Blochsches Theorem (Fortsetzung)

$\varphi_{nk}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}}\, u_{n\underline{k}}(\underline{r})$ Bloch Funktionen

sind Eigenfunktionen zum Ham.operator mit periodischem Potenzial $V(\underline{r}+\underline{R}) = V(\underline{r})$.

$H(k)\, u_{nk} = E_n(k)\, u_{nk}$ Eigenwertgleichung für Ham.operator

$$H(k) = \frac{1}{2m}\left(\hat{\underline{p}} + \hbar k\right)^2 + V(\underline{r})$$

$\downarrow$

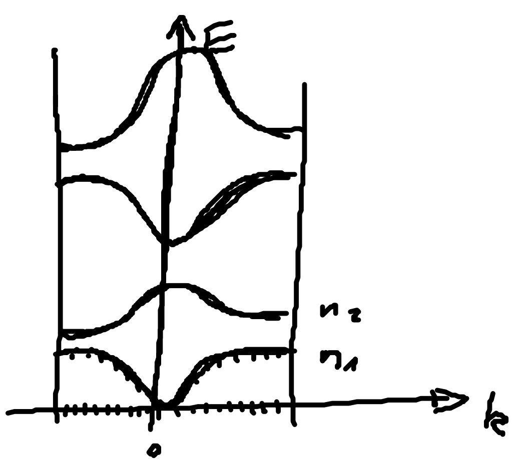
Hermitescher Hamiltonop.
auf endlichem Grundgebiet (wegen zykl. Randbed.)

$\Rightarrow$ diskretes Eigenwertspektrum $n = 1, 2, 3$

$$\underline{k} = \frac{h}{N_1}\underline{g}_1 + \frac{k}{N_2}\underline{g}_2 + \frac{l}{N_3}\underline{g}_3$$

$h, k, l \in \mathbb{Z}$

(iii) Bandstruktur



1. Brillouin-Zone

$E_n(k)$ beschreibt quasi-kontinuierliche Energiebänder

(iv) Es gilt $E(\underline{k}) = E(-\underline{k})$ Kramersches Theorem
(zeitumkehrsymm.)

Beweis: $\hat{T}_R \varphi^*_{n\underline{k}}(\underline{r}) = e^{-i\underline{k}\underline{R}} \varphi^*_{n\underline{k}}(\underline{r})$

andererseits $\hat{T}_R \varphi_{n,-\underline{k}}(\underline{r}) = e^{-i\underline{k}\underline{R}} \varphi_{n,-\underline{k}}(r)$

$\Rightarrow \varphi^*_{n\underline{k}} = \varphi_{n,-\underline{k}}$

wegen Hermitizität von H: $\varphi^*_{n\underline{k}}$ und $\varphi_{n\underline{k}}$ entartet bezgl. H

$\Rightarrow$ $\varphi_{n,-\underline{k}}$ und $\varphi_{n\underline{k}}$ sind entartet bzgl. H

d.h. $E(-\underline{k}) = E(\underline{k})$

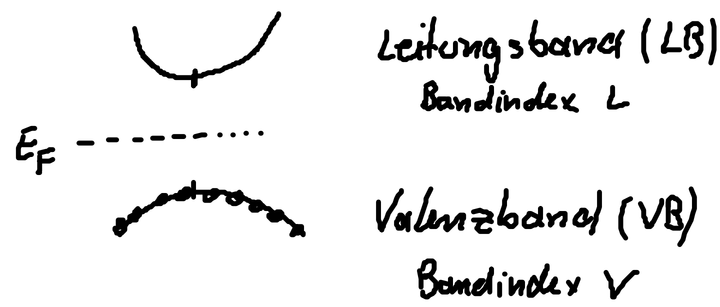
(v) Kristallelektronen sind Quasiteilchen, die die WW mit dem statischen Gitter bereits enthalten.

	freies Elektron	Kristallelektron	
Wellenfkt	$e^{i\underline{k}\underline{r}}$	$e^{i\underline{k}\underline{r}} u_{n\underline{k}}(\underline{r})$ Blochfkt.	
Eigenwerte	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	$E_n(\underline{k})$ Bandstruktur	
Impuls $\langle p \rangle$	$\hbar \underline{k}$ (= Eigenwert)	$\frac{m}{\hbar} \nabla_k E_n(\underline{k})$	Beweis durch nicht entartete Störungstheorie Entwicklung um $\underline{k}$
$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$	$\frac{1}{m} \delta_{ij}$	Tensor der inv. effektiven Masse	
Erzeuger Operator	$a^+_{\underline{k}}$	$a^+_{n\underline{k}}$	

