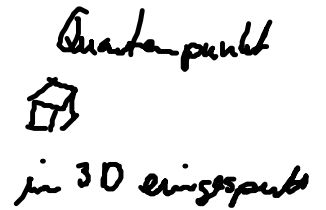
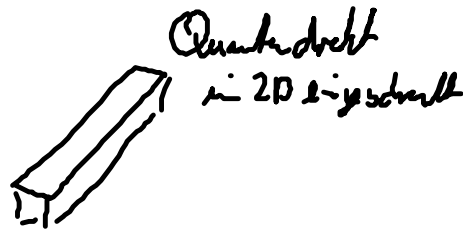
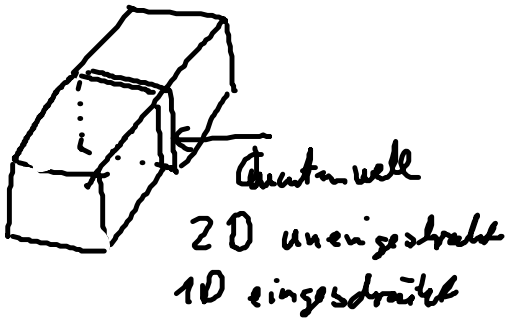


III.6 Nanostrukturen Wiederholung

Bsp:



Festsetzung

Einfache Ansatz: Einkellante Näherung
 $i(k_x x + k_y y)$

Quantenwell

$$\psi_{\lambda n k}(\underline{r}) = \psi_n(z) \frac{e^{i(k_x x + k_y y)}}{L} u_{\lambda k_{z=0}}(z)$$

λ → Wellenzahl
 n → Bindenindex
 k → Subbindenindex

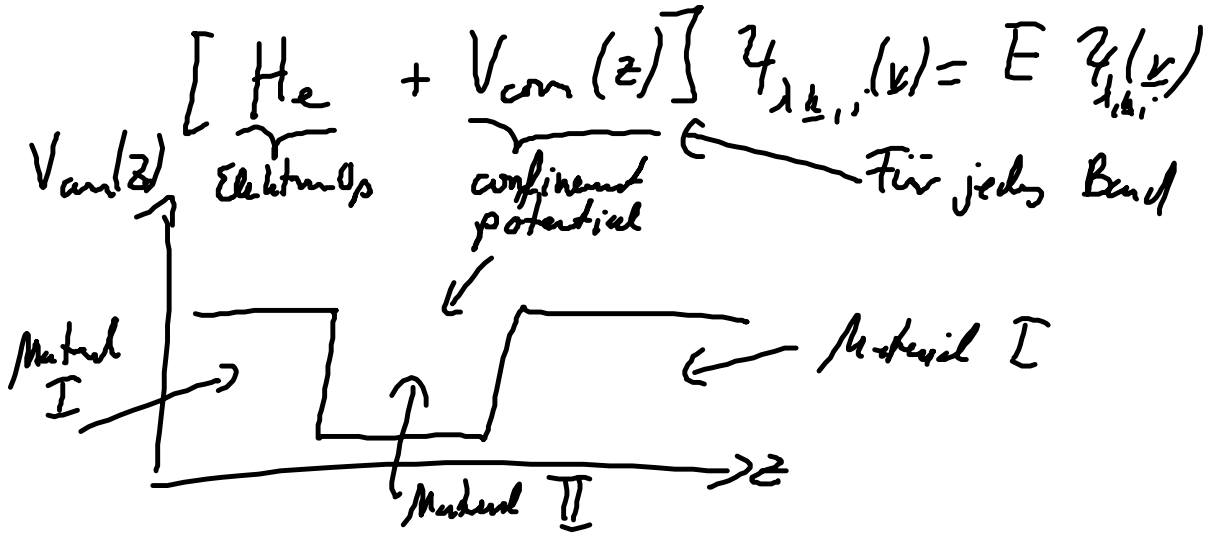
Quantendraht (1D)

$$\psi_{\lambda n k}(\underline{r}) = \psi_n(y, z) \frac{e^{i k_x x}}{\sqrt{L}} u_{\lambda k_{z=0}}(z)$$

