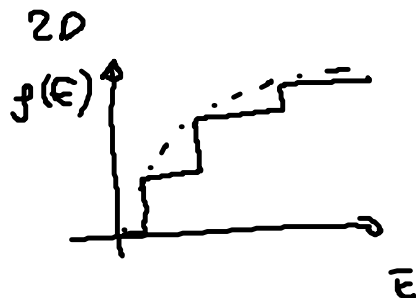
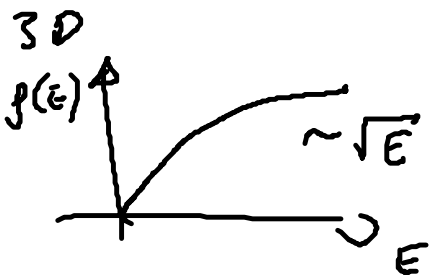
$$g_{2D}(\bar{E}) = \frac{L^2}{N} \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_\lambda \Theta(E - E_\lambda)$$

1D

$$g_{1D}(E) = \frac{L}{N} \frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sum_\lambda \frac{1}{\sqrt{E - E_\lambda}}$$

0D

$$g(E) = \frac{2}{N} \sum_\lambda \delta(E - E_\lambda)$$



Zusammenfassung zu Kapitel II (Elektronen)

→ Bloch-Theorem $\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik \cdot r} u_k(r)$

Eigenfkt. \Rightarrow ebene Welle, die gitterperiodisch moduliert sind

→ Schrödingergl. für $u_k(r)$ (Blochfaktoren)

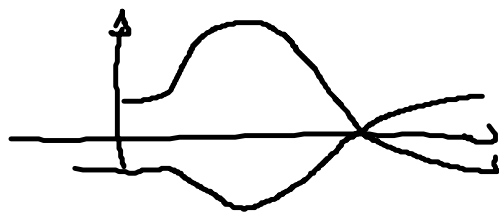
$$H u_k(r) = \left[\frac{\hbar^2}{2m} (-i\nabla + k)^2 + V(r) \right] u_k(r) = E_k u_k(r)$$

→ Bandstruktur

• freie Elektronen $E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$, $\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik \cdot r}$

• Tight binding am Beispiel von Graphen $E_{k\lambda} = \frac{E_{2p} \pm \gamma_0 \sqrt{f(k)}}{1 \pm S_0 \sqrt{f(k)}}$

$$\psi_u(r) = \sum_i c_i \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_n} e^{ik \cdot R_n} \varphi_i(r - R_n)$$



• effektive Masse - Näherung

$$E_{\lambda k} = E_{\lambda(0)} + \frac{\hbar^2}{2m_{\lambda}^*} k^2$$

$$\text{mit } \frac{1}{m_{\lambda}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E_{\lambda k}}{\partial^2 k} \right)_0$$

III. Teilsystem der Ionen

Gitterschwingungen:

1. Harmonische Näherung

Bisher: Gitterionen als unbeweglich angenommen
Elektronenbewegung im starren Ionenraster

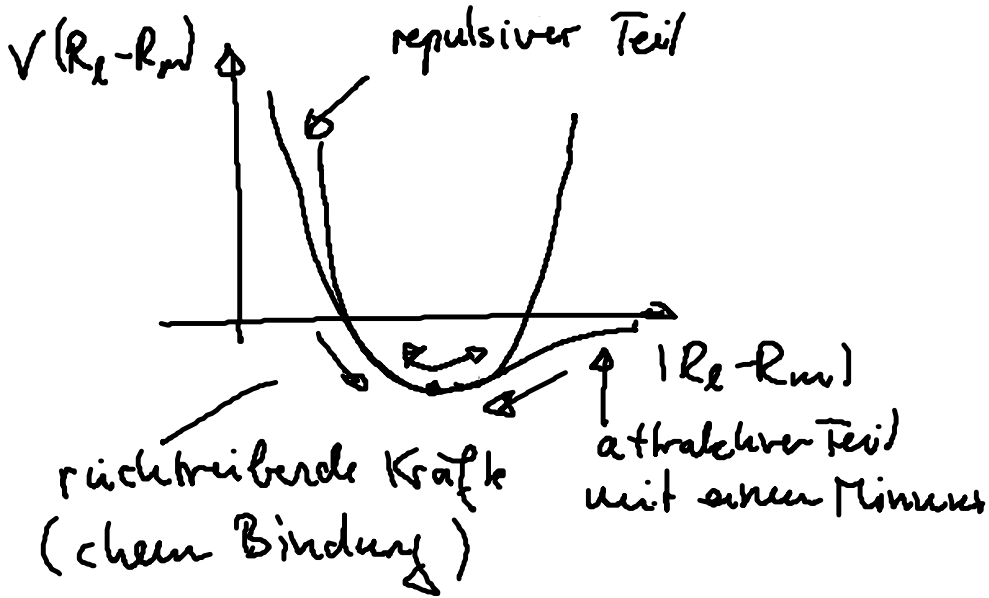
Jetzt: Anregungen der Ionen in einem homogenen
"Elektronensee"

