



Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 18**

Vorlesungsstunde: 14.01.2021

• freies Elektronengas, thermische Leitfähigkeit:

$$\mathbf{J}_h = -\kappa \nabla T$$

$$\kappa = \frac{1}{3} c_V v^2 \tau \quad (\text{äquivalent zu Phononengas})$$

$$c_V = \frac{\pi^2}{2} \frac{n k_B^2}{E_F} T \quad \rightarrow \quad v^2 \approx v_F^2 = \frac{2E_F}{m} = \frac{2k_B T_F}{m}$$

$$\rightarrow \quad \kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{n k_B^2 \tau}{m} T$$

• freies Elektronengas, T-Abhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit:

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{n k_B^2 \tau}{m} T$$

$$\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m}$$

$$\tau = \tau(T)$$

(gleiche Streuprozesse bestimmen Wärme- und Ladungstransport)

Wiedemann-Franz-Gesetz:

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T$$

Lorenz-Zahl: $L = 2.44 \times 10^{-8} \frac{\text{W}}{\Omega \cdot \text{K}^2}$

T-Abhängigkeit

$$\kappa = L \sigma(T) \cdot T \propto \begin{cases} T & \text{für } T \ll \ll \Theta_D \\ T^{-4} & \text{für } T \ll \Theta_D \\ \text{const.} & \text{für } T \gg \Theta_D \end{cases}$$

• Thermokraft/Seebeck-Effekt:

Elektronen bewegen sich in T-Gradient im Mittel von heiß nach kalt

→ Elektronenmangel an heißem Ende

→ Elektronenüberschuss an kaltem Ende

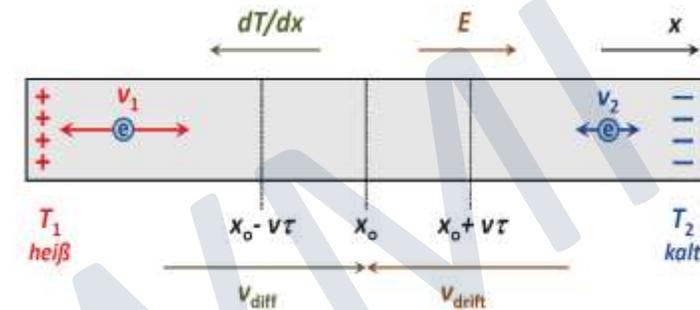
⇒ ∇T ist mit elektrischem Feld \mathbf{E} verknüpft: $\mathbf{E} \equiv \mathbf{S} \nabla T$ $\mathbf{S} = \text{Seebeck-Koeffizient}$

– im stationären Fall ist der Betrag der **Diffusionsgeschwindigkeit** und der **Driftgeschwindigkeit** gleich

$$\mathbf{v}_{\text{diff}} = -\frac{\tau}{6} \frac{dv^2}{dT} \nabla T = -\mathbf{v}_{\text{drift}} = -\mu \mathbf{E} = \frac{e\tau}{m} \mathbf{E} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{3e} \frac{c_V}{n} \nabla T \quad \Rightarrow \quad S = -\frac{\pi^2}{6} \frac{k_B}{e} \frac{T}{T_F} = -142 \frac{\mu\text{V}}{\text{K}} \cdot \frac{T}{T_F}$$

– für einfache Metalle: $S < 0$ in Größenordnung von **-1 $\mu\text{V}/\text{K}$ @ 300 K**

– für einige Metalle: $S > 0$ → **Modell des freien Elektronengases zu einfach!!** → **Elektronen im periodischen Potenzial/Bändermodell**



• **freies Elektronengas - Elektronenbewegung in E- und B-Feld:**

Kraft $\mathbf{F} = -e [\mathbf{E} + \langle \mathbf{v} \rangle \times \mathbf{B}]$ stationärer Zustand: $\frac{d\langle \mathbf{k} \rangle}{dt} = 0 \Rightarrow \frac{\mathbf{F}}{\hbar} = \frac{\langle \delta \mathbf{k} \rangle}{\tau} = \frac{-e[\mathbf{E} + \langle \mathbf{v} \rangle \times \mathbf{B}]}{\hbar}$

$\Rightarrow \langle \mathbf{v} \rangle = \mathbf{v}_D = \frac{\hbar \langle \delta \mathbf{k} \rangle}{m} = -\frac{e\tau}{m} [\mathbf{E} + \mathbf{v}_D \times \mathbf{B}] \quad \mathbf{J}_q = -en\mathbf{v}_D$

Leitfähigkeitstensor für $B \parallel z$:

$$\begin{pmatrix} J_{q,x} \\ J_{q,y} \\ J_{q,z} \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ +\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_c^2 \tau^2 \end{pmatrix}}_{\text{Leitfähigkeitstensor}} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m} = 1.76 \times 10^{11} \text{ s}^{-1} \cdot B \text{ [T]}$$

Zyklotron-Frequenz

• **Hall-Effekt** (Randbedingung: $J_{q,y} = 0$)

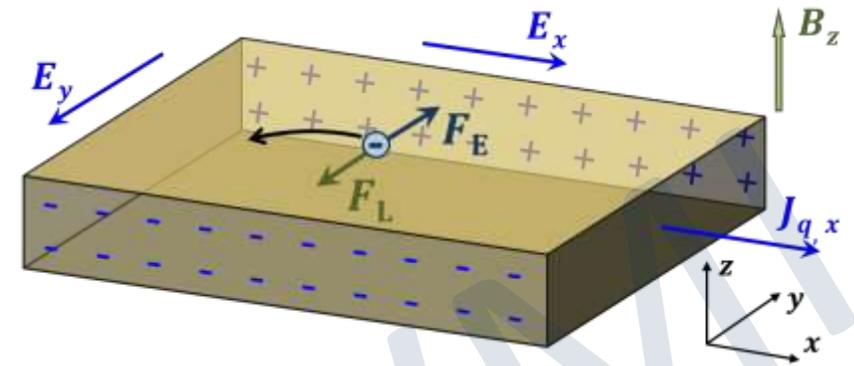
$$J_{q,y} = 0 = \omega_c \tau E_x + E_y \Rightarrow E_y = R_H B J_{q,x}$$

$$R_H = -\frac{1}{ne} \quad \text{Hall-Konstante}$$

$$\rho_{xy} = \frac{E_y}{J_{q,x}} = R_H B \quad \text{spez. Hall-Widerstand}$$

$$\tan \theta_H = \frac{E_y}{E_x} = R_H \sigma_0 = -\mu B$$

Hall-Winkel



• **Magnetwiderstand MR: $\rho = \rho(B)$**

\rightarrow **MR-Effekt:** $\frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = \frac{\Delta \rho}{\rho(0)}$

kann positiv ($\Delta \rho > 0$) oder negativ ($\Delta \rho < 0$) sein

longitudinaler Magnetwiderstand $\rho_{\parallel} : B \parallel J_q$
 transversaler Magnetwiderstand $\rho_{\perp} : B \perp J_q$

kein transversaler MR für freies Elektronengas erwartet: $\rho(B) = \text{const}$

\rightarrow genauere Beschreibung notwendig: Bändermodell

\rightarrow zahlreiche MR-Effekte in magnetischen und nichtmagn. Materialien

7.4.1 Zweidimensionales Elektronengas

- wir betrachten Elektronengas das nur in einer (z-) Richtung durch unendlich hohe Potentialwalle eingeschrankt wird
 → Reduktion des Elektronengases auf 2 Raumdimensionen: zweidimensionales Elektronengas (2 DEG)

- Energiequantisierung

- mogliche Wellenlangen/Wellenzahlen in z-Richtung

$$\lambda_{n_z} = \frac{2L_z}{n_z}, \quad n_z = 1, 2, 3, \dots$$

$$k_{n_z} = \frac{2\pi}{\lambda_{n_z}} = \frac{\pi}{L_z} n_z, \quad n_z = 1, 2, 3, \dots$$

- zugehorige Eigenenergien

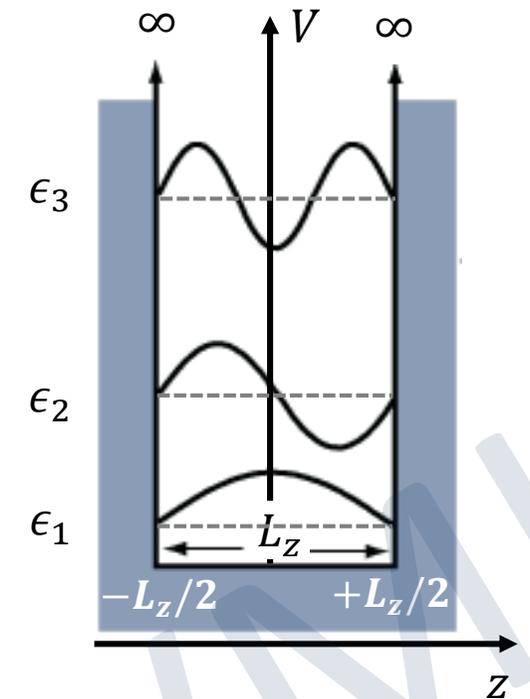
$$\epsilon_{n_z} = \frac{\hbar^2 k_{n_z}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2 n_z^2$$

