



Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 23**

Vorlesungsstunde: 02.02.2021

• **Dynamik von Kristallelektronen:** Bewegung von Kristallelektronen unter Wirkung äußerer Kräfte

- bisher:**
- Beschäftigung mit Energieeigenwerten $\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow$ Bandstruktur (einzelne Elektronen in periodischem Potenzial)
 - Besetzung der Zustände unter Berücksichtigung von Pauli-Prinzip \rightarrow Fermi-Energie, Fermi-Flächen

- jetzt:**
- Diskussion des Verhaltens der Elektronen unter Wirkung äußerer Kräfte
 - Beschreibung von Transportphänomenen \rightarrow Verhalten in elektrischen und magnetischen Feldern
 - Transportphänomene wurden bereits im Rahmen von Drude-Sommerfeld-Modell für freie Elektronen behandelt
 - \rightarrow jetzt Ausdehnung auf Bandelektronen
 - \rightarrow viele Konzepte können übernommen werden (Boltzmann-Transporttheorie)
 - \rightarrow **wichtig: zusätzlich zu äußeren Kräften wirken Kräfte durch Gitterpotenzial**

• **Gegenüberstellung von freien Elektronen und Kristallelektronen:**

	Sommerfeld	Bloch
Quantenzahlen	Wellenvektor \mathbf{k} ($\hbar\mathbf{k}$ ist Impuls)	Wellenvektor \mathbf{k} , Bandindex n ($\hbar\mathbf{k}$ ist Kristallimpuls)
Bereich der Quantenzahlen	\mathbf{k} verträglich mit Randbedingungen, sonst beliebig groß	\mathbf{k} verträglich mit Randbedingungen, beschränkt auf 1. BZ
Energie	$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$	$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)$
Geschwindigkeit	$\mathbf{v}_\mathbf{k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}$	$\mathbf{v}_{n,\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$
Wellenfunktion	ebene Welle: $\Psi_\mathbf{k}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}$	Bloch-Welle: $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ mit $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$



Zusammenfassung: Teil 22, 28.01.2021/2

• semiklassisches Modell zur Beschreibung der Dynamik von Kristallelektronen

- quantenmechanische Berechnung der Bandstruktur $\varepsilon_n(\mathbf{k})$
- Beschreibung der Dynamik mit **klassischen Bewegungsgleichungen**

freie
Elektronen

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F} = q (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$



Kristall-
Elektronen

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = q [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)]$$

→ effektive Masse

$$[m^{*-1}(\mathbf{k})]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

effektive
Massetensor

schmale Bänder → hohe effektive Masse
breite Bänder → kleine effektive Masse

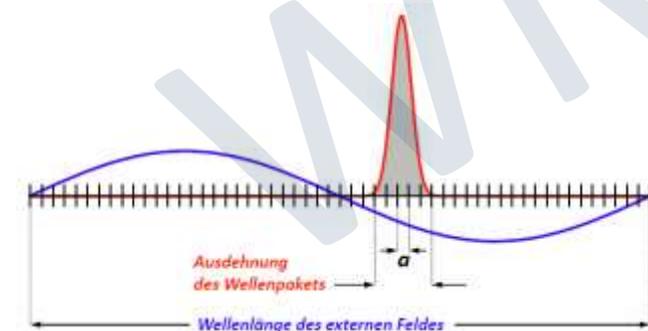
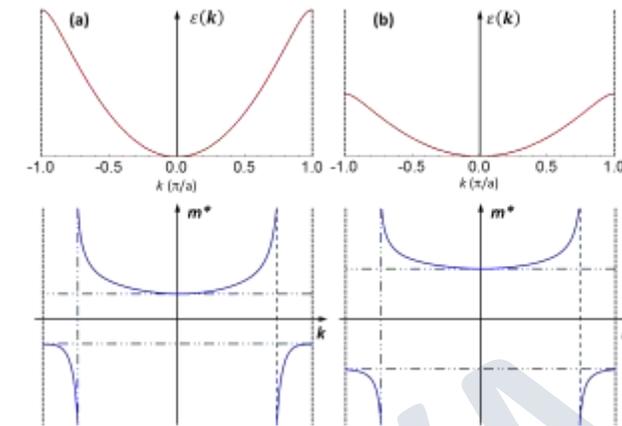
→ Bandindex ist Konstante der Bewegung → keine Band-Band-Übergänge

→ Beschreibung von Transportprozessen:

- Beschreibung der Bewegung der Bloch-Elektronen zwischen Stoßprozessen
- Beschreibung von Stoßprozessen (→ keine Antwort durch semiklassisches Modell)

→ Voraussetzungen für die Anwendbarkeit des semiklassischen Modells:

- da $\Delta k \ll 2\pi/a$ sein sollte, ist wegen $\Delta k \cdot \Delta r \geq 1$ dann $\Delta r \gg a$
→ Ausdehnung des Wellenpakets \gg Gitterabstand a
- klassische Beschreibung der Bewegung zwischen den Stößen erfordert, dass mittlere freie Weglänge ℓ und charakteristische Wellenlänge λ der externen Felder groß gegen die Ausdehnung des Wellenpakets ist



- *Bewegung von Kristallelektronen (nur ein Band, $T = 0$)*

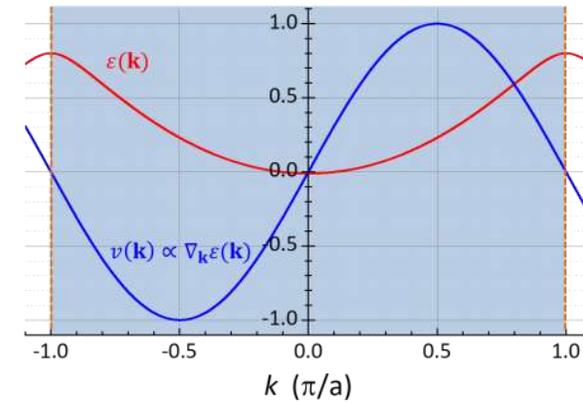
gefüllte Bänder

$$\mathbf{J}_q = \frac{q}{4\pi^3\hbar} \int_{1.BZ} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k$$

$$\mathbf{J}_h = \frac{1}{4\pi^3\hbar} \int_{1.BZ} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k$$

da $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{G})$ eine periodische Funktion ist, verschwindet das Integral über ihren Gradienten

→ **der Beitrag von gefüllten Bändern zur elektrischen und Wärmestromdichte verschwindet**



9.2.2 Ströme in teilweise gefüllten Bändern

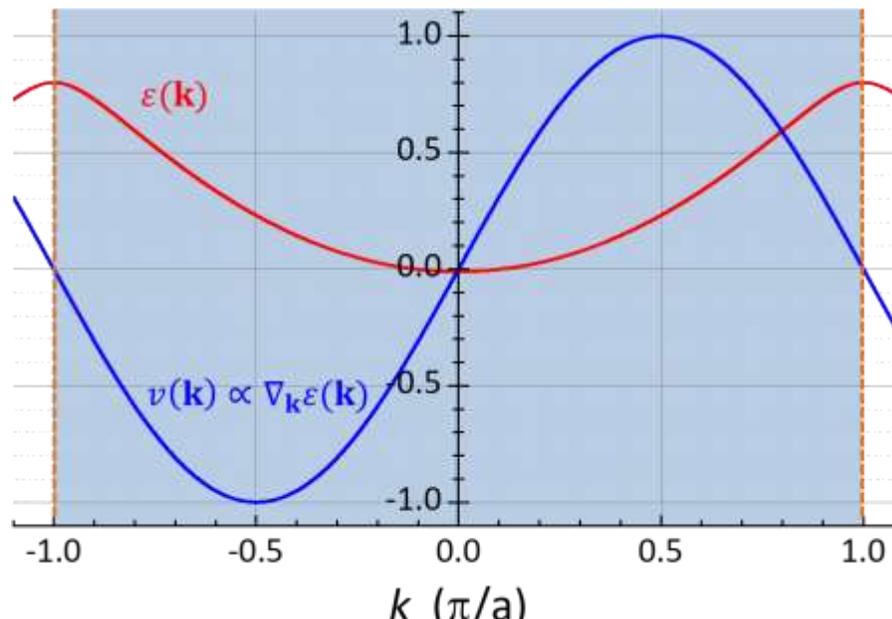
- Ströme in teilweise gefüllten Bändern (Wiederholung)

elektrische Stromdichte $\mathbf{J}_q = q \cdot \mathbf{J}$ ergibt sich durch Integration über die **besetzten Zustände**

$$\mathbf{J}_q = \frac{q}{4\pi^3 \hbar} \int_{\text{besetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3 k$$

für Elektronen: $q = -e$ (pro Teilchen transportierte Ladungsmenge)

die Stromdichte \mathbf{J}_q verschwindet nach wie vor im thermischen Gleichgewicht, da Zustände mit $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ und $\mathbf{v}(-\mathbf{k})$ gleich besetzt sind



durch angelegtes elektrisches Feld wird Gleichbesetzung von $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ und $\mathbf{v}(-\mathbf{k})$ aufgehoben