Aufgrund der starken Ion-Ion-Wechselwirkung wird die Auslenkung eines einzelnen Gitterions schnell auf das gesamte Gitter übertragen: Aus der lokalen wird eine kollektive Anregung \Rightarrow Quantisierung der Gitterschwingungen
(einzelne Quanta: Phononen)

Effektives Potential für N miteinander wechselwirkende Ionen

\rightarrow Summe von Zweiteilchenpotentialen

$$V(R_1, \dots, R_N) = \frac{1}{2} \sum_{l \neq m} V(|R_l - R_m|)$$



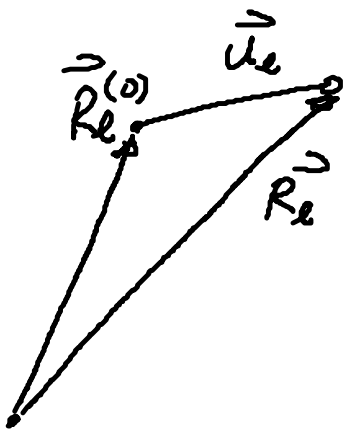
Ein Beispiel: Lennard-Jones-Potential

$$V(r) = A \left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - B \left(\frac{r_0}{r}\right)^6$$

\uparrow repulsiv \uparrow attraktiv

Für kleine Auslenkungen aus dem GG kann das Potential bis zur 2. Ordnung um die GG-Orte Taylor-entwickelt werden (harmonische Näherung)

$$V_{\text{eff}}(R_1, \dots, R_N) = V(R^{(0)}) + \sum_{\alpha} \frac{\partial V}{\partial R_{\alpha}} \Big|_{R^{(0)}} u_{\alpha}$$



da V_{eff} minimal $(R_1^{(0)}, \dots, R_N^{(0)})$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{\partial^2 V}{\partial R_{\alpha} \partial R_{\beta}} \Big|_{R^{(0)}} u_{\alpha} u_{\beta}$$

Auslenkungen u_e i.R. $< 5\%$ des Gitterabstandes
 \rightarrow höhere anharmonische Terme

vernachlässigbar

Die zweiten Ableitungen bilden eine $3N \times 3N$ Matrix
der-atmaren Kraftkonstanten

$$\Phi_{lm}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 V}{\partial R_{l\alpha} \partial R_{m\beta}} \Big|_{R^{(0)}}$$

↖ Richtungen (x, y, z)

↗ l, m

- $\Phi_{lm}^{\alpha\beta} u_{l\alpha} \equiv$ Kraft in β -Richtung, die auf das m -Atom ausgeübt wird, wenn das l -Atom in α -Richtung um $u_{l\alpha}$ ausgelenkt wird
(EZ)

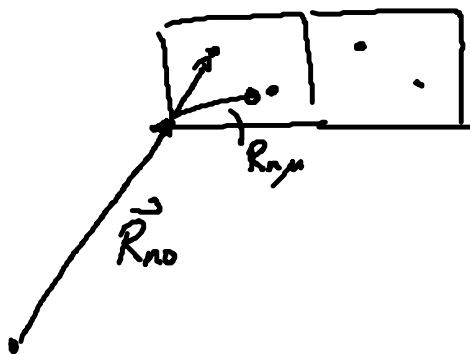
Verallgemeinerung: Einheitszelle beinhaltet mehr als ein Atom

$$l \rightarrow (n, \mu)$$

↗ ↘
Atom

$$\vec{R}_{n\mu} = \vec{R}_{n0} + \vec{R}_{\mu} + \vec{u}_{n\mu}$$

EZ



2. Klassische Theorie der Gitterschwingungen

$$\dot{p}_{n\mu}^{\alpha} = m_{n\mu} \ddot{U}_{n\mu}^{\alpha} = - \frac{\partial H}{\partial U_{n\mu}^{\alpha}} = - \frac{\partial V}{\partial U_{n\mu}^{\alpha}}$$

$$= - \sum_{\alpha' \mu' n'} \Phi_{n\mu n'}^{\alpha \alpha'} U_{n'\mu'}^{\alpha'}$$

Bewegungsgl für die α -Komponente der Auslenkung des μ -ten Ions in der n -ten BZ