(vi) WW dieser Quasiteilchen untereinander kann so behandelt werden wie für freie Elektronen (Hartree-Fock) gezeigt wurde

3.5.2. Defektelektronen (Löcher)

Annahme : 2 Bändermodell



- Zustandsfunktion eines Überschusselektrons (Valenzband voll 1 EL im Leitungsband)

$$|\phi_k^e\rangle = a_{Lk}^+ \underbrace{\left(a_{Vk_1}^+ a_{Vk_2}^+ \dots a_{Vk_N}^+\right)|0\rangle}_{|\phi_V\rangle}$$

$|\phi_V\rangle$ Zustandsfunktion des vollen VB

$$|\phi_k^e\rangle = a_{Lk}^+ |\phi_V\rangle$$

- Defektelektron

$$|\phi_k^h\rangle = a_{Vk} |\phi_V\rangle$$

Zustand einer Fehlstelle im VB mit Wellenzahl k

Vertauschungsrel. bekannt

Neue Erzeuger, Vernichter :

$$d_k^+ = a_{Vk}$$

$$d_k = a_{Vk}^+$$

wobei $d_k |\phi_V\rangle = a^+_{Vk} |\phi_V\rangle = 0$

d.h. $|\phi_V\rangle$ entspricht für Teilchenzahlop. d_k dem Vakuumzustand

-> Umschreiben des Hamilton Operators

(1) $a_\ell^+ a_m = d_\ell d_m^+ = \underline{\underline{\delta_{\ell m}}} - d_m^+ d_\ell$ (wegen Vertauschungsrel. der d^+, d)

(2) $a_\ell^+ a_m^+ a_{m'} a_{\ell'} = d_\ell d_m d_{m'}^+ d_{\ell'}^+$

$$= \underline{\underline{\delta_{mm'} \delta_{\ell\ell'}}} - \delta_{mm'} d_{\ell'}^+ d_\ell - \underline{\underline{\delta_{m'\ell} \delta_{m\ell'}}} + \delta_{m\ell'} d_{m'}^+ d_\ell$$

$$+ \delta_{m'\ell} d_{\ell'}^+ d_m - d_{m'}^+ d_m \delta_{\ell\ell'} + \underline{d_{m'}^+ d_{\ell'}^+ d_\ell d_m}$$

Einsetzen von (2) in $\hat{H}_{Full} = \sum_{\ell m} \langle \ell | \hat{h} | m \rangle a_\ell^+ a_m$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell\ell' \\ mm'}} \langle \ell m | \hat{V} | \ell' m' \rangle a_\ell^+ a_m^+ a_{m'} a_{\ell'}$$

=> $\hat{H}_{Full} = \underline{\underline{E_V}} + \hat{H}_D + \underline{H_{DD}}$ <- WW Beiträge

Beiträge ohne Operator

Beiträge mit $d^+ d$

$$E_V = \sum_\ell \varepsilon_\ell + \frac{1}{2} \sum_{\ell m} \langle \ell m | V | \ell m \rangle - \frac{1}{2} \sum_{\ell m} \langle \ell m | V | m \ell \rangle$$

über VB Zustände

≙ Energie des vollen VB in HF Näherung

$$H_D = -\sum_{lm} \langle l'|h|m\rangle d_m^+ d_l - \frac{1}{2} \sum_{ll'm'} d_{\substack{l'\\m}}^+ d_l \langle l m'|V|\substack{l'\\m} m'\rangle$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{m'ml'} d_{\substack{m'\\m}}^+ d_{\substack{m\\l}} \langle l' \substack{m\\l} |V| l' \substack{m'\\m}\rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{mm'l\\m'm}} d_{\substack{m'\\m}}^+ d_l \langle l \substack{m\\m'} |V| \substack{m\,m'\\m'\,m}\rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{lml'\\m'lm}} d_{\substack{l'\\m}}^+ d_{\substack{m\\l}} \langle l \substack{m\\m'l} |V| \substack{l'l\\m\,m'}\rangle$$

$$H_D = -\sum_{lm} d_m^+ d_l \left\{ \langle l|\hat{h}|m\rangle + \sum_{m'} \langle l m'|\hat{V}|m m'\rangle - \langle l m'|\hat{V}|m' m\rangle \right\}$$

$$= -\sum_{lm} d_m^+ d_l \ \langle l|\hat{H}_{eff}|m\rangle$$

eff. Hamilton Op. der die WW der Valenzelektronen durch eff. Potenzial beschreibt