Quantenpunkt

$$\psi_{\lambda, n}(\underline{r}) = \psi_n(x, y, z) u_{\lambda k_{z=0}}(z)$$

Beispiel für 2D Quantenwell



Die Idee ist in dem Fall (Annahmen wie sind nahe an der Bandkante)

$$\hbar k_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

Man erhält aus der Energie dispersion von Valenzelektronen

$$E_e(\underline{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_e}$$

dann als Gleichung für $\psi(z)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\text{con}}(z) \right] \psi(z) = E_z \psi(z)$$

Beispiel

Kastenpotential

$$V_{\text{con}}(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq z \leq L_c \\ \infty & \text{für } z > L_c \\ & \text{oder } z < 0 \end{cases}$$

Lösung ist dann

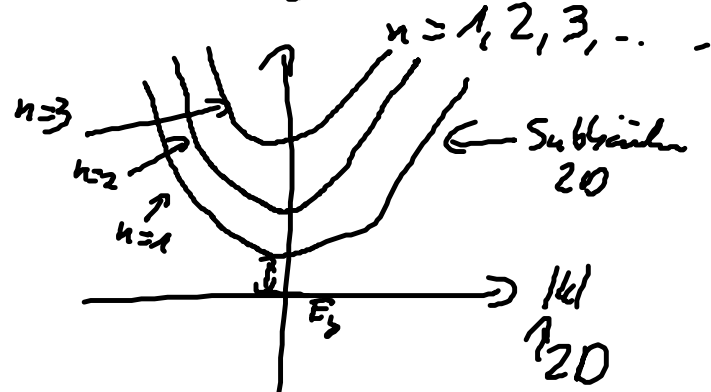
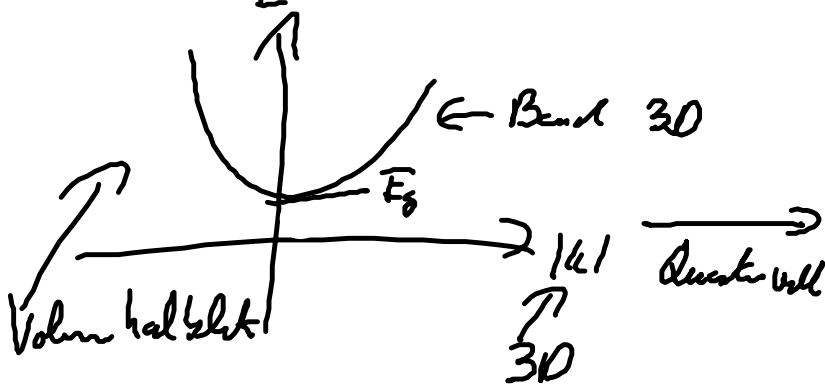
$$\psi(z) = A \sin(k_z z) + B \cos(k_z z)$$

mit den Randbed.

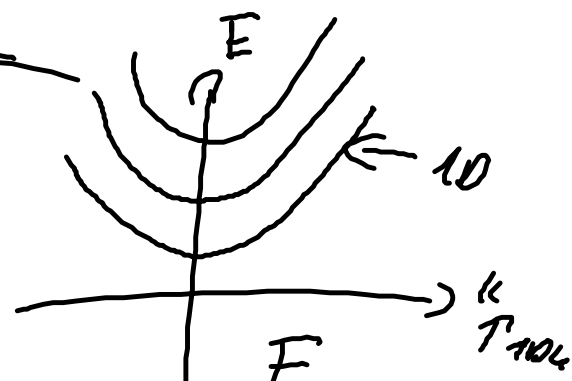
$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L_c) = 0 \Rightarrow A \neq 0, B = 0$$

