Theoretische Festkörperphysik

Organisatorisches

VL Di $10^{15} - 12^{00}$ Grundlagen (Malic)

VL Fr $10^{15} - 12^{00}$ Methoden (Knorr)

Übung Mi $14^{15} - 16^{00}$ (Milde)

VL-Skript auf

http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss09/wpfv/tfp/

Sprechstunden:

Di 13^{00} Prof. Knorr EW 742

Fr 9^{00} Ermin } EW 703

Mi 16^{00} Frank } EW 703

Programm

I. Einführung (Motivation)

II. Elektronisches Teilsystem (Bloch-Theorem)

III. Teilsystem der Ionen (Phononen, Gitterschw.)

IV. Elektron-Phonon-Wechselwirkung (Polaron)

V. Elektronischer Transport (Widerstand)

VI. Elektron-Elektron-WW (Hartree-Fock-Näherung, Exzitonen, Abschirmung ...)

VII. Optische Eigenschaften von Festkörpern (Lineare Optik, Absorptionsspektren)

I. Einführung

Festkörperphysik - Eigenschaften von Materie im festen Aggregatzustand, insbes. elektronischer und thermische Eigenschaften kristalliner Körper (periodische Struktur $\rightarrow$ Translationssymmetrie)

Festkörper – große Anhäufungen von atomaren Systemen ($\sim 10^{23}$), die nahe Gleichgewichts-Positionen lokalisiert sind (durch chem. Bindung)

Methoden: Quantenmechanik
Statistische Physik

Problem: i. A. Festkörper nicht exakt beschreibbar infolge der WW der vielen Teilchen untereinander

Zentrales Konzept:
Quasiteilchen $\hat{=}$ Originalteilchen + Teil der Umgebung

$\Rightarrow$ neue WW-freie Teilchen mit effektiver Masse oder Ladung

z. B. Polaron (Elektron im Gitter)
Exziton (gebundenes Elektron-Loch-Paar)
Phononen (kollektive Gitterschwingungen)

Vorgehensweise:
Teilaspekte des allg. Problems werden betrachtet (entscheidend um bestimmte Phänomene zu verstehen)

H Hamiton-Operator allg.
$\Downarrow$ Näherung
eff. Hamiltonian für das Teilproblem H_{eff}

Motivation:

Grundlegendes Verständnis physikalischer Phänomene auf mikroskopischer Ebene (Materie-Licht-WW, Elektron-Elektron-WW, Transport, Supraleitung)
$\Longrightarrow$ Anwendung (Laser, Verstärker)

Übertragung der theoretischen Methoden auf niederdimensionalen Nanostrukturen, z.B. Quantenfilme (2D), Nanotubes (1D), Quantenpunkte (0D)

⇒ neuartige, leistungsstarke Anwendungen (molekulare Schalter, Biosensoren etc.)

2. Born-Oppenheimer-Näherung:

<u>Entkopplung der Elektronen- und Gitterdynamik</u>

Atome

→ Atomkerne

→ Elektronen

→ → Rumpfelektronen (innere Schalen)

→ → Valenzelektronen (äußere Schalen, verantwortlich für chem. Bindung)

Atomkerne + Rumpfelektronen: Gitterionen

Aufteilung des Gesamtsystems (FK) in Teilsysteme: Gitterionen und (Valenz-) Elektronen

$$H = H_e + H_i + H_{e-i}$$

H_e → Elektronen beweglich im Potential der Gitterionen → Quasielektronen mit effektiver Masse

H_i → Ionen lokalisiert, Schwingen um Gleichgewichts-Lagen → Phononen kollektive Ionen-schwingungen

H_{e-i} → Elektron-Phonon-WW → neues Quasi-teilchen: Polaron

Polaron: Elektronbewegung im Kristall

→ Polarisation in der Umgebung infolge der Ladung des Elektrons

→ Verzerrung des Gitters

Die Polarisationswolke bewegt sich zusammen mit dem Elektron und bewirkt eine Veränderung der effektiven Masse

"nacktes" Elektron + Polarisationswolke $\hat{=}$ Polaron

Teilsystem der Elektronen

$$H_e = H_{e,kin} + H_{e-e} = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{p_i^2}{2m_e} + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{(i \neq j)} \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_i - r_j|}$$

$N_e \hat{=}$ Zahl der Valenzelektronen

Teilsystem der Ionen

$$H_i = H_{i,kin} + H_{ii} = \sum_{\alpha=1}^{N_i} \frac{P_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta}^{\alpha \neq \beta} V_{ii}(R_\alpha - R_\beta)$$