$|m\rangle$ ist Eigenfunktion von $\hat{H}_{eff}$ mit Eigenwert E_m

$$= -\sum_{k} d_k^+ d_k \ \varepsilon_{m,v}$$

zulässige Quasi-Impulse im Kristall

$\hat{=}$ Energie der Defektelektronen ohne WW

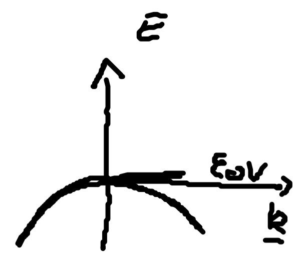
$$\hat{H}_{DD} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{lm \\ l'm'}} d_{m'}^+ d_{l'}^+ d_l d_m \langle lm | V | l'm' \rangle$$

Coulomb WW der Defektelektronen untereinander

$$\hat{H}_{Full} = E_V - \sum_k d_k^+ d_k \, \varepsilon_{k,V} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} d_{k_1}^+ d_{k_2}^+ d_{k_3} d_{k_4} \langle k_3 k_4 | V | k_1 k_2 \rangle$$

negative Energie ??
Nein!

$$\varepsilon_{kV} = \varepsilon_{0V} - \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_V}$$



$$\xrightarrow{\text{(ohne WW)}} \hat{H}_{Full} = \sum_k d_k^+ d_k \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_V} - \varepsilon_{0V} \right)$$

$\rightarrow$ Defektelektronen sind Teilchen mit positiver eff. Masse m_V

Ladung der Löcher

Operator der El. Ladungsdichte $\hat{\varrho}(x) = e\,\psi^{+}(x)\psi(x)$

(Entwicklung nach Blochfunktionen) $= e \sum_{kk'} \varphi_k^*(x)\varphi_{k'}(x)\, a_k^+ a_{k'}$

Relation (1) : $\rightarrow \hat{\varrho}(x) = \underbrace{e \sum_k |\varphi_k(x)|^2}_{} - \underbrace{e \sum_{kk'} \varphi_{k'}\varphi_k^*\, d_k^+ d_{k'}}_{}$

Ladungsdichte des vollen VB

(wird gerade kompensiert von pos. Ionen da sonst Kristall nicht neutral)

Erwartungswert bzgl. Zustand mit einem Defektelektron bei $\underline{k}_0$ $\quad (|\phi_{k_0}\rangle = d_{k_0}^+ |\phi_V\rangle)$

$$\langle \hat{\varrho} \rangle = \langle \phi_V | d_{k_0} \sum_{kk'} -e\, \varphi_{k'}\varphi_k^*\, d_k^+ d_{k'}\, d_{k_0}^+ | \phi_V \rangle$$

$$= (-e)\, |\varphi_{k_0}|^2$$

Valenzelektron Blochfunktion

positive Ladung des Loches

- Wechselwirkung der Defektelektronen mit äußerem Feld

$$\hat{V}_{Feld} = \int \hat{\psi}^+(x) \underbrace{-eEx}_{} \hat{\psi}(x)\, d^3x$$

äußeres Elektr. Feld

Feldoperatoren:

mit $\psi^+(x) = \sum_\mu \varphi_\mu^*(x)\, a_\mu^+$

(Bemerkung: analog kann auch der $\hat{H}$ hergeleitet werden

$$\hat{H} = \int \psi^+(x)\, h(x)\, \psi(x)\, d^3x$$

$$= \sum_\mu a_\mu^+ a_\mu \varepsilon_\mu$$

$\varepsilon_\mu = \langle \varphi_\mu | h | \varphi_\mu \rangle$)

$$\Rightarrow \hat{V}_{Feld} = \sum_{kk'} M_{kk'}\, a_k^+ a_{k'}$$

mit $M_{kk'} = \langle \varphi_k | -eEx | \varphi_{k'} \rangle$

falls E = konst

$= E\, \Theta_{kk'}$

Dipoloperator

$$\hat{V}_{Feld} \overset{(1)}{=} \underbrace{\sum_k M_{kk}}_{} - \sum_{kk'} d_{k'}^+ d_k\, (M_{k'k})^*$$

pot. Energie des vollen VB (wieder Kompensation mit Grundgitter)

positive Ladung bei WW mit äußerem Feld

Bsp.: Halleffekt

(Beobachtung von grundlegenden
Quantenfeldtheoretischen
Gesetzmäßigkeiten (anti-Symm))