- im Vergleich zu Fall ohne Einschrankung findet eine Energieerhohung statt

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2$$

Confinement-Energie

(wachst $\propto 1/L^2$ an)



7.4.1 Zweidimensionales Elektronengas

- Wellenfunktionen und Eigenenergien

- Schrödinger-Gleichung $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(z) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$ mit $V(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } -\frac{L_z}{2} \leq z \leq +\frac{L_z}{2} \\ \infty & \text{für } |z| > \frac{L_z}{2} \end{cases}$

- Lösungsansatz $\Psi(\mathbf{r}) = \phi_{n_z}(z) e^{i(k_x x + k_y y)} = \phi_{n_z}(z) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}}$

$$\textcircled{1} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}} = E_{\parallel} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}} \quad \textcircled{2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \phi_{n_z}(z) = \epsilon_{n_z} \phi_{n_z}(z)$$

1 ebene Wellen mit bekannten Eigenenergien $E_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m}$

2 stehende Welle innerhalb des Potenzialtopfs, verschwindende Welle außerhalb des Potenzialtopfs

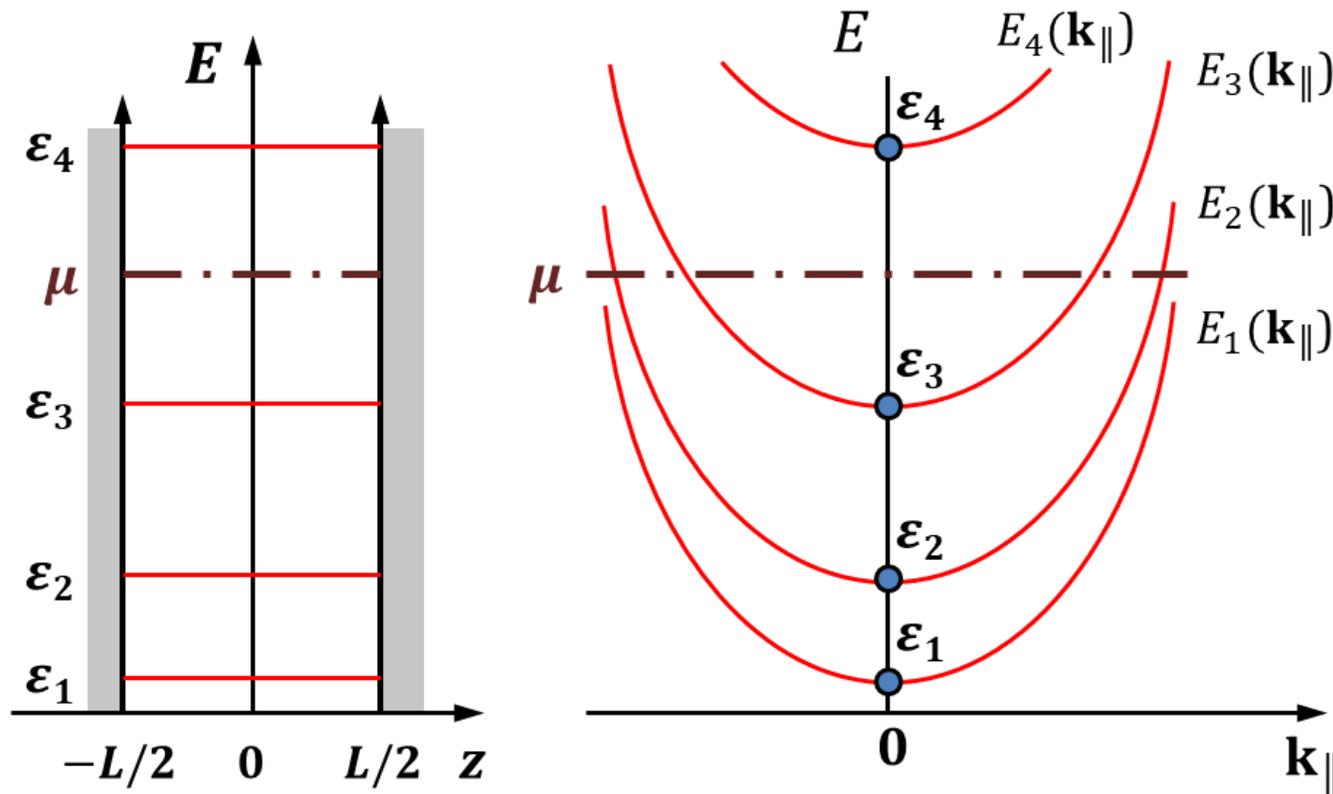
$$\phi_{n_z}(z) = \begin{cases} A_{n_z} (e^{ik_{n_z} z} + e^{-ik_{n_z} z}) & \text{für } -\frac{L_z}{2} \leq z \leq +\frac{L_z}{2} \\ 0 & \text{für } |z| > \frac{L_z}{2} \end{cases}$$

mit $\epsilon_{n_z} = \frac{\hbar^2 k_{n_z}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2 n_z^2$

- Eigenenergien: $E_{n_z} = E_{\parallel} + \epsilon_{n_z} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2 n_z^2$

7.4.1 Zweidimensionales Elektronengas

- Eigenenergien



$$E_{n_z} = E_{||} + \epsilon_{n_z} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{||}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2 n_z^2$$

- parabelförmige Dispersion in $k_{||}$ - Richtung mit Scheitelenergien ϵ_{n_z}
- Abstand der Subbänder wird für kleine L_z sehr groß

→ **2D-Subbänder**

→ **nur wenige Subbänder sind besetzt**

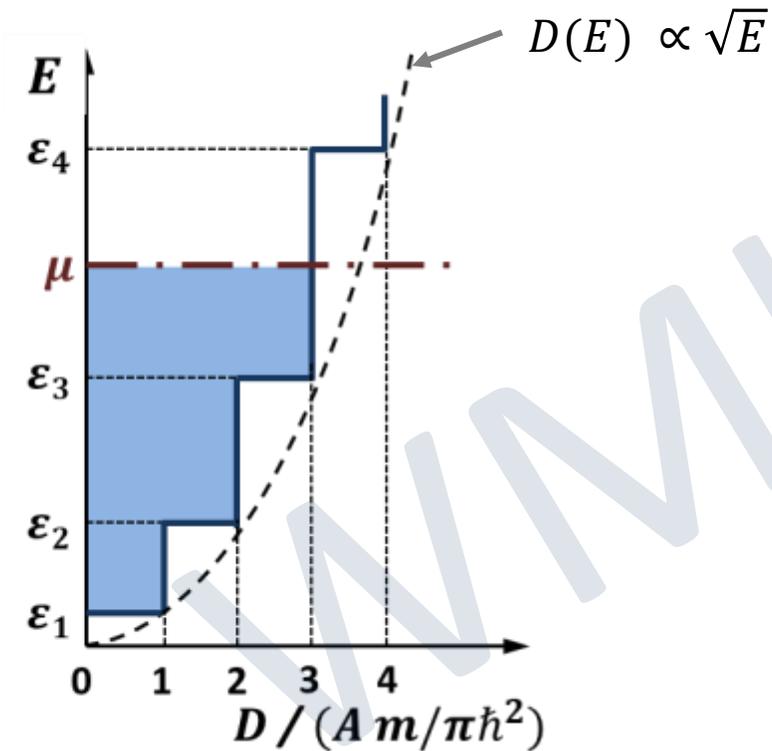
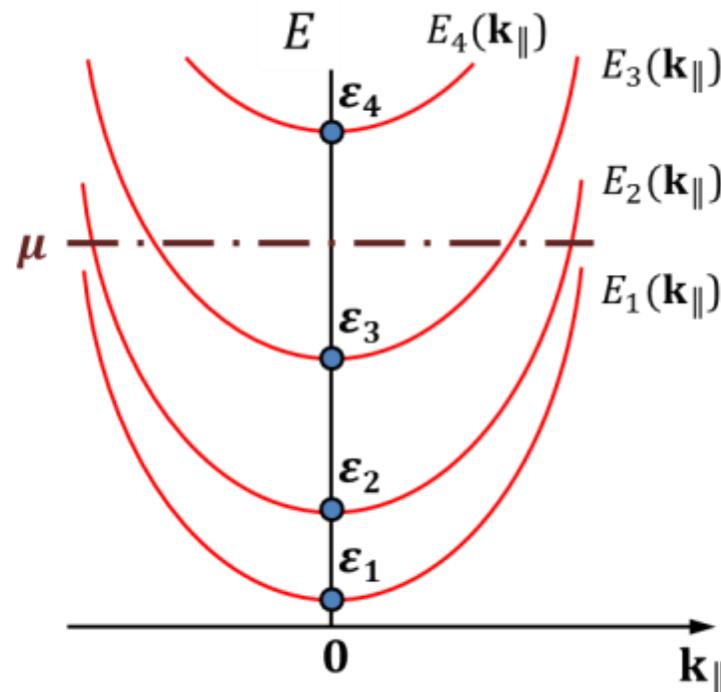
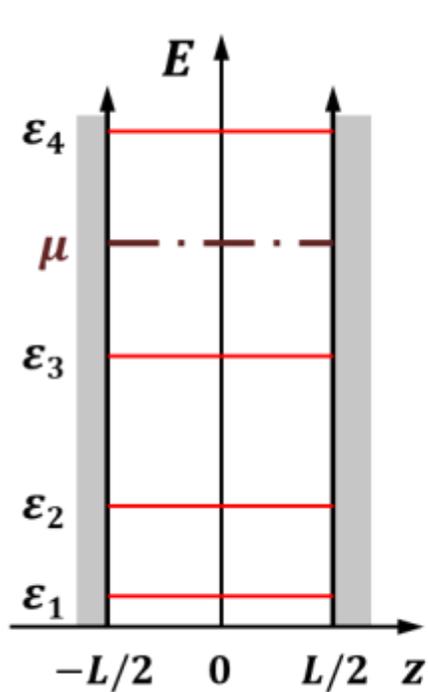
7.4.1 Zweidimensionales Elektronengas