→ **endliche elektrische Stromdichte**

9.2.2 Ströme in teilweise gefüllten Bändern

- Das Lochkonzept

$$J_q = \frac{q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{besetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k = \underbrace{\frac{q}{4\pi^3\hbar} \int_{1.BZ} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k}_{=0} - \frac{q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{unbesetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k = \frac{-q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{unbesetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k$$

$$\Rightarrow J_q = \frac{+q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{besetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k = \frac{-q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{unbesetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k$$

für Elektronen:
 $q = -e$

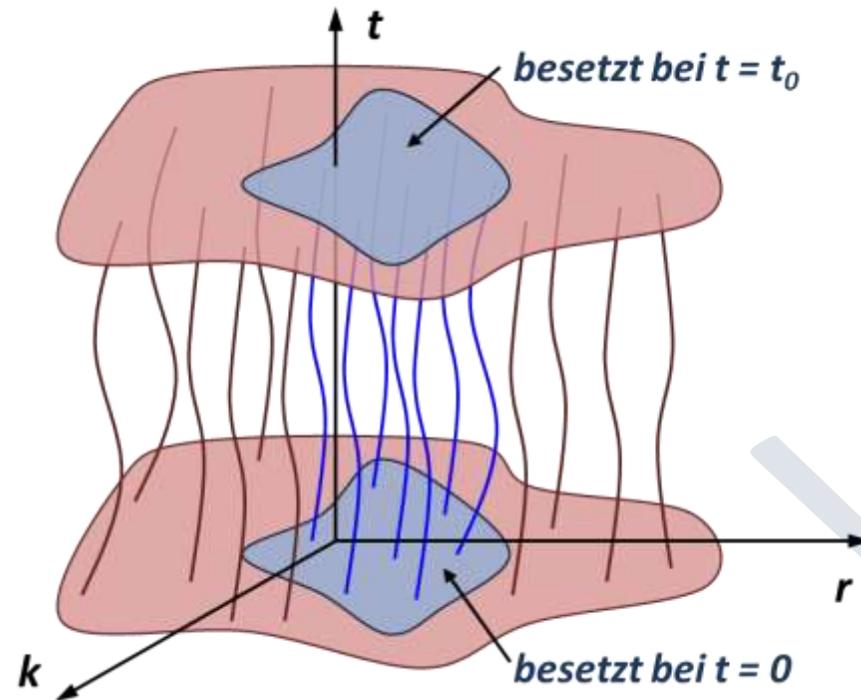
- Strombeitrag der besetzten Ladungsträgerzustände ist äquivalent zum Beitrag von unbesetzten Ladungsträgerzustände, wenn wir diesen eine Ladung mit entgegengesetztem Vorzeichen zuordnen
- falls Ladungsträger = Elektronen, bezeichnen wir die fiktiven positiv geladenen Teilchen als **Löcher** (fehlende Elektronen oder Defektelektronen)

Beispiel: Band mit 10^{23} Elektronen, in dem ein einziges Elektron fehlt

- Transporteigenschaften können mit dem einen „Defektelektron“ anstatt mit der Summe der 10^{23} Elektronen beschrieben werden

9.2.3 Elektronen und Löcher

- **Bewegung von Elektronen und Löchern**
 - wir benutzen deterministische Bewegungsgleichungen
 - falls Phasenraumkoordinaten (\mathbf{r}, \mathbf{k}) bei $t = 0$ bekannt, dann für alle Zeiten
 - Trajektorien von 2 Elektronen dürfen sich im 6-dimensionalen Phasenraum nicht schneiden
 - ➔ **Trennung in besetzte und unbesetzte Bahnkurven möglich**
 - ➔ **unbesetzte Zustände entwickeln sich unter der Wirkung von Kräften zeitlich genau so, als ob sie von realen Elektronen mit Ladung $+e$ besetzt wären**



9.2.3 Elektronen und Löcher

- **Beispiel: Elektronen in der Nähe eines Bandmaximums**

in der Nähe des Bandmaximums bei $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ gilt:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \simeq \varepsilon(\mathbf{k}_0) - c(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 \quad \text{mit } c > 0$$

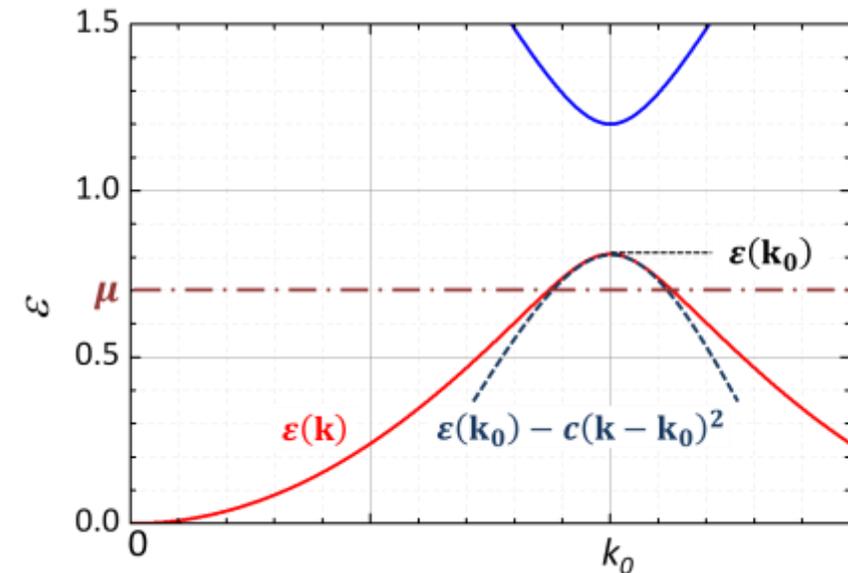
$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{k}) / \partial k^2} = -\hbar^2 / 2c < 0$$

→ **negative effektive Masse wegen negativer Bandkrümmung**

mit $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = -2c/\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$ ergibt sich: $\frac{d}{dt} \mathbf{v}(\mathbf{k}) = -\frac{2c}{\hbar} \frac{d}{dt} \mathbf{k} \propto -\frac{d}{dt} \mathbf{k}$ → **Beschleunigung ist antiparallel zu $\frac{d}{dt} \mathbf{k}$**

Folgerung:

Ein Elektron mit einer negativen effektiven Masse und negativen Ladung reagiert auf äußere Felder genauso wie ein entsprechendes Teilchen mit einer positiven effektiven Masse und positiven Ladung



9.2.3 Elektronen und Löcher

- Eigenschaften von Elektronen und Löchern

i. Wellenvektor \mathbf{k} : $\sum_{\text{BZ}} \mathbf{k} - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e \Rightarrow \mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$

Anregung eines Elektrons aus dem unteren Band (Valenzband) in das obere Band (Leitungsband)

Loch mit Wellenvektor $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$
 da $\mathbf{k}_h = \sum_{\text{BZ}} \mathbf{k} - \mathbf{k}_e = 0 - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e$

