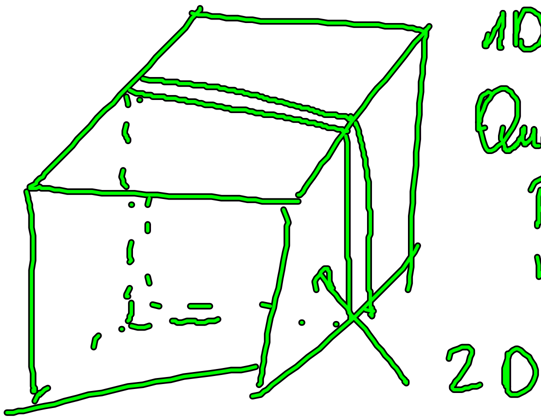
III.6 Nanostrukturen (Beispiele)

Wir haben die Elektronen in Kristallen (ausgedehnt) angeschaut, die Elektronen waren wellenartig.

Idee: Resonator ähnliche Strukturen um die Elektronenwellen einzusperren.

Grundtyp:



1D eingesperrt

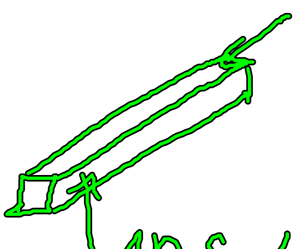
Quantenwell

Realisierung zwei Halbleiter mit unterschiedlichen Bandlücken

2D

Quantendraht

in zwei Dimensionen eingesperrt.



1D System

Quantenpunkt

in 3 Dimensionen eingesperrt

0D System

Einfacher Ansatz: Einhüllende Näherung

Quantenwell (2D)

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

Quantendraht

$$ik_x x$$

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

Quantenpunkt

$$\psi_{\lambda,k}(\underline{r}) = \xi_n(x,y,z)\,u_{\lambda k}(\underline{r})$$

Beispiel für 2D Quantenwell:

$$[\underbrace{H_e}_{\text{electron}} + \underbrace{V_{con}(z)}_{\text{confinement potential}}]\,\psi_{\lambda k}(\underline{r}) = \underline{E}\;\psi(\underline{r})$$

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

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

Aus der Energiedispersion

$$E_e(k) = E_g + \frac{\hbar^2 (k_\perp^2 + k_z^2)}{2 m_e}$$

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

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

Lsg ist dann:

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

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

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

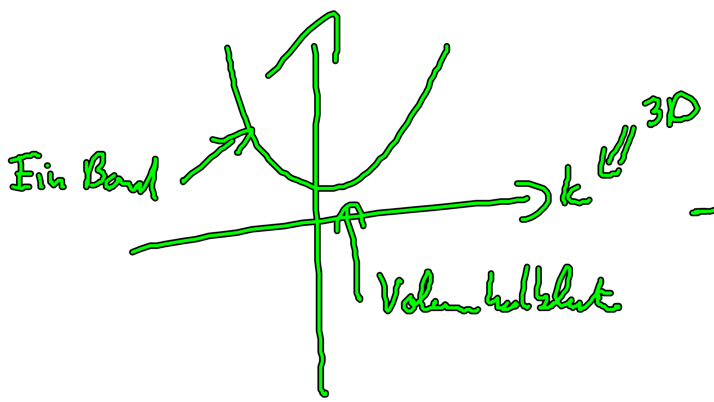
N: Normierungsfaktor

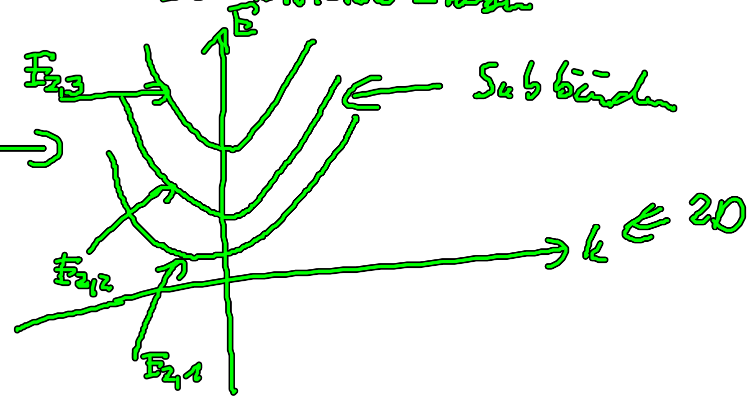
$k_z L_c = n\pi$

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

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

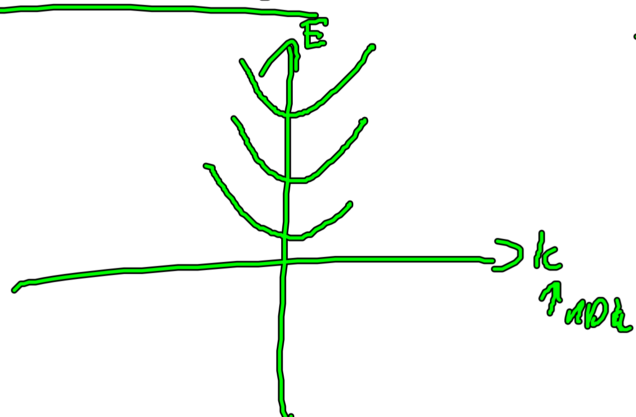
$\Rightarrow$ Diskrete Energien



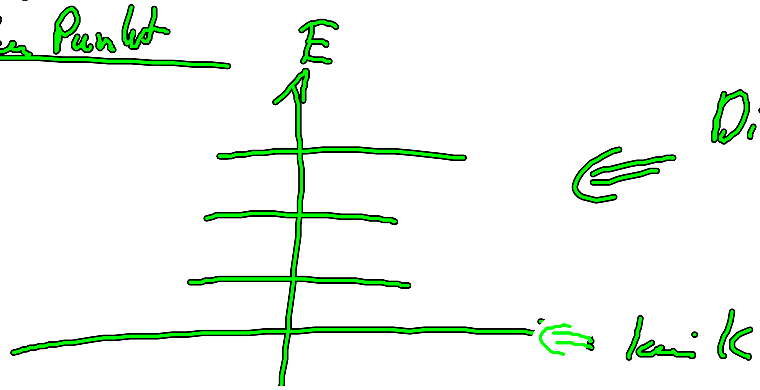


1D Quantenwire

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



0D Quantenpunkt

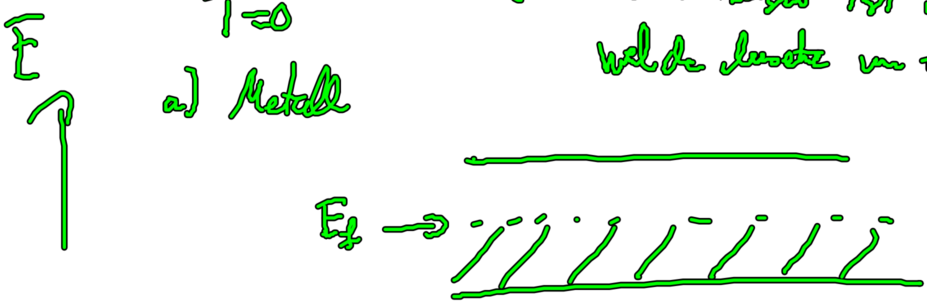


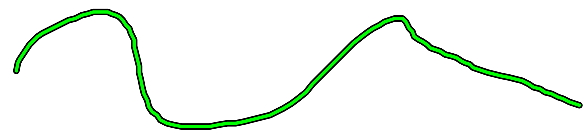
Diskrete Atomartige Zustände

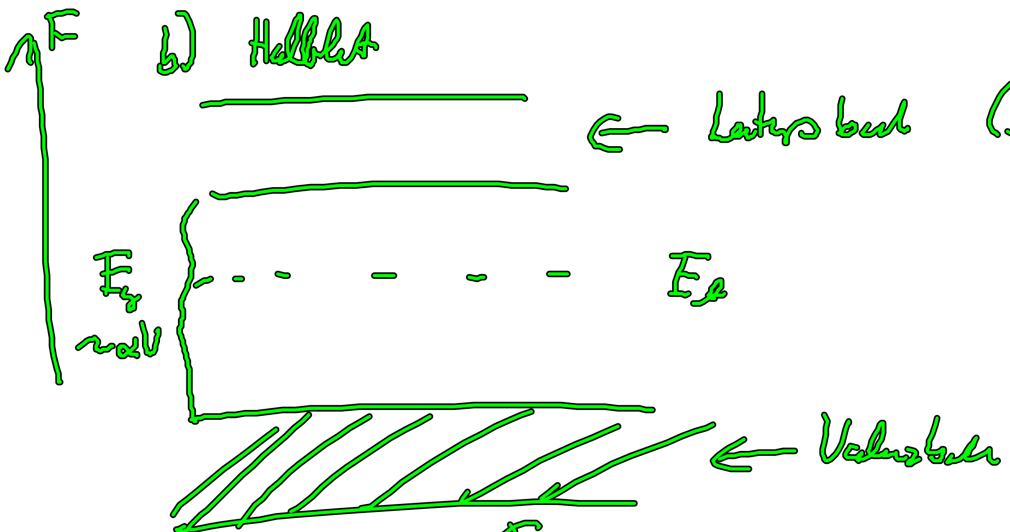
Bemerkung: Bandstruktur erlaubt Klassifizierung von Materialtypen mit Hilfe Fermi-Energie:

(Fermi-Energie ist bei $T=0$, die Energie, welche besetzte von unbesetzten Zuständen trennt)

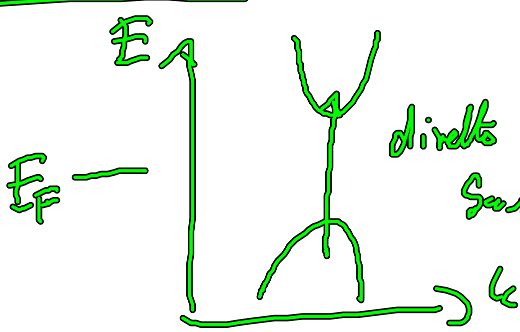
z.B.