Eigenschaften der Φ 's:

i) Symmetrisch: $\Phi_{n\mu n'}^{\alpha \alpha'} = \Phi_{n'\mu' n}^{\alpha' \alpha}$
Vertauschen der partiellen Ableitung

ii) Translationsinvariant \rightarrow Abhängigkeit nur vom
Relativabstand $R_{n0} - R_{n'0}$

$$\Phi_{n\mu n'}^{\alpha \alpha'} = \Phi_{n\mu n'}^{\alpha \alpha'} (R_{n0} - R_{n'0})$$

iii) $\sum_{n\mu} \Phi_{n\mu n'}^{\alpha \alpha'} = 0$ bei gleichmäßiger Auslenkung aller Atome wird der ganze Kristall verschoben, ohne dass Kraft zwischen den Ionen hervorgerufen wird

Ansatz für die Lösung der Bewegungsgl.:

$$U_{\mu}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}}} \underbrace{A_{\mu}^{\alpha}(q) e^{iq \cdot R_{n0} - i\omega q t}}_{\text{Welle durchs-Medium mit Dispersionsrelation } \omega(q)}$$

↗
Normierung

Einsetzen:

$$\omega_q^2 A_{\mu}^{\alpha}(q) = \sum_{\alpha' \mu'} \phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'} \frac{1}{\sqrt{m_{\mu} m_{\mu'}}} e^{iq \cdot (\underbrace{R_{n0} - R_{n0}}_{-R_{n1}})} A_{\mu'}^{\alpha'}(q)$$

Eigenwertgl. für die symmetrische Matrix $\phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'}$
(dynamische Matrix) mit $d \times d$ Eigenwerte
 ↗ ↕ ↖
 Dimension Ionen Atome in EZ

Mit

$$\phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'}(q) = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu} m_{\mu'}}} \sum_{n_1} \phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'}(R_{n1}) e^{-iq \cdot R_{n1}}$$

↖
Summe über alle EZ

folgt

$$\omega_q^2 A_{\mu}^{\alpha}(q) = \sum_{\mu' \alpha'} \phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'}(q) A_{\mu'}^{\alpha'}(q)$$

Eigenwertgleichung für die Fourier-transformierte dynamische Matrix $\Phi_{\mu\mu'}^{\alpha\alpha'}(q)$

Dispersionsrelation der Welle ω_q ist gegeben durch die Eigenwerte der $3p \times 3p$ Matrix

Für jedes q gibt es $3p$ Eigenwerte $\omega_j(q)$ (Moden) mit entsprechender Eigenvektoren $e_{\mu\alpha}^{(j)}$

Insgesamt die Lösung

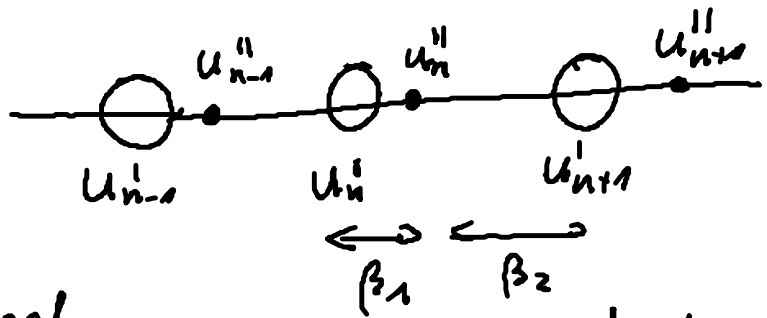
$$\vec{u}_{n\mu}^{(j)} = \frac{1}{\sqrt{m_{\mu}}} \vec{e}_{\mu}^{(j)} e^{i[\vec{q} \cdot \vec{R}_n - \omega_j(q)t]}$$

Zerlegung in p 3dim

Vektoren $e_{\mu}^{(j)}$ in Richtung der Auslenkung des μ -ten

Atoms: Polarizationsvektor

Klassifizierung der Moden am Beispiel einer 2-atomigen linearen Kette



Aufstellen der Bewegungsgl

$$m^I \ddot{u}_n^I = -\beta_1 (u_n^{II} - u_n^I) - \beta_2 (u_n^{II} - u_{n+1}^I)$$

$$m^{II} \ddot{u}_n^{II} = -\beta_1 (u_n^{II} - u_n^I) - \beta_2 (u_n^{II} - u_{n+1}^I)$$

