Theoretische Festkörperphysik

Start $8^{\underline{15}} \to 10^{\underline{00}}$ (beide Termine)

0) Einführung

Thema: Theorie der Festkörper in externen Feldern
methodisch: quantenfeldtheoretisch

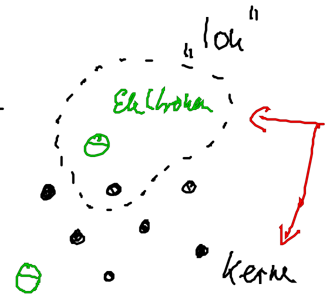
Festkörper: Anhäufung vieler $(10^2 - 10^3)$ atomarer Systeme
Ionen sind an Gleichgewichtslagen lokalisiert
(Unterschied zu Flüssigkeit → ständige Mischung)

→ Arbeitsdefinition!

als **Vielteilchensystem:**

a) Modelle / Methoden

1) atomare Systeme



3) Wechselwirkung der Teilchen über ein Feld

2) Unterscheidung: Außenelektronen → aktiv beschrieben
Innenelektronen + Kerne → „Ionen"

↓ Maxwellgleichungen f. em. Felder $\vec{E}, \vec{B}$
Materialgleichungen f. Teilchen (Newtongl. mit Lorentzkraft)
müssen selbstkonsistent gelöst werden

methodisch über Quantenfelder

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

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

b) kurzer Überblick

Hamiltonian $H = H($Ionen, Elektronen, Felder$)$

stark lokalisiert
+ Oszillationen um
Ruhelagen

beweglich / lokalisiert
im Feld der Ionen

vermitteln
Wechselwirkungen
zwischen Teilchen

als Vielteilchensystem sehr kompliziert
aber Hilfsmittel

a) kollektive Anregungen:

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

Bsp: Phonon, Plasmon

b) Quasiteilchen:

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

<u>Bsp</u>: Polaron, Blochelektronen

1. Wiederholung: geladene Teilchen u. em. Felder

1.1. Lagrangefunktion f. Teilchen in em. Feldern

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

$$L = \underbrace{\sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^{\,2}}_{\text{kinetische E d. Teilchen}} \underbrace{- \sum_i q_i \phi(\vec{r}_i, t) + \sum_i q_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t)}_{\text{WW-Energie im Feld}} + \underbrace{\int d^3r \left(\frac{\varepsilon_0}{2} \vec{E}^2(\vec{r}) - \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2 \right)}_{\text{Feldenergie}}$$

L führt über Lagrangegleichungen (Teilchen / Felder) auf

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

b) Feldgleichg: $\Box \vec{A} = -\mu_0 \vec{j}_T$, $\Delta \phi = -\frac{\rho(\vec{r},t)}{\varepsilon_0}$

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

Bemerkungen:

Stromdichte: $\vec{j}(\vec{r},t) = \sum_i q_i \dot{\vec{r}}_i(t)\, \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$

Ladungsdichte: $\rho(\vec{r},t) = \sum_i q_i\, \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t))$

Unterscheidg. d. Felder

1.1.1. A_{ext}, ϕ_{ext} externe Felder

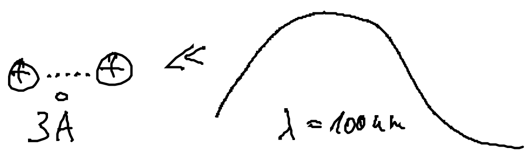
1.1.2. A, ϕ interne Felder (zwischen den Ladungsträgern)

11.1 Externe Felder

mikroskop. Längenskala a: Teilchenabstand $\hat{=}$ Å im Festkörper

externe Feldskala λ: Wellenlänge einige 10-100 nm in Optik
oder konstante Felder in Transport

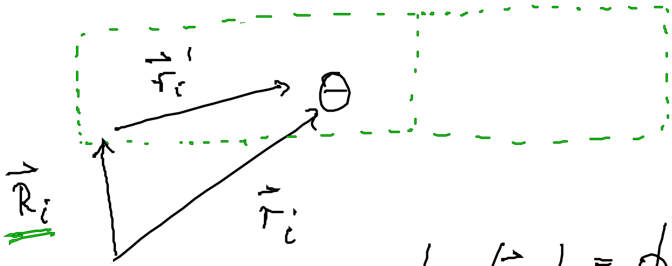
$a \ll \lambda$



→ Näherung f. externe Felder engl.

führe Grobraumskala ein $\{\vec{R}_i\}$,

auf dieser können diese Felder (extern) variieren



$$\phi_{ext}(\vec r_i) = \phi(\vec R_i) + \vec\nabla_r \phi(\vec r)\Big|_{\vec R_i} \cdot \vec r_i{}'$$

analog f. Vektorpotential

damit Lagrangefunktion umeichen, indem $(\vec r_i{}' \to \vec r_i)$

$$\frac{d}{dt}\left(-q\,\vec r_i(t)\cdot\vec A(\vec R_i,t) - \frac{q}{2}\,\vec r_i\cdot\left[\vec r_i\cdot\vec\nabla_{R_i}\vec A(\vec R_i,t)\right]\right)$$

zu L addiert wird, führt auf

$$\boxed{H = \sum_i \frac{\vec p_i^{\,2}}{2m_i} - \sum_i \vec d_i\cdot\vec E_{ext}(\vec R_i) - \sum_i \vec m_i\cdot\vec B_{ext}(\vec R_i)}$$

