

Vorlesung Theoretische Festkörperphysik

Michael Sentef

michael.sentef@mpsd.mpg.de

Zeiten: Montag, 12:15 - 14:00

Mittwoch, 14:15 - 16:00

Literatur Ashcroft / Mermin, "Festkörperphysik"
Kittel, "Quantum Theory of Solids"
weitere Hinweise zu einzelnen Themen $\rightarrow$ später

0. Einleitung

- Ziel: Verständnis der mechanischen, thermischen, optischen, elektronischen und magnetischen Eigenschaften fester Materie
- Phänomene: elektrische Leitfähigkeit (Metall, Halbleiter, Isolator, Supraleiter) variiert dramatisch; warum?
Magnetismus verschiedener Formen (Ferro, Ferri, Antiferro, exotischere wie "Skyrmionen");
Quanten-Hall-Effekt; Hochtemperatur-Supraleitung;
topologische Isolatoren; fraktionaler Quanten-Hall-Effekt; Weyl- und Majorana-Fermionen;
Spinflüssigkeiten; usw.

Beachte: zwei Vielteilcheneffekte in Festkörpern (10^{23} Elektronen) liefern Präzisionsmessungen von fundamentalen Naturkonstanten.



- 1) Josephson-Effekt $K_J = \frac{2e}{h}$
 - 2) Quanten-Hall-Effekt $R_K = \frac{h}{e^2}$
- $\left. \vphantom{\begin{matrix} K_J \\ R_K \end{matrix}} \right\} \Rightarrow e, h$ von-Klitzing-Konstante

→ Konzept der "Emergenz": Naturgesetze, die aus der "Selbstorganisation" vieler Teilchen hervortreten

• Anforderungen an Theorie:

- Beschreibung makroskopisch vieler Atome ($\sim 10^{23}$)
- Beschreibung QM-Effekte wie chemische Bindungen

→ QM + statistische Physik

+ (später) Methoden der Vielteilchentheorie

• Teilchen: Elektronen + Atomkerne (geladen!)

• Wechselwirkung elektromagnetisch

(Gravitation viel zu schwach, Kernkräfte irrelevant, da stabile Atomkerne vorausgesetzt werden → Separation von Energieskalen)

→ Hamiltonoperator prinzipiell bekannt, aber:
Aufgrund der Komplexität des Vielteilchenproblems
i. Allg. nicht lösbar

→ Modellbildung + numerische Simulationen
(+ Quantensimulationen)

Modellbildung: Identifikation und Betrachtung von

Teilaspekten des allg. Festkörperproblems, von denen man annimmt, dass sie die wesentlichen Aspekte eines Phänomens richtig beschreiben.

- Quasiteilchenkonzept:

Auch wenn Einzelteile des Festkörpers stark wechselwirken, gibt es oft elementare Anregungen, die als schwach wechselwirkende/wechselwirkungsfreie Bosonen/Fermionen beschrieben werden können, sog. Quasiteilchen

- Bsp.:
 - Phononen: quantisierte Schwingungen der Atome um GGW-Lage
 - WW-freie Elektronen und Löcher: effektive fermionische Quasiteilchen, die zusätzliches/fehlendes Elektron im Festkörper beschreiben, wobei WW mit allen anderen Elektronen durch Renormierung von Einteilchenparametern berücksichtigt wird (Masse, Ladung)
 - Magnonen: Spinwellen in (Anti-)Ferromagneten (Bosonen)
 - Exzitonen: gebundene Elektron-Loch-Paare (Bosonen)
 - Cooperpaare: gebundener Zustand zweier Elektronen im Supraleiter (Bosonen)
 - ↙
- WW zwischen Quasiteilchen kann zum Auftreten neuer Quasiteilchen führen

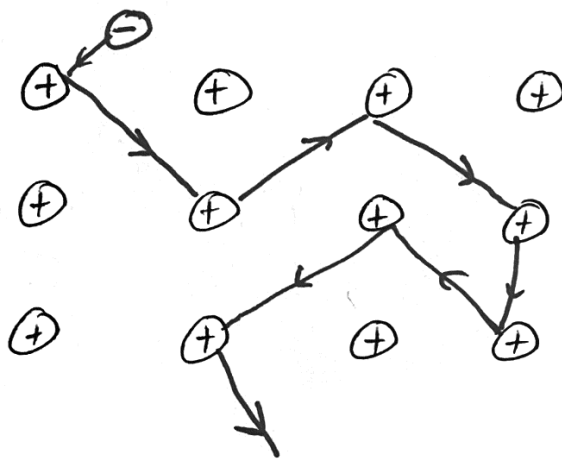
- Konzepte zur Klassifikation von Festkörpern:
 - Response auf äußere Störungen: - Metall vs. Isolator
- Ferro-, Para-, oder Diamagnet
 - Symmetrien / spontan gebrochene Symmetrien
 - topologische Invarianten (erst seit 1980er Jahren, sehr wichtig seit ca. 2005)
-

Vorlesungsinhalte: Teil I (vorläufig)

1. Drude-Modell
2. Periodische Gitter und Bloch-Theorem
3. Tight-binding-Methode
4. Semiklassische Dynamik der Elektronen
5. Phononen
6. Elektron-Phonon-Wechselwirkung / zweite Quantisierung
7. Elektron-Elektron-Wechselwirkung und Landau-Fermi-Flüssigkeitstheorie

1. Drude-Modell

- Konzepte der kinetischen Theorie von Gasen angewendet auf Elektronen im Festkörper, die an festen Ionen streuen
- eines der ersten mikroskopischen Modelle für Festkörper (~ 1900 ; Entdeckung des Elektrons: 1897)



- Bewegung zwischen Kollisionen

$$\dot{\vec{p}} = \vec{F}_L = -e(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{p} \times \vec{B})$$