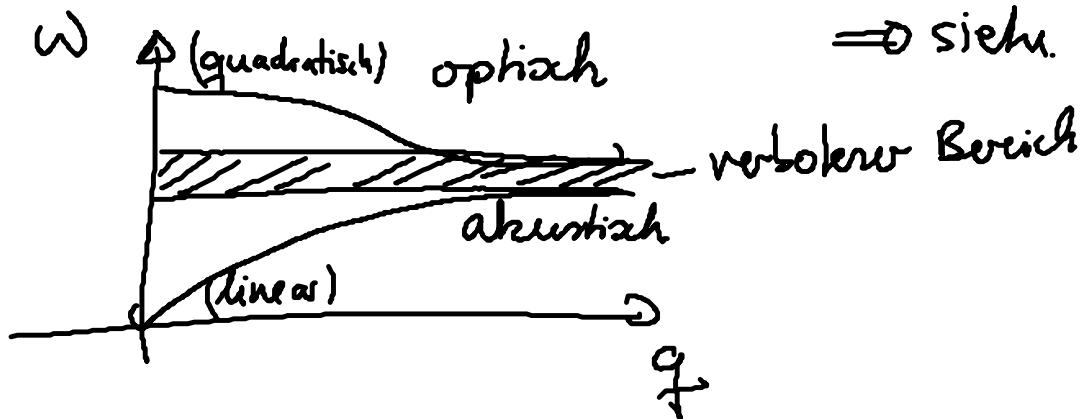
$$d=1$$

$$p=2$$

2×2 Matrix

$\Rightarrow 2$ Eigenwerte

$$\omega_{1,2}^2(q) = \frac{\Delta}{2} \omega_0^2 \left[1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\Delta}{2} q a_0} \right] \quad \text{Gitterkonstante}$$



\Rightarrow siehe Übergangsblatt

\Rightarrow zwei Zweige getrennt durch eine Frequenzlücke.

- akustischer Zweig

$$\omega_1(0) = 0$$

$$\omega_1(q) \approx \frac{\Delta}{q} \omega_0 \gamma a_0 q \quad \text{Taylor um } q=0$$

benachbarte Atome schwingen in gleicher Phase (Schallwellen)

- optischer Zweig

$$\omega_2(0) = \omega_0$$

$$\omega_2(q) \approx \omega_0 \left(1 - \frac{\gamma^2 a_0^2}{32} q^2 \right)$$

Allgemein: $d \cdot p$ Moden

davon d akustisch

$d(p-1)$ optisch

\Rightarrow d.h. für einatomige EZ gibt es keine optischen Moden

Anderer Klassifizierung:

longitudinale und transversale Zweige

Auslenkung parallel oder senkrecht zum Wellenvektor q

TO, LO, TA, LA Zweige

3. Quantenmechanik der Gitterschwingungen

3.1. Hamilton-Funktion

$$H(U_{\mu\alpha}^{\alpha}, p_{\mu\alpha}^{\alpha})$$

Ziel: Darstellung in Normalkoordinaten, in denen die

Darstellung der Auslenkung $u_{\mu\alpha}^{\alpha}$ $U_{\mu\alpha}^{\alpha}$ entkoppelt sind
nach Fourier-Amplituden

$$\sqrt{m_{\mu}} u_{\mu\alpha}^{\alpha}(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \sum_q \underbrace{A_{\mu}^{\alpha}(q, j)}_{\text{vollst. Flkt. System}} e^{iq \cdot R_n} Q_j(q, t)$$

nach allen Moden aufsummieren mit Gewichtungsfaktoren

Entwicklungskoeffizient (beinhaltet $e^{-i\omega_j^{\alpha} t}$)

$$\sum_{\mu\alpha} A_{\mu}^{*\alpha}(q, j) A_{\mu}^{\alpha}(q, j) = \delta_{jj'}$$

$$u_{\mu\alpha}^{\alpha} \text{ sind reell} \Rightarrow A_{\mu}^{\alpha}(q, j) = A_{\mu}^{\alpha*}(-q, j)$$

$$Q_j^{*}(q, t) = Q_j(-q, t)$$

\Rightarrow Hamilton-Flkt

$$H = H_{kin} + H_{pot} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\alpha} m_{\mu} (\dot{u}_{\mu}^{\alpha})^2 + \frac{1}{2} \sum \Phi_{\mu\nu}^{\alpha\alpha'} u_{\mu}^{\alpha} u_{\nu}^{\alpha'}$$

einsetzen $= \frac{1}{2} \sum_{j,j'} \left(\dot{Q}_j^*(q,t) \dot{Q}_{j'}(q,t) + \omega_j^2(q) Q_j^*(q,t) Q_{j'}(q,t) \right)$

ungekoppelter harmonischer Oszillatoren

Jede Mode entspricht einem ungekoppelter harmonischer Oszillator.