

7.2. Effektivmassenfaktor

Um den Γ -Punkt $\vec{k} = (0, 0, 0)$ konnte man eine effektive Masse $m_{\text{eff}}^{\lambda} / m_{\lambda}^*$ einführen, systematischer Zugang.

$$\varphi_{\lambda k}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\lambda k}(\vec{r})$$

Frage: allgemeiner Zugang von Γ -Punkt für Effektivmasse

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V_G(\vec{r}) \right) \varphi_{\lambda k}(\vec{r}) = \varepsilon_{\lambda k} \varphi_{\lambda k}(\vec{r})$$

↑
nach Eikonalmasse

Blockförmig einsetzen: \vec{p}^2 wirkt auf $\varphi_{\lambda k}(\vec{r})$

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V_G(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} \right) u_{\lambda k}(\vec{r}) = \left(\varepsilon_{\lambda k} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) u_{\lambda k}(\vec{r})$$

$\delta \varepsilon_{\lambda k}$

Problem bei $k=0$: $\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V_G(\vec{r}) \right) u_{\lambda k=0}(\vec{r}) = \varepsilon_{\lambda k=0} u_{\lambda k=0}(\vec{r})$

ist lösbar mit periodischen RB auf unser Einheitszelle



Idee: $\vec{k} \cdot \vec{p}$ - Störterm, mit bekannter $u_{\lambda 0}(\vec{r})$ kann der Term $\frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p}$ störungstheoretisch berücksichtigt werden

Spezialfall: Kristall mit Invertions-Symmetrie: $V_G(\vec{r}) = \pm V_G(-\vec{r})$
daher: $u_{\lambda 0}(\vec{r}) = \pm u_{\lambda 0}(-\vec{r})$

1. Ordnung Störung:
$$\left. \begin{aligned} \psi_{\lambda k}^0 &= u_{\lambda 0} \\ \epsilon_{\lambda k}^0 &= \epsilon_{\lambda 0} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{gegeben,} \\ \text{kein Entartung} \end{array}$$

$$H_{\text{Stör}} = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} \quad \& \quad \Delta \epsilon_{\lambda k}^{(1)} = \int d^3r u_{\lambda 0}^*(\vec{r}) \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} u_{\lambda 0}(\vec{r})$$

verschwindet wegen Invarianzsymmetrie:

(i) $u_{\lambda 0}(\vec{r}) \rightarrow \pm u_{\lambda 0}(\vec{r})$ (ii) $\vec{r} \rightarrow -\vec{r} : \vec{p} \rightarrow -\vec{p}$

(iii) $\Delta \epsilon_{\lambda k}^{(1)} = -\Delta \epsilon_{\lambda k}^{(1)} \rightarrow \Delta \epsilon_{\lambda k}^{(1)} = 0$

2. Ordnung Störung: Hst in zweiter Ordnung

Integralentwicklung: $u_{\lambda 0} \rightarrow |u_{\lambda 0}\rangle$

$$\Delta \epsilon_{\lambda k}^{(2)} = \sum_{\lambda' \neq \lambda} \frac{\langle u_{\lambda 0} | H_{\text{Stör}} | u_{\lambda' 0} \rangle \langle u_{\lambda' 0} | H_{\text{Stör}} | u_{\lambda 0} \rangle}{\epsilon_{\lambda 0} - \epsilon_{\lambda' 0}}$$

$$\epsilon_{\lambda k}^{(2)} = \epsilon_{\lambda 0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\alpha \alpha'} k_{\alpha} k_{\alpha'} \sum_{\lambda \lambda'} \frac{P_{\lambda \lambda'}^{\alpha} P_{\lambda \lambda'}^{\alpha'}}{\epsilon_{\lambda 0} - \epsilon_{\lambda' 0}}$$

↑
Beiwert frei
Atom in Zelle
zu EL-Energie

↑
Beiwert der freien
Bewegung durch
Störter ohne
daß U_G gespürt wird

↑
Einfluß des
Kristallpotentials
(α : kartesischen Koordinaten
f. Skalarprodukt)

$$P_{\lambda \lambda'}^{\alpha} = \int d^3r u_{\lambda 0}^*(\vec{r}) p^{\alpha} u_{\lambda' 0}(\vec{r})$$

Analogie zu $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow \sum_{\alpha \alpha'} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_{\lambda}^*} \right)_{\alpha \alpha'} \quad \hbar k_{\alpha} \quad \hbar k_{\alpha'}$

mit Effektivmasstensor:

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{m} \delta_{\alpha\alpha'} + \frac{2}{m^2} \sum_{\lambda\lambda'} \frac{p_{\lambda\lambda'}^{\alpha} p_{\lambda\lambda'}^{\alpha'}}{\epsilon_{\lambda 0} - \epsilon_{\lambda' 0}}$$

