



Physik der Kondensierten Materie 2

Rudolf Gross

SS 2021

Teil 2

Vorlesungsstunde: 12.04.2021-2

Zusammenfassung: Teil 1a, 12.04.2021/1

• Quantisierung der Bahnen freier Ladungsträger ($q = +e$) im Magnetfeld

Wellen auf geschlossenen Bahnen müssen Bohr-Sommerfeld-Quantisierung erfüllen

- **Schrödinger-Gleichung:**
$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 \Psi = \varepsilon \Psi$$
 Eichung: $\mathbf{A} = (0, Bx, 0) \rightarrow \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B)$

Operator des kinematischen Impulses: $p = \hbar k + qA \rightarrow \hbar k = p - qA = \frac{\hbar}{i} \nabla - qA$

- Lösung ergibt Eigenenergien:

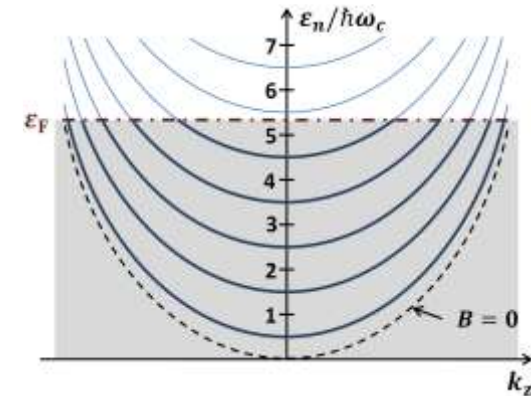
Subbänder: Landau-Niveaus

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Kreisbewegung in Ebene senkrecht zu B freie Bewegung || B

Zyklotron-Frequenz:

$$\omega_c = \frac{eB}{m} = 1.758\,820\,174\,(71) \times 10^{11} \text{ s}^{-1} \times B [\text{Tesla}]$$



• Entartung der Landau-Niveaus (für eine Spin-Richtung)

$$p = \left(\frac{m\omega_c}{\hbar} L_x \right) / \left(\frac{2\pi}{L_y} \right) = \hbar \omega_c D_{2D} = L_x L_y B \cdot \frac{e}{2\pi\hbar} = \frac{\Phi}{2\Phi_0}$$

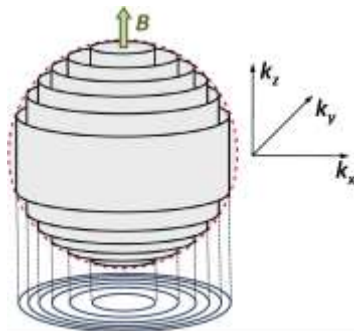
$$D_{2D} = \frac{m}{2\pi\hbar^2} L_x L_y$$

Fluss durch Fläche $\perp B$

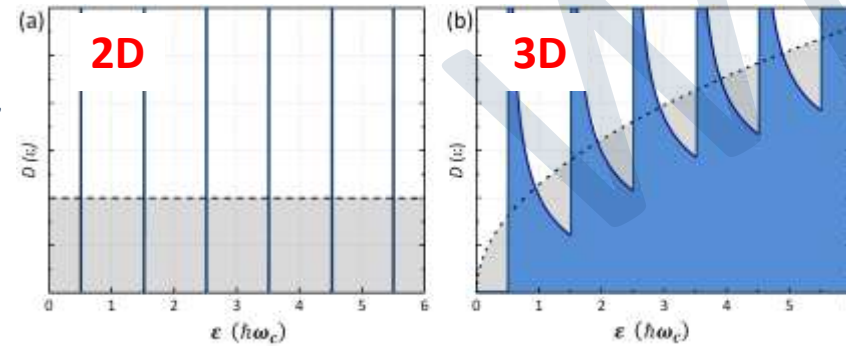
$$2\Phi_0 \quad (\Phi_0 = \frac{h}{2e} = \text{Flussquant})$$

wie viele Zustände gibt es zu jedem möglichen Wert von k_z in $k_x k_y$ -Ebene ?

Landau-Zylinder:



Zustandsdichte im Magnetfeld:



Zusammenfassung: Teil 1b, 12.04.2021/1

• Bahnquantisierung für Kristallelektronen ($q = +e$)

Korrekturfaktor γ

- Quantisierungsbedingung wie für freie Ladungsträger:

$$\frac{1}{2\pi} \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \hbar(n + \gamma), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

mit kanonischem Impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} + q\mathbf{A} = q\mathbf{r} \times \mathbf{B} + q\mathbf{A}$ erhalten wir:

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = -q\Phi = -qBA = 2\pi\hbar(n + \gamma), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

→ von Bahnen umschlossene Flächen und der von ihnen eingeschlossene magnetische Fluss sind quantisiert!

