

# Theoretische Festkörperphysik

## Gliederung der VL

- (EN) 0 Einführung und Motivation
- (NR) I Kristallsymmetrie
- (EN) II Born-Oppenheimer Näherung [Entkopplung der Elektronen- und Gitterdynamik]
- (NR) III Elektronische Zustände
- (EN) IV Gitterschwingungen [Phononen, Debye und Einstein-Modell]
- (NR) V Zweite Quantisierung
- (EN) VI Elektron-Phonon Wechselwirkung [Streuprozesse, Boltzmann Gleichung, Quantenkinetik]
- (NR) VII Elektron-Elektron Wechselwirkung
- (EN) VIII Elektrischer Transport [Strom, Drude Modell, elektrischer Widerstand, Ohmsches Gesetz]
- (NR) IX Supraleitung
- (EN) X Optik (Materie-Licht WW, Absorption, Exzitonen, Quantenoptik)

grobe Aufteilung: Elektrodynamik (M. Richter)  
Gitterdynamik (E. Malic)

## 0. Einführung und Motivation

### 1. Motivation

- Festkörperphysik: Eigenschaften von Materie im festen Aggregatzustand, Fokus auf kristalline Strukturen (periodisch mit Translations-symmetrie)
- Festkörper: große Anhäufungen von atomaren Systemen ( $10^{23}$ ), die durch chem. Bindungen nahe Gleichgewichtspositionen lokalisiert sind
- Methoden: Quantenmechanik + statistische Physik  
 Hamilton-Operator bekannt, da <sup>meist</sup> elektromagnetische WW wichtig  
 Coulomb-Potential  $V = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|r-r'|}$   
 (relativistische Effekte vernachlässigbar  
 Gravitation  $\rightarrow$  Astrophysik  
 starke und schwache WW  $\rightarrow$  Elementarteilchenphysik)
- Zentrales Konzept: Einführung von Quasi-Teilchen  
 $\hat{=}$  Originalteilchen + Teil der Umgebung  
 $\Rightarrow$  neue WW-frei Teilchen mit  
 z.B. effektive Masse oder Ladung  
 z.B. Phononen  $\hat{=}$  kollektive Gitterschwingungen  
 Exzitonen  $\hat{=}$  gebundene Elektron-Loch-Paare  
 Polaronen  $\hat{=}$  Elektronen im Gitter

Plasmonen  $\hat{=}$  quantisierte Plasmaschwingungen

Polaritonen  $\hat{=}$  Phonon oder Exziton + WW mit Photonen

- theoretische Vorgehensweise: Teilspekt des allg. Problems

Hamilton-Operator

$\Downarrow$  Näherung

effektiver Hamilton-Operator für das Teilproblem

$\Downarrow$

Bewegungsgleichungen für Observablen

- Ziel: grundlegendes physikalisches Verständnis

auf mikroskopischer Ebene:

Materie-Licht WW, Elektron-Elektron WW, Elektron-Phonon WW, Supraleitung etc

$\Rightarrow$  Anwendung (optoelektronische Bauteile wie Laser, Solarzellen)

$\Rightarrow$  Beschreibung von niederdimensionalen Nanostrukturen (0-dim Quantenpunkte, 1-dim Nanoröhren, 2-dim Graphen)

$\nearrow$   
häufig als Beispiel aus aktueller Forschung

## 2. Theoretische Ansätze

Unterschiedliche Ansätze in der FKP, um Vielteilchen-Probleme zu lösen

### - Dichtematrix-Formalismus (DMF)

statistischer Operator

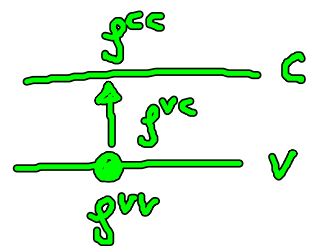
$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad \leftarrow \text{QM Vorlesung}$$

↑  
Wahrscheinlichkeiten

gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich ein System innerhalb eines Ensembles in einem bestimmten Zustand befindet