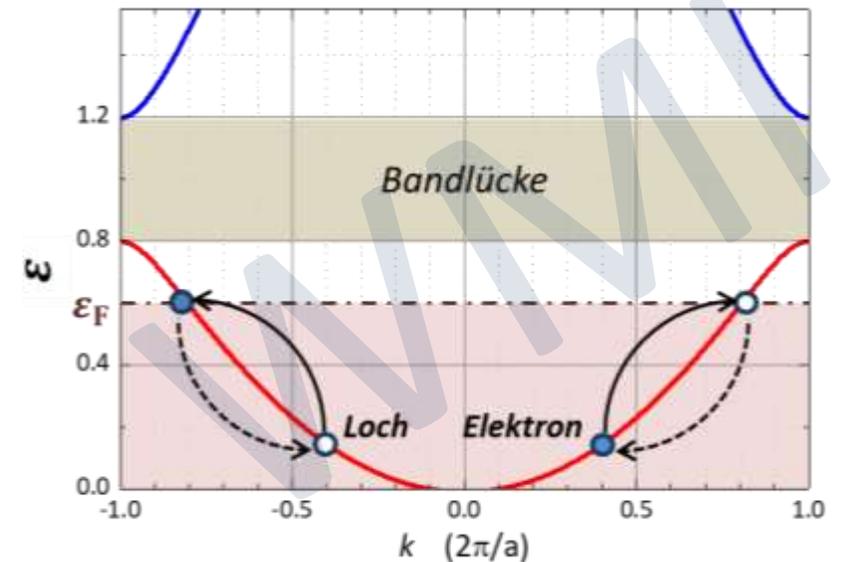
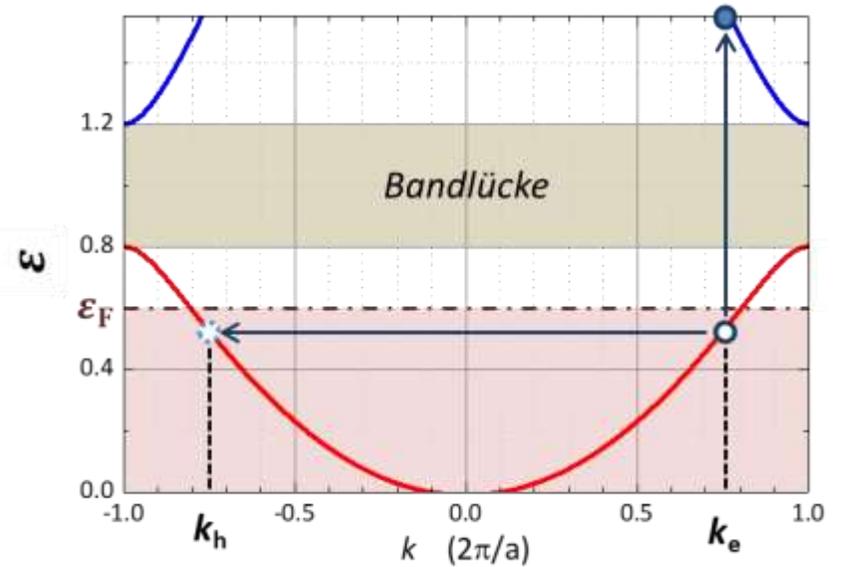
ii. Energie ε : $\varepsilon_h(\mathbf{k}) = -\varepsilon_e(\mathbf{k})$

Erzeugen von Loch = Anheben von Elektronen auf ε_F

benötigte Energie: $\varepsilon_h(\mathbf{k}) = -\varepsilon_e(\mathbf{k})$
 wobei ε = Energie bezogen auf ε_F

Anheben eines Lochs auf das Fermi-Niveau

Energie wird frei



9.2.3 Elektronen und Löcher

- Eigenschaften von Elektronen und Löchern

iii. effektive Masse m^* (Vorzeichenwechsel bei \mathbf{k} und ε):

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_h = \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{-\partial^2 \varepsilon(k)}{(-\partial k)(-\partial k)} \right] = - \left(\frac{1}{m^*}\right)_e \quad \Rightarrow \quad m_h^* = -m_e^*$$

iv. Geschwindigkeit \mathbf{v} (Vorzeichenwechsel bei \mathbf{k} und ε):

$$\mathbf{v}_h(\mathbf{k}_h) = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right]_h = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{-\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{-\partial \mathbf{k}} \right]_e = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v}_h(\mathbf{k}_h) = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$$

die Löcher folgen bei einer gleichförmigen Bewegung der Elektronen der Elektronenbewegung

beim Stromtransport:

Elektronen an Unterkante von Band und Löcher an Oberkante von Band bewegen sich aufgrund des umgekehrten Vorzeichens der effektiven Masse unter Wirkung der Kraft von \mathbf{E} -Feld in entgegengesetzte Richtung

9.2.3 Elektronen und Löcher

- Eigenschaften von Elektronen und Löchern

v. Bewegungsgleichungen:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_e}{dt} = \mathbf{F} = -e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B})$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_h}{dt} = \mathbf{F} = +e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B})$$

Löcher bewegen sich unter Wirkung von Kräften so wie Teilchen mit positiver Ladung

WMI

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Bewegungsgleichungen: **Bewegung von Elektron mit Ladung $q = -e$ in homogenem B -Feld**

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = (-e)[\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] = \frac{(-e)}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)]$$

(wir betrachten nur ein Band und lassen den Bandindex n weg)

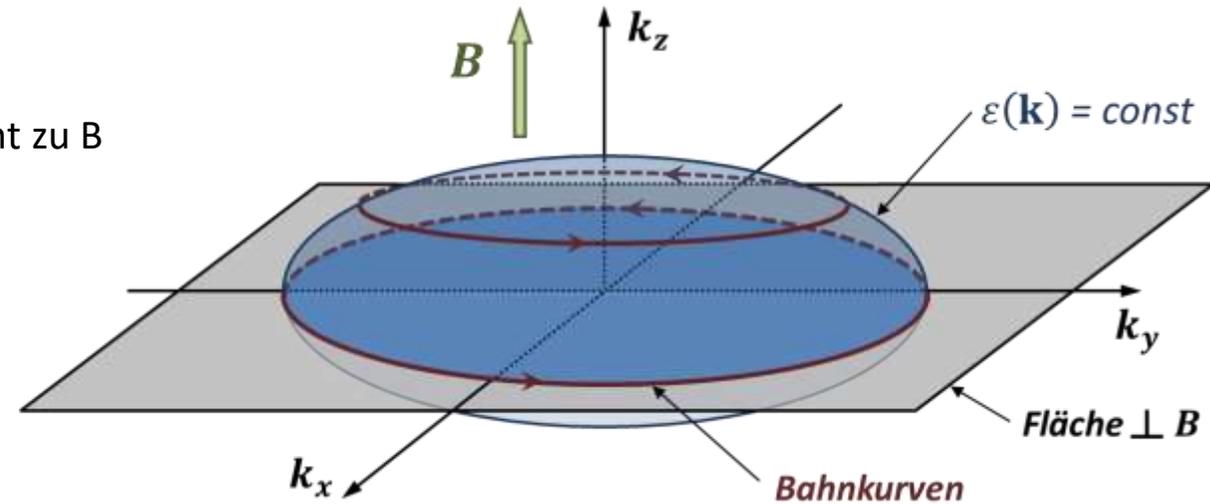
- Konstanten der Bewegung:**
- i. $\varepsilon(\mathbf{k})$ da $d\varepsilon/dt = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = (-e)[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \cdot \mathbf{v} = 0$
 - ii. $\mathbf{k} \parallel \mathbf{B}$ da $dk_{\parallel}/dt = \mathbf{F}_{\parallel} = 0$

- Folgerung:**
- i. **Bewegung erfolgt auf Flächen konstanter Energie, $\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const.}$**
 - ii. **Bahnkurven liegen in einer Ebene senkrecht zum B-Feld**

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Bahnkurven im k -Raum und Umlaufsinn

