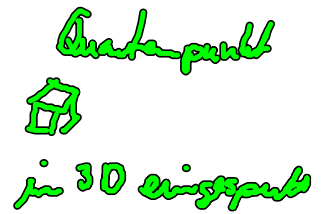
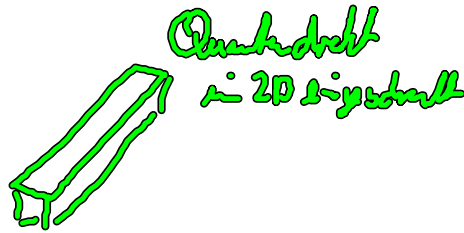
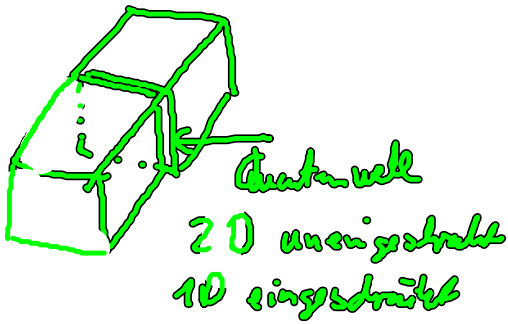


III.6 Nanostrukturen Wiederholen

Bsp:



Festsetzung

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

Quantenwell

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

\nearrow λ Bandindex
 \nearrow n Subbandindex
 \leftarrow Wellenvektor

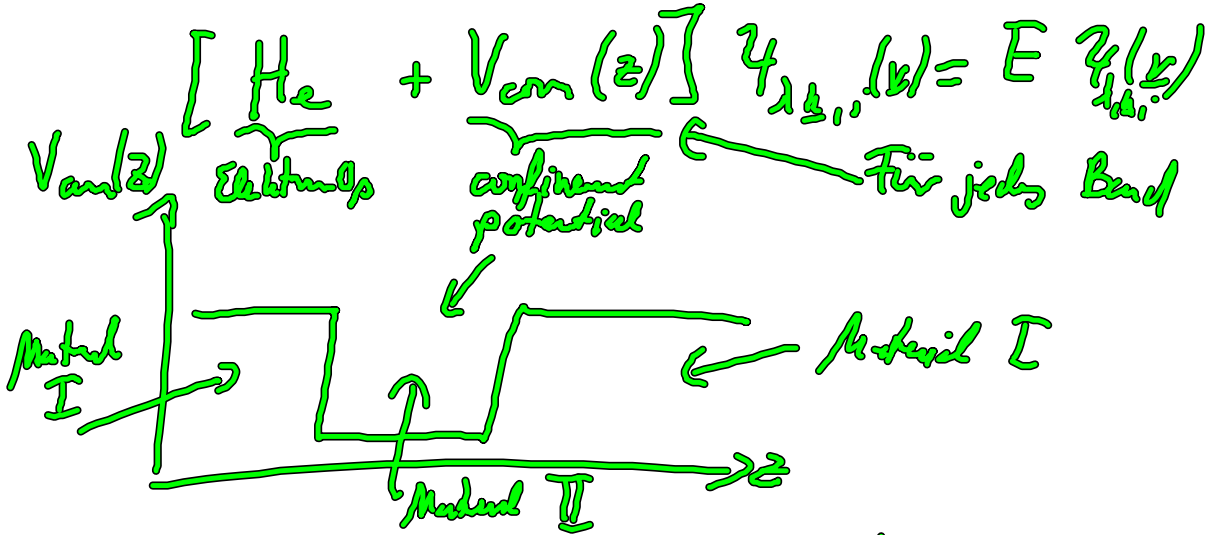
Quantendraht (1D)

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

Quantenpunkt

$$\psi_{\lambda, n}(z) = \int_n(x, y, z) u_{\lambda, n, 0}(z)$$

Beispiel für 2D Quantenwell



Die Idee ist in dem Fall (Annehmen wir sind nicht an der Bandkante)

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

Man erhält so die Energie dispersiv von Volumen abhängt

$$E_2(\underline{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_z^2)}{2m_e}$$

dann als Gleichung für $\psi_k(z)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\text{arr}}(z) \right] \psi(z) = E_2 \psi(z)$$

Beispiel Rechteckpotential $V_{\text{arr}}(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq z \leq L_1 \\ \infty & \text{für } z > L_1 \\ & \text{oder } z < L_2 \end{cases}$

Lösung ist dann

$$\psi(z) = A \sin(k_2 z) + B \cos(k_2 z)$$

mit den Randbed.