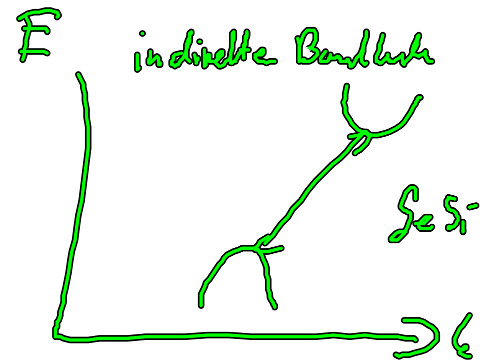






Volle Bänder tragen nicht zur Leitfähigkeit bei!





c) Isolator, wie Halbleiter $E_g \sim 10\,eV$.

V 2. Quantisierung (kurze Einführung)

Erinnerung an harmonischen Oszillator in der Quantenmechanik:

Operator b und b^+ erzeugen bzw. vernichten ein Quantum ... Zustand des harm. Oszillators (Phonon)

Ziel: Hamiltonoperator und Zustände mit Erzeugern und Vernichtern von Teilchen in verschiedenen Zuständen darstellen. Elegante und einheitliche Formulierung.

Vorgehen: Mehrere Wege:

1) Konstruktiv: z.B. Fermion, Einteilchen Schrödinger-Gl.
$\Rightarrow$ Slater determinante $\Rightarrow$ Einführung Erzeuger-Vernichteroperatoren verschiedener Teilchenzahlzustände.

2) Mit Methoden der Quantenfeldtheorie
Vorteil: Herleitung aller Teilchen mit einheitlichen Prinzipien (und Quasiteilchen)
Hier für Phonon, Fermion!

V.1 Mathematische Rüstzeug: Funktionalableitung und Lagrange-Gl. f. Felder

Punktmechanik: Lagrange-Fkt von endlich vielen Koordinaten q_i, p_i

Bei der Quantisierung von Feldern z.B. $\psi(\underline{x})$ ist der Ort der Index. Analogon zu Partieller Ableitung + Lagrange-Fkt gesucht!

1. Schritt Funktional Ableitung (Regeln)

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

1) $$\frac{\partial q_i}{\partial q_k} = \delta_{ik} \qquad \frac{\delta \psi(\underline{x})}{\delta \psi(\underline{x}')} = \delta(\underline{x}-\underline{x}')$$

$$\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \dot{q}_k} = \delta_{ik} \qquad \frac{\delta \dot{\psi}(\underline{x})}{\delta \dot{\psi}(\underline{x}')} = \delta(\underline{x}-\underline{x}')$$

2) Kettenregel

$$\frac{d f(q_i)}{d q_j} = \frac{\partial f(q_i)}{\partial q_i}\frac{d q_i}{d q_j} \quad \Bigg| \quad \frac{\delta f(\psi(x))}{\delta \psi(x')} = \frac{\partial f(\psi(x))}{\partial \psi(x)}\frac{\delta \psi(x)}{\delta \psi(x')}$$

3.

$$\boxed{\frac{\delta}{\delta \psi(x')}\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}} \underset{dx\to 0}{=} \frac{\delta}{\delta \psi(x')}\frac{\psi(x+dx)-\psi(x)}{dx} = \frac{1}{dx}\left(\delta(x+dx-x')-\delta(x-x')\right) = \boxed{\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')}$$

Lagrange Gl.

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \Rightarrow \frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta \dot\psi(x)} = \frac{\delta L}{\delta \psi(x)}$$

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

Ensemble von ungekoppelten harmonischen Oszillatoren (Beispiel: Kernschwingungen der Atome im Kristall siehe Elk. VL Teil I).

