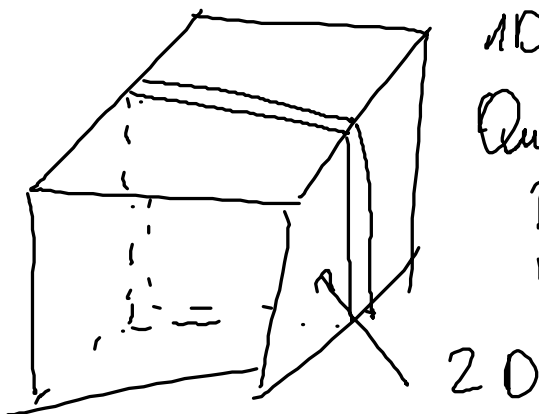


III.6 Nanostrukturen (Beispiele)

Wir haben die Elektronen im Kristall (ausgedehnt) angesehen, die Elektronen waren wellenartig.

Idee: Resonanz ähnliche Strukturen um die Elektronenwellen einzusperren.

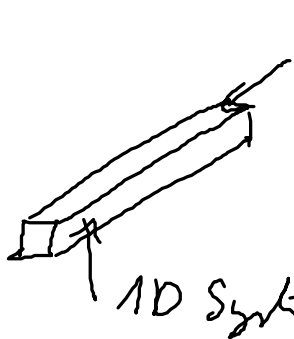
Grundtyp:



1D eingespannt

Quantenwell

Realisierung zwei Halbleiter
mit unterschiedlichen Bandlücken



Quantendraht

in zwei Dimensionen
eingespannt.

Quantenpunkt

in 3 Dimensionen eingespannt



0D System

Einfacher Ansatz: Einkügelmodell Näherung

Quantenwell (2D)

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

Quantendraht

$$i k_x x$$

$$\psi_{\lambda, k}(z) = \int_n(y, z) \frac{e}{\sqrt{L}} u_{\lambda k}(z)$$

Quantenpunkt

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

Beispiel für 2D Quantenwell:

$$\left[\underbrace{H_0}_{\text{elektron}} + \underbrace{V_{\text{con}}(z)}_{\text{confinement potential}} \right] \psi_{\lambda k}(z) = E \psi(z)$$

elektron confinement potential

Die Idee ist in dem Fall, dass wir nur der Bandlücke.

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

Aus der Energie dispersion

$$\Rightarrow E_e(k) = E_g + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_e}$$

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

Beispiel: Für Kastenpotential $V_{\text{con}}(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq z \leq L_c \\ \infty & \text{für } z > L_c \\ & \text{und } z < 0 \end{cases}$

LSG ist dann:

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

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

$$\psi(z) = N \sin(k_z \cdot z)$$

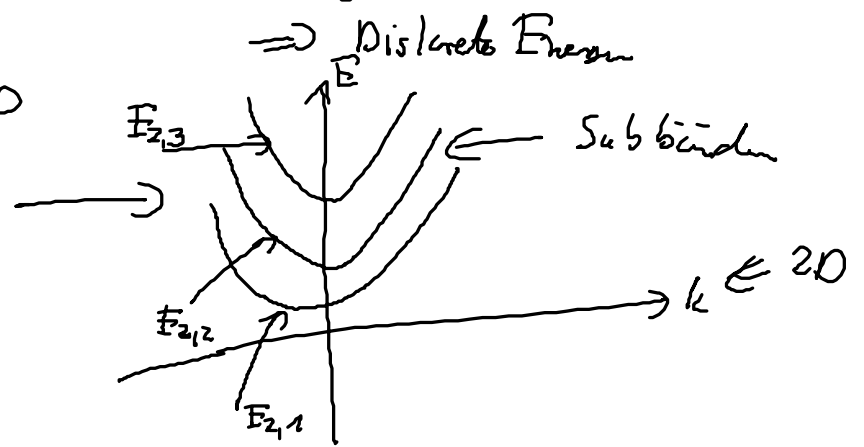
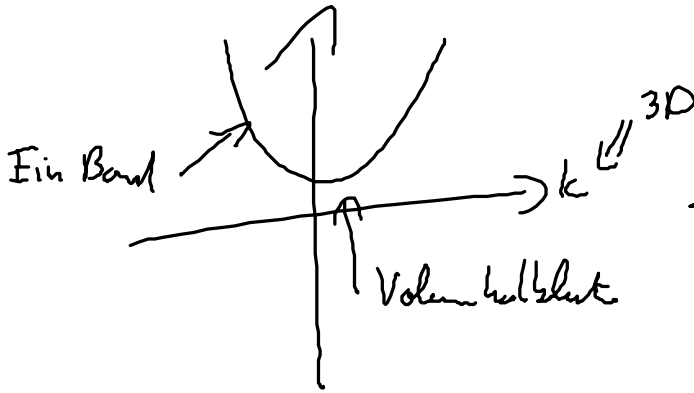
↑
Normierungsfaktor