- Zustandsdichte der zweidimensionalen Subbänder ist konstant

$$D_{n_z}^{(2D)} = \begin{cases} \frac{A}{2\pi} \frac{2m}{\hbar^2} & \text{für } E \geq \epsilon_{n_z} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

gesamte Zustandsdichte

$$D(E) = \sum_{n_z} D_{n_z}^{(2D)}(E)$$



7.4.1 Zweidimensionales Elektronengas

- Was passiert bei endlich hohen Potenzialwänden?

- Lösung $\phi_{n_z}(z)$ verschwindet außerhalb des Potenzialtopfs nicht vollkommen

$$\phi_{n_z}(z) = \begin{cases} a_{n_z} e^{\kappa z} & \text{für } z < -\frac{L_z}{2} \\ a_{n_z} e^{-\kappa z} & \text{für } z > +\frac{L_z}{2} \end{cases}$$

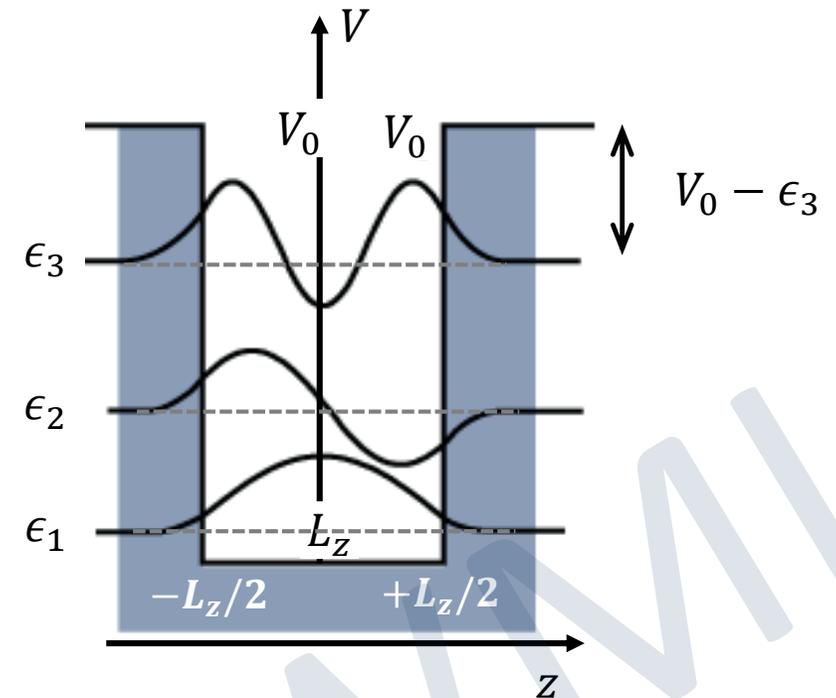
- charakteristische Abklinglänge κ^{-1}

$$\kappa = \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - (E - E_{||})] = \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - \epsilon_{n_z}]$$

- Lösung $\Psi = \phi_{n_z}(z) e^{i\mathbf{k}_{||}\cdot\mathbf{r}}$ beschreibt eine **evaneszente Welle**

➔ *freie Ausbreitung parallel zum Potenzialwall*

➔ *exponentielles Abklingen senkrecht zum Potenzialwall*



7.4.2 Eindimensionales Elektronengas

- wir betrachten Elektronengas, das in zwei (z- und y-) Richtungen durch unendlich hohe Potentialwalle eingeschrankt wird
 → **eindimensionales Elektronengas (1 DEG, Quantendraht)**

– Losungsansatz $\Psi(\mathbf{r}) = \phi_{n_z, n_y}(y, z) e^{ik_x x}$

– Eigenenergien

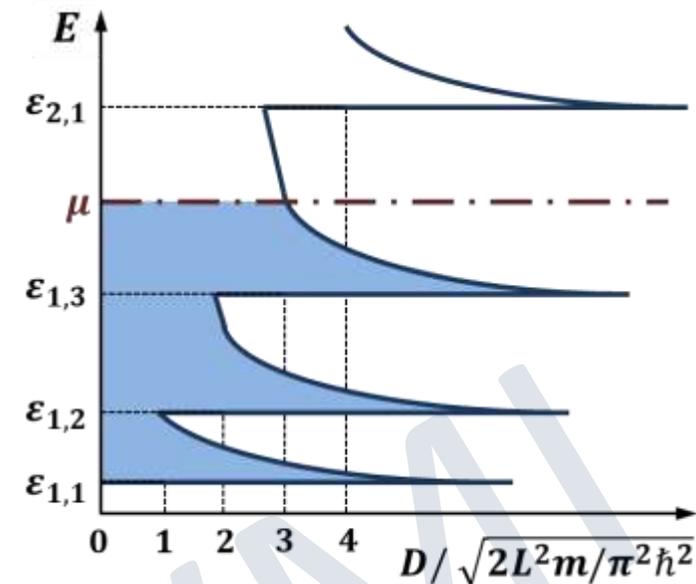
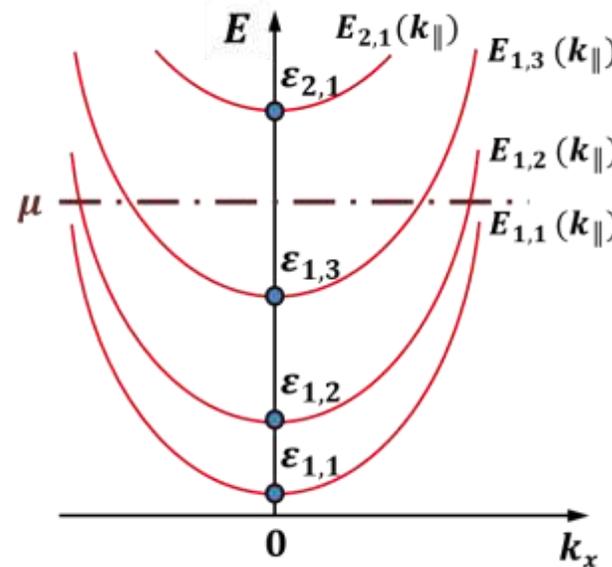
$$E_{n_y, n_z} = E_{||} + \epsilon_{n_y} + \epsilon_{n_z} = E_{||} + \epsilon_{n_y, n_z}$$

$$E_{n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_y} \right)^2 n_y^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2 n_z^2$$

– Zustandsdichte

$$D(E) = \sum_{n_y, n_z} D_{n_y, n_z}^{(1D)}(E)$$

$$D_{n_y, n_z}^{(1D)} = \begin{cases} \frac{L}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} (E - \epsilon_{n_y, n_z})^{-1/2} & \text{fur } E \geq \epsilon_{n_y, n_z} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$



parabelformige Dispersion in k_x - Richtung mit Scheitelenergien ϵ_{n_y, n_z} → **1D-Subbander**