Die Lagrange Fkt. (in Normalkoordinaten)

$$L = \sum_{iq}\left(\frac{1}{2}\dot Q_{iq}^2 - \frac{1}{2}\omega_{iq}^2 Q_{iq}^2\right)$$

q ← Kristallimpuls

i ↑ Zweig Phononen

Der kanonische Impuls P_{iq} zu Q_{iq} wird durch

$$P_{iq} = \frac{\partial L}{\partial \dot Q_{iq}} = \dot Q_{iq} \quad \text{bestimmt}$$

Legendre Transformation ⇒ Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2}\sum_i \left(P_{iq}P_{iq} + \omega_i^2 Q_{iq}Q_{iq}\right)$$

Übergang zur Quantenmechanik: (Postulat von Kommutatoren)

$$[Q_{iq}, P_{jq'}]_- = i\hbar\,\delta_{ij}\,\delta_{qq'} \qquad [Q_{iq}, Q_{jq'}]_- = 0$$

↑ Bosonen

$$[P_{iq}, P_{jq'}]_- = 0$$

Konstruktion von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

$$b_{iq}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{iq}}}\left(\omega_{iq}Q_{iq} - iP_{iq}\right) \qquad b_{iq} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{iq}}}\left(\omega_i Q_{iq} + iP_{iq}\right)$$

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

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

$$H = \sum_{qi} \hbar\omega_{iq}\,(b_{iq}^+ b_{iq} + \tfrac{1}{2})$$

Vertauschungsrelationen

$$[b_{iq}, b_{jq'}^+]_- = \delta_{ij}\delta_{qq'} \qquad [b_{iq}, b_{jq'}] = 0, \quad [b_{iq}^+, b_{iq}^+]_-$$

$$\| \; b_j \underbrace{|\phi_0\rangle}_{\text{Grundzustand}} = 0 \, \|$$

Erinnerung an die QM:

Wenn $|\phi\rangle$ EV von H-Op ist, so ist auch $b_{iq}|\phi\rangle$ und $b_i^+|\phi\rangle$ EV

Wir können jetzt jeden EV aus Grundzustand konstruieren:

(Multiindex $i \in \{i,q\}$)

$$|n_1,\dots,n_i,\dots,n_{max}\rangle = \frac{1}{N(n_1\dots n_{max})}\prod_i (b_i^+)^{n_i}|\phi_0\rangle$$

Normierungsfaktor zeigen (für eine Mode)

Behauptung: $|n_1\rangle = \frac{1}{N(n_1)} b_1^{+n}|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} b_1^{+n}|\phi_0\rangle$

Beweis über Induktion: $(n_1 = 1)$ (i) $\| b_1^+|\phi_0\rangle\|^2 = \langle\phi_0| b_1 b_1^+|\phi_0\rangle = \langle\phi_0|(\underbrace{b_1^+ b_1}_{0} + 1)|\phi_0\rangle$

$$= \langle\phi_0|\phi_0\rangle = 1 = n_1!$$

(ii) $b_1^+ b_1 b_1^+|\phi_0\rangle = b_1^+|\phi_0\rangle + \underbrace{b_1^+ b_1^+ b_1|\phi_0\rangle}_{0} = b_1^+|\phi_0\rangle$

$(n_1 \to n_1+1)$: Voraussetzung: $\|(b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle\| = n_1!$ und $b_1^+ b_1 (b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle = n_1 (b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle$

Schritt: (i) $\|(b_1^+)^{n_1+1}|\phi_0\rangle\|^2 = \langle\phi_0| b_1^{n_1} \underline{b_1 b_1^+} b_1^{+n_1}|\phi_0\rangle$

$$= \langle\phi_0| b_1^{n_1} b_1^{+n_1}|\phi_0\rangle + \langle\phi_0| b_1^{n_1} \underbrace{b_1^+ b_1 b_1^{+n_1}|\phi_0\rangle}_{n_1 (b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle}$$

$$= n_1! + n_1 \underbrace{\langle\phi_0| b_1^{n_1} b_1^{+n_1}|\phi_0\rangle}_{n_1!} = n_1!(1+n_1) = (n_1+1)!$$

(ii) $b_1^+ b_1 (b_1^+)^{n_1+1}|\phi_0\rangle = b_1^+ b_1 b_1^+ (b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle$

$$= b_1^+ \underbrace{b_1^+ b_1 (b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle}_{n_1 (b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle} + b_1^+ (b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle$$

$= (n_1+1)\, b_1^+ |\phi_0\rangle$

Ergo:

$$|n_1, \dots, n_j, \dots, n_{max}\rangle = \frac{1}{\prod_j \sqrt{n_j!}} \prod_j (b_j^+)^{n_j} |\phi_0\rangle$$

(Fock Zustände)

Wirkung der b_j, b_j^+ bzw. Eigenzustand $b_j^+ b_j$.

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

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

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

Deshalb ist der ein Teilchenzahloperator

Interpretation zu Ham Op:

$$H = \sum_i \hbar\omega_i\, b_i^+ b_i$$

Anzahl der Teilchen in Mode i multipliziert mit der Energie des Osz.

Das heißt b_j vernichtet Phonon in Zustand j

und b_j^+ erzeugt Phonon in Zustand j

Man kann beliebig viele Teilchen in eine Mode stecken!