

Theoretische Festkörperphysik

Start 8¹⁵ → 10⁰⁰ (beide Termine)

0) Einführung

Thema: Theorie des Festkörpers in externen Feldern

methodisch: quantenfeldtheoretisch

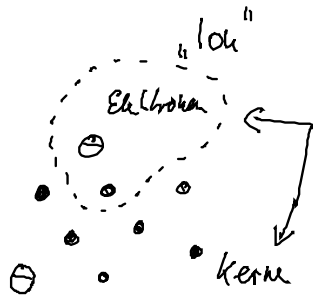
Festkörper: Anhäufung vieler ($10^2 - 10^3$) atomarer Systeme
Ionen sind an Gittergitterstellen lokalisiert
(Unterschied zu Flüssigkeit → ständige Mischung)

→ Arbeitsdefinition!

als Vielteilchensystem:

a) Modell / Methoden

1) atomare Systeme



3) Wechselwirkung
der Teilchen über
ein Feld

2) Unterscheidung: Außen elektron → aktiv beschreiben
Innen elektron + Kerne → „Ionen“

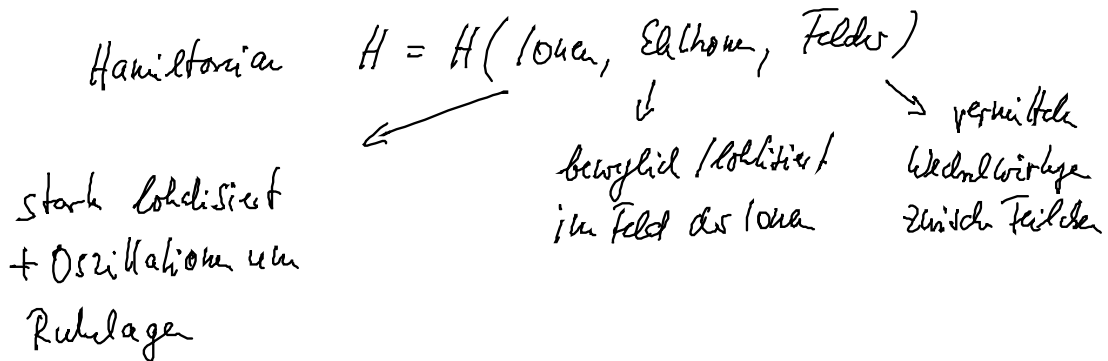
↓ Maxwellgleichungen f. em. Felder F, B
 Materialgleichungen f. Teilchen (Newstangl. mit Lorentz \vec{v})
 müssen selbstkonsistent gelöst werden

methodisch über Quarkfelder

$\hat{\psi}(\vec{r}, t) \rightarrow$ Schrödingerfeld f. Elektron + Loch

$\vec{A}(\vec{r}, t), \phi(\vec{r}, t) \rightarrow$ Vektor- u. Skalarpotential

b) kurzer Überblick



als Vielteilchensystem sehr kompliziert
 ohne Hilfsmittel

a) kollektive Anregungen:

gekoppelte gemeinsam organisierte Antwort
 vieler wechselwirkender Teilchen (gekoppelter Pendel)
 als Anregung von ungekoppelten Moden / Koordinaten

Bsp: Phonon, Plasmone

b) Quasiteilchen:

- Zusammenfassung v. Originalteilchen + Teile d. Umgebung
- reagiert ähnlich wie freies Teilchen mit auch Eigenschaften wie Masse, Ladung, kann Lebensdauer haben

Bsp: Polariton, Bloch-Elektronen

1. Wiederholung: geladene Teilchen u. em. Felder

1.1. Lagrangefunktion f. Teilchen in em. Feldern

Teilchenbahn $\vec{r}_i(t)$ des i -ten Teilchen, Ladung q_i , Masse m_i
in den Potentiale $\phi(\vec{r}_i, t)$, $\vec{A}(\vec{r}_i, t)$