In einem einfachen 2-Niveau-System:

diagonale Elemente von  $\hat{\rho} \hat{=}$  Besetzungswahrscheinlichkeit eines Elektrons in einem Zustand



$$J^{vv} = \langle a_v^\dagger a_v \rangle$$

2. Quantisierung

nicht-diagonale Elemente  $\hat{=}$  Maß für die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Zuständen

↓  
Kapitel II

$$J^{vc} = \langle a_c^\dagger a_v \rangle$$

Man stellt Bewegungsgleichungen für diese mikroskopischen Größen auf

$$J^{vv}(t), J^{cc}(t), J^{vc}(t) \quad [\text{Bloch-Gleichungen}]$$

↑

Input: Hamilton-Operator mit allen relevanten WW  
 ↑  
 Matrixelement, die die WW beschreiben  
 (z.B. Materie-Licht, Elektron-Elektron-WW)  
 ↑  
 notwendig: Wellenfunktionen

Tight-Binding Ansatz  
 [Elektronen eng gebunden  
 an Kerne → Linearkombination  
 von Orbitalfunktionen]

effektive Masse-Näherung  
 (freie Elektronen mit  
 effektive Masse  
 → ebene Wellen)

⇒ makroskopische Größen können durch diese  
 mikroskopischen Größen ( $\rho^{uv}$ ,  $\rho^{cc}$ ,  $\rho^{vc}$ ) ausgedrückt  
 werden, z.B. makroskopische Polarisation

$$\underline{P(t)} = \sum_k M_k \rho_{\underline{R}}^{vc} \quad \Leftarrow \text{Kapitel X}$$

optisches Matrixelement

$$\text{Absorption } \alpha(\omega) \sim \omega \operatorname{Im} \chi(\omega)$$

↑  
 Suszeptibilität

$$\chi(\omega) = \frac{P(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)}$$

DMT im Fokus dieser VL

- Dichtefunktionaltheorie (DFT)

⇒ VL von Prof. Schwarz

Berechnung des quantenmechanischen Grundzustands  
eines Vielteilchensystems  $\psi_0(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$

Beruhrt auf dem Hohenberg-Kohn Theorem:

Grundzustand eindeutig bestimmbar aus der  
Elektronendichte  $n_0(\vec{r})$

↓  
zu bestimmende Observablen  
sind Funktionale dieser Dichte

Vorzeit: Man muß nicht die volle Schrödinger Gleichung  
lösen, um den Grundzustand mit  $N^3$  Freiheits-  
graden zu berechnen, sondern nur die Elektronendichte

Elektronendichte wird durch Kohn-Sham Gleichungen  
für effektive Einteilchen-Wellenfunktionen.

Annahme:  $n_0(\vec{r})$  des wv Hamilton-Operators entspricht  
der Teilchendichte zu einem effektiven Einteilchen-H  
Operator

⇒ Einteilchen-Schrödinger Gl für die Einteilchen-Wellenfkt.  
 $\psi_i(\vec{r})$

$$\Rightarrow n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\vec{r})|^2$$

Vorgehensweise: - Start mit einer geeignet gewählten Teilchendichte  
 $n_0(\vec{r})$   
- Bestimmung des effektiven Einteilchen-Potentials  
 $V_{\text{eff}}$ , das von der Dichte abhängt

- Lösung der Kohn-Shan Gleichungen
  - Bestimmung der neuen Teilchendichte  $n_2(\vec{r})$
- Vergleich von  $n_1(\vec{r})$  und  $n_2(\vec{r})$ 
  - Iterationsverfahren bis eine selbstkonsistente Lösung gefunden ist

Vorteil: Selbstkonsistente Bestimmung des Grundzustands

Nachteil: - Beschränkt auf Strukturen mit einigen 100 Atomen  
 - Unsicherheit bzgl. des effektiven Einkeilchen-Teilchen-Potentials  $V_{\text{eff}}$

⇒ Kombination von DMF und DFT möglich  
 → größere Systeme beschreibbar