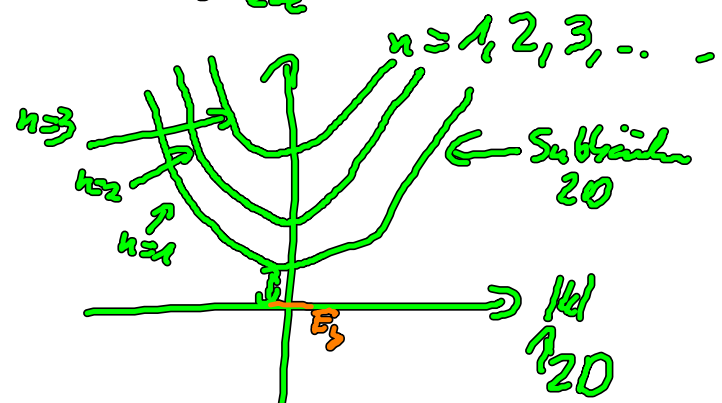
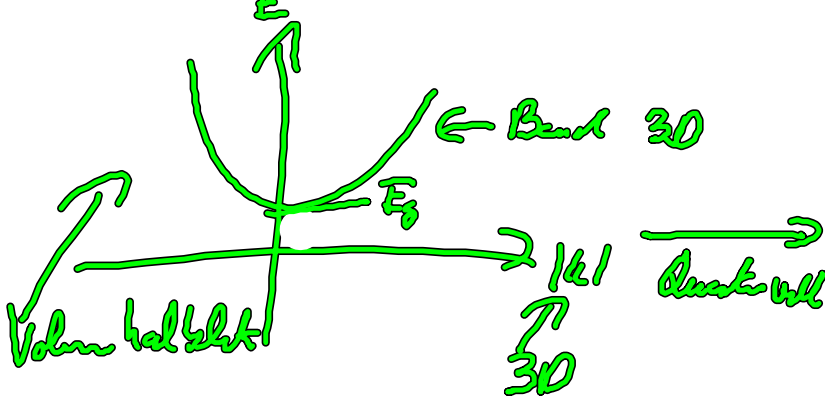
$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L_1) = 0 \Rightarrow A \neq 0, B = 0$$

$$\Rightarrow \psi(z) = N \sin(k_2 \cdot z)$$

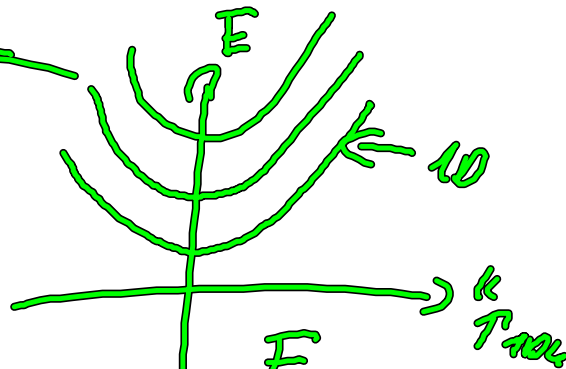
$$k_2 L_c = n\pi$$

$$\Rightarrow k_2 = n \frac{\pi}{L_c}$$

$$\Rightarrow E_{2,n} = \left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} \right) = \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{n\pi}{L_c} \right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_2 L_c^2} n^2$$



1D Quant. v.m.



0D Quant. Punkt



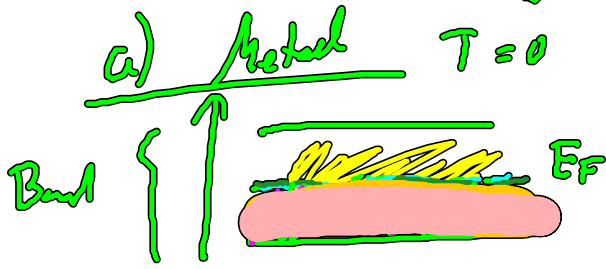
← diskrete atomare Zustände

Zusammenfassung / Klassifizierung von Materialien in Üben

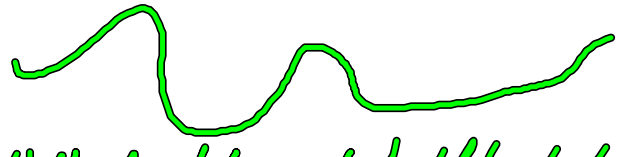
Bemerkung:

Bandstruktur erlaubt Klassifizierung von Materialtypen mit Hilfe der Fermi-Energie