Lorentzkraft

- Kollisionswahrscheinlichkeit in $[t, t+dt]$:

$$\frac{dt}{\tau}, \quad \tau \equiv \text{Relaxationszeit}$$

- nach Kollisionen: Gleichgewichts-Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$\Rightarrow \left\langle \frac{d\vec{p}}{dt} \right\rangle = \vec{F}_L - \frac{\langle \vec{p} \rangle}{\tau}$$

Bewegungsgleichung für gemittelten Impuls

$\Rightarrow$ zeitl. variierendes $\vec{E}$ -Feld (AC)

$$\vec{E}(t) = \text{Re}(\vec{E}(\omega) e^{-i\omega t})$$

$$\vec{p}(t) = \text{Re}(\vec{p}(\omega) e^{-i\omega t})$$

$$\rightarrow -i\omega \langle \vec{p}(w) \rangle = -e \vec{E}(w) - \frac{\langle \vec{p}(w) \rangle}{\tau} \quad (*)$$

$$\rightarrow \text{Strom } \langle \vec{j} \rangle = -en \langle \vec{v} \rangle = -en \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}$$

↑
Elektronendichte

$$\langle j(t) \rangle = \text{Re} (\langle \vec{j}(w) \rangle e^{-i\omega t})$$

$$\langle \vec{j}(w) \rangle = -en \frac{\langle \vec{p}(w) \rangle}{m} \stackrel{(*)}{=} \frac{(ne^2/m) \vec{E}(w)}{1/\tau - i\omega}$$

Definition der komplexen optischen Leitfähigkeit: $\sigma(w)$:

$$\langle \vec{j}(w) \rangle = \sigma(w) \vec{E}(w)$$

$$\Rightarrow \boxed{\sigma(w) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} ; \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}}$$

↑
DC Leitfähigkeit

- phänomenologisches Modell $\rightarrow$ nützlich
- aber: Probleme mit mikroskopischer Herleitung

(i) Streurate $\frac{1}{\tau}$ hat nichts mit Streuung an Ionen zu tun: σ_{dc}^{-1} (Widerstand) geht für perfekte Kristalle (keine Defekte) $\rightarrow 0$ für $T \rightarrow 0$.

$\rightarrow$ Elektronen können sich in perfekten periodischen Kristall quasi frei bewegen

$\Rightarrow$ Bloch - Theorem (Kap. 2)

(ii) nach kinetischer Gasttheorie müsste die elektronische spezifische Wärme $C_V = \frac{3}{2} n k_B = \text{const.}$ sein.

Realität: $C_V \propto T$

$\Rightarrow$ Elektronen sind Fermionen und verhalten sich quantenmechanisch, nicht wie klassische Teilchen.

• grobes Argument, wann QM wichtig wird:

$$r_s \approx n^{1/3}$$

Abstand zwischen Elektronen

$$< \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{3mk_B T}}$$

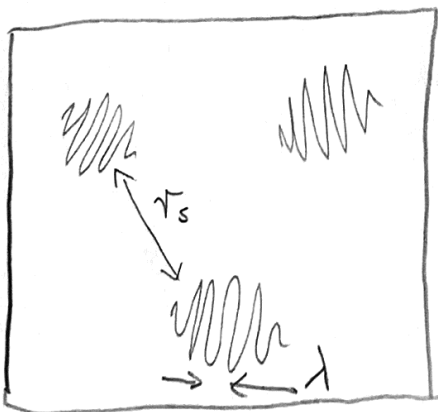
durchschnittliche de-Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\langle p \rangle}$$

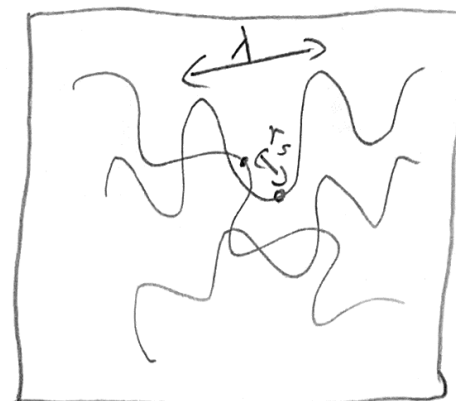
im idealen Gas:

$$\left\langle \frac{m}{2} v^2 \right\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

klassisch



QM



Wellenfunktionen überlappen!

Überprüfung: $T_s \lesssim \langle \lambda \rangle$ bis zu einer Energie

$E_F \gtrsim T$ mit E_F = Fermienergie freier Elektronen der Dichte n :

$$E_F = \left(3\pi^2 n\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m}$$

typische Werte in Metallen:

$$E_F \sim 1-20 \text{ eV} \gg k_B T \approx 0.01 \text{ eV}$$

Fermitemperatur $k_B T_F = 1 \text{ eV} \hat{=} 11605 \text{ Kelvin}$!

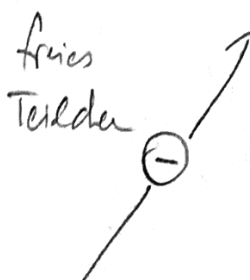
Materialien bei Normalbedingungen benötigen immer Quantenmechanische Beschreibung der Elektronen!