$$k_z L_c = n\pi$$

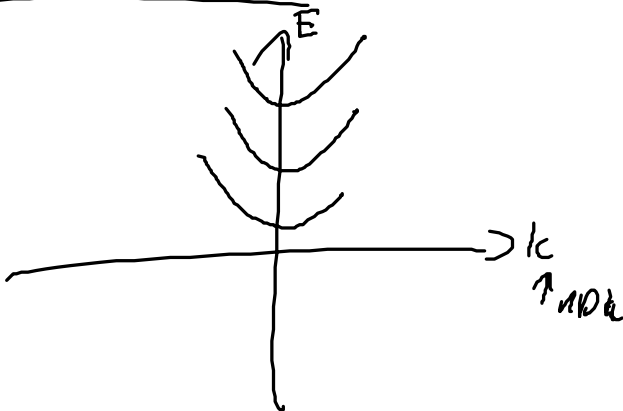
$$\Rightarrow k_z = \frac{n\pi}{L_c}$$

Energie $E_{z,n} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{n\pi}{L_c}\right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L_c^2} n^2$ $n = 1, 2, 3, \dots$

\Rightarrow Discrete Energien

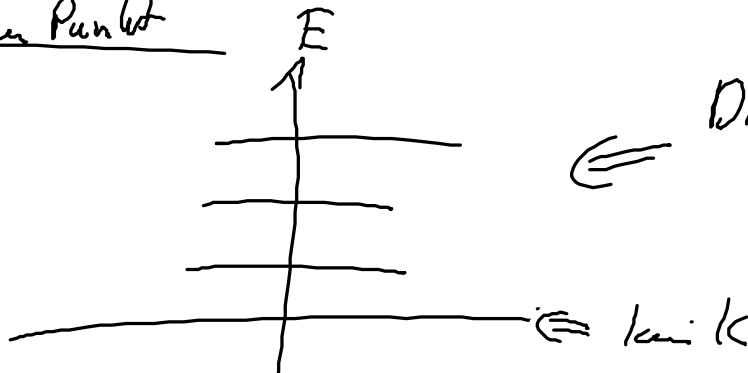


1D Quantenwire



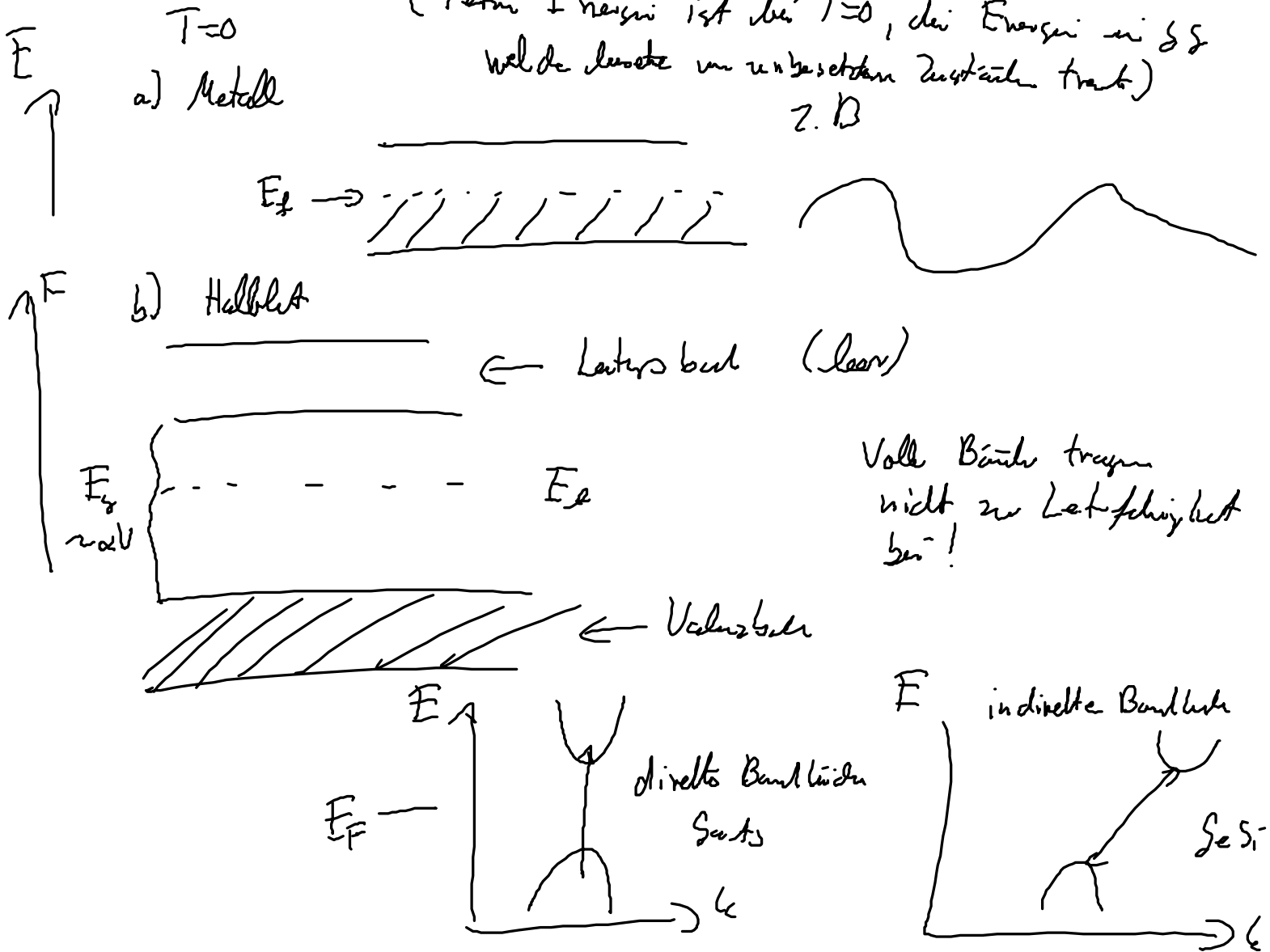
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{L_c^2} + k_{\perp}^2 \right)$$

0D Quantenpunkt



\Leftarrow Discrete Atomartige Zustände

Bemerkung: Bandstruktur erlaubt Klassifizierung von Materialtypen mit Hilfe Fermi-Energie:
 (Fermi-Energie ist bei $T=0$, die Energie in eV welche besetzt von unbesetzten Zuständen trennt)
 z. B.



c) Isolatoren, wie Halbleiter $E_g \sim 10 \text{ eV}$.

V 2. Quantisierung (kurze Einführung)

Erinnerung an harmonischen Oszillatoren in der Quantenmechanik:

Operatoren b und b^\dagger erzeugen bzw vernichten ein Quanten-
 Zustand des harmonischen Oszillators (Phonon)

Ziel: Hamiltonoperatoren und Zustände mit Erzeugern und
 Vernichtern von Teilchen in verschiedenen Zuständen darstellen.
 Elegante und eingängige Formeln.

Vorsicht: Mehrere Wege:

1) Konstruktiv: z.B. Fermionen, Einzeile der Schrödinger-
 \Rightarrow Später determiniert \Rightarrow Einführung Erzeug- Vernichtoperatoren
 verschiedene Teilchenzustände.

2) Mit Methode der Quantenfeldtheorie

Vorteil: Herleitung aller Teilchen mit einheitlichen Prinzipien
 (mit Quasiteilchen)

Hier für Phonon, Fermionen!

