Blochsches Theorem (Fortsetzung)

$\psi_{n\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}}\, u_{n\underline{k}}(\underline{r})$ Bloch Funktionen

sind Eigenfunktionen zum Ham.operator mit periodischem Potenzial $V(\underline{r}+\underline{R}) = V(\underline{r})$.

$H(\underline{k})\, u_{n\underline{k}} = E_n(\underline{k})\, u_{n\underline{k}}$ Eigenwertgleichung für Ham.operator

$H(\underline{k}) = \frac{1}{2m}(\hat{\underline{p}} + \hbar \underline{k})^2 + V(\underline{r})$

$\downarrow$

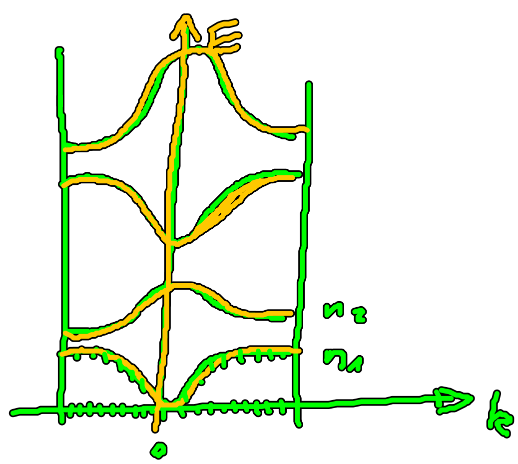
Hermitescher Hamiltonop.
auf endlichem Grundgebiet (wegen zykl. Randbed.)

$\Rightarrow$ diskretes Eigenwertspektrum $n = 1, 2, 3$

$$\underline{k} = \frac{h}{N_1}\underline{g}_1 + \frac{k}{N_2}\underline{g}_2 + \frac{l}{N_3}\underline{g}_3$$

$h, k, l \in \mathbb{Z}$

(iii) Bandstruktur



1. Brillouin-Zone

$E_n(\underline{k})$ beschreibt quasi-kontinuierliche Energiebänder

(iv) Es gilt $E(\underline{k}) = E(-\underline{k})$ Kramersches Theorem
(zeitumkehrsymm.)

Beweis: $\underline{T}_R\, \varphi^*_{n\underline{k}}(\underline{r}) = e^{-i\underline{k}\underline{R}}\, \varphi^*_{n\underline{k}}(\underline{r})$

andererseits $\underline{T}_R\, \varphi_{n,-\underline{k}}(\underline{r}) = e^{-i\underline{k}\underline{R}}\, \varphi_{n,-\underline{k}}(r)$

$\Big\}\; \varphi^*_{n\underline{k}} = \varphi_{n,-\underline{k}}$

wegen Hermitizität von H: $\varphi^*_{n\underline{k}}$ und $\varphi_{n\underline{k}}$ entartet bzgl. H

$\Rightarrow$ $\varphi_{n,-\underline{k}}$ und $\varphi_{n\underline{k}}$ sind entartet bzgl. H

d.h. $E(-\underline{k}) = E(\underline{k})$

(v) Kristallelektronen sind Quasiteilchen, die die WW mit dem statischen Gitter bereits enthalten.

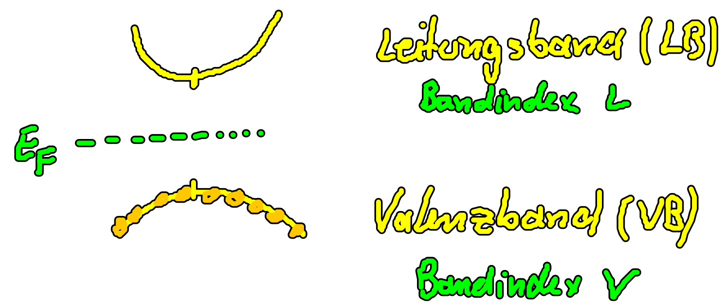
	freies Elektron	Kristallelektron
Wellenfkt	$e^{i\underline{k}\underline{r}}$	$e^{i\underline{k}\underline{r}}\, u_{n\underline{k}}(\underline{r})$ Blochfkt.
Eigenwerte	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	$E_n(\underline{k})$ Bandstrukturen
Impuls $\langle p \rangle$	$\hbar \underline{k}$ (= Eigenwert)	$\frac{m}{\hbar} \nabla_k E_n(\underline{k})$
$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$	$\frac{1}{m}\delta_{ij}$	Tensor der inv. effektiven Masse
Erzeuger Operator	a_k^+	a_{nk}^+