- (iii) in realen Materialien kann $\frac{e}{m}$ sehr unterschiedliche Werte annehmen ($\rightarrow$ Quasiteilchen)

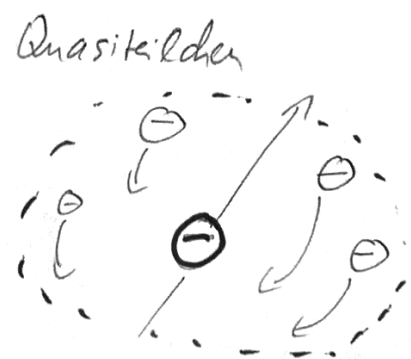
Lev Landau: "there are no electrons in solids"

Quasiteilchen = Anregungen eines Grundzustands
mit fester Energie-Impuls-Relation ("Dispersion")

freies Teilchen


$$\epsilon = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$

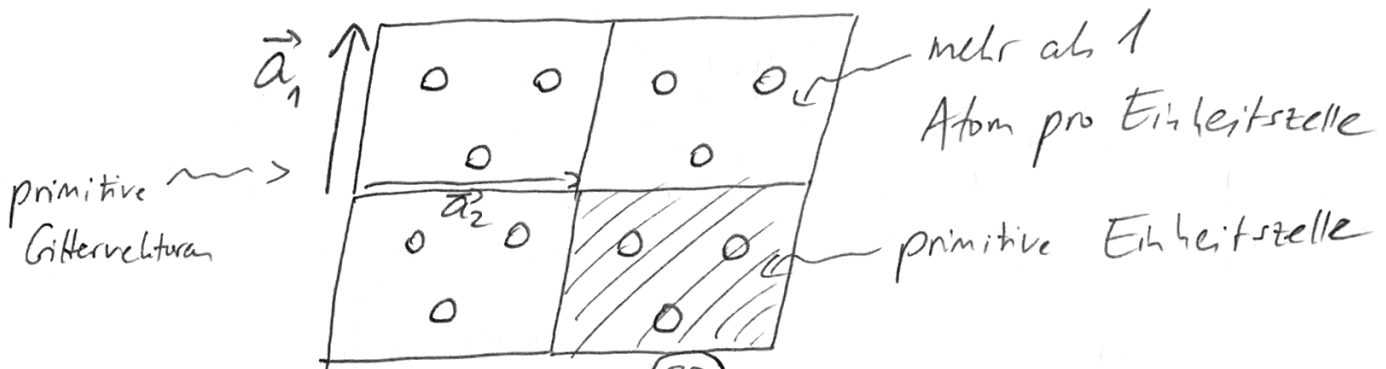
Quasiteilchen


$$\epsilon = \frac{(\hbar k)^2}{2m^*}$$

② Periodische Gitter und Blochtheorem

Bandtheorie der Elektronen $\equiv$ Elektronen im periodischen Potential

②.1 Periodische Strukturen: Kristallsymmetrien



$$\{\vec{R} : \vec{R} = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{a}_i, n_i \in \mathbb{Z}\}$$

$\{0; \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots\}$

heißt Bravaisgitter

- Klassifikation von Gittern nach Symmetrie

Punktgruppe: Symmetrioperationen, die mindestens einen Punkt fest lassen

Raumgruppe: volle Symmetriegruppe

$$\vec{r} \longrightarrow \underline{\underline{D}} \vec{r} + \vec{a}$$

$\underline{\underline{D}}$: Punktgruppenelement

$\vec{a}$: Verschiebung (Translation)

Beispiele:

- Bravaisgitter in 2D
- Honigwabengitter ist kein Bravaisgitter

- in 3D: Bravaisgitter haben 7 Punktgruppen
und 14 Raumgruppen haben (Bravais ~1850)
- in 2D: Raumgruppen $\hat{=}$ "wallpaper groups" (cf. Wikipedia)
- Bedeutung von Symmetrien für Beschreibung von Festkörpern:
 - gute Quantenzahlen (Quasimpuls $\vec{k}$) $\leadsto$ s. später
 - Symmetrien bestimmen Responsefunktionen

Beispiel: Leitfähigkeit = Tensor (Matrix)

$$j_\alpha = \sum_{\alpha'} \sigma_{\alpha\alpha'} E_{\alpha'} \quad , \quad \alpha, \alpha' = x, y, z$$

$$\underline{\underline{D}} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{D}}^{-1} \stackrel{!}{=} \underline{\underline{\sigma}} \quad \text{Invariant für alle Punktgruppenoperationen } \underline{\underline{D}}$$

z.B. Kristall ist invariant unter 180° -Drehungen um z-Achse:

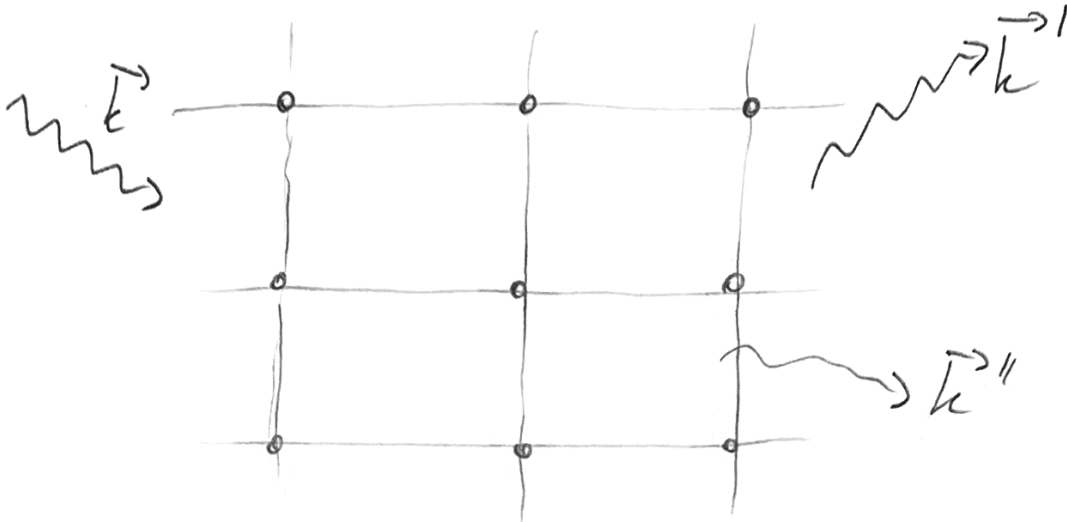
$$\underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & +1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{D}} \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \underline{\underline{D}}^{-1} = \begin{pmatrix} +\sigma_{11} & +\sigma_{12} & -\sigma_{13} \\ +\sigma_{21} & +\sigma_{22} & -\sigma_{23} \\ -\sigma_{31} & -\sigma_{32} & +\sigma_{33} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \underline{\underline{\sigma}}$$

$$\Rightarrow \sigma_{13} = \sigma_{23} = \sigma_{31} = \sigma_{32} = 0$$

ähnlich: Rotationen um x-, y-Achsen $\Rightarrow \underline{\underline{\sigma}}$ diagonal usw. 10