$$A_n = \frac{2\pi\hbar(n + \gamma)}{qB}, \quad \Phi_n = BA_n = (n + \gamma) \frac{h}{q} = (n + \gamma) 2\Phi_0 \quad (\text{mit } \Phi_0 = h/2e)$$

- aus $\hbar\mathbf{k} = e\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ folgt $|dr| = \frac{\hbar}{eB} |dk|$ folgt:

$$A_n = \left(\frac{\hbar}{qB} \right)^2 S_n \quad S_n = \frac{(n + \gamma) 2\pi q B}{\hbar}$$

- Fläche zwischen benachbarten Landau-Zylindern:

$$\Delta S = \frac{2\pi q B}{\hbar} = \frac{2\pi m_c}{\hbar} \hbar\omega_c$$

• Welches ΔB führt zu gleichen Flächen aufeinanderfolgender Landau-Zylinder?

aus $(n + \gamma + 1) \frac{2\pi q B_{n+1}}{\hbar} = S_n = (n + \gamma) \frac{2\pi q B_n}{\hbar} = S$ folgt:

$$\Delta = \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi q}{\hbar S}$$

→ gleiche Zunahme in $1/B$ führt zu gleichen Bahnen im k -Raum

→ $1/B$ -Oszillationen von physikalischen Größen

• Voraussetzungen für experimentelle Beobachtung von $1/B$ Oszillationen

- Abstand benachbarter Landau-Niveaus groß gegen $k_B T$: $\hbar\omega_c > k_B T \rightarrow \frac{B}{T} > \frac{m_c k_B}{\hbar q} = 0.78 \text{ T/K}$

→ hohe B/T

- genügend lange Streuzeit τ : $\Delta\varepsilon \approx \frac{\hbar}{\tau} < \hbar\omega_c \rightarrow \omega_c \tau = \frac{qB}{m_c} \tau > 1$

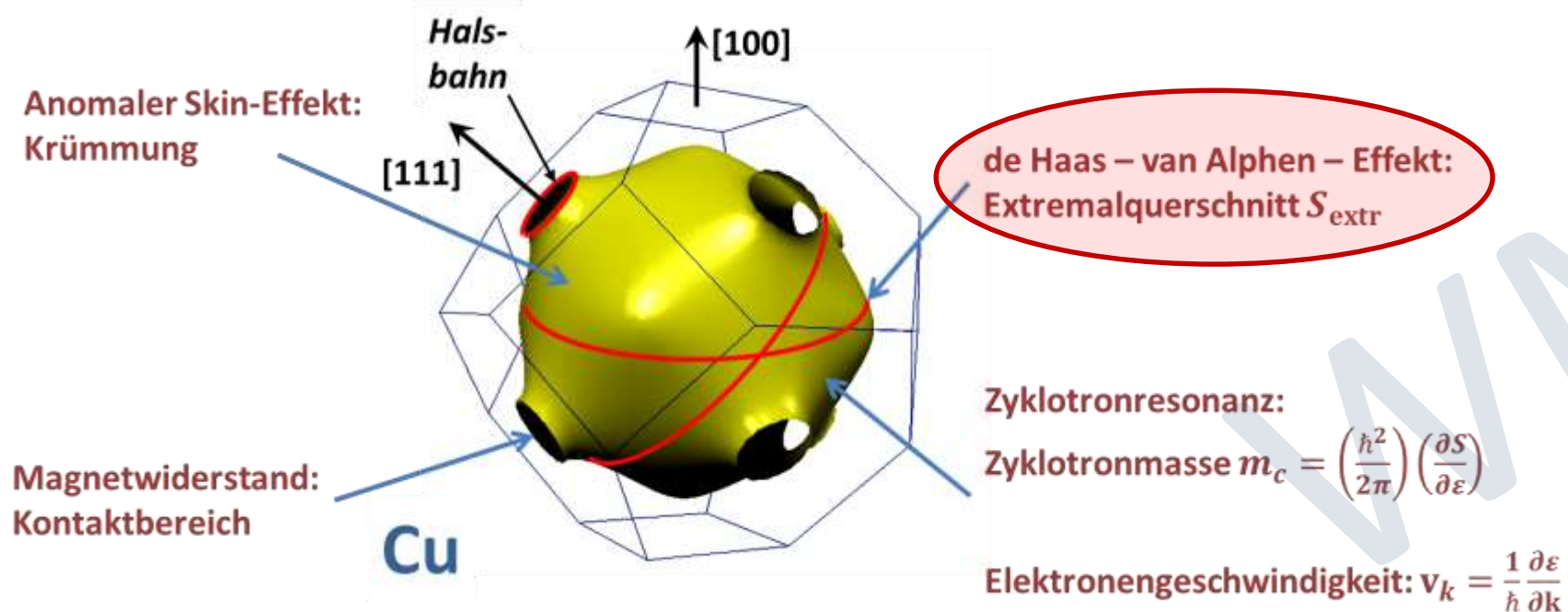
→ hohe B , tiefe T und reine Proben

9.11 Exp. Bestimmung der Fermi-Fläche

- Fermi-Fläche $\varepsilon = \varepsilon_F$
 - trennt bei Metallen für $T = 0$ die besetzten von den unbesetzten Zuständen
 - ist eng mit den Transporteigenschaften und den optischen Eigenschaften verknüpft