$\Rightarrow \psi(z) = N \sin(k_2 \cdot z)$
 $k_2 L_c = n\pi$
 $\Rightarrow k_2 = n \frac{\pi}{L_c}$

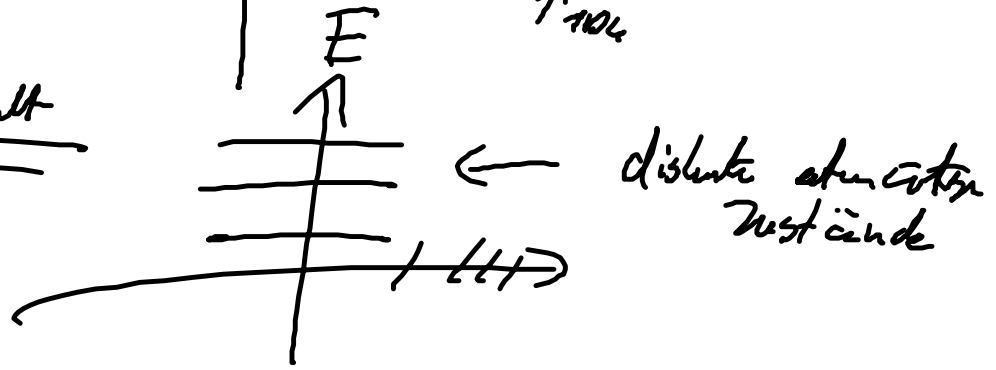
$\Rightarrow E_{z,n} = \left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_e} \right) = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{n\pi}{L_c} \right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_c^2} n^2$



1D Quasikristall



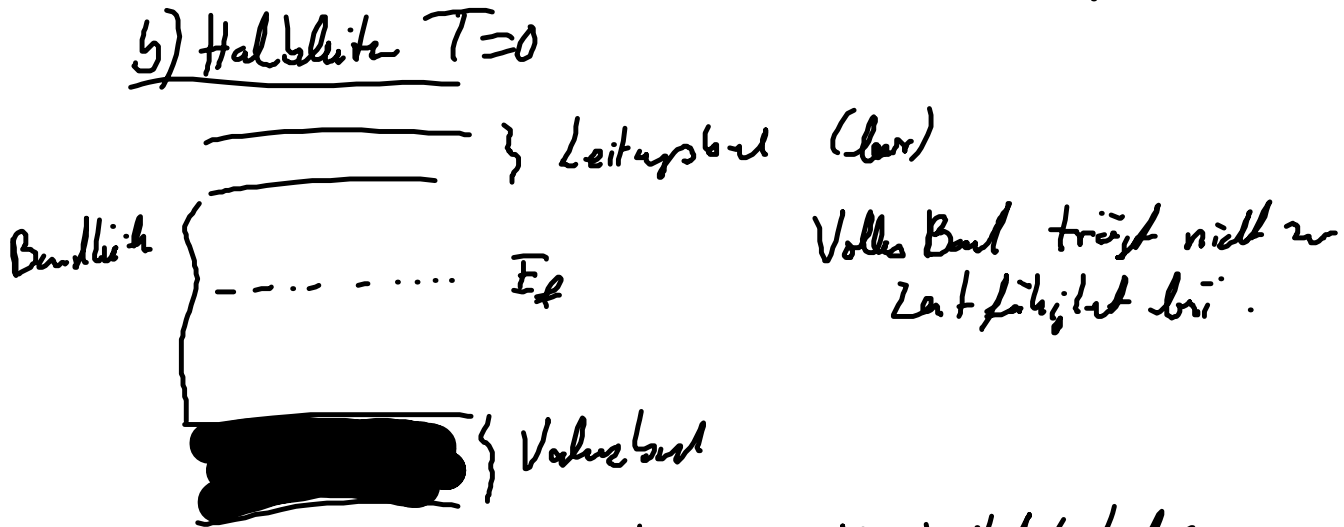
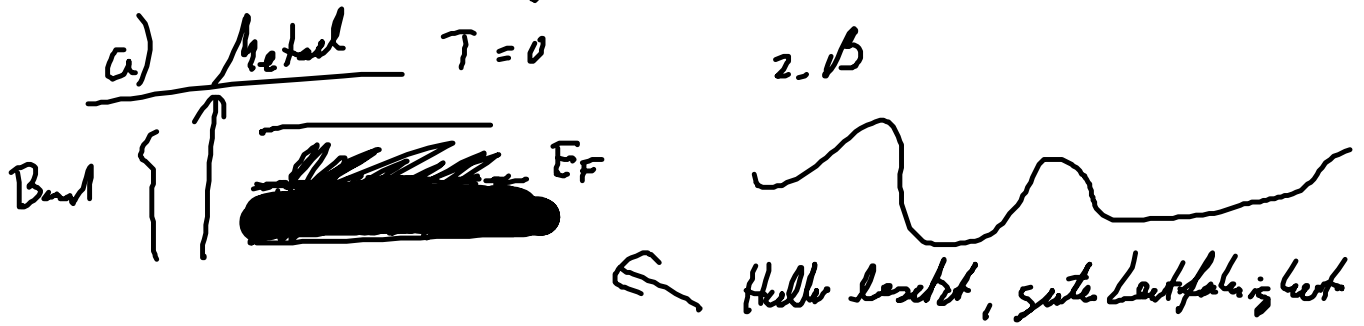
0D Quasikristall