2.2) Streuung von Wellen an periodischen Strukturen



- diskrete Braggreflexe mit Wellenvektoren $\vec{k}', \vec{k}''$ usw.
- Bedingung für konstruktive Interferenz der gestreuten Welle in Richtung $\vec{k}'$:

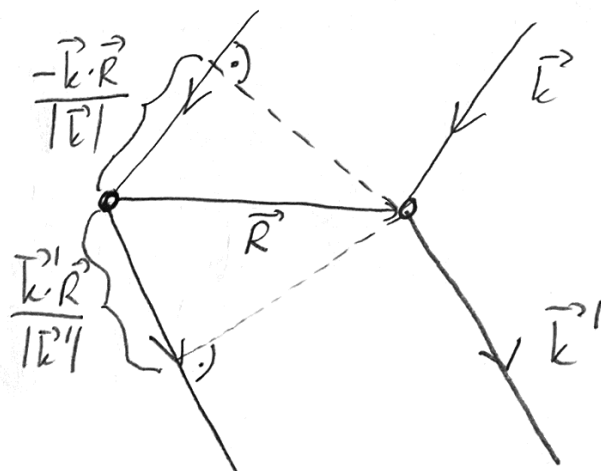
$$(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R} = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}$$

für alle $\vec{R} \in \text{Gitter}$ (von-Laue-Bedingung)

Beweis:

Pfad-Differenz

$$\left(\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} - \frac{\vec{k}'}{|\vec{k}'|} \right) \cdot \vec{R} = n \lambda$$



für konstruktive Interferenz:

Mit $\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{2\pi}{|\vec{k}'|} \Rightarrow$ von-Laue-Bedingung
(elastische Streuung)

2.3 Das reziproke Gitter

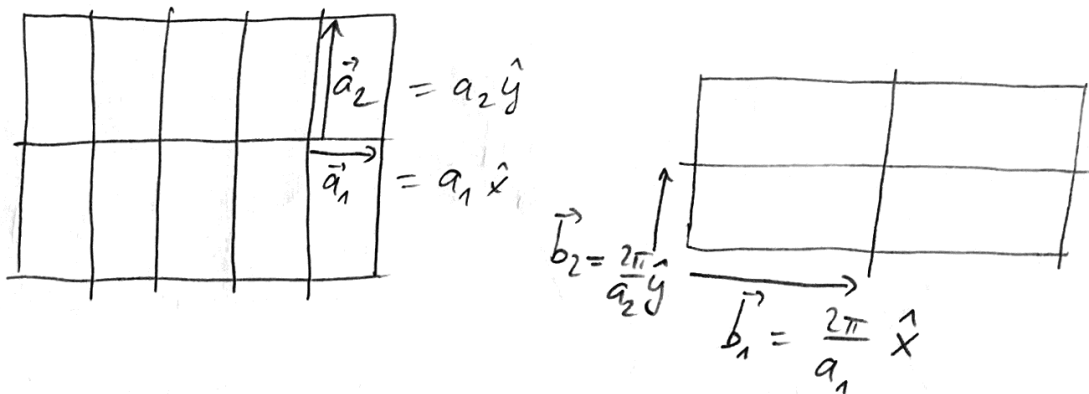
Für ein Bravaisgitter $\{\vec{R}\}$ sei das reziproke Gitter $\{\vec{G}\}$ definiert durch $\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi n$, $n \in \mathbb{Z}$ für alle $\vec{R} \in \{\vec{R}\}$, d.h. $e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} = 1$.

Wenn $\{\vec{R}\}$ die primitiven Basisvektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ hat, dann ist das reziproke Gitter ein Bravaisgitter mit primitiven Basisvektoren $\vec{b}_i$, so dass

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{|\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|}, \quad 1, 2, 3 \text{ zyklisch}$$

Beispiel: rechteckiges Gitter



- alternative Formulierung der von-Laue-Bedingung:

konstruktive Interferenz $\Leftrightarrow \vec{k} - \vec{k}' \in \text{reziprokes Gitter}$

- Bemerkung: das reziproke Gitter definiert eine Fourier-Zerlegung von Funktionen, die periodisch auf dem Bravaisgitter sind:

$$f(\vec{r} + \vec{R}) = f(\vec{r}) \Rightarrow \begin{cases} f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \\ f_{\vec{G}} = \frac{1}{\text{vol}} \int d^3r e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} f(\vec{r}) \end{cases}$$

Einheitszelle

2.4 Impulserhaltung auf dem Gitter

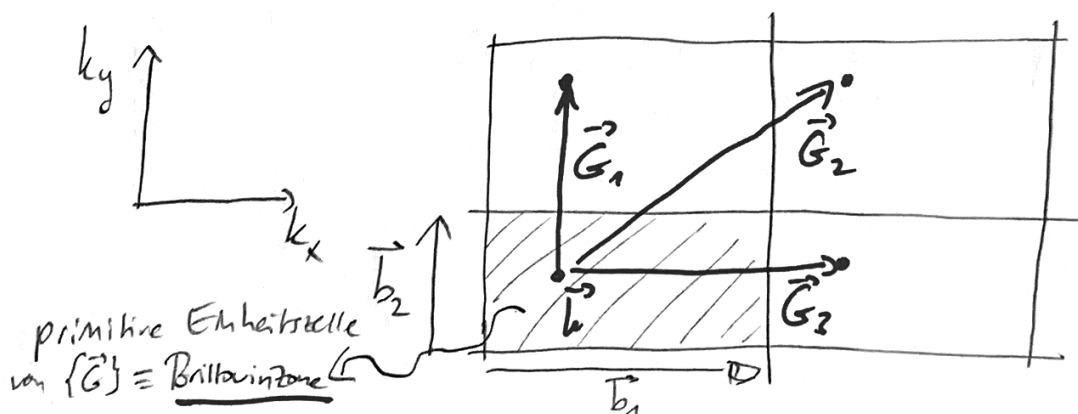
Streuung in periodischem Gitter $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$ mit
 $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G} \in \{\vec{G}\}$

$\Rightarrow$ Impuls ist erhalten modulo einem reziproken Gittervektor.