→ großes Interesse an experimenteller Bestimmung

- zahlreiche physikalische Größen liefern Information über Fermi-Fläche



9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- Gemessen wird Oszillation der Magnetisierung eines Metalls als Funktion des angelegten Magnetfeldes

→ Entdeckung durch **de Haas** und **van Alphen** im Jahr 1930 an Wismut

→ Oszillation entsteht durch das Schieben der Landau-Zylinder über die Fläche $\varepsilon = \varepsilon_F$ bei Variation von B



W.J. de Haas
(1878 – 1960)



P.M. van Alphen
(1906 – 1967)

- Magnetisierung eines Festkörpers**

(Ausrichtung von magnetischen Momenten durch B , wird erst später im Detail behandelt)

- Definition:
$$M = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_{T,V=const}$$
- bei genügend tiefen Temperaturen ist freie Energie $F = U - TS \simeq U$

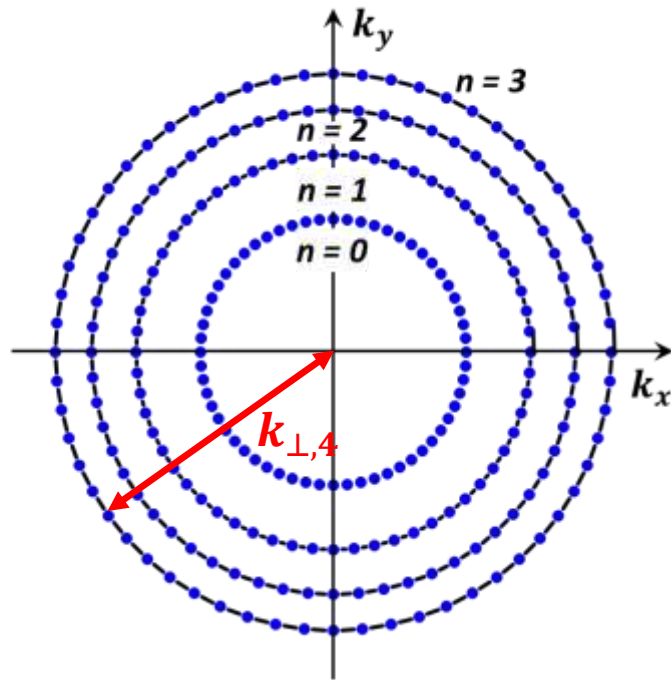
$$M \simeq -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial U}{\partial B} \right)_{T,V=const}$$

→ wir müssen $U(B)$ kennen, um $M(B)$ zu berechnen

→ im Folgenden Berechnung für 2D freies Elektronengas

9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

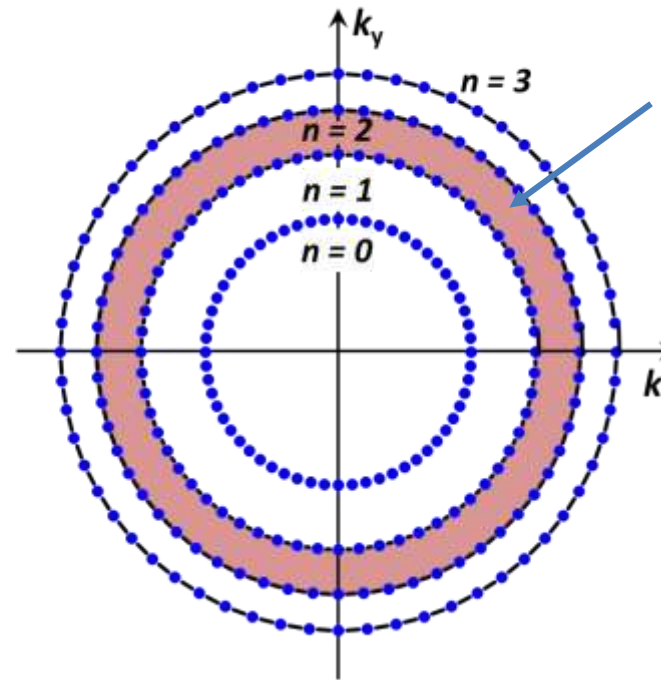
- 2D freies Elektronengas im Magnetfeld (Wiederholung)