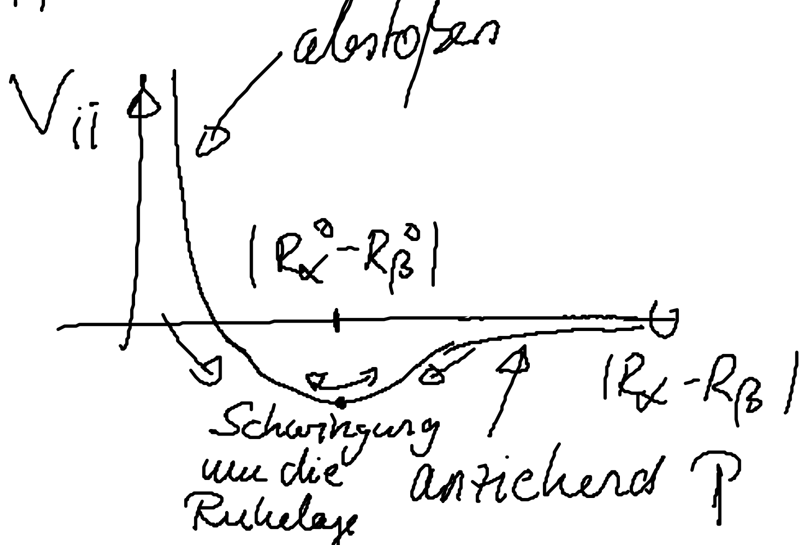
$N_i \hat{=}$ Zahl der Ionen

Falls nur Atomkerne (ohne Rumpfelektronen) betrachtet werden:

$$V_{ii}(R_\alpha - R_\beta) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z_\alpha Z_\beta e_0^2}{|R_\alpha - R_\beta|}$$

mit Kernladungszahlen Z_α, Z_β

Rumpfelektronen führen zu einem abgeschirmten effektiven Potential



Um einen stabilen Kristall zu beschreiben, muß V_{ii} ein stabiles Minimum als Fkt. des Abstandes zweier Ionen

z.B. Lennard-Jones-Potential

Vorgehensweise, um V_{ii} zu bestimmen

Annahme: kleine Auslenkungen

$\Rightarrow$ Taylorentwicklung um die Ruhelage $\quad u^n_{\alpha\beta} u^m_{\alpha\beta}$

$$H_{ii} = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} V_{ii}(R^0_{\alpha\beta})}_{\substack{\text{Coulomb-WW zwischen} \\ \text{ruhenden Ionen} \\ \hat{=} \text{ Bindungsenergie}}} + \underbrace{\frac{1}{2}\frac{1}{2!} \sum_{\alpha\beta}^{\alpha \neq \beta} \sum_{n,m} \frac{\partial^2 V_{ii}(R_{\alpha\beta})}{\partial R^n_{\alpha\beta} \partial R^m_{\alpha\beta}} \Bigg|_{R^0_{\alpha\beta}}}_{\Phi^{nm}_{\alpha\beta}}$$

H_{ii} läßt sich als quadratische Form der Auslenkung der Ionen darstellen $\rightarrow$ Beitrag der potentiellen Energie gekoppelter harmonischer Oszillatoren mit $\Phi^{nm}_{\alpha\beta}$ als Kraftkonstante

Die quadratische Form kann diagonalisiert werden $\Rightarrow$ H_i Summe kollektiver ungekoppelter Oszillatoren: Phononen

WW der beiden Teilsysteme

$$H_{e-i} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{e-i}(r_i - R_\alpha)$$

Im Falle "nackter" Atomkerne: $V_{ei} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z_\alpha e_0^2}{|r_i - R_\alpha|}$

Genauer Taylorentwicklung:

$$H_{e-i} = \underbrace{\sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{e-i}(|r - R_\alpha^0|)}_{\text{Elektronenbewegung im statischen Potential der Ionen } H_{e-i}^{(0)}} + \underbrace{\sum_{i}^{N_e} \sum_{\alpha}^{N_i} \vec{u}_\alpha \cdot \vec{\nabla}_{R_\alpha} V(|r_i - R_\alpha|)\Big|_{R_\alpha^0}}_{\text{WW der Elektronen mit dem zeitabh. Potential der Ionen } u_\alpha(t)}$$

$\Rightarrow$ Gitterverzerrungen

H_{e-p}

Exakte Lösung des Gesamtsystems nicht möglich.