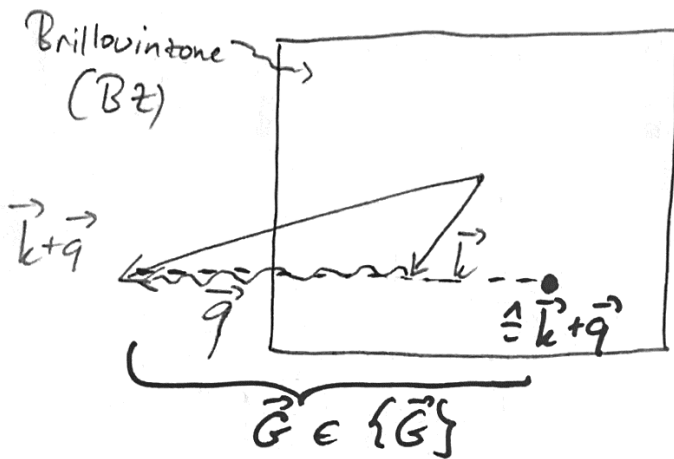
Def.:

Ein Zustand $|\psi\rangle$ hat "guten Quasi-Impuls $\vec{k}$ "
 $\Leftrightarrow |\psi\rangle$ ist Superposition von Zuständen mit
 Impuls $\vec{k} + \vec{G}$, $\vec{G} \in \{\vec{G}\}$.

Anmerkung: "gute Quantenzahl" = Erhaltungsgröße.



Beispiel: Umklappstreuung ("umklapp scattering")



Streuung eines Elektrons mit $\vec{k}$ an einem anderen Quasiteilchen (Phonon, andere Elektronen, ...), so dass sich sein Quasi-Impuls um $\vec{q}$ ändert.

→ Wenn $\vec{k} + \vec{q}$ in einer anderen BZ des $\{\vec{G}\}$ liegt, reden wir von Umklappstreuung.

Impulserhaltung: algebraische Formulierung

In einem periodischen Kristall kommutiert der Hamiltonoperator $\hat{H}$ mit allen Translationen:

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{R}}] = 0 \quad \forall \vec{R} \in \{\vec{R}\}$$

Def.: $(\hat{T}_{\vec{R}} \psi)(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{R})$

⇒ Eigenfunktionen von $\hat{H}$ und $\hat{T}_{\vec{R}}$ sind dieselben.

$$\hat{T}_{\vec{R}} |\psi\rangle = c(\vec{R}) |\psi\rangle \quad \forall \vec{R} \in \{\vec{R}\}$$

$$\vec{R} = \sum_i n_i \vec{a}_i \Rightarrow \hat{T}_{\vec{R}} = (\hat{T}_{\vec{a}_1})^{n_1} (\hat{T}_{\vec{a}_2})^{n_2} (\hat{T}_{\vec{a}_3})^{n_3}$$

(da Translationsoperatoren kommutieren)

$$\Rightarrow \hat{T}_{\vec{R}} |\psi\rangle = c(\vec{a}_1)^{n_1} c(\vec{a}_2)^{n_2} c(\vec{a}_3)^{n_3} |\psi\rangle \quad \forall n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\text{Wegen } \| |\psi\rangle \| = \| \hat{T}_{\vec{R}} |\psi\rangle \| \Rightarrow c(\vec{R}) = 1$$

$$\Rightarrow \text{definiere } \vec{k} \text{ so, dass } c(\vec{a}_i) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_i}, \quad i=1,2,3$$

$$\Rightarrow c(\vec{R}) = \exp\left(i \sum_j \vec{a}_j \cdot n_j\right) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} //$$

$\vec{k}$ = Quasi-Impuls : Quantenzahl, die charakterisiert, wie sich eine Wellenfunktion unter Translation verhält:

$|\psi\rangle$ hat Quasi-Impuls $\vec{k}$

$$\Leftrightarrow \hat{T}_{\vec{R}} |\psi\rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} |\psi\rangle \quad \forall \vec{R} \in \{\vec{R}\}$$

Bemerkungen: • $\vec{k}$ und $\vec{k} + \vec{G}$ mit $\vec{G} \in \{\vec{G}\}$ sind derselbe Quasi-Impuls

• aber Achtung: das gilt nur innerhalb des (unendlich ausgedehnten) Kristalls. Sobald wir "in die Außenwelt" streuen, gilt diese Äquivalenz nicht mehr.
 $\rightarrow$ Bedeutung höherer Brillouinonen bei Streuexperimenten ins Vakuum.

• vergleiche: L^2, L_z = Quantenzahlen, die Verhalten unter Rotationen beschreiben

2.5 Elektronen im periodischen Potential

Ziel: Lösung der Schrödingergleichung für Elektronen im Festkörper.