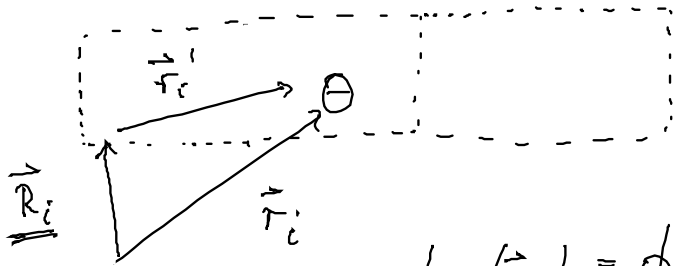
$$L = \underbrace{\sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2}_{\text{kinetische E d. Teilchen}} - \underbrace{\sum_i q_i \phi(\vec{r}_i, t) + \sum_i q_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t)}_{\text{WW-Energie im Feld}} + \underbrace{\int d^3r \left(\frac{\epsilon_0}{2} \vec{E}^2 - \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2 \right)}_{\text{Feldenergie}}$$

L führt über Lagrangegleichungen (Teilchen/Felder) auf

a) Lorentzkraft: $m_i \ddot{\vec{r}}_i = q_i (\vec{E} + \dot{\vec{r}}_i \times \vec{B})$

b) Feldgleichung: $\square \vec{A} = \mu_0 \vec{j}_T, \quad \Delta \phi = -\frac{\rho(\vec{r}, t)}{\epsilon_0}$

Coulombbedingung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$



$$\phi_{\text{ext}}(\vec{r}_i) = \phi(\vec{R}_i) + \vec{\nabla}_T \phi(\vec{r}) \Big|_{\vec{R}_i} \cdot \frac{\vec{r}_i}{R_i}$$

analyt. f. Vektorpotential

damit Lagrangefunktion umschreiben, indem $(\vec{r}_i' \rightarrow \vec{r}_i)$

$$\frac{d}{dt} \left(-q \vec{r}_i(t) \cdot \vec{A}(\vec{R}_i, t) - \frac{q}{2} \vec{r}_i \cdot \left[\vec{r}_i \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}_i} \vec{A}(\vec{R}_i, t) \right] \right)$$

zu L addiert wird, führt auf

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} - \sum_i \vec{d}_i \cdot \vec{E}_{\text{ext}}(\vec{R}_i) - \sum_i \vec{m}_i \cdot \vec{B}_{\text{ext}}(\vec{R}_i) \quad \text{UA}$$

$$\vec{d}_i = q_i \vec{r}_i, \quad \vec{m}_i = \frac{q_i}{2m_i} \vec{r}_i \times \frac{d}{dt} \vec{p}_i$$

elektrisch Dipole

magnetisch Dipole

Formulierung in Feldern ist i.a. besser, weil eichinvariant

1.1.2. Internes Feld

formale Lösung des Potentials:

$$\phi_{\text{int}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \frac{\rho(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \frac{q_j}{|\vec{r} - \vec{r}_j|}$$

bestimmt ϕ_{int} auf Kosten der $\{\vec{r}_j\}$

$$\vec{A}_{\text{int}}(\vec{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int d^3r' \frac{\vec{j}(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{c})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \text{Schwierig (Lienard Wiechert an FD)}$$

Wir lassen \vec{A}_{int} als unabhängiges Feld zu,

Wird auf $\{\vec{r}_i\}$ zurückgeführt „intern“ begeben

$$\mathcal{L} = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_i q_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i)$$

$$+ \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r (-\partial_t \vec{A} - \vec{\nabla} \phi)^2 - \frac{1}{2\mu_0} \int d^3r (\text{rot } \vec{A})^2$$

$$(\partial_t \vec{A})^2 + 2 \underbrace{\partial_t \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \phi}_{\uparrow} + \underbrace{\vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} \phi}_{\uparrow} \quad \text{steht unter Integral, partiell integrieren}$$

$$- 2 \underbrace{\partial_t \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \phi}_{\downarrow} \quad - \Delta \phi \phi$$

$$= 0$$

$$\text{Poissongleichung } \Delta \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$\phi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \frac{q_j}{|\vec{r} - \vec{r}_j|}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

$$L = \sum_i \frac{m_i \dot{\vec{r}}_i^2}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_i q_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i) + \int d^3r \left(\frac{\epsilon_0}{2} (\operatorname{div} \vec{A})^2 - \frac{1}{2\mu_0} (\operatorname{rot} \vec{A})^2 \right)$$