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

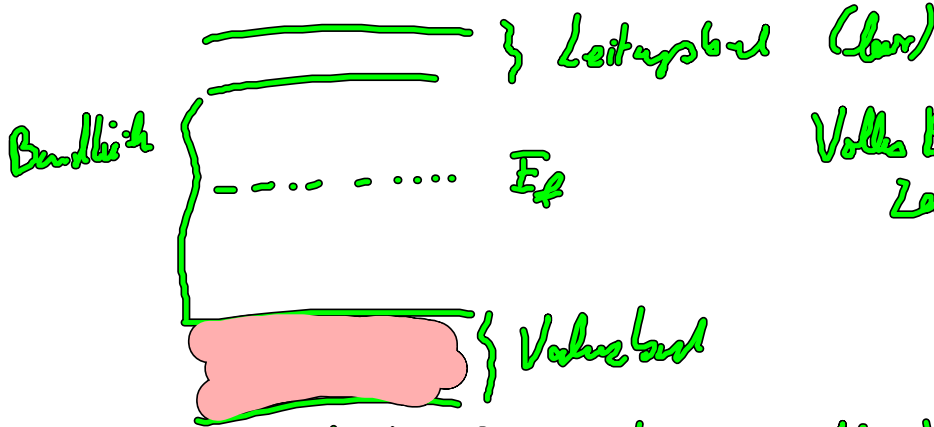


z.B.



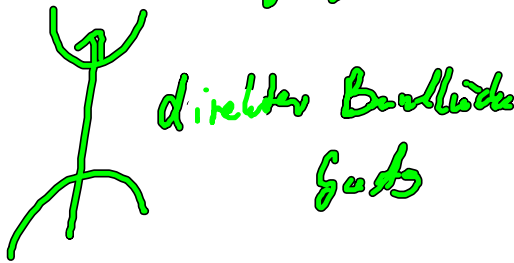
← Helle Leuchte, gute Leitfähigkeit

b) Halbleiter $T=0$

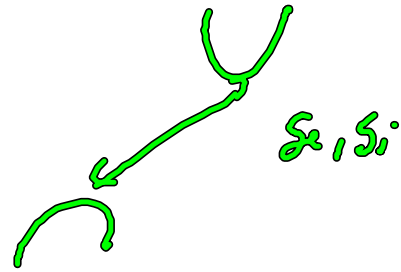


Volles Band trägt nicht zu
 Leitfähigkeit bei.

Volle Bänder tragen nicht Leitfähigkeit bei;
 Störstoffe als alle Richten gleich sicher
 Elektron müssen zum Leiter ins Leitungsband
 angeregt werden.



direkter Bandlücke
 GaAs



Ge, Si

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 Hamiltonoperators der
 Gitterschwingungen und dem Quasiteilchen der Phononen.

Ausgangspunkt ist die Born-Oppenheimer Näherung

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

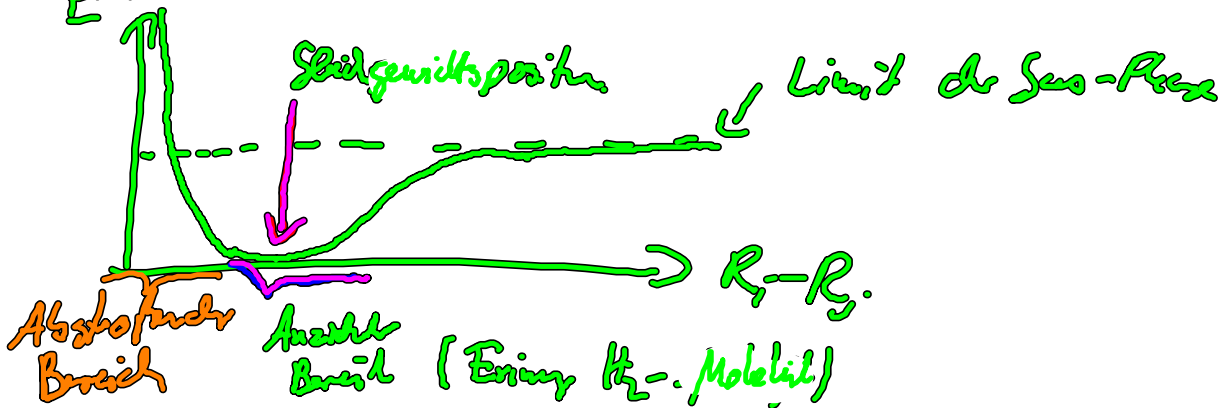
$$\left(H_{\text{ion}} + \underbrace{E_{\text{el,el}}(R_1, \dots, R_N)}_{\substack{\text{Energie der Elektronen} \\ \text{parametrisiert durch Ionenpositionen}}} \right) \psi_{\text{ion}} = E_{\text{ion}} \psi_{\text{ion}}$$

bekannt

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

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

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



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

2) Minimum in der Energie markiert die Gleichgewichtspositione
 (R_1^0, \dots, R_n^0) , wie folgt die Hamiltonoperatore
 auf in Energie ist bei Gleichgewichtsposition
 und den Abweich