Bemerkungen:

a) Einträge von m^* können sich drastisch von der freien Elektronenmasse unterscheiden: z.B. negative Massen ...

b) isotroper Festkörper: $p^{\alpha} p^{\alpha'} \sim \delta_{\alpha\alpha'}$

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{m} \delta_{\alpha\alpha'} + \frac{2}{m^2} \sum_{\lambda,\lambda'} \frac{p_{\lambda\lambda'}^{\alpha} p_{\lambda\lambda'}^{\alpha'}}{\epsilon_{\lambda 0} - \epsilon_{\lambda' 0}} \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$\downarrow \epsilon_{\lambda k} = \epsilon_{\lambda 0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

c) Begriff Quasielektron: nackte EL + V_G bewegt sich wie freie Elektron mit anderer Masse

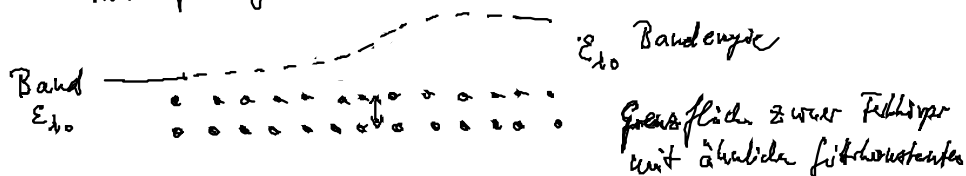
7.3. Elektron im Lippertpotential und weiteren schwach veränderlichen Potentialen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_G(\vec{r}) + U(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) = \epsilon \varphi(\vec{r})$$

$U(\vec{r})$ räumlich schwach veränderlich:
 über Elementarzelle nur leicht verändert

$$|\vec{\nabla}_r U(\vec{r})| \ll \frac{|U(\vec{r})|}{|\vec{a}_n|}$$

mit auf ein Gitter zweier Füllkörper



Herstellung v. Heterostrukturen!

Uns Schrödingergleichung zu lösen Ansatz

bisher: $\psi_{\lambda k}(\vec{r}) = \sum_n \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}}{\sqrt{N_s}} \sum_j c_j^\lambda w_j(\vec{r}-\vec{R}_n)$

jetzt: $\psi_\lambda(\vec{r}) = \sum_n \underbrace{C_\lambda(\vec{R}_n)}_j \sum_j c_j^\lambda w_j(\vec{r}-\vec{R}_n)$

$C_\lambda(\vec{R}_n)$ soll bestimmt werden

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_G + U \right) \sum_{nj} \underbrace{C_\lambda(\vec{R}_n)}_j w_j(\vec{r}-\vec{R}_n) = \epsilon_{\lambda k} \sum_{j^k} C_\lambda(\vec{R}_n) w_j(\vec{r}-\vec{R}_n)$$

①

$$\textcircled{1} = \sum_{nj} \underbrace{\sum_k \frac{C_\lambda(k)}{\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}}_{\text{Fourierreihe}} c_j^\lambda w_j(\vec{r}-\vec{R}_n) = \sum_k C_\lambda(k) \psi_{\lambda k}(\vec{r})$$

mit $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_G \right) \psi_{\lambda k} = \epsilon_{\lambda k} \psi_{\lambda k}$ (ideale Kristalle)

$$\sum_k C(k) \left[\left(\epsilon_{\lambda 0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\lambda}^*} \right) + U(\vec{r}) \right] \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\lambda k=0} = \frac{1}{\epsilon_{\lambda}} \sum_k C(k) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\lambda k=0}$$

$m \hat{=} \text{Fermi-Richtfaktor}$

$$\left(\epsilon_{\lambda 0} - \frac{\hbar^2 \Delta}{2m_{\lambda}^*} + U(\vec{r}) \right) C_{\lambda}(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_{\lambda}} C_{\lambda}(\vec{r})$$

Bestimmungsgleichung für $C_{\lambda}(\vec{r})$, z.B. $\epsilon_{\lambda 0}^{(1)}$ bilden in Kombination mit $\epsilon_{\lambda 0}^{(2)}$ f. $U(\vec{r})$

Zusammenfassung: Die Wellenfunktion v. Kristallelektronen in schwach veränderl. Potentialen am Γ -Punkt lassen durch die Effektivmassennäherung berechnen:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_{\lambda}^*} + U(\vec{r}) \right) C_{\lambda}(\vec{r}) = \left(\frac{1}{\epsilon_{\lambda}} - \epsilon_{\lambda 0} \right) C_{\lambda}(\vec{r}) \quad \text{QH I}$$

$\delta \epsilon$: Änderung der Energie d. Potentials

Gesamtenergie $\epsilon_{\lambda 0} + \delta \epsilon$.