7.4.2 Nulldimensionales Elektronengas

- wir betrachten Elektronengas, das in alle 3 Raumrichtungen durch unendlich hohe Potentialwalle eingeschrankt wird
 → **nulldimensionales Elektronengas (0 DEG, Quantenpunkt)**

– Eigenenergien

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \epsilon_{n_x} + \epsilon_{n_y} + \epsilon_{n_z}$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_x} \right)^2 n_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_y} \right)^2 n_y^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2 n_z^2$$

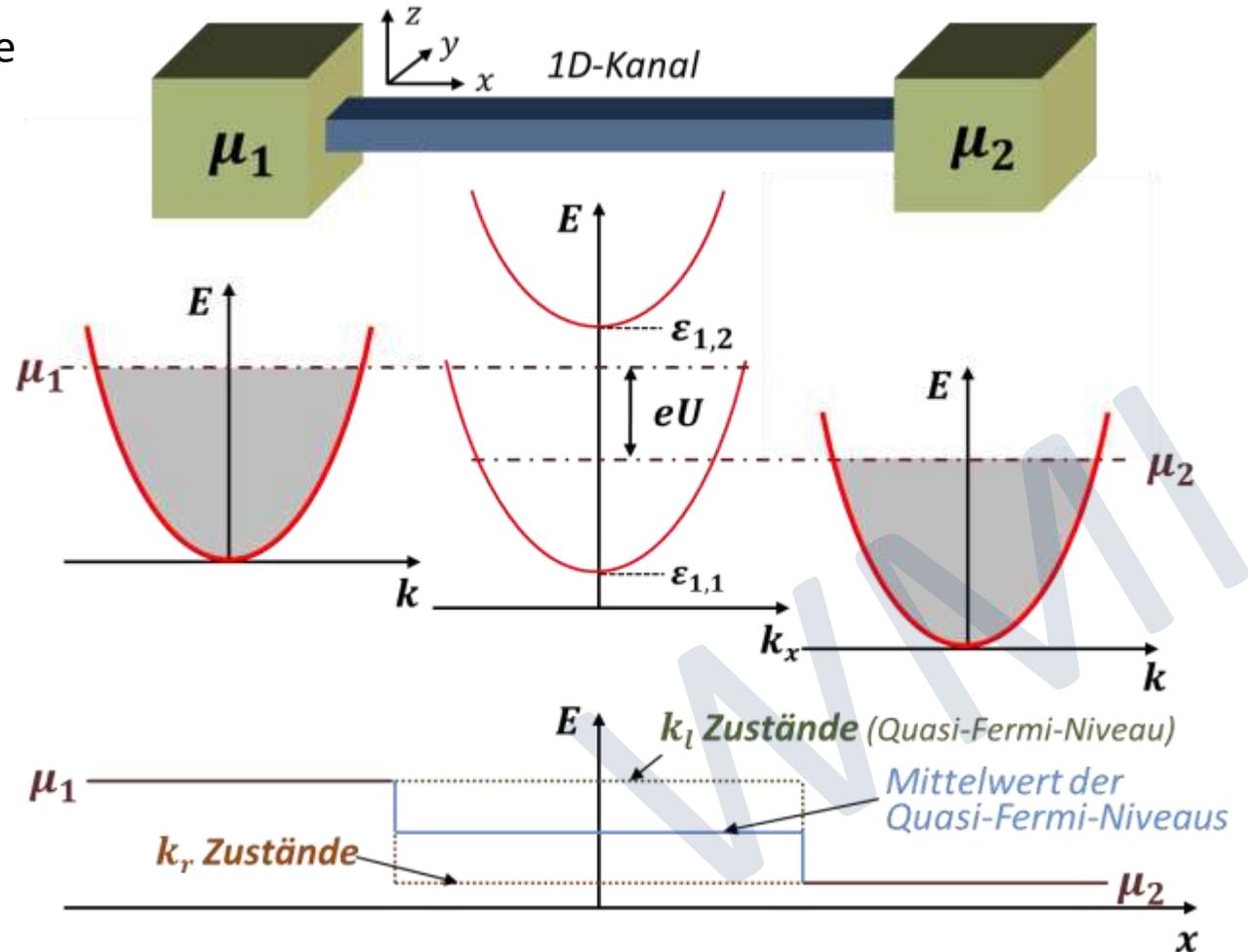
diskretes Energiespektrum wie bei Atomen
 → **kunstliche Atome**

- niedrigdimensionale Elektronengase besitzen interessante Transporteigenschaften
 - **2D Elektronengas:** **Quanten-Hall-Effekt, Basis fur HEMT,...**
 - **1D Elektronengas:** **Quantisierung des elektrischen und thermischen Leitwerts, ...**
 - **0D Elektronengas:** **Coulomb-Blockade, Basis fur Einzelelektronentransistor, ...**
- nachfolgend nur Diskussion der Quantisierung des elektrischen Leitwerts

7.5 Transporteigenschaften von 1 DEG

- wir diskutieren ballistischen Transport durch idealen eindimensionalen Leiter
 - ballistischer Transport: Transmissionswahrscheinlichkeit durch eindimensionalen Kanal ist $T = 1$ (keine Rückstreuung, idealer Leiter)
 - Reservoire können unterschiedliche chemische Potenziale besitzen:

Spannung
$$U = \frac{\mu_1 - \mu_2}{e}$$



- in Transportkanal kann aufgrund fehlender Streuprozesse kein thermisches Gleichgewicht zwischen den von links und rechts injizierten LT erreicht werden
- es kann kein chemisches Potenzial angegeben werden
 - Quasi-Fermi-Niveaus

7.5 Transporteigenschaften von 1 DEG

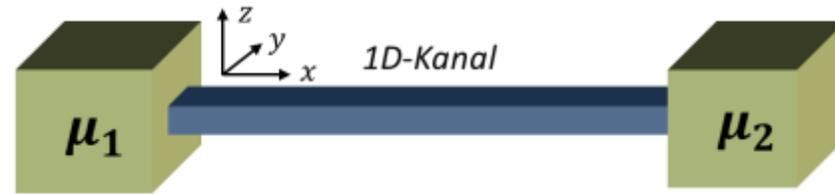
- wir starten mit allgemeinem Ausdruck für elektrische Stromdichte

$$J_{q,x} = \left(\frac{N(-e)}{V} \right) \langle v_x \rangle = -en \langle v_x \rangle = -en \frac{\hbar}{m} \langle k_x \rangle = -en \frac{\hbar}{m} \frac{1}{N} \sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x} = -\frac{e \hbar}{V m} \sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x}$$

- wir benutzen $I_{q,x} = J_{q,x} A$ und $V = A \cdot L$ ($A =$ Querschnittsfläche, $L =$ Länge des Leiters)

$$I_{q,x} = -\frac{e \hbar}{L m} \sum_{k_x, \sigma} k_x f_{k_x} = -\frac{e \hbar}{L m} \sum_{k_x, \sigma} [k_x f_{k_x}^l - k_x f_{k_x}^r]$$

Differenz der von links und rechts in den Leiter injizierten Ladungsträger



- Übergang von Summation zu Integration mit $Z^{(1D)} = L/2\pi$ (Faktor 2 durch Summation über Spinrichtungen)

$$I_{q,x} = -\frac{e \hbar}{L m} \sum_{k_x, \sigma} [k_x f_{k_x}^l - k_x f_{k_x}^r] = -\frac{2e \hbar}{L m} \frac{L}{2\pi} \int_0^{\infty} [k_x f_{k_x}^l - k_x f_{k_x}^r] dk_x = -\frac{2e \hbar}{2\pi m} \int_0^{\infty} [k_x f_{k_x}^l - k_x f_{k_x}^r] dk_x$$

7.5 Transporteigenschaften von 1 DEG

- Übergang von Integration über k_x zu Integration über E (wir benutzen $dE = (\hbar^2 k_x / m) dk_x$ und damit $dk_x = \frac{m}{\hbar^2 k_x} dE$)

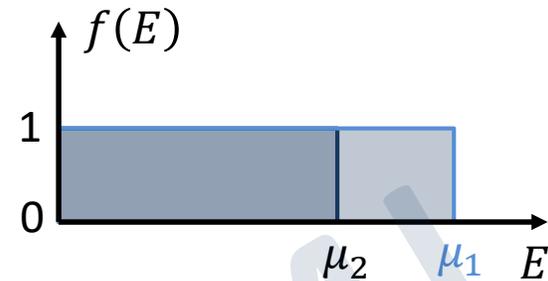
$$I_{q,x} = -\frac{2e\hbar}{2\pi m} \int_0^\infty [k_x f_{k_x}^l - k_x f_{k_x}^r] dk_x = -\frac{2e\hbar}{2\pi m} \int_0^\infty [k_x f_{k_x}^l - k_x f_{k_x}^r] \frac{m}{\hbar^2 k_x} dE = -\frac{2e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty [f^l(E) - f^r(E)] dE$$

→ k_x und damit die Gruppengeschwindigkeit $v_x = \hbar k_x / m$ fällt gerade heraus !!