- Bewegung erfolgt auf Flächen konstanter Energie
- Bahnkurve eines Kristallelektrons liegen in Ebenen senkrecht zu B
- Umlaufsinn ist durch Vorzeichen von $\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k})$ gegeben
 - Elektronenbahnen: $\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k})$ ist nach außen gerichtet
 - Lochbahnen: $\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k})$ ist nach innen gerichtet

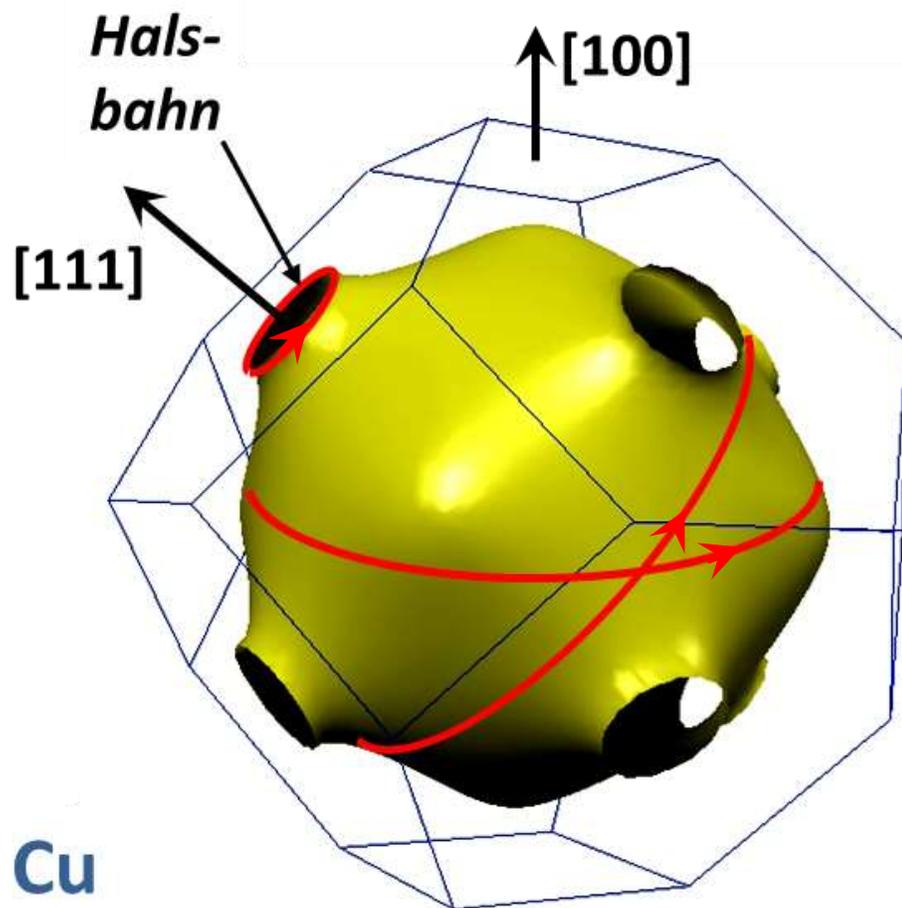


Merkregel:

- wir stehen auf der Fläche senkrecht zum Magnetfeld und zwar so, dass das Feld von den Füßen zum Kopf hin ausgerichtet ist
- wir bewegen uns dann entlang der Bahnkurve und zwar so, dass die Seite höherer Energie immer zu unserer Rechten liegt
- bei Elektronenbahnen erfolgt die Bewegung entgegen dem Uhrzeigersinn, bei Lochbahnen im Uhrzeigersinn

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Bahnkurven im k -Raum: Kupfer



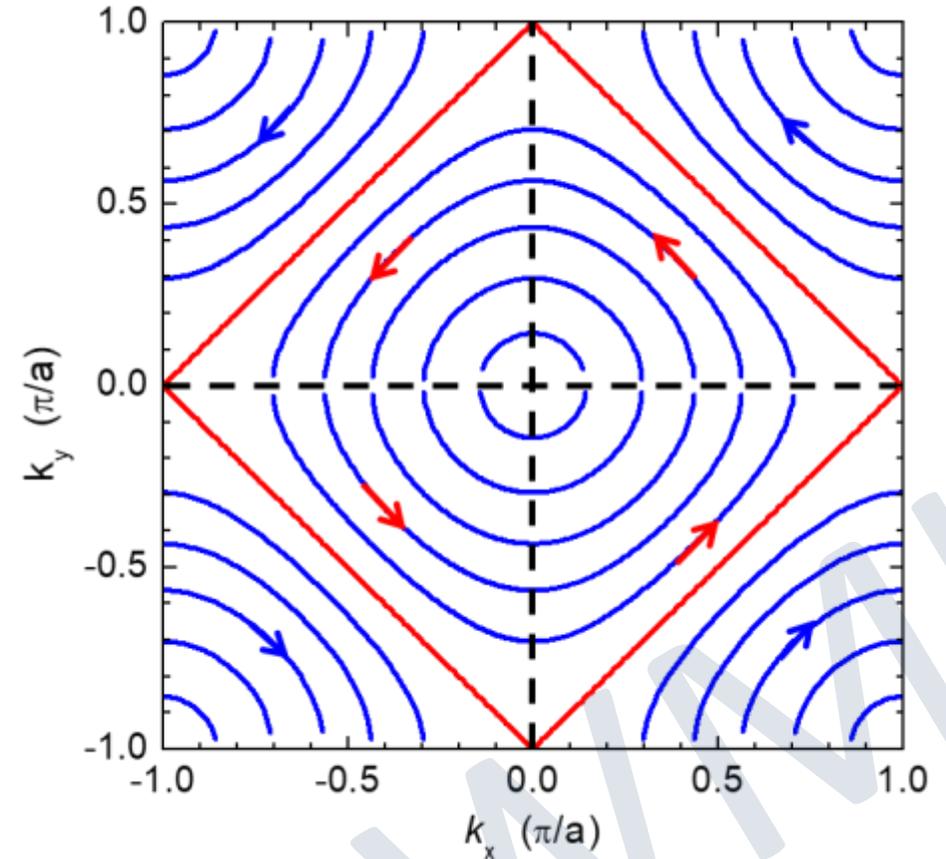
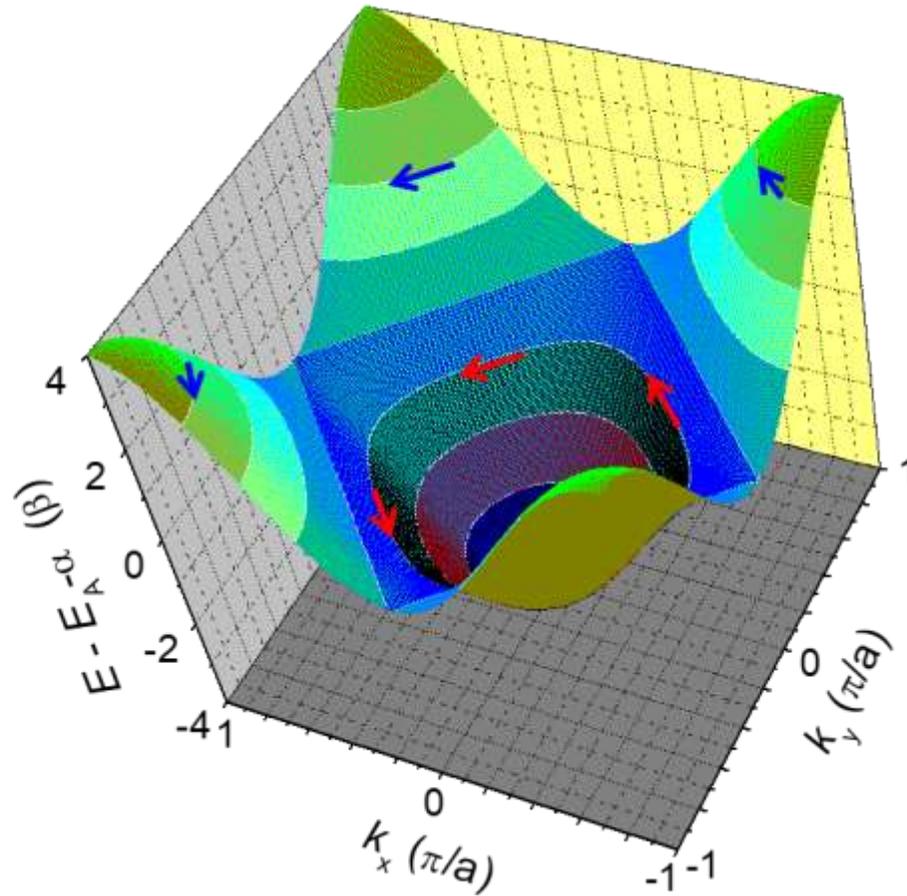
energetisch höher liegende Zustände liegen außerhalb der gelben Fermi-Fläche