ÜA

$$\vec d_i = q_i\,\vec r_i \,, \qquad \vec m_i = \frac{q_i}{2m_i}\,\vec r_i\times\frac{\hbar}{i}\vec\nabla_{r_i}$$

elektrischer Dipol — magnetischer Dipol

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

1.1.2. Interne Felder

formale Lösungen der Potentiale:

$$\phi_{int}(\vec r,t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3 r' \frac{\rho(\vec r',t)}{|\vec r - \vec r'|} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_j \frac{q_j}{|\vec r - \vec r_j|}$$

eliminiert ϕ_{int} auf Kosten der $\{\vec r_j\}$

$$\vec A_{int}(\vec r,t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int d^3 r' \frac{\vec j_T\left(\vec r', t - \frac{|\vec r - \vec r'|}{c}\right)}{|\vec r - \vec r'|} = \text{Schwierig}$$

(Lienard Wiechert aus FD)

wir lassen $\vec A_{int}$ als unabhängiges Feld zu,
nicht auf $\{\vec r_i\}$ zurückgeführt „intern" weglassen

$$L = \sum_i \frac{m_i}{2}\dot{\vec r}_i^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{ij}\frac{q_i q_j}{|\vec r_i - \vec r_j|} + \sum_i q_i \dot{\vec r}_i \cdot \vec A(\vec r_i)$$

$$+ \frac{\varepsilon_0}{2}\int d^3 r \underbrace{\left(-\partial_t \vec A - \vec\nabla\phi\right)^2} - \frac{1}{2\mu_0}\int d^3 r\left(\mathrm{rot}\,\vec A\right)^2$$

$$(\partial_t \vec A)^2 + 2\,\partial_t \vec A\cdot\vec\nabla\phi + \vec\nabla\phi\cdot\vec\nabla\phi$$

steht unter Integral, „partiell integrieren"

$$\underbrace{-2\,\partial_t \vec\nabla\cdot\vec A\,\phi}_{=0} \qquad -\Delta\phi\,\phi$$

$\parallel$

Poissongleichung $\Delta\phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$

$$\underbrace{\phi = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_j \frac{q_j}{|\vec r - \vec r_j|}}$$

$$+\frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j}\frac{q_i q_j}{|\vec r_i - \vec r_j|}$$

$$\boxed{L = \sum_i \frac{m_i}{2}\dot{\vec{r}}_i^{\,2} - \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{ij}\frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_i q_i \dot{\vec{r}}_i \vec{A}(\vec{r}_i) + \int d^3r \left(\frac{\varepsilon_0}{2}(\partial_t \vec{A})^2 - \frac{1}{2\mu_0}(\mathrm{rot}\vec{A})^2\right)}$$

Lagrangefunktion eines Ladungsträgers im äußeren Feld $\vec{A}$ und Coulomb-WW

Bemerkungen:

a) zugehöriger

$$\boxed{H = \sum_i \frac{(\vec{p}_i - q_i\vec{A})^2}{2m_i} + \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{ij}\frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}$$

b) wenn man Optik betreibt, so kann das Vektorpotential wieder über die Lagrangefunktion angenähert werden

$$\boxed{H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} - \sum_i \vec{d}_i \cdot \underbrace{\vec{E}(\vec{R}_i)}_{\text{emittiertes optisches Feld } (\lambda \text{ groß})} + \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{ij}\frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}$$

2. Ladungsträger in Festkörpern

2.1. Modellvorstellungen

a) Unterscheidung v. Teilchen

Festkörper = Σ aller Elektronen und Kerne

Außenelektronen (aktive Elektronen) → „Elektronen"

Innenelektronen (passive Elektronen) → „Ionen"

Kerne

„Elektronen": erzeugen chem. Bindung zwischen den Ionen

„Ionen": bilden im geordneten FK periodische Anordnung um Ruhelagen, können ausgelenkt werden

b) ϕ : Coulomb WW $\qquad \Delta\phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$

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

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

$\langle \rho \rangle \neq 0$

zunächst f. Gleichgewichtsrechnungen $\vec{A} \to 0$ setzen

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

$$H = T + V = \sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} + \frac{1}{2}\sum_{ij} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \cancel{H_{WW}}(A, \alpha t)$$

konzentrieren uns auf Grundzustandsrechnung.

„ i,j " Elektronen , „ n,m " Ionen

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} + \frac{1}{2}\sum_{ij} \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \equiv H_{el}(\{\vec{r}_i\})$$

kinetisch El   Coulomb-WW zw. Elektronen

$$+ \sum_n \frac{\vec{P}_n^{\,2}}{2m_n} + \frac{1}{2}\sum_{nm} V_{ion\text{-}ion}(\vec{R}_n - \vec{R}_m) \equiv H_{ion}(\{\vec{R}_n\})$$

kinetisch Ionen   ↗ Ionenpositionen

$V_{ion\text{-}ion}$ ist effektive WW
der Ionen untereinander,
abgeschwächte Coulomb WW d. Kerne
durch die Innenelektronen

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

$$\left[\ \frac{1}{2} \text{ fällt weg wegen: } \sum_{\substack{ij \\ \text{El/Ion}}} = \sum_j \left(\sum_{i,\,el} + \sum_{n,\,Ionen}\right) = \sum_n \sum_i + \sum_i \sum_n = 2\sum_{n,i}\ \right]$$

$$\boxed{H = H_{el} + H_{ion} + W_{el\text{-}ion}}$$

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