- mit $f^l(E) = f(E - \mu_1)$ und $f^r(E) = f(E - \mu_2)$ erhalten wir

$$I_{q,x} = -\frac{2e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty [f^l(E) - f^r(E)] dE = -\frac{2e}{h} \int_0^\infty [f(E - \mu_1) - f(E - \mu_2)] dE$$

$= \mu_1 - \mu_2 = (-e)U$



→ $I_{q,x} = 2 \frac{e^2}{h} U = 2 G_Q U$

$$G_Q^{-1} = R_Q = \frac{h}{e^2} = 25\,881.8 \, \Omega$$

Klitzing-Konstante

Leitwert bzw. Widerstand eines idealen eindimensionalen Transportkanals ist durch Naturkonstante gegeben

- bei Transmissionswahrscheinlichkeit $T < 1$: $G = 2 \frac{e^2}{h} T < 2 G_Q$

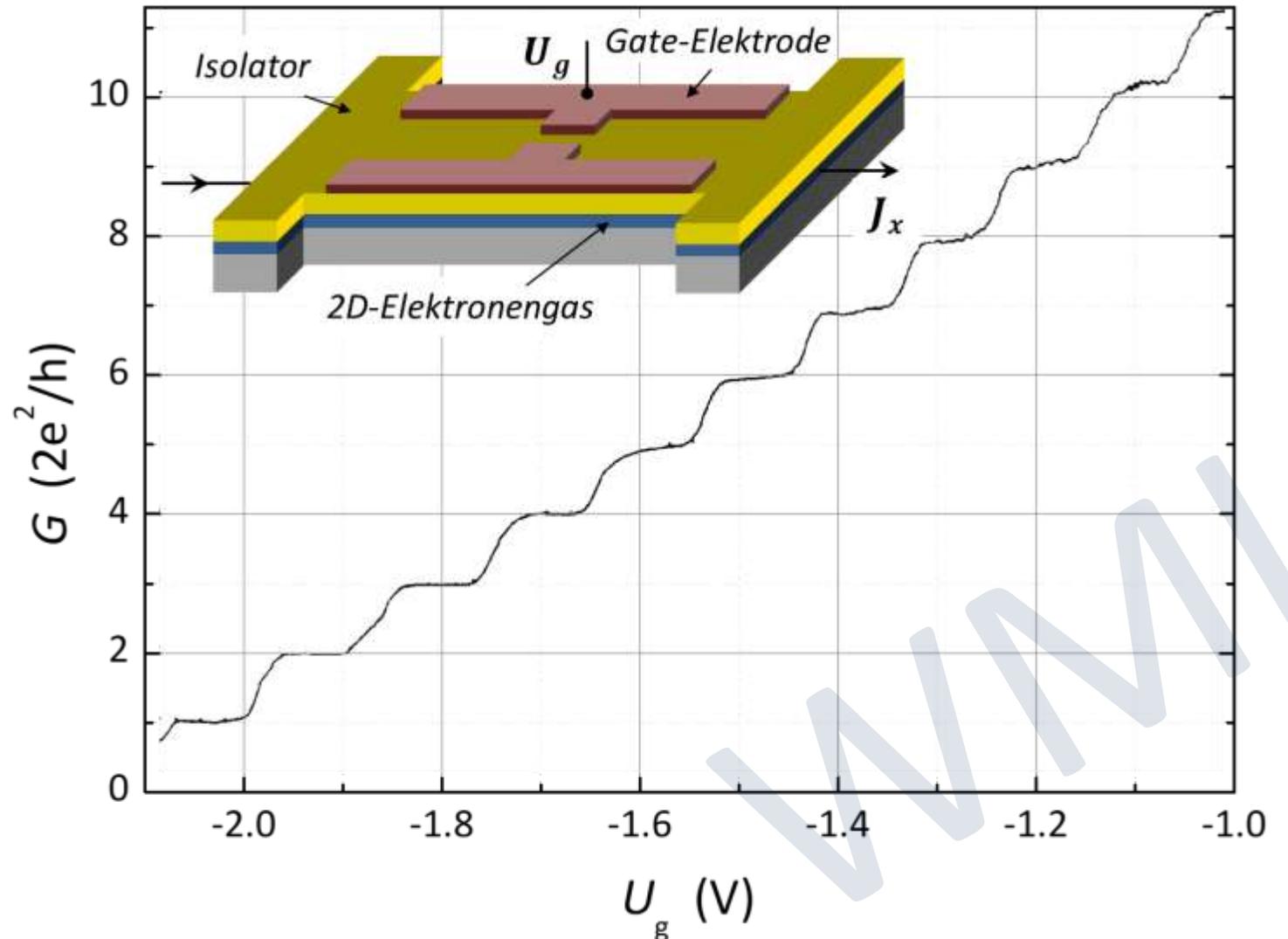
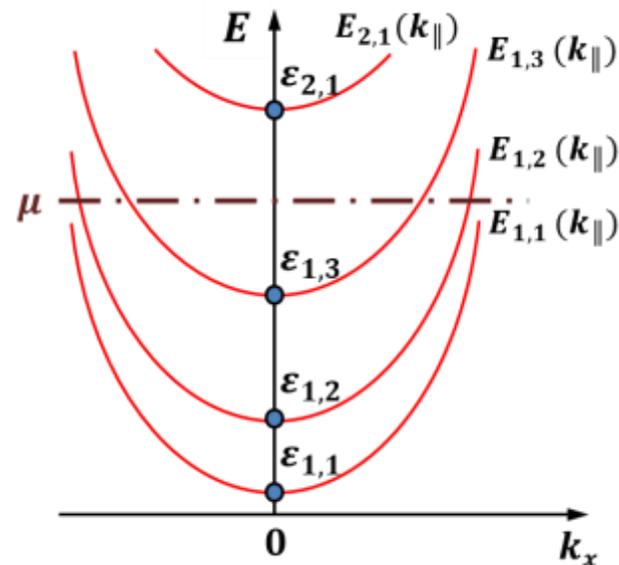
7.5 Transporteigenschaften von 1 DEG

- experimentelle Bestätigung mit Quantendraht in Halbleiterprobe

mit Gate-Spannung kann Breite des Quantendrahts variiert und so nacheinander ein zusätzlicher Transportkanal geöffnet werden

→ pro Transportkanal kommt Leitwert

$$2G_Q = 2 \frac{e^2}{h} \text{ hinzu}$$



8 Energiebänder

- bisher wurde Gas vollkommen freier Elektronen ($V = 0$) betrachtet
 - reicht zur qualitativen Beschreibung zahlreicher Eigenschaften von Metallen vollkommen aus:
 - spezifische Wärme des Elektronensystems
 - thermische und elektrische Leitfähigkeit
 - Wiedemann-Franz-Gesetz
 - negative Hall-Konstante der „einfachen“ Metalle
 - negative und kleine Werte des Seebeck-Koeffizienten der „einfachen“ Metalle

 - viele Eigenschaften von Festkörpern können aber nicht zufriedenstellen oder gar nicht erklärt werden
 - Wieso sind manche Festkörper Metalle, andere aber Halbleiter oder Isolatoren?
 - Was bestimmt die Anzahl der Valenzelektronen?
 - Wieso messen wir manchmal positive Werte für die Hall-Konstante oder Thermokraft?
 - Wie können wir die gemessene T - und B -Abhängigkeit der Hall-Konstante erklären?
 - Wie erklären wir die beobachteten optischen und Magnetotransporteigenschaften?
- ➔ Erweiterung des Modells freier Elektronen
 - ➔ Berücksichtigung des **periodischen Kristallpotenzials $V(r)$**

8 Energiebänder

- Übergang von freien Elektronen zu Kristallelektronen

freies Elektronengas



langweilig !!

plus gitterperiodisches Potenzial

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$



Erhöhung des Spaßfaktors !!