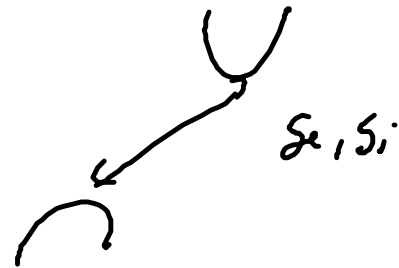
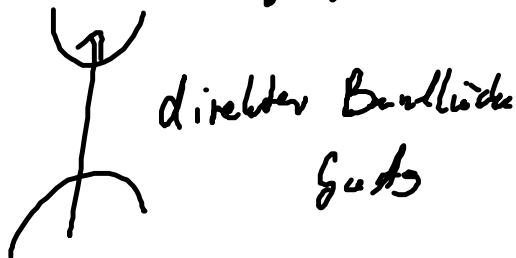
Zusammenfassung / Klassifizierung von Materialien in Volumen

Bemerkung: Bandstruktur erlaubt Klassifizierung von Materialtypen mit Hilfe der Fermi-Energie

(Fermi Energie ist bei $T=0$, die Energie welche besetzte von unbesetzten Zuständen trennt)



Volle Bänder tragen nicht Leitfähigkeit bei;
 Ströme aus allen Richtungen gleich sich aus
 Elektronen müssen zum Leeren ins Leitungsband
 angeregt werden.



c) Isolatoren, wie Halbleiter nur $E_g \approx 10\text{eV}$ nicht anregbar!

IV Gitterschwingungen

IV.1 Harmonische Näherung

Ziel: das Kapitel ist die Herleitung des Hamilton operators der Gitterschwingungen und dann Quasiteilchen der Phononen.