Lagrangefunktion ein Ladungsträger im internen Feld \vec{A}
 und Coulomb-WW

Bemerkungen:

a) zugehörige $H = \sum_i \frac{(\vec{p}_i - q_i \vec{A})^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$

b) wenn man Optl bekommt so kann das Vektorpotential
 wieder über die Lagrange funktion angegeben werden

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} - \sum_i \vec{d}_i \cdot \vec{E}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

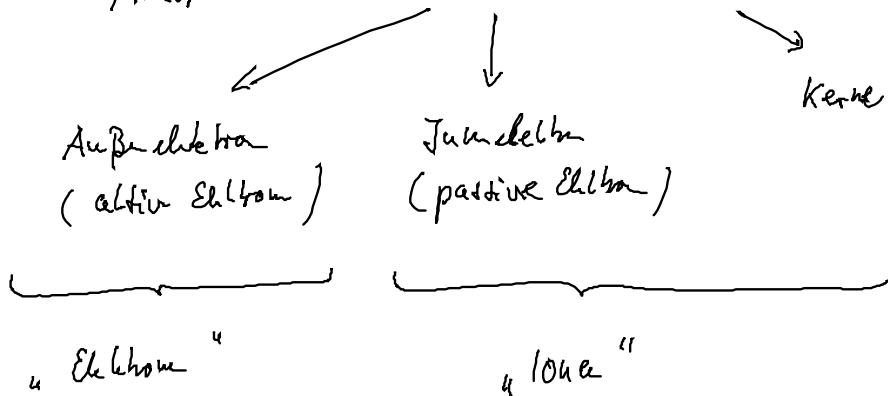
↑
ermittelt optisch Feld
(λ groß)

2. Ladungsträger in Festkörpern

2.1. Modellvorstellungen

a) Unterscheidung v. Feldern

Festkörper = Σ alle Elektronen und Kerne



erzeugt durch Bindung
zwischen den Ionen

bilden im gesamten FK periodische Anordnung
um Rastgitter, können ausgetauscht werden

b) ϕ : Coulomb WW $\Delta\phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$

\vec{A} : Strahlungskopplg. $\square = -\mu_0 \vec{j}$

im fließgewicht: $\langle \vec{j} \rangle = 0$ Mittelwerte

$\langle \rho \rangle \neq 0$

Zunächst f. fließgewichtsberechnung $\vec{A} \rightarrow 0$ setzen

2.2. Hamiltonfunktion f. Coulomb-WW Felder: Ionen / Elektronen

$$H = T + V = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \cancel{H_{\text{ext}}(A, \text{ext})}$$

Korrektur nur auf Grundzustandsrechnung.

" i, j " Elektronen, " k, m " Ionen

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \equiv H_{el}(\{\vec{r}_i\})$$

kinetisch El Coulomb-WW zw. Elektronen

$$+ \sum_k \frac{\vec{p}_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} \sum_{km} \frac{V_{ion-ion}(\vec{R}_k - \vec{R}_m)}{4m} \equiv H_{ion}(\{\vec{R}_k\})$$

kinetisch Ionen Ionenposition

$V_{ion-ion}$ ist effektive WW
der Ionen untereinander,
abgeschwächt durch Coulomb WW d. Kerne
durch die Fremdelektronen

$$+ \sum_{i,n} W_{el-ion}(\vec{R}_n - \vec{r}_i) \equiv W_{el-ion}(\{\vec{R}_n, \vec{r}_i\})$$

$$\left[\frac{1}{2} \text{ fällt weg wegen: } \sum_{ij} = \sum_j \left(\sum_i + \sum_n \right) = \sum_n \sum_i + \sum_i \sum_n = 2 \sum_{ni} \right]$$

El/Ionen

$$H = H_{el} + H_{ion} + W_{el-ion}$$

Gesamthamiltonian über mit elektronisch, ionisch und WW Anteil bestimmt. Ideu: Born Oppenheimer Näherung beruht auf der unterschiedl. Masse v. Ionen und Elektronen (Faktor 1000)