Ergo

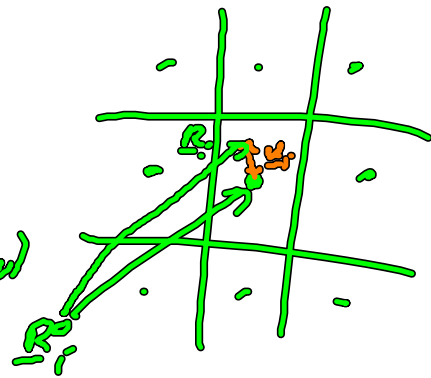
$$H_{\text{kin}} = \underbrace{\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{i,j}(R_i - R_j)}_{H_{\text{kin}}(R_1^0, \dots, R_n^0)} + E_{\text{el}}(R_1, \dots, R_n)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (V_{i,j}(R_i - R_j) - V_{i,j}(R_i^0 - R_j^0)) + (E_{\text{el}}(R_1, \dots, R_n) - E_{\text{el}}(R_1^0, \dots, R_n^0))$$

Abweich, von Gleichgewicht, werden $\Delta H_{\text{kin}}(R_1 - R_1^0, \dots, R_n - R_n^0)$
 als klein angenommen (mit Weg von Schwerk)



parabolische Näherung von Gleichgewichtspositionen



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

$$\approx 0 + \sum_{i\alpha} \frac{\partial \Delta H_{\text{kin}}(u_1, \dots, u_n)}{\partial u_{i\alpha}} \bigg|_{u=0} u_{i\alpha}$$

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

Verschiebung des
 Minimum ≈ 0

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

Parabolische Näherung.

Das kann man kompakt schreiben als:

$$\phi_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \Delta H_{\text{int}}(u_1, \dots, u_M)}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{j\beta}} \Big|_{u=0}$$

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

Der Hamiltonoperator kann mit Hilfe der u s geschrieben werden:

$$H_{\text{int}}(u) = \sum_i \frac{p_i^2}{2M_i} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} u_{i\alpha} \phi_{ij}^{\alpha\beta} u_{j\beta} + \dots$$

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

1) Aus der Hamiltonformalisierung 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 Kraftkonstante $\phi_{ij}^{\alpha\alpha'}$ und die momentane Auslenkung bestimmt.

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

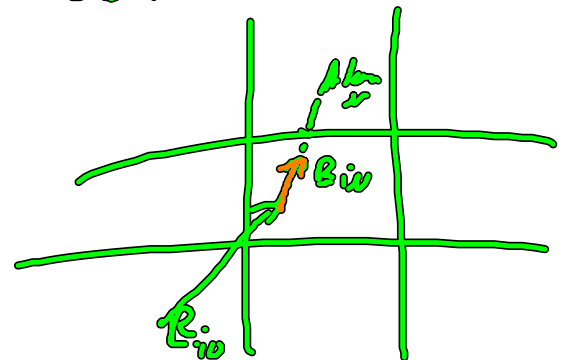
$$\phi_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 \Delta H_{\text{int}}(u_1, \dots, u_M)}{\partial u_{i\alpha} \partial u_{j\beta}} \Big|_{u=0} = \frac{\partial^2 \Delta H_{\text{int}}(u_1, \dots, u_M)}{\partial u_{j\beta} \partial u_{i\alpha}} \Big|_{u=0} = \phi_{ji}^{\beta\alpha}$$

\Rightarrow Matrix hat reelle Eigenwerte

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

$$R_i \rightarrow R_{i,\alpha} + R_{i,\mu}$$

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



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

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

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

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

Eine ähnliche Gleichung ergibt auch ein Dativ des
 Gegendkristalls.

V.2 Berechnung der Moden

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

Bewegungsgl. aus \bar{V}, M

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

Wir versuchen einen Ansatz zu finden, der die
 Translationsinvarianz ausnutzt

Analog etwas so ähnlich wie diskrete FT als Ansatz.

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

Fourier Reihe für
die Auslenkung
der Atompunkte

\Rightarrow

$$A_{i,\mu} \omega^2 \frac{1}{\sqrt{M_{i,\mu}}} A_{\mu}^{\alpha}(\xi) e^{i\xi \cdot \underline{R}_{i,\mu} - i\omega t}$$

$$= \sum_{\alpha', \mu'} \frac{1}{\sqrt{M_{\mu'} M_{\mu}}} \underbrace{\phi_{i-j, \mu' \mu}^{\alpha \alpha'}}_{\text{transduktionskoeff.}} A_{\mu'}^{\alpha'}(\xi) e^{i\xi \cdot \underline{R}_{\mu'} - i\omega t}$$

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

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

Bedingungst.-für $A_{\mu}^{\alpha}(\xi)$, wir müssen kleinste Werte Eigenschaften
C hat.