Ausgangspunkt ist die Born-Oppenheimer Näherung

Wiederholung: Es kommt gezeigt wird, dass in BO-Näherung das Ionen Problem die Form

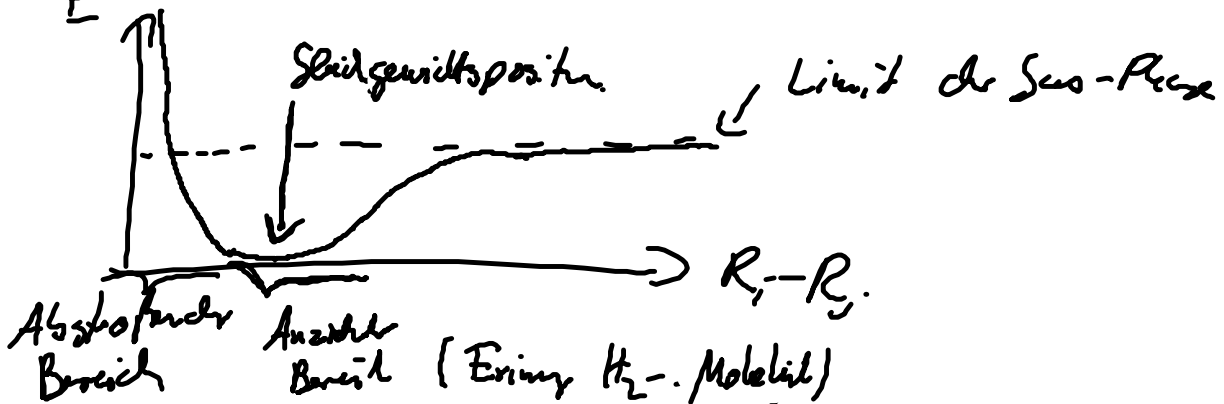
$$\left(H_{\text{ion}} + \underbrace{E_{\text{el, n}}(R_1, \dots, R_n)}_{\substack{\text{Energie der Elektronen} \\ \text{parametrisiert durch Ionenpos.}}} \right) \psi_{\text{ion}} = E_{\text{ion}} \psi_{\text{ion}}$$

bekannt

So wirkt effektiv auf ψ_{ion} ein Hamiltonian der Form

$$\begin{aligned} H_{\text{ion, eff, n}} &= H_{\text{ion}} + E_{\text{el, n}}(R_1, \dots, R_n) \\ &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\text{ion-ion}}(R_i - R_j) + E_{\text{el, n}}(R_1, \dots, R_n) \end{aligned}$$

Welcher Verhalten der Energie erwarten wir, wenn wir den E Abstand von Ionen variieren?



- 1) Kommt durch Überlagerung von anziehend und abstoßend Kräften
2. B. Coulomb Abstoßung, Abstoßung der Elektronen, Coulomb Anziehung zwischen Elektronen-Ionen, Austauschwechselwirkung u.v.u. (wie Van der Waals, metallische Bindung, ...)

2) Minimum in der Energie markiert die Gleichgewichtsposition (R_1^0, \dots, R_n^0) , wir führen die Hamiltonoperatoren auf in Energieabst bei Gleichgewichtsposition und den Abweichung

Ergo

$$H_{\text{kin}} = \underbrace{\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{i,j}(R_i - R_j)}_{H_{\text{kin}}(R_1^0, \dots, R_n^0)} + E_{\text{el}}(R_1^0, \dots, R_n^0)$$

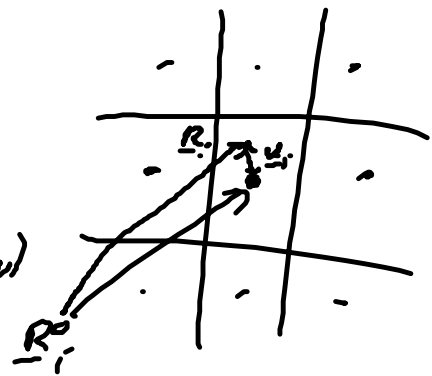
$$+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (V_{i,j}(R_i - R_j) - V_{i,j}(R_i^0 - R_j^0))$$

$$+ (E_{\text{el}}(R_1, \dots, R_n) - E_{\text{el}}(R_1^0, \dots, R_n^0))$$

Abweichung von Gleichgewicht, werden $\Delta H_{\text{kin}}(R_1 - R_1^0, \dots, R_n - R_n^0)$ als klein angenommen (weit weg von Scheitel)