- Übergang von freien Elektronen zu Kristallelektronen
 - Berücksichtigung des **periodischen Kristallpotenzials** $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \neq 0$
 - ➔ keine *völlig freien Elektronen* ($V(\mathbf{r}) = 0$) mehr
 - ➔ nach wie vor gehen wir von *völlig unabhängigen Elektronen* aus (keine Elektron-Elektron-Wechselwirkung)
 - Festkörper = Gitter aus starren Atomrümpfen, durch das sich Elektronen völlig unkorreliert bewegen können (Ski-Fahrer in Buckelpiste)
 - Bewegung von einzelnen Elektronen in periodischem Potenzial
 - ➔ Einelektronennäherung (**Bloch, Sommerfeld, Bethe, Mott**)
 - Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein Elektron in periodischem Potenzial
 - ➔ Auffüllen der erhaltenen Eigenzustände unter Berücksichtigung von Pauli-Prinzip



8 Energiebänder

- zwei Betrachtungsweisen:

- **Näherung quasi-freier Elektronen**

Ausgangspunkt ist freies Elektronengas + periodisches Gitterpotenzial als kleine Störung

- **Näherung quasi-gebundener Elektronen (Tight-Binding Methode)**

Ausgangspunkt sind gebundene Elektronen + Hüpfen zu nächsten Nachbarn als Störung

WMI



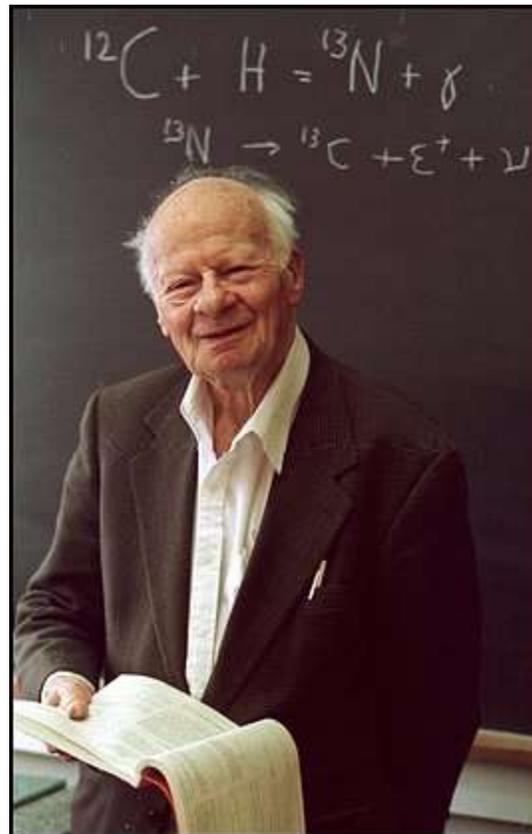
als Student in Königsberg 1889



1897 in Göttingen

Arnold Sommerfeld

Schüler: u.a. Werner Heisenberg, Wolfgang Pauli, Peter Debye, Hans Bethe, Isidor Isaac Rabi, Linus Carl Pauling.



Hans Albrecht Bethe

geboren am 02. Juli 1906 in Straßburg, gestorben am 6. März 2005 in Ithaca, New York.

Nobelpreis für Physik (1967)

....*"for his contributions to the theory of nuclear reactions, especially his discoveries concerning the energy production in stars"*



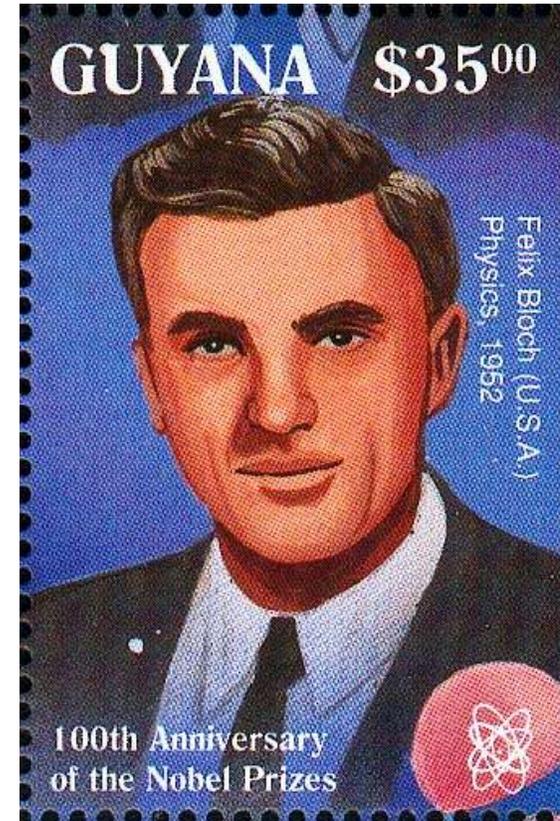
Sir Neville Francis Mott

geboren am 30. September 1905 in Leeds, GB, gestorben am 08. August 1996 in Milton Keynes, GB

Nobelpreis für Physik (1977)

„für die grundlegenden theoretischen Leistungen zur Elektronenstruktur in magnetischen und ungeordneten Systemen“

(gemeinsam mit Philip Warren Anderson und John Hasbrouck van Vleck)



Felix Bloch

geboren am 23. Oktober 1905 in Zürich, gestorben am 10. September 1983 in Zürich

Felix Bloch, Doktorarbeit (1928): „*Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*“

Nobelpreis für Physik (1952)

.....„für ihre Entwicklung verfeinerter und vereinfachter Methoden zur Messung magnetischer Kraftfelder im Atomkern,,
(gemeinsam mit Edward Mills Purcell)

8.1 Bloch-Elektronen

- Schrödinger-Gleichung für Elektronen in gitterperiodischem Potenzial

Felix Bloch, Doktorarbeit (1928)

$$\mathcal{H} \Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$$

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (\text{gitterperiodisches Potenzial})$$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad n_1, n_2, n_3 = \text{ganzzahlig} \\ (\text{Gittervektor})$$

- Entwicklung des Potenzials in Fourier-Reihe

→ Transformation der Schrödinger-Gleichung in den reziproken Raum

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad \mathbf{G} = h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3 \quad h, k, \ell = \text{ganzzahlig} \quad (\text{reziproker Gittervektor})$$

Hinweis:

Die Koeffizienten $V_{\mathbf{G}}$ in der Fourier-Reihe nehmen für ein Coulomb-Potenzial $\propto 1/G^2$ ab, weshalb in der Reihenentwicklung meist nach wenigen Termen abgebrochen werden kann

- allgemeiner Lösungsansatz: Linearkombination ebener Wellen

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

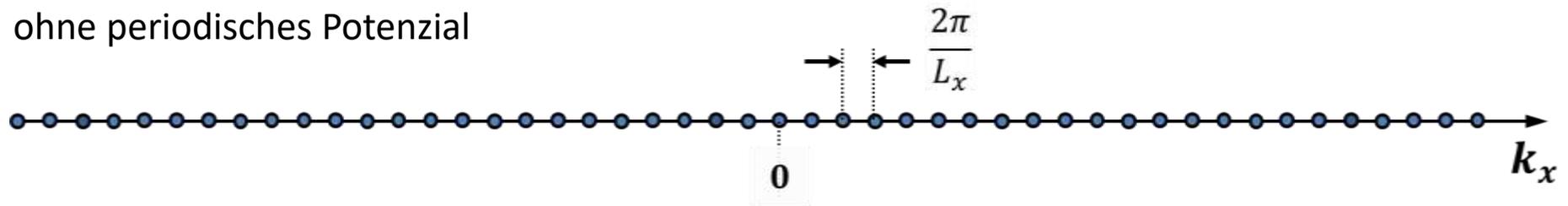
8.1 Bloch-Elektronen

- Wellenzahlen müssen periodische Randbedingungen erfüllen:

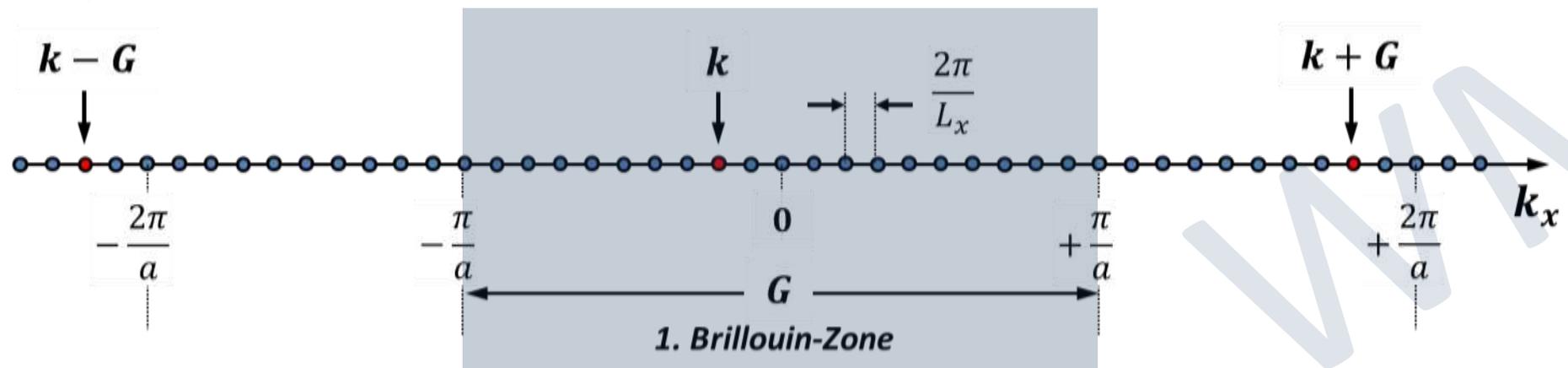
$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z \quad \text{mit } n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

ohne periodisches Potenzial



mit periodischem Potenzial



8.1 Bloch-Elektronen

- Einsetzen des Lösungsansatzes $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ in Schrödinger-Gl. $\mathcal{H} \Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{G}} C_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{G}} e^{i (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} = E \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

- Umbenennung der Summationsindizes: $k \rightarrow k - G$ im 2. Term
(Umbenennung ändert nicht den Wert der Summationsglieder, sondern nur ihre Reihenfolge)

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k} - \mathbf{G}} \right] = 0$$

- da dies für alle \mathbf{r} erfüllt sein muss, muss Ausdruck in [] für alle \mathbf{k} verschwinden

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k} - \mathbf{G}} = 0$$

- Satz von algebraischen Gleichungen entspricht **Darstellung von Schrödinger-Gleichung im k -Raum**
- wir erhalten für jeden Wellenvektor \mathbf{k} eine Lösung $\Psi_{\mathbf{k}}$ mit Eigenwert $E_{\mathbf{k}}$
- Satz von Gleichungen erscheint unhandlich, da wir unendlich viele Koeffizienten $C_{\mathbf{k} - \mathbf{G}}$ bestimmen müssen
→ Praxis zeigt, dass bereits kleine Zahl ausreichend ist

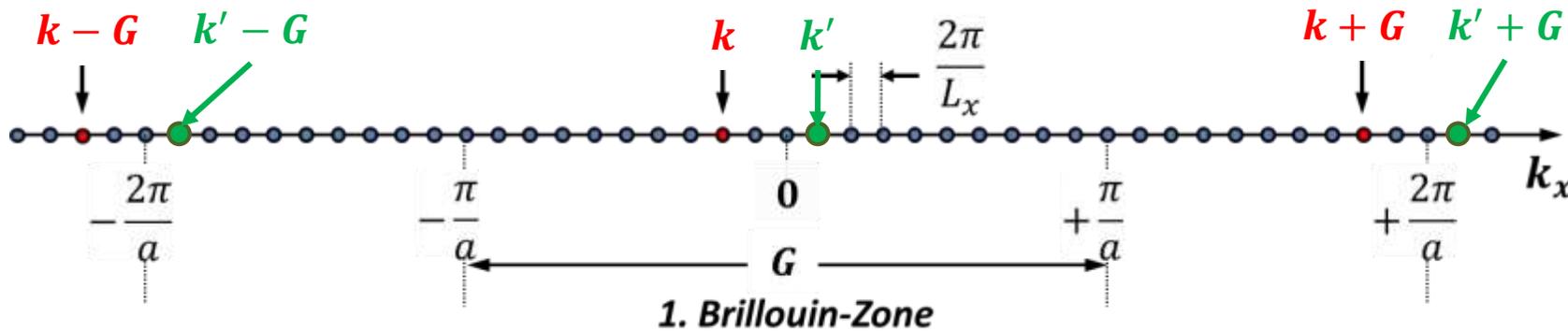
8.1 Bloch-Elektronen

- im algebraischem Gleichungssystem werden nur die Entwicklungskoeffizienten C_k von Ψ_k gekoppelt, deren k -Werte sich um einen reziproken Gittervektor G unterscheiden:

$$\dots \leftrightarrow C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}'} \leftrightarrow C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} \leftrightarrow C_{\mathbf{k}} \leftrightarrow C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} \leftrightarrow C_{\mathbf{k}+\mathbf{G}'} \leftrightarrow \dots$$

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$



- Gleichungssystem zerfällt in N unabhängige Gleichungssysteme, und zwar eines für jeden erlaubten k -Wert aus der 1. Brillouin-Zone

$$\text{Zahl der } k\text{-Werte (1D): } N = \frac{V_{\text{BZ}}}{2\pi/L} = \frac{2\pi/a}{2\pi/L} = \frac{L}{a}$$

$$\text{Zahl der } k\text{-Werte (3D): } N = \frac{V_{\text{BZ}}}{(2\pi/L)^3} = \frac{(2\pi/a)^3}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3}{a^3}$$

N entspricht Zahl der Einheitszellen

- wir können deshalb die Summe über alle \mathbf{k} im Ansatz $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ durch eine Summe über alle reziproken Gittervektoren \mathbf{G} ersetzen und erhalten

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Rightarrow$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

8.1 Bloch-Elektronen

- Bloch-Wellen im Ortsraum

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{eine von insgesamt } N \text{ Lösungen})$$

wichtig: $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ist Fourier-Reihe über reziproke Gittervektoren $\mathbf{G} \rightarrow u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ist **gitterperiodische Funktion**

- Lösung der Schrödinger-Gleichung ist gitterperiodisch-modulierte ebene Welle

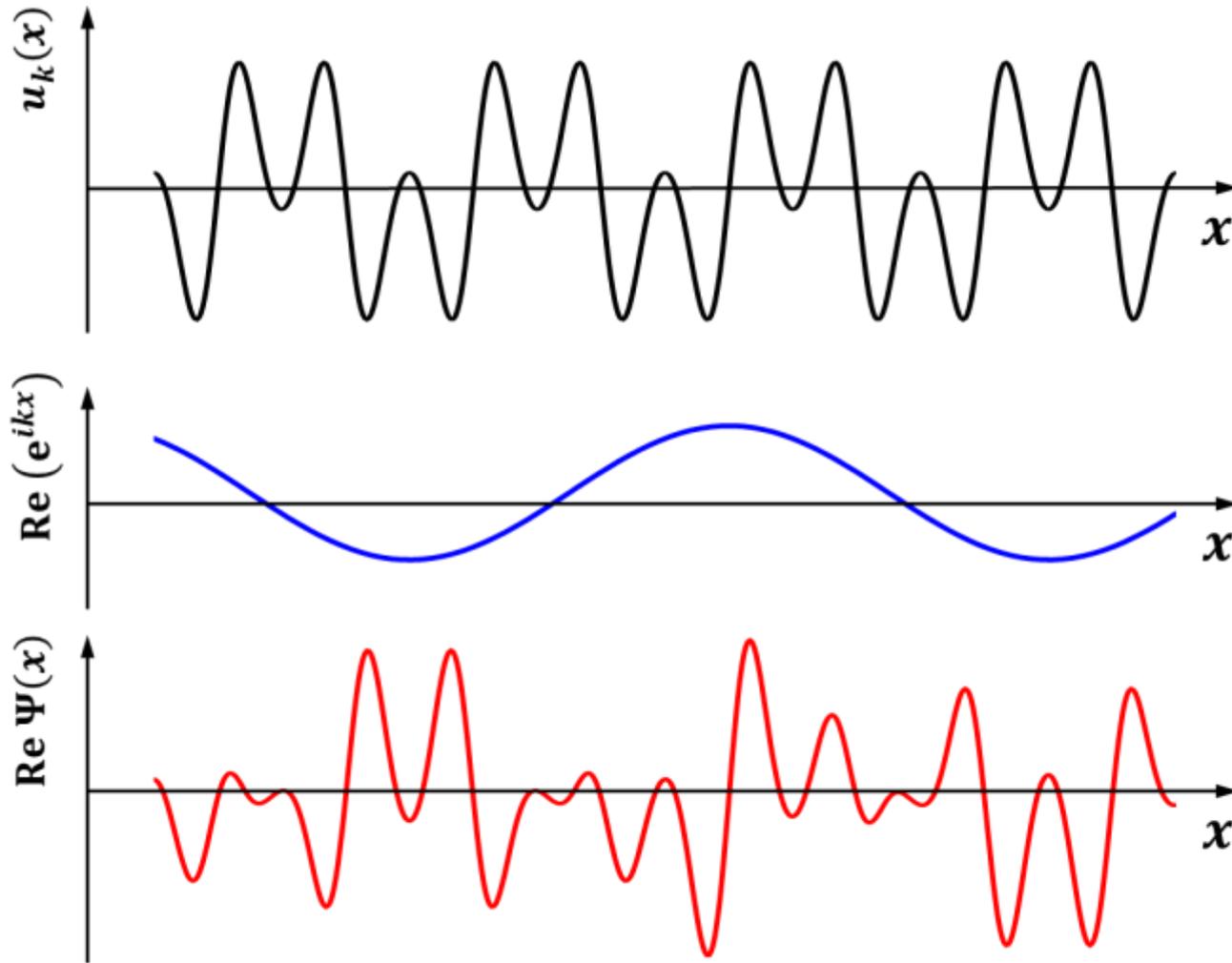
$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{mit} \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad \text{Bloch-Welle}$$