V. 1

Mathematische Rüstzeug: Funktionalableitung und Lagrange-
~~St-f~~ Felder

Partikelmechanik: Lagrange-Funkt von endlich vielen
 Koordinaten q_i, p_i

Bei der Quantisierung von Feldern z.B. $\varphi(x)$ ist der Ort
 der Index. Analogie zu Partikeln Ableitung + Lagrange-Funkt
 gesucht!

1. Schritt Funktional Ableitung (Rezept)

(Herleitung, s. Feynman, Hibbs
 "Quantum mechanics and Path Integrals")

$$1) \frac{\partial q_i}{\partial q_k} = \delta_{ik}$$

$$\frac{\delta \varphi(x)}{\delta \varphi(x')} = \delta(x-x')$$

$$\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{q}_k} = \delta_{ik}$$

$$\frac{\delta \dot{\varphi}(x)}{\delta \dot{\varphi}(x')} = \delta(x-x')$$

2) Kettenregel

$$\frac{d f(q_i)}{d q_j} = \frac{\partial f(q_i)}{\partial q_i} \frac{d q_i}{d q_j} \quad \left| \quad \frac{\delta f(\varphi(x))}{\delta \varphi(x')} = \frac{\partial f(\varphi(x))}{\partial \varphi(x)} \frac{\delta \varphi(x)}{\delta \varphi(x')} \right.$$

3.

$$\frac{\delta}{\delta \varphi(x')} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \underset{dx \rightarrow 0}{=} \frac{\delta}{\delta \varphi(x')} \frac{\varphi(x+dx) - \varphi(x)}{dx} = \frac{1}{dx} (\delta(x+dx-x) - \delta(x-x')) = \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x')$$

Lagrange SL

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}(x)} = \frac{\delta L}{\delta \varphi(x)}$$

V.2 Harmonische Oszillatoren (Prototyp für die Zweite Quantisierung)

Ensemble von ungekoppelten Harmonischen Oszillatoren (Beispiel: benachbarte Atome im Kristall siehe E.M. VL Teil)

Die Lagrange Fkt. (in Normalkoordinaten)

$$L = \sum_{i,q} \left(\frac{1}{2} \dot{Q}_{i,q}^2 - \frac{1}{2} \omega_{i,q}^2 Q_{i,q}^2 \right)$$

\uparrow $q \leftarrow$ Kristallimpuls
 Zwei Phononen

Der kanonische Impuls $P_{i,q}$ zu $Q_{i,q}$ wird durch

$$P_{i,q} = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_{i,q}} = \dot{Q}_{i,q} \quad \text{bestimmt}$$

Lesende Transformation \Rightarrow Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2} \sum_i (P_{i,q}^2 + \omega_i^2 Q_{i,q}^2)$$

Übergang zur Quantenmechanik: (Postulate von Kommutator)

$$[Q_{i,q}, P_{j,q}]_{-} = i\hbar \delta_{ij} \delta_{qq}$$

$$[Q_{i,q}, Q_{j,q}]_{-} = 0$$

$$[P_{i,q}, P_{j,q}]_{-} = 0$$

Konstruktion von Erzeugnis- und Vernichtungsoperatoren:

$$b_{i,q}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega_i}} (\omega_i Q_{i,q} - i P_{i,q})$$

$$b_{i,q} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega_i}} (\omega_i Q_{i,q} + i P_{i,q})$$

$$Q_{iq} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (b_{iq}^\dagger + b_{iq})$$

$$P_{iq} = -i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (b_{iq} - b_{iq}^\dagger)$$

$$H = \sum_{q_i} \hbar \omega_{iq} (b_{iq}^\dagger b_{iq} + \frac{1}{2})$$

Vertauschungsrelationen

$$[b_{iq}, b_{jq}^\dagger] = \delta_{ij} \delta_{qq'} \quad [b_{iq}, b_{jq}] = 0, \quad [b_{iq}^\dagger, b_{jq}^\dagger] = 0$$

$$\| \underbrace{b_j}_{\text{Gutsterk}} |d_0\rangle = 0 \|$$

Erinnerung an die QM:

Wenn $|\phi\rangle$ EV von $H = \sum \hbar \omega_{iq} (b_{iq}^\dagger b_{iq} + \frac{1}{2})$ ist, so ist auch $b_{iq} |\phi\rangle$ und $b_{iq}^\dagger |\phi\rangle$ EV.