Näherungen (später mehr dazu):

- Ionen fixiert ($m_e \ll m_{\text{ion}}$)
- Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt (Grund: Landau-Fermiflüssigkeitstheorie)

Ziel: bestimme Eigenwertspektrum von

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) \quad \forall \vec{R} \in \{\vec{R}\}$$

Blochtheorem:

$\hat{H}$ kommutiert mit allen Translationen $\hat{T}_{\vec{R}}$, $\vec{R} \in \{\vec{R}\}$
 $\Rightarrow$ Eigenzustände von $\hat{H}$ haben guten Quasi-Impuls

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{R}} |\psi(\vec{r})\rangle &= |\psi(\vec{r} + \vec{R})\rangle \\ &\parallel \\ e^{i\vec{k}\vec{R}} |\psi(\vec{r})\rangle \end{aligned}$$

Blochtheorem

$\Rightarrow$ Eigenfunktionen von $\hat{H}$ können geschrieben werden als

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

$\vec{k} \in 1. \text{ BZ}$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \forall \vec{R} \in \{\vec{R}\}$$

Bemerkung: Ein analoges Theorem existiert für
endlich periodische Systeme (Floquet-Theorem)

Aus dem Blochtheorem folgt:

Es gibt eine Schrödingergleichung für $u_{\vec{k}}(\vec{r})$
(Blochzustände).

Nutze $\hat{\vec{p}} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla} \rightarrow \hat{\vec{p}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (\vec{p} + \hbar\vec{k}) f(\vec{r})$

$$\Rightarrow \left[\frac{(\vec{p} + \hbar\vec{k})^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] u_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (*)$$

Diese Gleichung muss auf einer Einheitszelle
(Kriger-Seite-Zelle) mit periodischen Rand-
bedingungen $u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$ gelöst
werden.

Dadurch ist ein Eigenwertproblem auf einem endlichen

Volumen definiert. $\rightarrow$ vgl. Teilchen in Box;

diskrete Eigenwerte für jedes $\vec{k}$, jedes

Niveau hat endliche Entartung

$$\Rightarrow \text{Energiebänder } E_n(\vec{k}), \quad n=1, 2, 3, \dots$$

- $E_n(\vec{k})$ ist stetig als Funktion von $\vec{k}$
- periodisch über die BZ:

$$E_n(\vec{k} + \vec{G}) = E_n(\vec{k}) \quad \forall \vec{G} \in \{\vec{G}\}$$

- das Spektrum ("Bandstruktur") ist entscheidend für die Eigenschaften des Festkörpers:

- für unabhängige Elektronen werden die Energieniveaus bis E_F besetzt;
wenn E_F in einer Bandlücke ist, gibt es eine minimale Anregungsenergie Δ

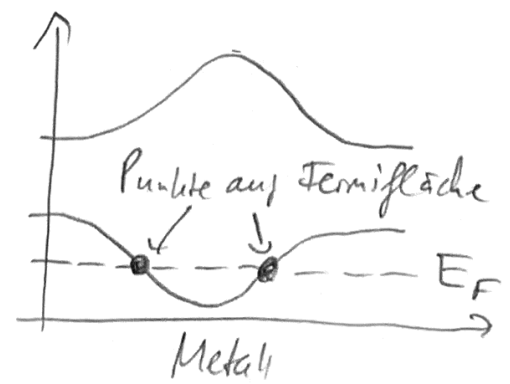
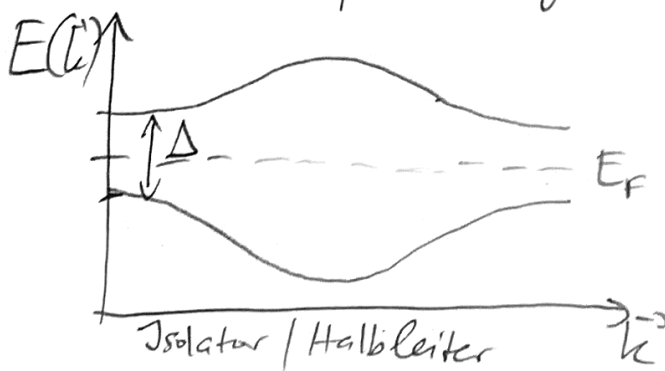
$\Rightarrow$ Isolator bzw. Halbleiter

$$(\Delta \gg k_B \cdot T_{\text{Raum}}) \quad (\Delta \lesssim k_B \cdot T_{\text{Raum}})$$

- in einem Metall bilden Zustände mit $E_n(\vec{k}) = E_F$ die Fermioberfläche; diese kann aus mehreren Teilen ("pockets") bestehen.

$\Rightarrow$ Fermioberfläche / Fermifläche ist sehr wichtig für viele Eigenschaften;

Transport, Ordnungszustände (Magnetisierung, Supraleitung, ...)



Lösung der Schrödingergleichung (x): $(\hat{p}^2 + U(x)) \psi(x) = E \psi(x)$

Entwicklung nach Harmonischen (ebene Wellen),

Setze $\frac{\hbar^2}{2m} \equiv 1$, Gitterkonstante $a \equiv 1$

($\rightarrow$ definiert Energieeinheiten)

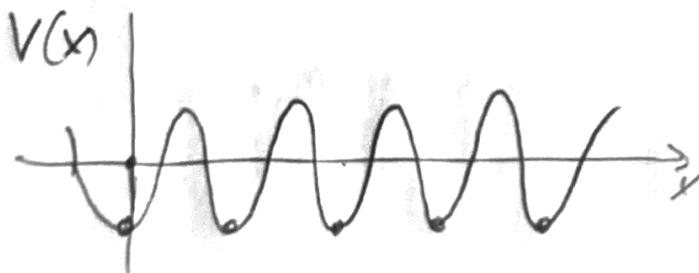
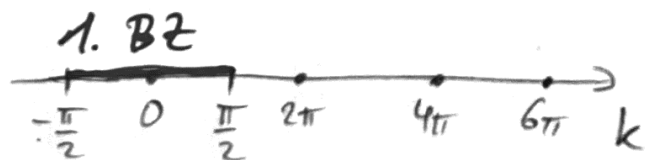
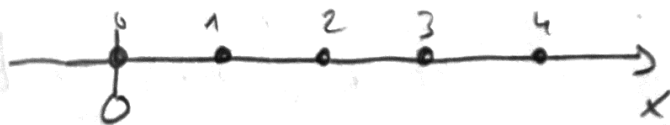
Zur Vereinfachung: 1D-Notation (Verallgemeinerung ist "einfach")

