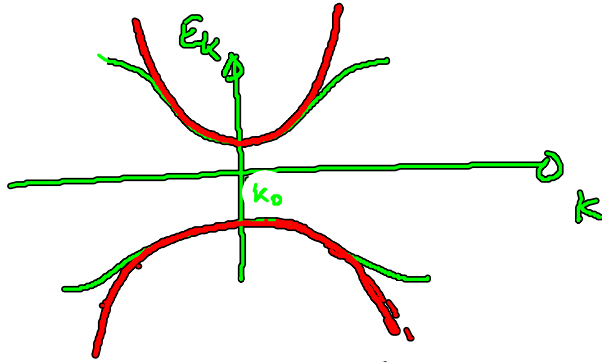


2.3. Effektive Masse - Näherung



- Sprechstundeneränderung
Fr 18⁰⁰-14⁰⁰ 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 freien Elektronen. Einfluß des Gitters drückt sich in einer effektiven Masse aus ⇒ Krümmung des Bandes

Taylorentwicklung um das Bandextremum

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

↙
0 da Minimum bei k_0

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_\lambda(k)}{\partial k_i \partial k_j} (k_i - k_{i0}) (k_j - k_{j0})$$

$$= E_{\lambda}(k_0) + \sum_{ij} \frac{\hbar^2}{2m_{ij}^*} (k_x - k_{x0})(k_j - k_{j0})$$

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 $E + \Delta E$

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

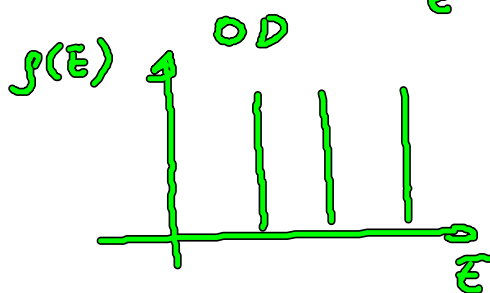
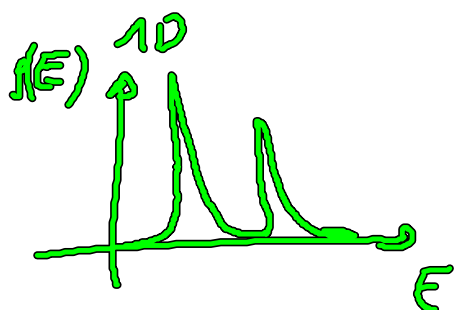
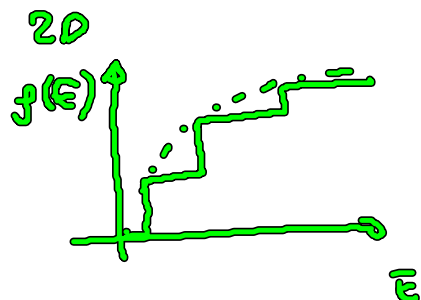
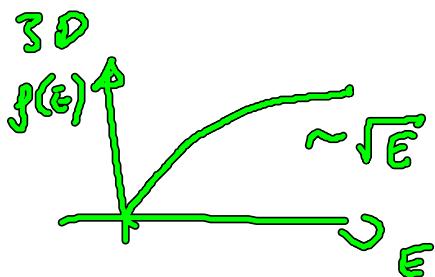
3D $\rho(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{N} \frac{1}{2} \int d^3k \delta(E - E_k)$ für ein Band \uparrow
 $= \frac{V}{N} \frac{1}{4\pi^3} \frac{m}{\hbar^2} 4\pi \int_0^\infty dE_k k \delta(E - E_k)$
 $= \frac{V}{N} \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$

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

$$\rho_0(E) = \frac{L^2}{N} \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_\lambda \Theta(E - E_\lambda)$$

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

0D $\rho(E) = \frac{2}{N} \sum_\lambda \delta(E - E_\lambda)$



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)

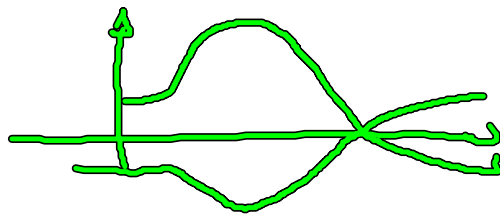
$$H u_k(r) = \left[\frac{\hbar^2}{2m} (-i\nabla + k)^2 + V(r) \right] u_k(r) = E_k u_k(r)$$

→ 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 $E_{\pm} = \frac{E_p \pm \gamma_0 \sqrt{f(k)}}{1 \pm S_0 \sqrt{f(k)}}$

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



• 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"