→ alle gezeigten Trajektorien sind Elektronenbahnen



9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Bahnkurven im k -Raum: 2D Quadratgitter, Tight-Binding Bandstruktur



Elektronenbahnen:

gegen Uhrzeigersinn

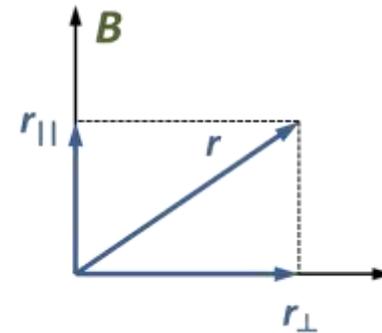
Lochbahnen:

im Uhrzeigersinn

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Bahnkurven im Ortsraum

- wir betrachten Projektion der Bahnkurve auf die Ebene senkrecht zum Magnetfeld



$$\mathbf{r}_{\perp} = \mathbf{r} - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{r})$$

- Bewegungsgleichung

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] = (-e)[\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}]$$

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$$

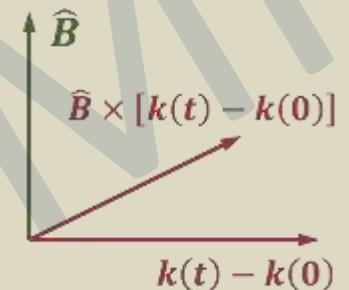
$$\hat{\mathbf{B}} \times \hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)\hat{\mathbf{B}} \times [\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}] = (-e) \left[\dot{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\hat{\mathbf{B}} \cdot \dot{\mathbf{r}}) \right] = (-e)B [\dot{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{B}}(\hat{\mathbf{B}} \cdot \dot{\mathbf{r}})] = (-e)B \dot{\mathbf{r}}_{\perp}$$

- Integration ergibt

$$\mathbf{r}_{\perp}(t) - \mathbf{r}_{\perp}(0) = -\frac{\hbar}{eB} \hat{\mathbf{B}} \times [\mathbf{k}(t) - \mathbf{k}(0)]$$

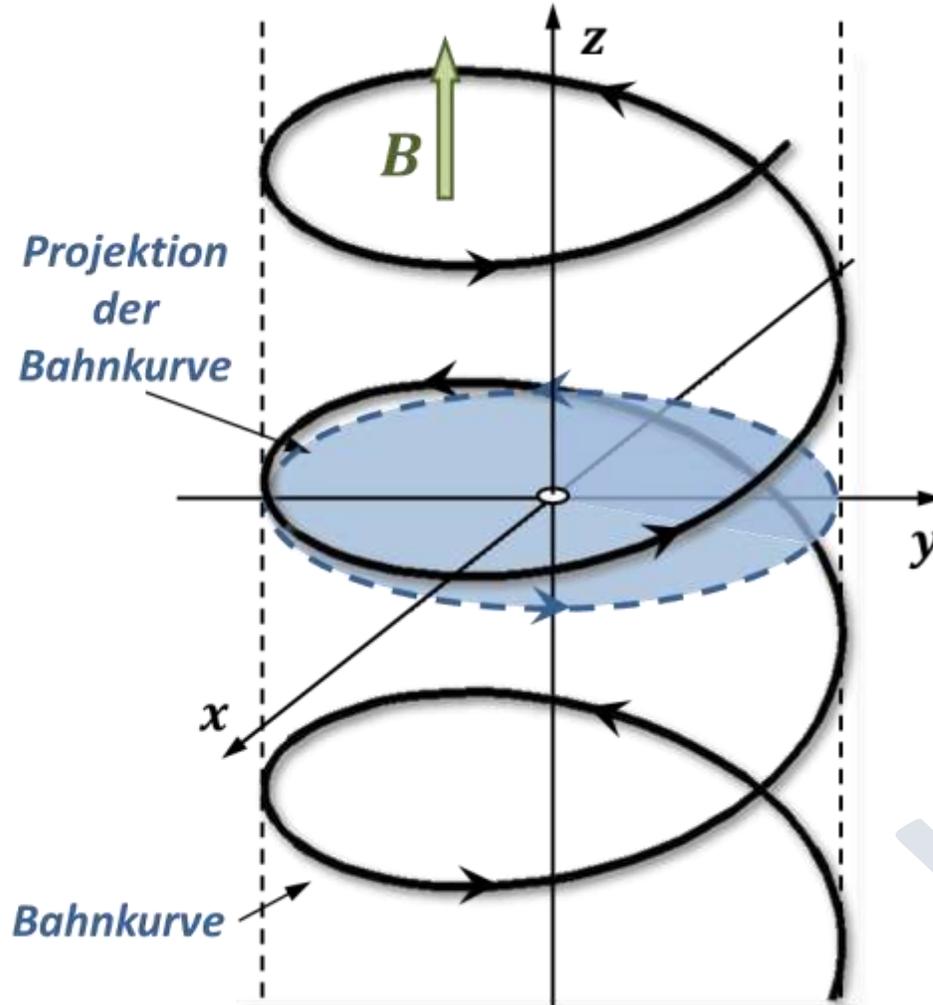
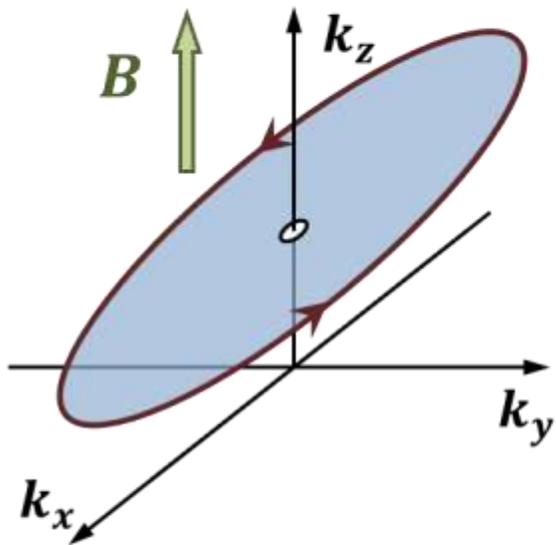
➔ Projektion der Bahn im Ortsraum auf Ebene senkrecht zu \mathbf{B} ergibt bis auf Skalierungsfaktor \hbar/eB die um 90° gedrehte Bahn im k -Raum

Kreuzprodukt von Einheitsvektor mit senkrechtem Vektor ergibt diesen Vektor um 90° gedreht



9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Bahnkurven im Ortsraum



Bewegung in Ebene senkrecht zu B -Feld ist gleichförmige
Bewegung parallel zu B -Feld
überlagert

für Kristallelektronen erhalten
wir keine Kreisbahnen mehr wie
für freie Elektronen sondern
kompliziertere Bahnen, die durch
die Form der Flächen konstanter
Energie bestimmt werden

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- geschlossene und offene Bahnen

freie Elektronen:

- Flächen konstanter Energie, $\varepsilon(\mathbf{k}) = const.$ sind Kugeln
- k -Raum-Trajektorien sind Kreise senkrecht zu \mathbf{B}
- Ortsraum-Trajektorien sind wiederum Kreise, da ein um 90° gedrehter Kreis wiederum Kreis ist

Kristallelektronen:

- Flächen konstanter Energie, $\varepsilon(\mathbf{k}) = const.$ sind keine Kugeln mehr \rightarrow kompliziertere Form
- k -Raum-Trajektorien sind keine Kreise senkrecht zu \mathbf{B} mehr
- Ortsraum-Trajektorien sind deshalb auch keine Kreise mehr
- wir unterscheiden Bahnkurven in **offene** und **geschlossene** Bahnen

offene Fermi-Fläche
innerhalb der BZ

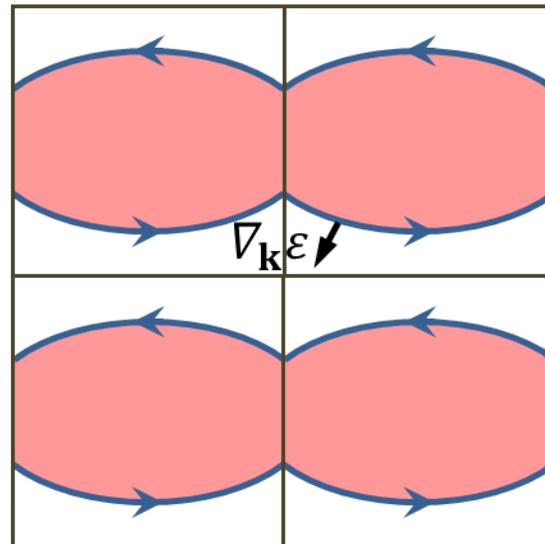
geschlossenen Fermi-Fläche
innerhalb der BZ

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

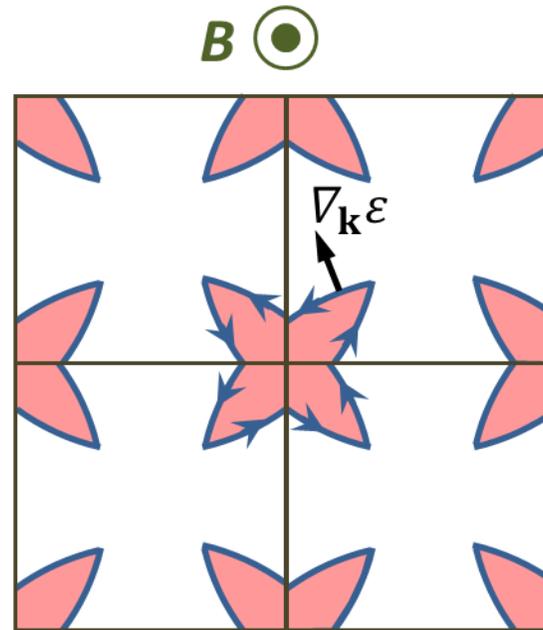
- geschlossene und offene Bahnen im k -Raum

periodisches
Zonenschema

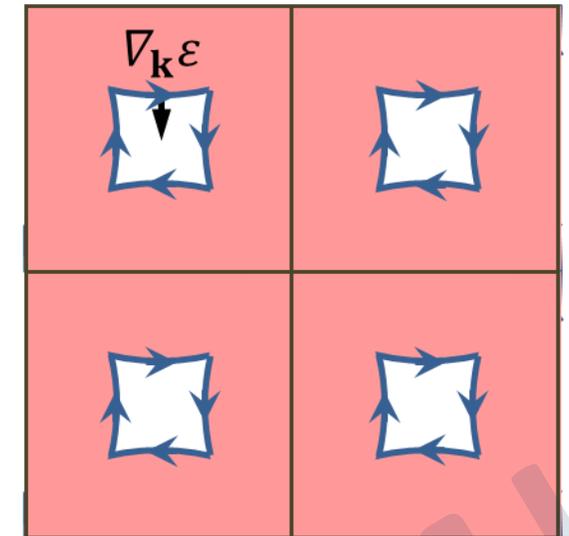
rote Bereiche:
besetzte Zustände



**offene Bahn
elektronenartig**



**geschlossene Bahn
elektronenartig**

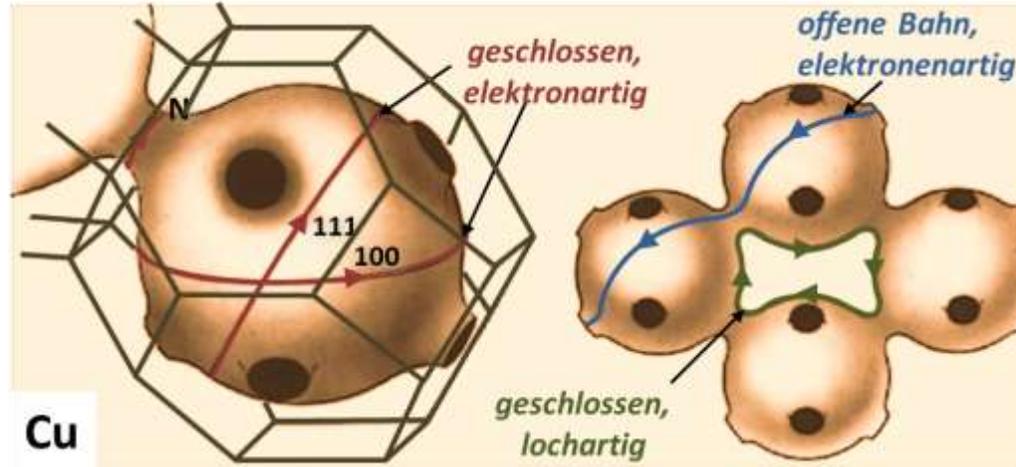


**geschlossene Bahn
lochartig**

die Bahn kann formal im
Unendlichen geschlossen
werden, um einen
Umlaufsinn zu definieren

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

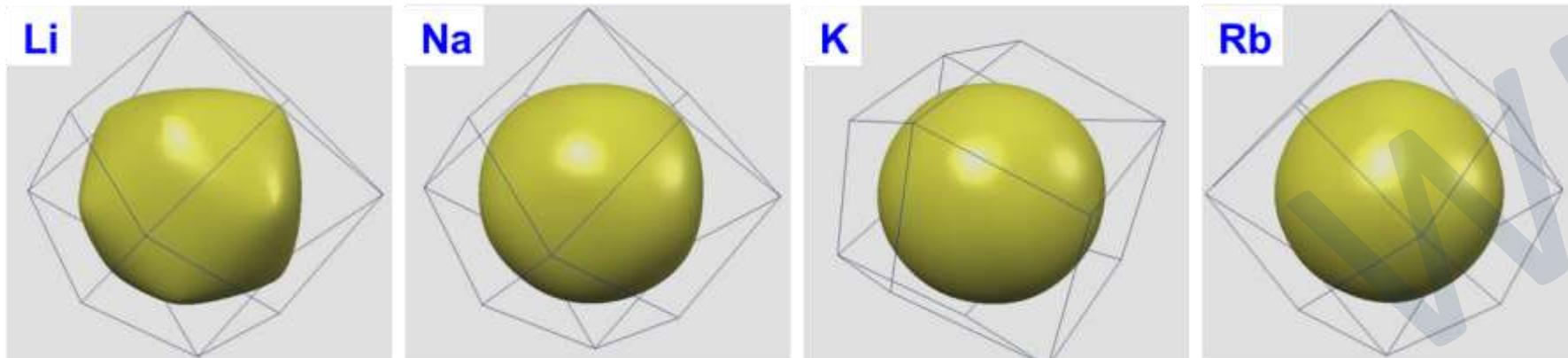
- geschlossene und offene Bahnen: Kupfer



Fermi-Fläche berührt den Rand der BZ

- offenen Bahnen
- geschlossene lochartige Bahn („Hundeknochen-Bahn“)

- Alkalimetalle:** Fermi-Flächen berühren Rand der BZ nicht → keine offenen Bahnen, geschlossene Bahnen sind elektronartig



Bewegung von Kristallelektronen ähnlich zu der von freien Elektronen

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Zyklotronfrequenz

- Frage: wie groß ist die Umlaufzeit T der Kristallelektronen auf einer geschlossenen k -Raumtrajektorie ?