Beweis durch nicht nichtentartete Störungstheorie Entwicklung um $\underline{k}$

(vi) WW dieser Quasiteilchen untereinander kann so behandelt werden wie für freie Elektronen (Hartree-Fock) gezeigt wurde

3.5.2. Defektelektronen (Löcher)

Annahme: 2 Bändermodell



• Zustandsfunktion eines Überschusselektrons (Valenzband voll, 1 EL im Leitungsband)

$$|\phi_k^e\rangle = a^+_{Lk} \underbrace{(a^+_{vk_1} a^+_{vk_2} \dots a^+_{vk_N})|0\rangle}_{|\phi_v\rangle}$$

Zustandsfunktion des vollen VB

$$|\phi_k^e\rangle = a^+_{Lk} |\phi_v\rangle$$

• Defektelektron

$$|\phi_k^h\rangle = a_{vk} |\phi_v\rangle$$

Zustand einer Fehlstelle im VB mit Wellenzahl k

Vertauschungsrel. bekannt?

Neue Erzeuger, Vernichter:

$$d_k^+ = a_{vk}$$

$$d_k = a^+_{vk}$$

wobei $a_k|\phi_v\rangle = a^+_{vk}|\phi_v\rangle = 0$

d.h. $|\phi_v\rangle$ entspricht für Teilchenzahlop. a_k dem Vakuumzustand

→ Umschreiben des Hamilton Operators

(1) $a_l^+ a_m = a_l a_m^+ = \underline{\underline{\delta_{lm}}} - \underline{a_m^+ a_l}$ (wegen Vertauschungsrel. der a^+, a)

(2) $a_l^+ a_m^+ a_{m'} a_{l'} = a_l a_m a_{m'}^+ a_{l'}^+$

$$= \underline{\delta_{mm'}\delta_{ll'}} - \delta_{mm'}\underline{a_{l'}^+ a_l} - \underline{\delta_{m'l}\delta_{ml'}} + \delta_{ml'}\underline{a_{m'}^+ a_l}$$
$$+ \delta_{m'l}\underline{a_{l'}^+ a_m} - \underline{a_{m'}^+ a_m}\,\delta_{ll'} + \underline{a_{m'}^+ a_{l'}^+ a_l a_m}$$

Einsetzen von (2) in $\hat{H}_{Full} = \sum_{lm} \langle l|\hat{h}|m\rangle a_l^+ a_m + \frac{1}{2}\sum_{\substack{ll'\\mm'}} \langle lm|\hat{V}|l'm'\rangle a_l^+ a_m^+ a_{m'} a_{l'}$

$$\Rightarrow \quad \hat{H}_{Full} = \underline{\underline{E_V}} + \underline{\hat{H}_D} + \underline{H_{OD}}$$

Beiträge ohne Operator

Beiträge mit $a^+ a$

WW Beiträge

$$E_V = \sum_l \varepsilon_l + \frac{1}{2}\sum_{lm}\langle lm|V|lm\rangle - \frac{1}{2}\sum_{lm}\langle lm|V|ml\rangle$$

über VB Zustände

$\hat{=}$ Energie des vollen VB in HF Näherung

$$H_D = -\sum_{lm} \langle l'|h|m\rangle d_m^+ d_l - \frac{1}{2}\sum_{ll'm'} d_{\underset{m}{l'}}^+ d_l \langle lm'|V|\underset{m}{l'}m'\rangle$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{m'ml'} d_{\underset{m}{m'}}^+ d_{\underset{l}{m}} \langle l'\underset{l}{m}|V|l'\underset{m}{m'}\rangle$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\underset{m'm}{mm'l}} d_{\underset{m}{m'}}^+ d_l \langle l\underset{m'}{m}|V|\underset{m'}{m}\,\underset{m}{m'}\rangle$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\underset{m'lm}{lml'}} d_{\underset{m}{l'}}^+ d_{\underset{l}{m}} \langle \underset{m'l}{lm}|V|\underset{m\,m'}{l'l}\rangle$$

$$H_D = -\sum_{lm} d_m^+ d_l \left\{ \langle l|\hat{h}|m\rangle + \sum_{m'} \langle l m'|\hat{V}|m m'\rangle - \langle l m'|\hat{V}|m' m\rangle \right\}$$

$$= -\sum_{lm} d_m^+ d_l \langle l|\hat{H}_{eff}|m\rangle$$

eff. Hamilton Op. der die WW der Valenzelektronen durch eff. Potenzial beschreibt