Blockansatz: $\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$

Blockwelle $u_k(x) = \sum_{G \in G_1} \boxed{C_G(k)} e^{iGx}$

Expansionskoeffizient
für ebene Wellen mit
reziproken Gittervektor G
"Fourier-artige Zerlegung"

$C_G(k) = \int_0^1 dx e^{-iGx} u_k(x)$ Integral über
Einheitszelle



Blochansatz in (*) einsetzen: unter Nutzung von $\hat{p}_x^2 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$:

$$\left. \begin{aligned} \sum_G (k+G)^2 c_G(k) e^{iGx} + \sum_{G,G'} U_{G'} e^{iG'x} c_G(k) e^{iGx} \\ = E_k \sum_G c_G(k) e^{iGx} \end{aligned} \right\} (**)$$

wobei wir $V(x) = \sum_{G'} e^{iG'x} U_{G'}$ benutzt haben.

(Entwicklung des Potentials nach ebenen Wellen)

Wann klappt das gut? Wenn das Potential mit wenigen ebenen Wellen dargestellt werden kann.

Zum Beispiel: $V(x) = V_0 \cos(2\pi x)$

$$\Rightarrow U_G = \begin{cases} \frac{V_0}{2} & \text{falls } G = \pm 2\pi \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(\text{Begründung: } V(x) = \frac{V_0}{2} (e^{i2\pi x} + e^{-i2\pi x}))$$

Aus (**) erhalten wir die Gleichung für $c_{\tilde{G}}(k)$, indem wir:

- multiplizieren mit $e^{-i\tilde{G}x}$
- integrieren $\int_0^1 dx$
- benutzen, dass $\int_0^1 dx e^{i(G-\tilde{G})x} = \delta_{G\tilde{G}}$

$$\rightarrow \boxed{(k+G)^2 C_G(k) + \sum_{G'} U_{G-G'} C_{G'}(k) = E_k C_G(k)}$$

Was ist hier passiert?

→ Differentialgleichung wurde in algebraische Gleichung umgeformt
(mit periodischer Randbedingung)

→ Struktur: $(\hat{T} + \hat{V}) |\psi\rangle = E |\psi\rangle$
kinetische + potentielle Energie

Algorithmus zur Lösung:

- schreibe für festes k die Gleichung als Matrix-Gleichung (Eigenwertproblem) $\underline{H} \underline{c} = \lambda \underline{c}$
- man muss i.A. die Matrix abschneiden (check: Konvergenz im Cutoff!)
z.B. erster Term (kinetische Energie)

$$\underline{T} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ & (k-2\pi)^2 & & \\ & & k^2 & \\ & & & (k+2\pi)^2 \\ & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

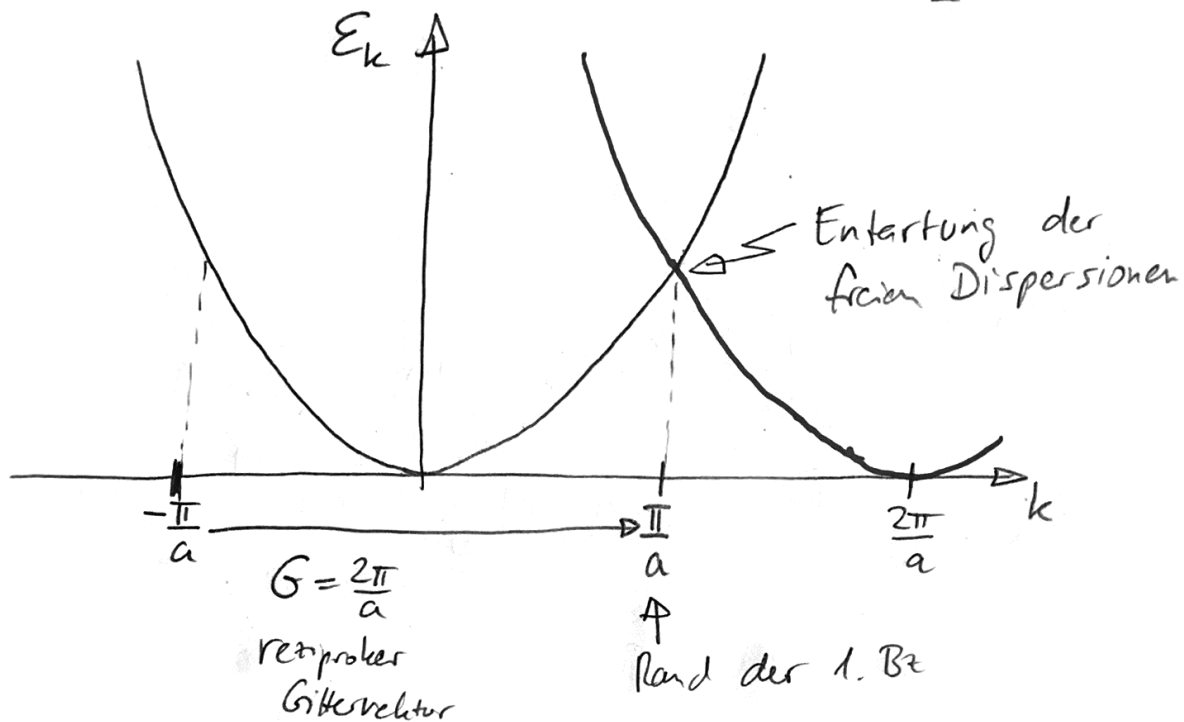
ist diagonal, aber für $k \in [-\pi, \pi) = 1. \text{ Bz}$ wird der Eintrag irgendwann sehr groß

⇒ nicht relevant, wenn wir uns nur für Bänder bei niedrigen Energien interessieren

2.6 Elektronen im schwachen periodischen Potential

Wir interessieren uns für den Einfluss eines schwachen periodischen Potentials auf die Energie- Impuls - Relation der Elektronen.