Born-Oppenheimer Näherung: Entkopplung der Elektronen- und Atomkern-Bewegung

Begründung: Infolge der viel größeren Masse der Ionen ($\sim 10^4$) ist die Ionenbewegung so langsam, daß sich die Elektronen fast instantan an die neuen Konpositionen anpassen können.

(adiabatische Näherung)

Näherung nur exakt für $M_\alpha \to \infty$

unendlich schwere, ruhende Atomkerne

Herangehensweise:

1) Beschreibung der Elektronenbewegung im starren Ionengitter $H = H_e + H_{e-i}^{(0)}$

2) Beschreibung der Atomkernbewegung im homogenen "Elektronensee" $H = H_i$

3) Störungstheoretische Behandlung der Elektron-Phonon-WW $H = H_{e-p}$

Math. Begründung der Born-Oppenheimer-Näherung

Infolge der schweren Masse wird die kin. Energie der Atomkerne als Störung aufgefasst

$$H = H_0 + H_S$$

mit $H_0 = H_{e,kin} + H_{e-e} + H_{e-i}$

$H_S = H_{i,kin}$

Annahme: Die zu H_0 zugehörige Schrödingergl. lösbar

$$* \quad H_0 \phi_\alpha^R(r) = \varepsilon_\alpha^R \phi_\alpha^R(r)$$

H_0 beschreibt das Problem von N_e WW Elektronen im statischen Potential, das von N_i Atomkernen aus fixierten Positionen R erzeugt wird.

In $\phi_\alpha^R(r)$ gehen Kernpositionen als Parameter ein. $\{\alpha\} \hat{=}$ vollständiger Satz von elektron. Quantenzahl.

Allg. Wellenfkt. $\psi(r,R)$ kann nach den $\phi_\alpha^R(r)$ für jedes R entwickelt werden

$$\psi(r,R) = \sum_\alpha \underline{\underline{\chi_\alpha(R)}}\, \phi_\alpha^R(r)$$

Ziel ist die Lösung des Gesamteigenwert-Problems

$$H\,\psi(r,R) = E\,\psi(r,R)$$

χ_α sollen bestimmt werden

$$(H - E)\,\psi(r,R) = \sum_\alpha (H_0 + H_S - E)\,\chi_\alpha(R)\,\phi_\alpha^R(r)$$
$$\overset{*}{=} \sum_\alpha (\varepsilon_\alpha^R + H_S - E)\,\chi_\alpha(R)\,\phi_\alpha^R(r) = 0 \quad \Big| \phi_\beta^{R*}(r) \quad \int dr$$

$$\sum_\alpha \int \phi_\beta^{R*}(r) \Big[\varepsilon_\alpha^R - E - \underbrace{\sum_{i=1}^{N_1} \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_{R_i}^2 \Big] \chi_\alpha(R)\,\phi_\alpha^R(r)}\, dr = 0$$

$$\phi_\alpha^R(r) \frac{\partial^2}{\partial R_i^2} \chi_\alpha(R) + \chi_\alpha(R) \frac{\partial^2}{\partial R_i^2} \phi_\alpha^R(r)$$
$$+\, 2 \frac{\partial}{\partial R_i} (\phi_\alpha^R(r)) \frac{\partial}{\partial R_i} \chi_\alpha(R)$$

$$\int \phi_\beta^* \phi_\alpha\, dr = \delta_{\beta\alpha}$$

$$\left(\varepsilon_\beta^R - E + \overset{\text{d}}{H_S}\right)\chi_\beta(R) - \sum A_{\alpha\beta}(R)\,\chi_\alpha(R) = 0$$ orthonormal

$$A_{\alpha\beta} = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i}\int dr\,\Big[\,\phi_\beta^{R*}(r)\,\frac{\partial^2}{\partial R_i^2}\,\phi_\alpha^R(r) + $$
$$+\,\phi_\beta^{R*}(r)\,\frac{\partial}{\partial R_i}\big(\phi_\alpha^R(r)\big)\frac{\partial}{\partial R_i}\,\Big]$$

$\hat{=}$ Übergangsmatrixelemente zwischen verschiedenen elektron. Zuständen α, β der Ionenbewegung

$\Rightarrow$ Schrödingergl. nur für die Atomkerne, die sich im effekt. Potential ε_β^R befinden

$$\left(H_S + \varepsilon_\beta^R\right)\chi_\beta(R) = E\,\chi_\beta(R)$$

für $A_{\alpha\beta} \to 0$