8. Quantisierung d. Ionfelds (Phononen)

8.1. Allgemeine Betrachtungen

Falkörper H : $H = \underbrace{H_{el}}_{\text{bisher}} + \underbrace{H_{ion}}_{\text{fällt}} + H_{el-ion}$

$$= H_{ion} + \text{Ladungshintergrund}$$

$$H_{ion} = \sum_n \frac{\vec{p}_n^2}{2m_n} + H_{ion}(\text{Ruhlagen}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n, m \\ \alpha, \beta}} \phi_{\alpha\beta}^{nm} u_n^\alpha u_m^\beta$$

\nearrow kinetische Energie der Ionen
 (n-ter Ionen mit m_n)

\nearrow Coulomb-Werte
 Ruhlagen

\nearrow keine Auslenkungen der Ionen
 um: R_n^0 mit Amplituden
 u_n^α (α-Komponente des n-ten Ions)

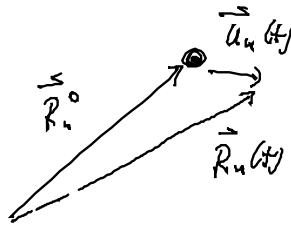
$(\phi_{\alpha\beta}^{nm} : \text{Kraftkonstanten})$

--- $\hat{=}$ analog falls eine Ladungsneutralität

$$\Downarrow H_{ion} = \sum_n \frac{\vec{p}_n^2}{2m_n} + \sum_{\substack{n, m \\ \alpha, \beta}} \phi_{\alpha\beta}^{nm} u_n^\alpha u_m^\beta$$

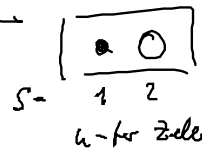
beschreibt oszillierendes System um Ionen

$$p_n^\alpha = \frac{1}{i} \partial_{u_n^\alpha}$$



R_n^0 = Ruhelage

führt mit Basis



$$\hat{=} n \rightarrow n_1 s$$

|| s''-te Ionen in der u-ten Zelle

$$\vec{u}_n \rightarrow \vec{u}_{ns} \quad | \quad \phi_{\alpha\beta}^{nm} \rightarrow \phi_{\alpha\beta}^{nms} (s, t)$$

Symmetrie der Kraftkonstanten

a) $\phi_{\alpha\beta}^{u_n} (s, t) = \phi_{\beta\alpha}^{u_n} (t, s)$ (Vertauschbarkeit der
zweiten Ableitung der WW-Potential)

b) $\phi_{\alpha\beta}^{u_n} (s, t) = \phi_{\alpha\beta}^{u_{-n}} (s, t)$ (Translationsinvarianz im
ausgedehnten Festkörper)

c) $\sum_{u, s} \phi_{\alpha\beta}^{u_n} (s, t) = 0$ (Kräfte zwischen Ionen neutralisiert
bei Gesamtnutralität d. FK)

8.2. Klassische Theorie d. Gitterschwingungen

8.2.1. Bewegungsgleichungen

Erdnung: $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$ \ddot{z}

$$\dot{p}_n^\alpha = -\frac{\partial H_{\text{ion}}}{\partial u_n^\alpha} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial u_n^\alpha} \left(\sum_{\substack{0 \leq n \\ \mu \neq n}} \phi_{\mu\beta}^{0u} u_0^\mu u_n^\beta \right)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum \phi_{\mu\beta}^{0u} \left(u_0^\mu \delta_{u_n^\alpha}^{\alpha\beta} + u_n^\beta \delta_{0u}^{\mu\alpha} \right)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum \left(\phi_{\mu\alpha}^{0u} u_0^\mu + \phi_{\alpha\beta}^{u_n} u_n^\beta \right)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum \left(\phi_{\beta\alpha}^{u_n} u_n^\beta + \phi_{\alpha\beta}^{u_m} u_m^\beta \right)$$

$0 \rightarrow u$
 $\mu \rightarrow \beta$

Eigenschaft a

$$m_n \ddot{u}_n^\alpha = - \sum_{\beta, u} \phi_{\alpha\beta}^{u_n} u_m^\beta$$

Bewegungsgleichung der m -ten Ionen in Richtung α ,
 getrieben durch Bewegung der m -ten Ionen in Richtung β .
 ϕ sind die zugehörigen Kraftkonstanten, über alle m 's wird summiert

Bemerkung zu Eigenschaft c:

Konstante Verschiebung d. Gesamtkristalls $u_m^{\vec{r}} = \text{konstante}$

$$\vec{v} \cdot 0 = - \sum_{\beta, \gamma} \phi_{\alpha\beta}^{u_{\alpha\gamma}} - \text{Konstante} \rightarrow \text{Eigenschaft d}$$

Ziel ab jetzt: Lösung und Diagonalisierung der Bewegungsgleichung