Wenn $V(x) \equiv 0$, dann $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (freie Elektronen).



Für schwaches periodisches Potential machen wir eine entartete Störungstheorie nahe dem Punkt der Entartung:

$$k \approx \frac{G}{2} = \frac{\pi}{a}$$

Die kinetische Energie war E_k und bei $-G$

war sie $E_{k-G} = E_{k - \frac{2\pi}{a}}$

→ nimmt nur zwei ebene Wellen für Entwicklung der Blochfunktionen:

$$\begin{aligned}
 U_k(x) &= \sum_G C_G(k) e^{iGx} \\
 &= C_0(k) e^{i0x} + C_{-\frac{2\pi}{a}}(k) e^{-i\frac{2\pi}{a}x}
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Schrödinger-Gleichung wird zu 2×2 Eigenwertproblem:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_k & U_{\frac{2\pi}{a}} \\ U_{-\frac{2\pi}{a}}^* & \epsilon_{k-\frac{2\pi}{a}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_0 \\ C_{-\frac{2\pi}{a}} \end{bmatrix} = E_k \begin{bmatrix} C_0 \\ C_{-\frac{2\pi}{a}} \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow$ "pq"-Formel liefert $(U_{-\frac{2\pi}{a}} = U_{\frac{2\pi}{a}}^*)$:

$$E_k^{\pm} = \frac{1}{2} \left[(\epsilon_k + \epsilon_{k-\frac{2\pi}{a}}) \pm \sqrt{(\epsilon_k - \epsilon_{k-\frac{2\pi}{a}})^2 + 4|U_{\frac{2\pi}{a}}|^2} \right]$$

Bei $k \approx \frac{G}{2} = \frac{\pi}{a}$ haben wir $\epsilon_k \approx \epsilon_{k-\frac{2\pi}{a}} \equiv \epsilon_0$:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_0 & U_{\frac{2\pi}{a}} \\ U_{\frac{2\pi}{a}}^* & \epsilon_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_0 \\ C_{-\frac{2\pi}{a}} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} C_0 \\ C_{-\frac{2\pi}{a}} \end{bmatrix}$$

Lösungen:

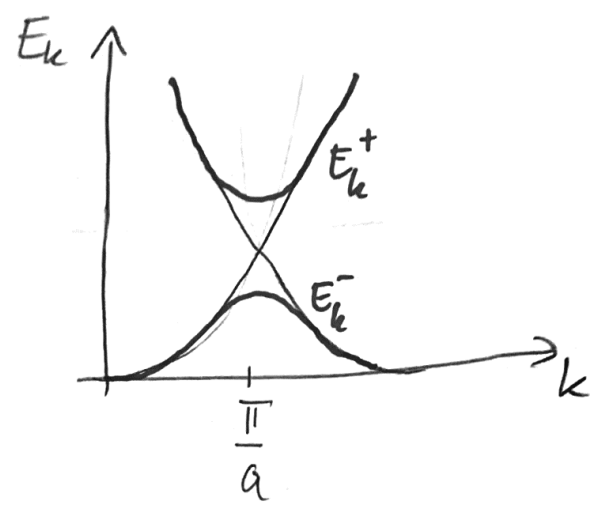
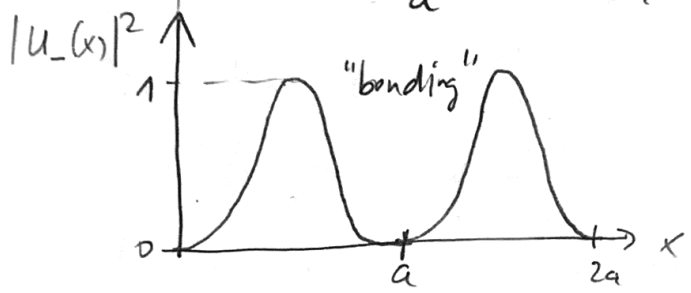
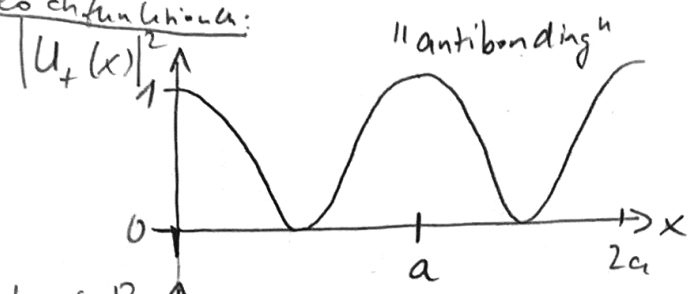
$$\begin{bmatrix} C_0 \\ C_{-\frac{2\pi}{a}} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} / \sqrt{2} \Rightarrow E^+ = \epsilon_0 + |U_{\frac{2\pi}{a}}|$$

$$|U_+(x)|^2 \sim |1 + e^{iGx}|^2 \sim \cos\left(\frac{Gx}{2}\right)^2$$

$$\begin{bmatrix} C_0 \\ C_{-\frac{2\pi}{a}} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} / \sqrt{2} \Rightarrow E^- = \epsilon_0 - |U_{\frac{2\pi}{a}}|$$

$$|u_-(x)|^2 \sim |1 - e^{iGx}|^2 \sim \sin^2\left(\frac{Gx}{2}\right)$$

Blochfunktionen:



Vergleiche $\uparrow$ H_2 -Molekül (Molekularorbitaltheorie):