- Bloch-Theorem

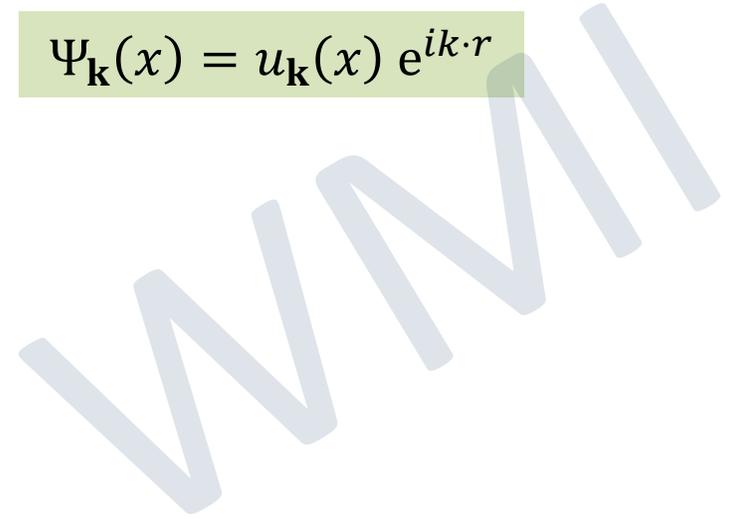
die Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung für ein periodisches Potenzial $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ sind durch das Produkt von ebenen Wellen $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ mit einer gitterperiodischen Funktion $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ gegeben

8.1 Bloch-Elektronen

- Bloch-Wellen im Ortsraum



$$\Psi_{\mathbf{k}}(x) = u_{\mathbf{k}}(x) e^{ik \cdot r}$$



• niederdimensionale Elektronengassysteme

räumliche Einschränkung von 3D-Elektronengas durch Potenzialbarrieren

→ 2D-, 1D- und 0D-Elektronengas

2D - Elektronengas

$$E_{n_z} = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m} + \epsilon_{n_z} = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_z^2} n_z^2$$

2D-Subbänder, treppenförmige DOS

1D – Elektronengas: Quantendraht

$$E_{n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \epsilon_{n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_z^2} n_z^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_y^2} n_y^2$$

1D-Subbänder, $1/\sqrt{E}$ förmige DOS mit Singularitäten bei $E = \epsilon_{n_y, n_z}$

0D – Elektronengas: Quantenpunkt

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \epsilon_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_z^2} n_z^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_y^2} n_y^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L_x^2} n_x^2$$

diskrete Energiewerte → künstliche Atome

• Leitwertquantisierung in eindimensionalen Leitern (ballistischer Transport)

$$I_q = J_q A = -en \langle v \rangle A$$

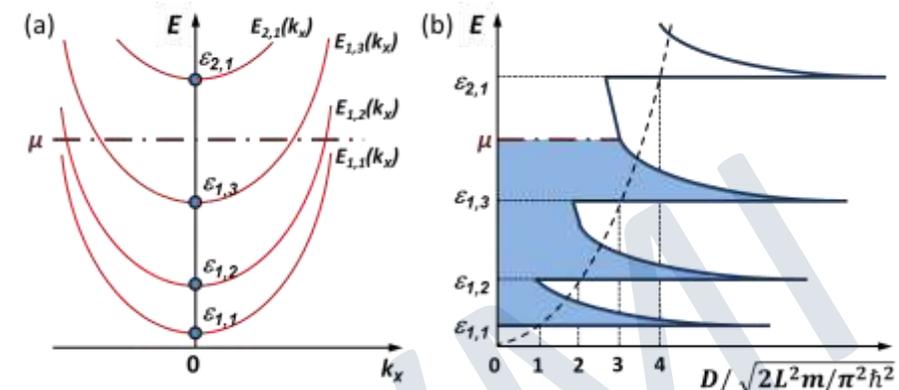
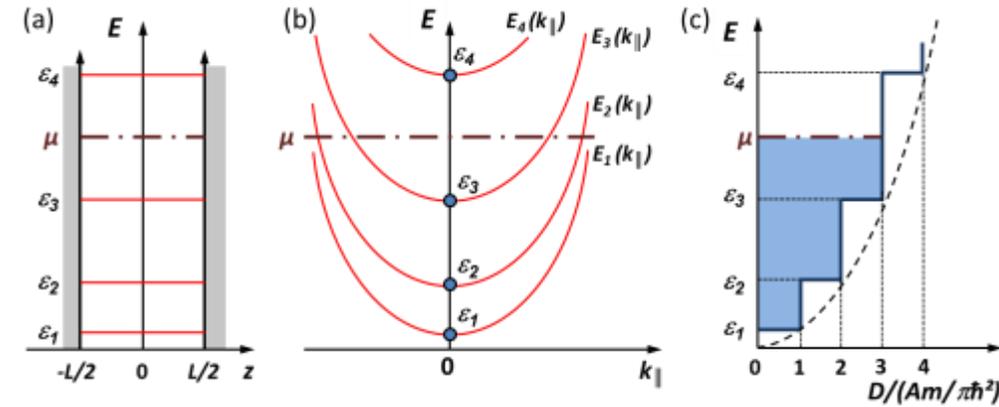
$$= -e \frac{N}{V} A \frac{1}{N} \sum_{k, \sigma} \frac{\hbar(k^l - k^r)}{m} = -\frac{2e}{L} \sum_k \frac{\hbar(k^l - k^r)}{m}$$

→ 1D-Kanal besitzt Leitwert $G = 2 \frac{e^2}{h} = 2G_Q$

$$\Rightarrow I_q = 2 \frac{e^2}{h} U \Rightarrow G = 2G_Q = 2 \frac{e^2}{h}, \quad R = \frac{1}{2} R_Q = \frac{1}{2} \frac{h}{e^2}$$

$$R_Q = \frac{h}{e^2} = 25\,812.807\,572(95) \, \Omega$$

Klitzing-Konstante



- **Mängel des freien Elektronengasmodells**

nicht erklärt werden kann: Unterschied zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren, Anzahl der Valenzelektronen, positive Werte für die Hall-Konstante oder Thermokraft, T - und B -Abhängigkeit der Hall-Konstante erklären,

- **Berücksichtigung des periodischen Kristallpotenzials $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$**

→ keine völlig freien Elektronen mehr: Bewegung in periodischem Gitterpotenzial

→ nach wie vor gehen wir von **völlig unabhängigen Elektronen** aus (keine e-e-Wechselwirkung)

- **Bloch-Elektronen:** löse Schrödinger-Gleichung für ein Elektron in gitterperiodischem Potenzial $V(\mathbf{r})$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$$

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{G} = h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3$$

Ansatz: Superposition ebener Wellen: $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ → Übergang zum reziproken Raum (Fourier-Entwicklung)

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0 \quad \text{Schrödinger-Gleichung im reziproken Raum}$$

→ **N unabhängige Gleichungssysteme:** eines pro \mathbf{k} aus 1. BZ, jedes koppelt nur \mathbf{k} -Werte, die sich \mathbf{G} unterscheiden

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Rightarrow \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad \text{Indizierung mit } \mathbf{k} \text{ möglich: } E(\mathbf{k}) = E_{\mathbf{k}}$$

→ \mathbf{k} ist nicht auf 1. BZ beschränkt, zu jedem \mathbf{k} aus 1. BZ gibt es unendlich viele Lösungen (Energieeigenwerte)

$$E_n(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n) \quad \text{mit} \quad \mathbf{G}_n = h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3, \quad n = \text{Bandindex}$$

- **Bloch-Wellen im Ortsraum:**

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad \text{mit} \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

Bloch-Theorem

die Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung für ein periodisches Potenzial $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ sind durch das Produkt von ebenen Wellen $e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ mit einer gitterperiodischen Funktion $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ gegeben