parabolische Näherung von Gleichgewichtsposition



$$\Delta H_{\text{kin}}(R_1 - R_1^0, \dots, R_n - R_n^0) \approx \Delta H_{\text{kin}}(u_1, \dots, u_n)$$

$$\approx \underbrace{0}_{\substack{\text{0. Ordnung verschwindet} \\ \text{da } \Delta H_{\text{kin}} = 0 \text{ bei } u_i = 0}} + \sum_{i,a} \frac{\partial \Delta H_{\text{kin}}(u_1, \dots, u_n)}{\partial u_{i,a}} \bigg|_{u=0} u_{i,a}$$

0. Ordnung verschwindet
da $\Delta H_{\text{kin}} = 0$ bei $u_i = 0$

Verschwindet da
Minimum $= 0$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,a \\ j,\beta}} \frac{\partial^2 \Delta H_{\text{kin}}(u_1, \dots, u_n)}{\partial u_{i,a} \partial u_{j,\beta}} \bigg|_{u=0} u_{i,a} u_{j,\beta} + \dots$$

Parabolische Näherung.

Das kann man kompakt schreiben als:

$$\phi_{ij}^{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial^2 \Delta H_{i-i}(u_1, \dots, u_N)}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{j\beta}} \right|_{u=0}$$

Die Matrix $\phi_{ij}^{\alpha\beta}$ ist eine $3N \times 3N$ Matrix.

Der Hamiltonoperator kann mit Hilfe der u s geschrieben werden:

$$H(u_1, \dots, u_N) = \sum_i \frac{p_i^2}{2M_i} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ \alpha,\beta}} u_{i\alpha} \phi_{ij}^{\alpha\beta} u_{j\beta} + \dots$$

Nächster Schritt: Untersuchung der Eigenschaften von $\phi_{ij}^{\alpha\beta}$.

1) Aus dem Hamiltonformalismus können die Kräfte zwischen den Ionen berechnet werden:

$$\dot{p}_i^\alpha = M_i \dot{u}_i^\alpha = - \frac{\partial H}{\partial u_i^\alpha} = - \sum_{\alpha', j} \phi_{ij}^{\alpha\alpha'} u_j^{\alpha'}$$

Hier wird die Kraft durch die Kraftkonstant $\phi_{ij}^{\alpha\alpha'}$ und die momentanen Auslenkung bestimmt.

2) Die Matrix $\phi_{ij}^{\alpha\alpha'}$ ist symmetrisch da

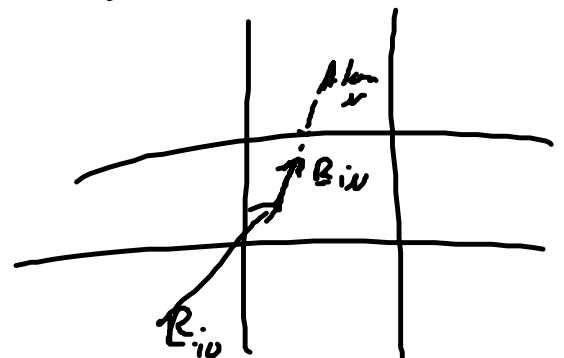
$$\phi_{ij}^{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial^2 \Delta H_{i-i}(u_1, \dots, u_N)}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{j\beta}} \right|_{u=0} = \left. \frac{\partial^2 \Delta H_{i-i}(u_1, \dots, u_N)}{\partial u_{j\beta} \partial u_{i\alpha}} \right|_{u=0} = \phi_{ji}^{\beta\alpha}$$

\Rightarrow Matrix hat reelle Eigenwerte

3) In einem Kristall mit periodisch angeordnete Einheitszellen (Translation invariant) ist es zweckmäßig R_i mit einem Index für die Einheitszelle und für das jeweilige Ion zu bezeichnen.

