

Theoretische Festkörperphysik

Gliederung der VL

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

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

0. Einführung und Motivation

1. Motivation

- Festkörperphysik: Eigenschaften von Materie im festen Aggregatzustand, Fokus auf kristalline Strukturen (periodisch mit Translationssymmetrie)
- Festkörper: große Anhäufungen von atomaren Systemen (10^{23}), die durch chem. Bindungen nahe Gleichgewichtspositionen lokalisiert sind
- Methoden: Quantenmechanik + statistische Physik
 Hamilton-Operator bekannt, da ^{nur} 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 Gitterschwingen
 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: Teilespekt 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 niedrigdimensionalen 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

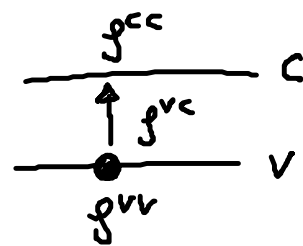
$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad \leftarrow \text{QM Vorlesung}$$

↑
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



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

2. Quantisierung

↓
Kapitel II

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

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

Man stellt Bewegungsgleichungen für diese mikroskopischen Größen auf

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

↑

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 (f^{vu} , f^{cc} , f^{vc}) ausgedrückt
 werden, z.B. makroskopische Polarisation

$$\underline{P(\omega)} = \sum_k M_k \underline{f_{ku}^{vc}} \quad \Leftarrow \text{Kapitel X}$$

optisches Matrixelement

⇓

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

Vorteil: 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
 $n_1(\vec{r})$
- Bestimmung des effektiven Einteilchen-Potentials
 V_{eff} , das von der Dichte abhängt

- Lösung der Kohn-Sham 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 Ein-Teilchen-Teilchen-Potentials V_{eff}

⇒ Kombination von DMT und DFT möglich
 → größere Systeme beschreibbar