$|m\rangle$ ist Eigenfunktion von $\hat{H}_{eff}$ mit Eigenwert E_m

$$= -\sum_{k} d_k^+ d_k E_{m,v}$$

zulässige Quasi-Impulse im Kristall

$\widehat{=}$ Energie der Defektelektronen ohne WW

$$\hat{H}_{DD} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{lm \\ l'm'}} d_{m'}^{+} d_{l'}^{+} d_l d_m \langle lm | V | l'm' \rangle$$

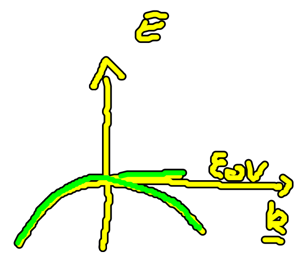
Coulomb WW der Defektelektronen untereinander

$$\hat{H}_{Full} = E_V - \sum_{k} d_k^{+} d_k \, \varepsilon_{k,V} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} d_{k_1}^{+} d_{k_2}^{+} d_{k_3} d_{k_4} \langle k_3 k_4 | V | k_1 k_2 \rangle$$

negative Energie ??

Nein!

$$\varepsilon_{kV} = \varepsilon_{0V} - \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_V}$$



$$\xrightarrow{\text{(ohne WW)}} \hat{H}_{Full} = \sum_{k} d_k^{+} d_k \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_V} - \varepsilon_{0V} \right)$$

→ Defektelektronen sind Teilchen mit positiver eff. Masse m_V

Ladung der Löcher

Operator der El. Ladungsdichte $\quad \hat{\rho}(x) = e\,\psi^+(x)\,\psi(x)$

(Entwicklung nach Blochfunktionen) $\quad = e \sum_{kk'} \varphi_k^*(x)\,\varphi_{k'}(x)\, a_k^+ a_{k'}$

$$\text{Relation (1)} :\rightarrow \hat{\rho}(x) = \underbrace{e \sum_k |\varphi_k(x)|^2}_{\text{Ladungsdichte des vollen VB}} - \underbrace{e \sum_{kk'} \varphi_{k'}\varphi_k^*\, d_k^+ d_{k'}}$$

(wird gerade kompensiert von pos. Ionen da sonst Kristall nicht neutral)

Erwartungswert bzgl. Zustand mit einem Defektelektron bei $\underline{k}_0$ $\quad \left(|\phi_{k_0}\rangle = d_{k_0}^+ |\phi_V\rangle\right)$

$$\langle \hat{\rho} \rangle = \langle \phi_V |\, d_{k_0} \sum_{kk'} -e\, \varphi_{k'}\varphi_k^*\, d_k^+ d_{k'}\, d_{k_0}^+\, | \phi_V \rangle$$

$$= -e\, |\varphi_{k_0}|^2$$

Valenzelektron Blochfunktion

positive Ladung des Loches

- <u>Wechselwirkung</u> <u>der Defektelektronen mit äußerem Feld</u>

$$\hat{V}_{Feld} = \int \hat{\psi}^+(x) \, -eEx \, \hat{\psi}(x) \, d^3x$$

äußeres elektr. Feld

Feldoperatoren:

mit $\psi^+(x) = \sum_\mu \varphi_\mu^*(x) a_\mu^+$

(Bemerkung: analog kann auch der $\hat{H}$ hergeleitet werden

$$\hat{H} = \int \psi^+(x) h(x) \psi(x) \, d^3x$$

$$= \sum_\mu a_\mu^+ a_\mu \varepsilon_\mu$$

$\varepsilon_\mu = \langle \varphi_\mu | h | \varphi_\mu \rangle$)

$$\Rightarrow \hat{V}_{Feld} = \sum_{kk'} M_{kk'} a_k^+ a_{k'}$$

mit $M_{kk'} = \langle \varphi_k | -eEx | \varphi_{k'} \rangle$

falls E = konst

$= E \, \Theta_{kk'}$

Dipoloperator

$$\hat{V}_{Feld} \overset{(1)}{=} \underbrace{\sum_k M_{kk}}_{\substack{\text{pot. Energie} \\ \text{des vollen VB}}} - \sum_{kk'} d_{k'}^+ d_k (M_{k'k})^*$$

pot. Energie des vollen VB

(wieder Kompensation mit Grundgitter)

positive Ladung bei WW mit äußerem Feld

Bsp.: Halleffekt

(Beobachtung von grundlegenden
Quantenfeldtheoretischen
Gesetzmäßigkeiten (anti-Symm))