$$R_i \rightarrow R_{i,0} + R_{i,\nu}$$

$$\phi_{ij}^{\alpha\beta} \rightarrow \phi_{i\nu, j\nu'}^{\alpha\beta}$$



Aufgrund der Translationinvarianz, hängen die Kopplungskonstanten von relativen Abständen ab.

$$\phi_{i\nu, j\nu'}^{\alpha\beta} = \phi_{\nu\nu'}^{\alpha\beta} (\underline{R}_i^0 - \underline{R}_j^0)$$

4) Wenn wir das gesamte Kristall bewegen: infinitesimale Translation
 $u_{i\nu\alpha} = \delta u_\alpha$, dann keine Kraft entsteht.

$$\sum_{\alpha} \delta u_{\alpha} \sum_{i\nu} \phi_{i\nu, j\nu'}^{\alpha\beta} = 0 \Rightarrow \sum_{i\nu} \phi_{i\nu, j\nu'}^{\alpha\beta} = 0$$

Eine ähnelnde Gleichung ergibt auch ein Drehen des Gesamtkristalls.

V.2 Berechnung der Moden

Ziel dieses Abschnittes ist die Formulierung des Längengleiches mit Hilfe von Normalmoden.

Bewegungsgl. aus $\underline{V}, 11$

$$M_{i\nu} \ddot{u}_{i\nu}^{\alpha} = - \sum_{\alpha' j\nu'} \phi_{i\nu, j\nu'}^{\alpha\alpha'} u_{j\nu'}^{\alpha'}$$

Wir versuchen einen Ansatz zu finden, der die Translationsinvarianz ausnutzt.

Am besten etwas so ähnlich wie diskrete FT als Ansatz.

$$u_{i\nu}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{M_{i\nu}}} A_{\nu}^{\alpha}(\underline{q}) e^{i\underline{q} \cdot \underline{R}_{i\nu}} e^{-i\omega t}$$

Fourier Reihe für
die Auslenkung an
der Atomposition

=>

$$M_{i\nu} \omega^2 \frac{1}{\sqrt{M_{i\nu} M_{j\nu}}} A_{\nu}^{\alpha}(\xi) e^{i\xi \cdot R_{i\nu}} e^{-i\omega t}$$

$$= \sum_{\alpha' j \nu'} \frac{1}{\sqrt{M_{j\nu} M_{\nu'}}} \underbrace{\phi_{i-j, \nu \nu'}^{\alpha \alpha'}}_{\text{translativ invariant}} A_{\nu'}^{\alpha'}(\xi) e^{i\xi \cdot R_{j\nu'}} e^{-i\omega t}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \omega^2 A_{\nu}^{\alpha}(\xi) &= \sum_{\alpha' j \nu'} \phi_{i-j, \nu \nu'}^{\alpha \alpha'} e^{i\xi \cdot (R_{j\nu'} - R_{i\nu})} \frac{1}{\sqrt{M_{j\nu} M_{\nu'}}} A_{\nu'}^{\alpha'}(\xi) \\ &= \sum_{\alpha' \mu'} \underbrace{\sum_j \phi_{i-j, \nu \mu'}^{\alpha \alpha'} e^{i\xi \cdot (R_{j\nu'} - R_{i\nu})}}_{C_{\alpha \nu \alpha' \mu'}(\xi)} \frac{1}{\sqrt{M_{\mu} M_{\nu'}}} A_{\mu'}^{\alpha'}(\xi) \end{aligned}$$

$$\| \omega^2 A_{\nu}^{\alpha}(\xi) = \sum_{\alpha' \mu'} C_{\alpha \nu \alpha' \mu'}(\xi) A_{\mu'}^{\alpha'}(\xi) \|$$

Bestimmst für $A_{\nu}^{\alpha}(\xi)$, wir müssen klären welche Eigenschaften
C hat.