Wir können jetzt jeden EV aus Grundzustand konstruieren:

$$|n_1, \dots, n_i, \dots, n_{max}\rangle = \frac{1}{N(n_1, \dots, n_{max})} \prod_i (b_i^\dagger)^{n_i} |d_0\rangle$$

(Multiindex $i \in \{iq\}$)

Normierung zeichnen (für eine Mode)

Behauptung: $|n_1\rangle = \frac{1}{N(n_1)} b_1^{\dagger n_1} |d_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} b_1^{\dagger n_1} |d_0\rangle$

Beweis über Induktion: ($n_1=1$) (i) $\|b_1^\dagger |d_0\rangle\|^2 = \langle d_0 | b_1 b_1^\dagger |d_0\rangle = \langle d_0 | (b_1^\dagger b_1 + 1) |d_0\rangle = \langle d_0 | d_0\rangle = 1 = n_1!$

(ii) $b_1^\dagger b_1 b_1^\dagger |d_0\rangle = b_1^\dagger |d_0\rangle + \underbrace{b_1^\dagger b_1^\dagger b_1 |d_0\rangle}_0 = b_1^\dagger |d_0\rangle$

($n_1 \rightarrow n_1+1$): Voraus: $\| (b_1^\dagger)^{n_1} |d_0\rangle \| = n_1!$ und $b_1^\dagger b_1 (b_1^\dagger)^{n_1} |d_0\rangle = n_1 (b_1^\dagger)^{n_1} |d_0\rangle$

Schritt: (i) $\| (b_1^\dagger)^{n_1+1} |d_0\rangle \|^2 = \langle d_0 | b_1^{n_1} b_1 b_1^\dagger b_1^{n_1} |d_0\rangle$

$$= \langle d_0 | b_1^{n_1} b_1^{n_1+1} |d_0\rangle + \langle d_0 | b_1^{n_1} \underbrace{b_1^\dagger b_1}_{n_1} b_1^{n_1} |d_0\rangle$$

$$= n_1! + n_1 \langle d_0 | b_1^{n_1} b_1^{n_1+1} |d_0\rangle = n_1! (1+n_1) = (n_1+1)!$$

(ii) $b_1^\dagger b_1 (b_1^\dagger)^{n_1+1} |d_0\rangle = b_1^\dagger \underbrace{b_1 b_1^\dagger}_{n_1!} (b_1^\dagger)^{n_1} |d_0\rangle = n_1! b_1^\dagger (b_1^\dagger)^{n_1} |d_0\rangle + b_1^\dagger (b_1^\dagger)^{n_1} |d_0\rangle$

$$= \underbrace{n_1!}_{n_1} (b_1^\dagger)^{n_1+1} |d_0\rangle + b_1^\dagger (b_1^\dagger)^{n_1} |d_0\rangle$$

Ergebnis: $= (n_i + 1) b_i^\dagger |d_0\rangle$ J

$$|n_1, \dots, n_i, \dots, n_{max}\rangle = \frac{1}{\prod_j \sqrt{n_j!}} \prod_j (b_j^\dagger)^{n_j} |d_0\rangle$$

(Fock Zustände)

Wirken der b_j, b_j^\dagger bzw. Eigenwert $b_j^\dagger b_j$.

$$b_j |n_1, \dots, n_{max}\rangle = \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots, n_{max}\rangle$$

$$b_j^\dagger |n_1, \dots, n_{max}\rangle = \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots, n_{max}\rangle$$

$$b_j^\dagger b_j |n_1, \dots, n_{max}\rangle = n_j |n_1, \dots, n_{max}\rangle$$

↑ Besetzung ist die in Teilchenzahl operiert
 Interpretation zu Ham Op:

$$H = \sum_i \hbar \omega_i b_i^\dagger b_i$$

↙ Anzahl der Teilchen in Modus i
 multipliziert mit der Energie des Quas

Das b_j bewirkt Phonon in Zustand j
 b_j^\dagger erzeugt Phonon in Zustand j

Man kann beliebig viele Teilchen in eine Mode stecken!