- Bewegungsgleichung

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{(-e)}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \times \mathbf{B}] \quad \Rightarrow \quad dk_{\parallel} = \frac{(-e)}{\hbar^2} [\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon \times \mathbf{B}] dt = \frac{e}{\hbar^2} B [\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon]_{\perp} dt$$

($d\mathbf{k}_{\parallel}$ ist parallel zu Fläche konstanter Energie und $\perp \mathbf{B}$)

- Integration über einen Umlauf

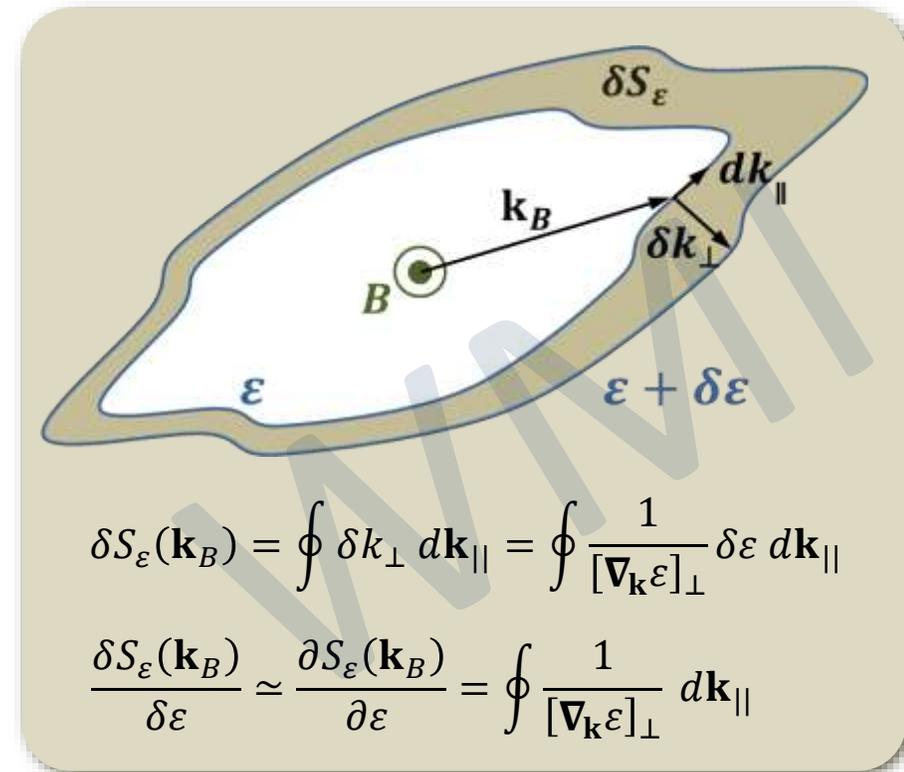
$$\frac{\hbar^2}{eB} \oint \frac{1}{[\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon]_{\perp}} d\mathbf{k}_{\parallel} = \int_0^T dt$$

$$T(\varepsilon, \mathbf{k}_B) = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial S_{\varepsilon}(\mathbf{k}_B)}{\partial \varepsilon}$$

gibt an, wie schnell sich umschlossene Fläche $S_{\varepsilon} \perp B$ ändert, wenn wir ε ändern

$$\omega_c(\varepsilon, \mathbf{k}_B) = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S_{\varepsilon}(\mathbf{k}_B)}{\partial \varepsilon} \right)^{-1}$$

Zyklotronfrequenz



9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Zyklotronfrequenz für freie Elektronen

- für freie Elektronen sind die Bahnkurven Kreise

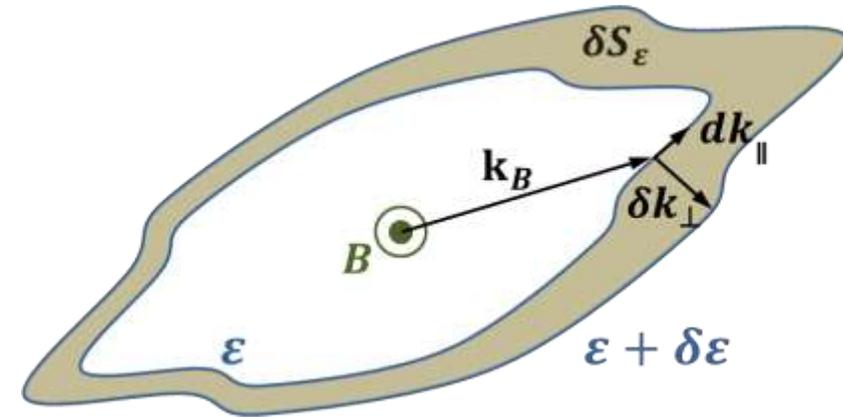
$$\rightarrow \delta S_\varepsilon = 2\pi k_B \delta k_\perp$$

- mit $\delta\varepsilon(k_B) = \frac{\hbar^2(k_B + \delta k_\perp)^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m} \simeq \hbar^2 k_B \delta k_\perp / m$ erhalten wir

$$\omega_c = \frac{2\pi e B}{\hbar^2} \left(\frac{\delta S_\varepsilon(k_B)}{\delta\varepsilon(k_B)} \right)^{-1} = \frac{2\pi e B}{\hbar^2} \frac{\hbar^2 k_B \delta k_\perp / m}{2\pi k_B \delta k_\perp}$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$

(bereits bekanntes Ergebnis für freie Elektronen)



- Zyklotronmasse

- Ergebnis $\omega_c = \frac{2\pi e B}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S_\varepsilon(\mathbf{k}_B)}{\partial\varepsilon} \right)^{-1}$ für Kristallelektronen ist identisch zu dem für freie Elektronen, wenn wir die Zyklotronmasse m_c statt der freien Elektronenmasse verwenden

- Vergleich liefert

$$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S_\varepsilon(\mathbf{k}_B)}{\partial\varepsilon}$$