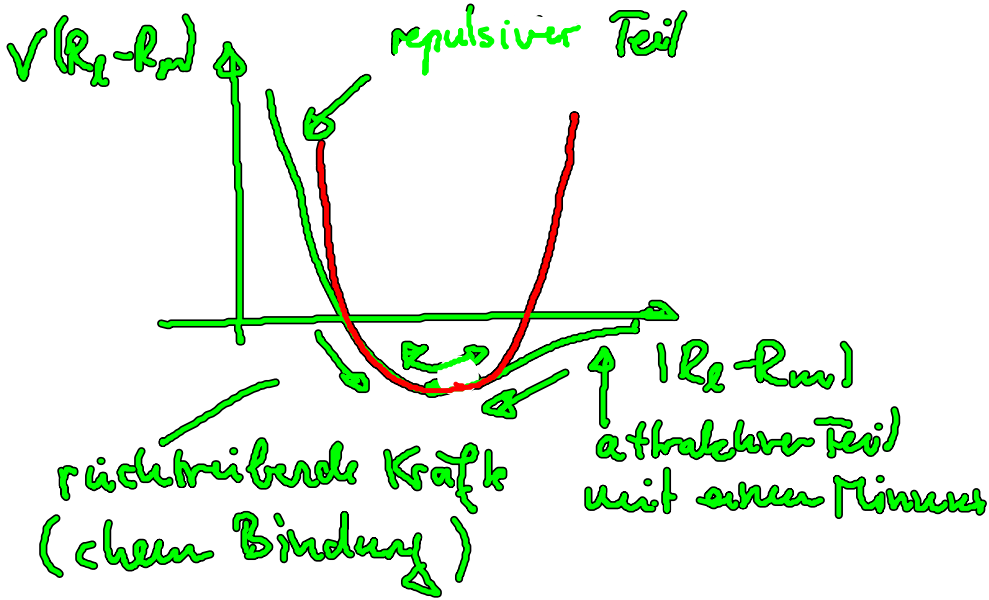
Aufgrund der starken Ion-Ion-Wechselwirkung wird die Auslenkung eines einzelnen Gitterions schnell auf das gesamte Gitter übertragen: Aus der lokalen wird eine kollektive

Anregung \Rightarrow Quantisierung der Gitterschwingungen
(einzelne Quanta: Phononen)

Effektives Potential für N miteinander wechselwirkende Ionen

\rightarrow Summe von Zweiteilchenpotentialen

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



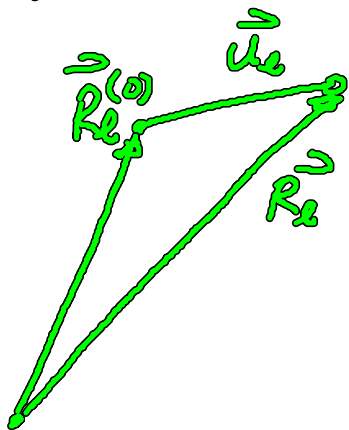
Ein Beispiel: Lennard-Jones-Potential

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

\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)

$$V_{\text{eff}}(R_1, \dots, R_N) = V(R^0) + \sum_{\alpha} \frac{\partial V}{\partial R_{2\alpha}} \Big|_{R^0} u_{\alpha}$$



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

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

Auslenkungen u_{α} i.R. $< 5\%$ des Gitterabstandes
 \rightarrow höhere anharmonische Terme

vernachlässigt

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

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

Richtungen (x, y, z)

$\Phi_{lm}^{\alpha\beta}$
↖ ↗
↘ ↙
l m

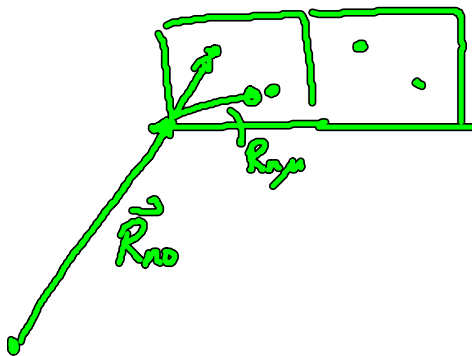
- $\Phi_{lm}^{\alpha\beta} u_{l\alpha} \hat{=} \text{Kraft in } \beta\text{-Richtung, die auf das } m\text{-Atom ausgeübt wird, wenn das } l\text{-Atom in } \alpha\text{-Richtung um } u_{l\alpha} \text{ ausgelenkt wird}$
(EZ)

Verallgemeinerung: Einheitszelle beinhaltet mehr als ein Atom

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

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

EZ Atom



2. Klassische Theorie der Gitterschwingungen

$$\dot{p}_{\mu\alpha} = m_{\mu} \ddot{u}_{\mu\alpha} = - \frac{\partial H}{\partial u_{\mu\alpha}} = - \frac{\partial V}{\partial u_{\mu\alpha}}$$

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

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

Eigenschaften der Φ 's:

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

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

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

iii) $\sum_{\mu} \Phi_{\mu\mu'n'}^{\alpha\alpha'} = 0$

bei gleichmäßiger Auslenkung aller Atome wird der ganze Kristall verschoben, ohne dass Kraft zwischen den Ionen hervorgerufen wird

Ansatz für die Lösung der Bewegungsgl:

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

↗
Normierung

Einsetzen:

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

Eigenwertgl. für die symmetrische Matrix $\phi_{\mu \mu'}^{\alpha \alpha'}$ (dynamische Matrix) mit $d(N_p)$ Eigenwerten
 ↗ ↕ ↖
 Dimension $l \times n$ Atome in \mathbb{E}^3

Mit

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

↖
Summe über alle \mathbb{E}^3

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 $\Phi_{\mu\mu'}^{\alpha\alpha'}(\mathbf{q})$

Dispersionsrelation der Welle $\omega_{\mathbf{q}}$ ist gegeben durch die Eigenwerte der $3p \times 3p$ Matrix

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

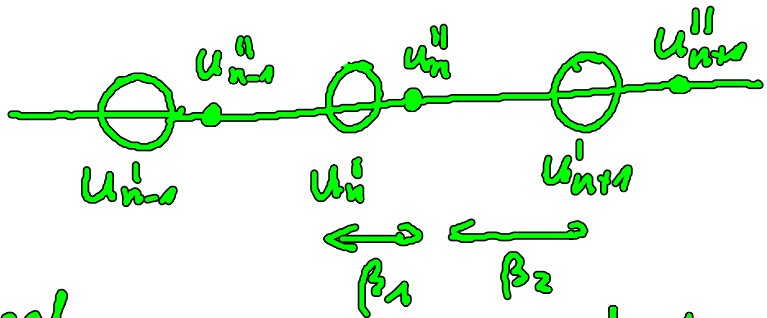
Insgesamt die Lösung

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

Zerlegung in p Schwingungen

Vektoren $\mathbf{e}_{\mu\alpha}^{(j)}$ in Richtung der Auslenkung des μ -ten Atoms: Polarizationsvektor

Klassifizierung der Moden am Beispiel einer 2-atomigen linearen Kette



Aufstellen der Bewegungsgl.

$$m_1 \ddot{u}_n^I = -\beta_1 (u_n^{II} - u_n^I) - \beta_2 (u_n^{II} - u_{n+1}^I)$$

$$m_2 \ddot{u}_n^{II} = -\beta_1 (u_n^{II} - u_n^I) - \beta_2 (u_n^{II} - u_{n+1}^I)$$

$$d=1$$

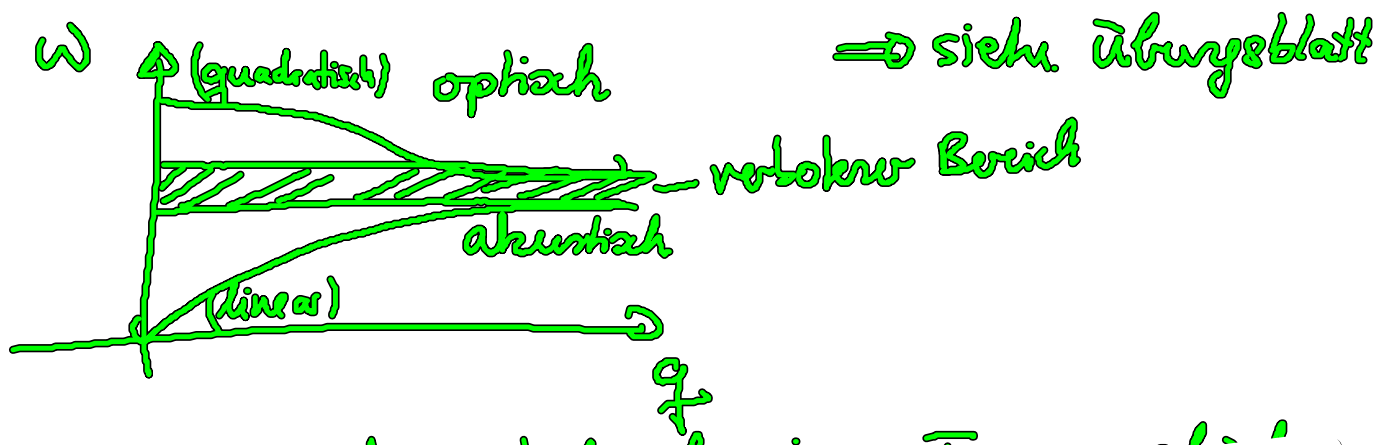
$$p=2$$

2×2 Matrix

$\Rightarrow 2$ Eigenwerte

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

Gitterkonstante



=> 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 · p Moden

davon d akustisch

d(p-1) optisch

=> 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 $u_{\mu\alpha}^{\alpha}$ nach Fourier-Amplituden $u_{\mu\alpha}^{\alpha}$ entkoppelt sind

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

nach allen Moden aufsummieren mit Gewichtungsfaktoren

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

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

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

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

\Rightarrow Hamilton-Fkt

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

einsetzen $= \frac{1}{2} \sum_{j1} \left(\dot{Q}_j^*(q,t) \dot{Q}_j(q,t) + \omega_j^2(q) Q_j^*(q,t) Q_j(q,t) \right)$

uncoupled harmonic oscillators

Jede Mode entspricht einem uncoupled harmonic oscillator.