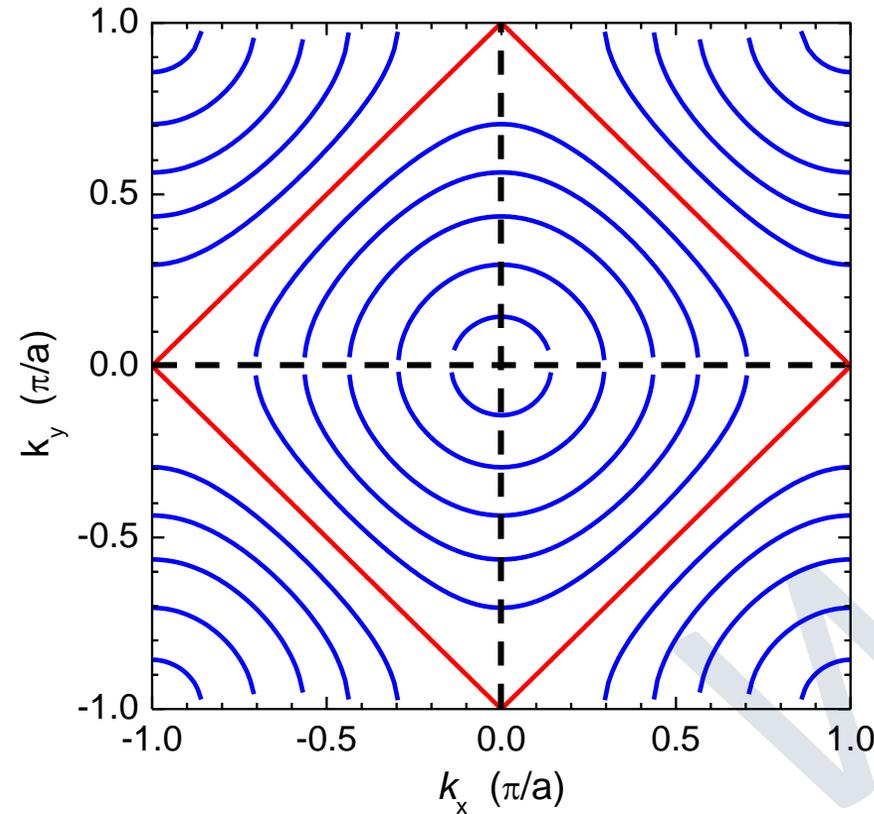
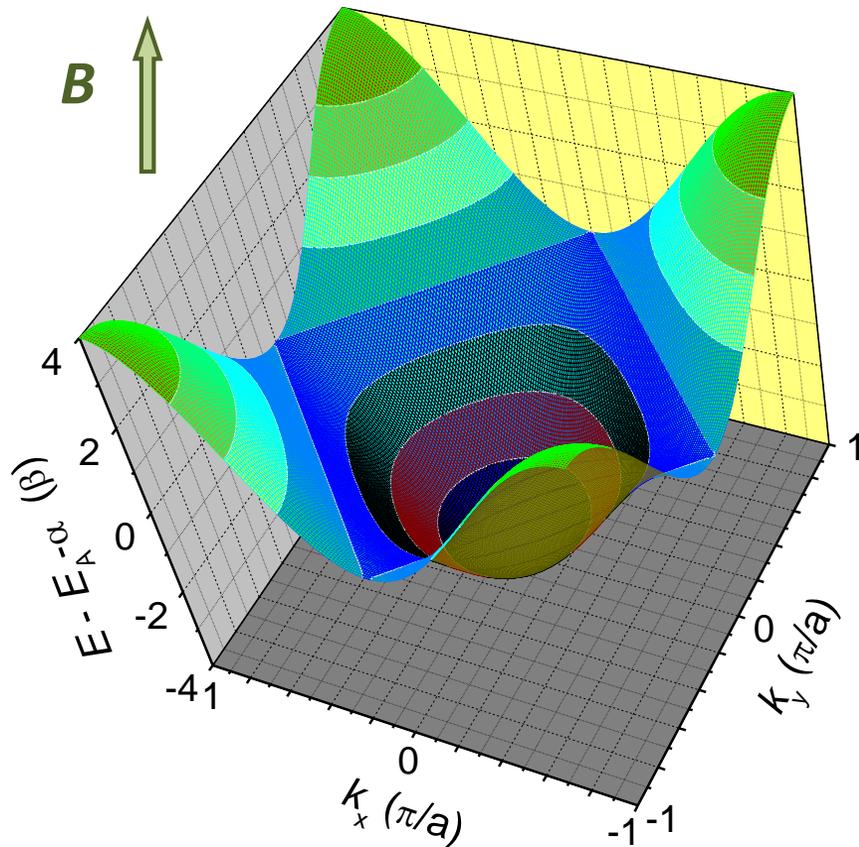
Zyklotronmasse enthält die Energieabhängigkeit der von der Umlaufbahn im k -Raum umschlossenen Fläche und ist nicht notwendigerweise gleich der effektiven Bandmasse m^*

9.2.4 Semiklassische Bewegung in B-Feld

- Zyklotronmasse (Beispiel: 2D Quadratgitter, Tight-Binding Modell)

$$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S_\varepsilon(\mathbf{k}_B)}{\partial \varepsilon}$$

bestimmt durch die Größe der Änderung δS_ε einer Fläche konstanter Energie bei Änderung der Energie um $\delta \varepsilon$



Wichtig:

Flächenänderungen δS_ε sind nicht gleich, wenn wir ε in gleichen Schritten ändern

• *Bewegung von Kristallelektronen (nur ein Band, $T = 0$)*

gefüllte Bänder

$$J_q = \frac{q}{4\pi^3\hbar} \int_{1.BZ} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k = 0$$

elektrische Stromdichte
verschwindet

teilweise gefüllte Bänder

$$J_q = \frac{+q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{besetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k = \frac{-q}{4\pi^3\hbar} \int_{\text{unbesetzt}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k$$

unbesetzte Zustände = fiktive
Teilchen mit Ladung $+e$
→ „Lochkonzept“

• *Eigenschaften von Elektronen und Löchern:*

i. Wellenvektor $\mathbf{k}_h = \Sigma \mathbf{k} - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e$

→ $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$

ii. Energie $\varepsilon_h(\mathbf{k}) = -\varepsilon_e(\mathbf{k})$

→ $\varepsilon_h(\mathbf{k}) = -\varepsilon_e(\mathbf{k})$

iii. effektive Masse (Vorzeichenwechsel bei \mathbf{k} und ε)

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_h = \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{-\partial^2 \varepsilon(k)}{(-\partial k)(-\partial k)} \right] = -\left(\frac{1}{m^*}\right)_e$$

→ $m_h^* = -m_e^*$

iv. Geschwindigkeit (Vorzeichenwechsel bei \mathbf{k} und ε)

$$\mathbf{v}_h(\mathbf{k}_h) = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right]_h = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{-\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{-\partial \mathbf{k}} \right]_e = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$$

→ $\mathbf{v}_h(\mathbf{k}_h) = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$

v. Bewegungsgleichungen

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_e}{dt} = \mathbf{F} = -e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B})$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_h}{dt} = \mathbf{F} = +e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_h \times \mathbf{B})$$

→ „Löcher“ bewegen sich wie
„Teilchen“ mit positiver Ladung

• Elektronen mit negativer effektiver Masse:

Elektronen mit einer negativen Ladung und einer negativen effektiven Masse (e.g. an Oberkante von Band) reagieren auf Kräfte genauso wie ein entsprechendes Teilchen mit einer positiven Ladung und positiven effektiven Masse

• semiklassische Bewegung im homogenen Magnetfeld

Bewegungsgleichungen:

$\varepsilon(\mathbf{k})$ und $\mathbf{k} \parallel \mathbf{B}$ sind
Konstanten der Bewegung

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = (-e)[\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] = \frac{(-e)}{\hbar} [\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)]$$

Bewegung im k-Raum:

- Bewegung erfolgt auf Flächen $\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const.}$, da $\partial \varepsilon / \partial t = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = (-e)[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \cdot \mathbf{v} = 0$
- Bahnkurven liegen in Ebene senkrecht zu \mathbf{B}

Bewegung im Ortsraum:

- Bahn in Ebene $\perp \mathbf{B} \Leftrightarrow$ der um 90° gedrehten und mit \hbar/eB skalierten Bahn im k-Raum
- gleichförmige Bewegung parallel zu \mathbf{B}

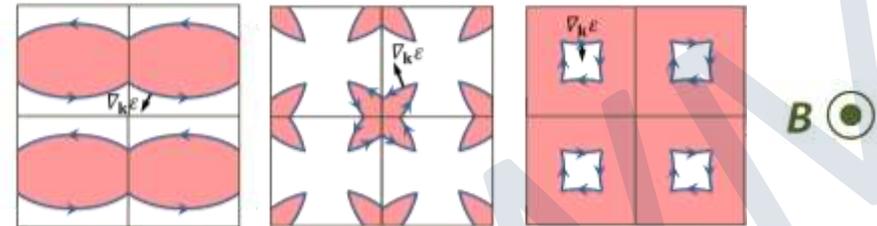
Elektron- und lochartige Bahnen:

- Umlaufsinn gegen (elektronartig) und im Uhrzeigersinn (lochartig)

• offene und geschlossene Bahnen

abhängig davon, ob Fermi-Fläche innerhalb der BZ offen oder geschlossen ist

- freie Elektronen: nur geschlossene Bahnen → Kreise



• Zyklotron-Frequenz

Umlauffrequenz der Kristallelektronen auf $\varepsilon(\mathbf{k}) = \text{const}$ – Fläche \perp Feldrichtung

- freie Elektronen: $\omega_c = eB/m$

- Bandelektronen: $\omega_c = eB/m_c$

$$\omega_c = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \left(\frac{\partial S_\varepsilon(\mathbf{k}_B)}{\partial \varepsilon} \right)^{-1}$$

$$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S_\varepsilon(\mathbf{k}_B)}{\partial \varepsilon}$$

**Zyklotron
Masse**