Eigenenergien: $\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c = \frac{\hbar^2 k_{\perp,n}^2}{2m}$

Kreisradius: $k_{\perp,n} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c} = \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2eB}{\hbar}}$

B-Änderung führt zu Änderung von $k_{\perp,n}$



Flächendifferenz: $\Delta S = \frac{2\pi eB}{\hbar}$

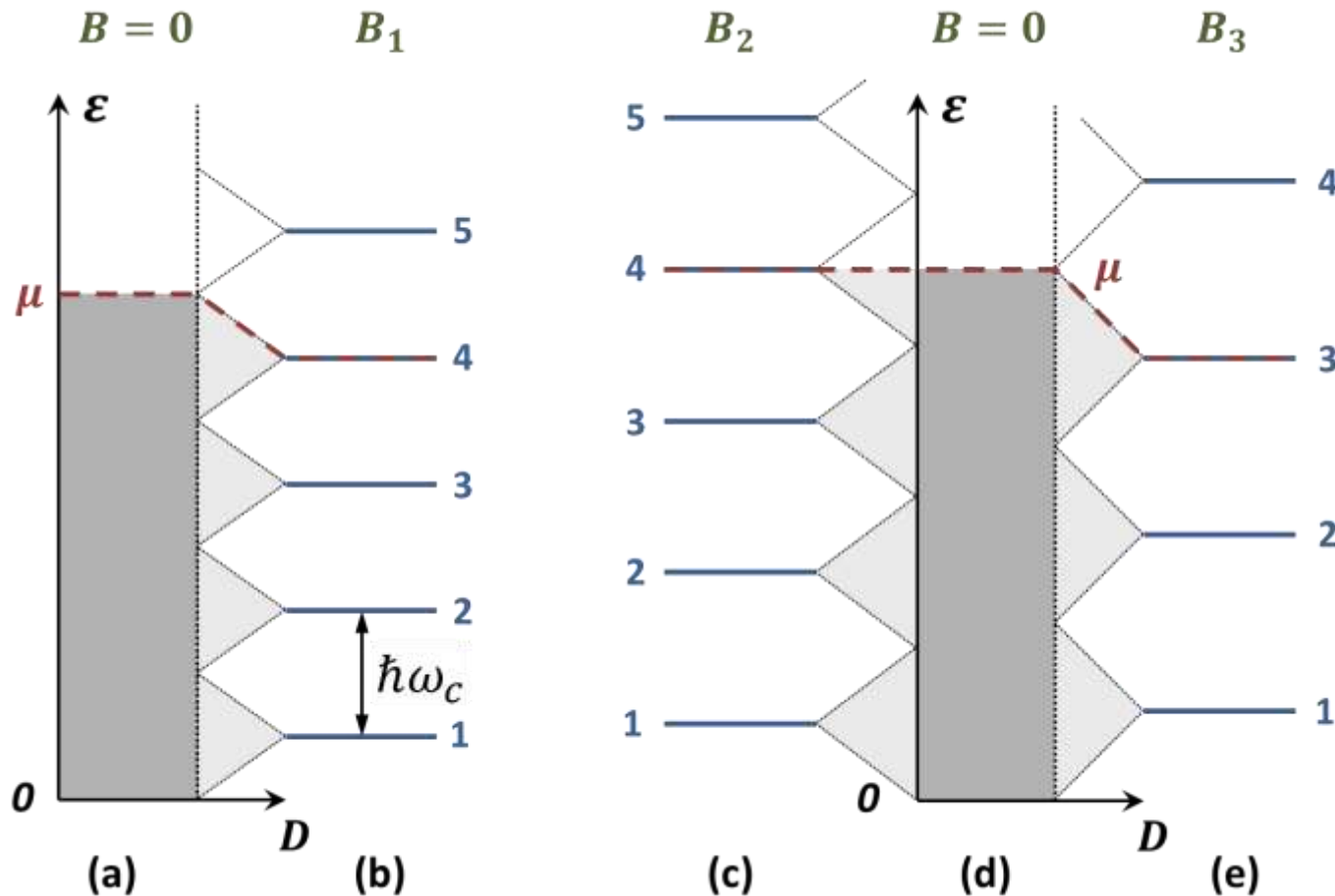
Entartung der Landau-Niveaus (Zahl der Punkte auf Kreisen):

$$p = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \Delta S = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \frac{2\pi eB}{\hbar} = \rho B$$

B-Änderung führt zu Änderung der maximalen Zahl der Zustände pro Landau-Niveau

9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- Was passiert mit den Landau-Niveaus und der Fermi-Energie von 2D-Elektronengas, wenn wir B variieren?

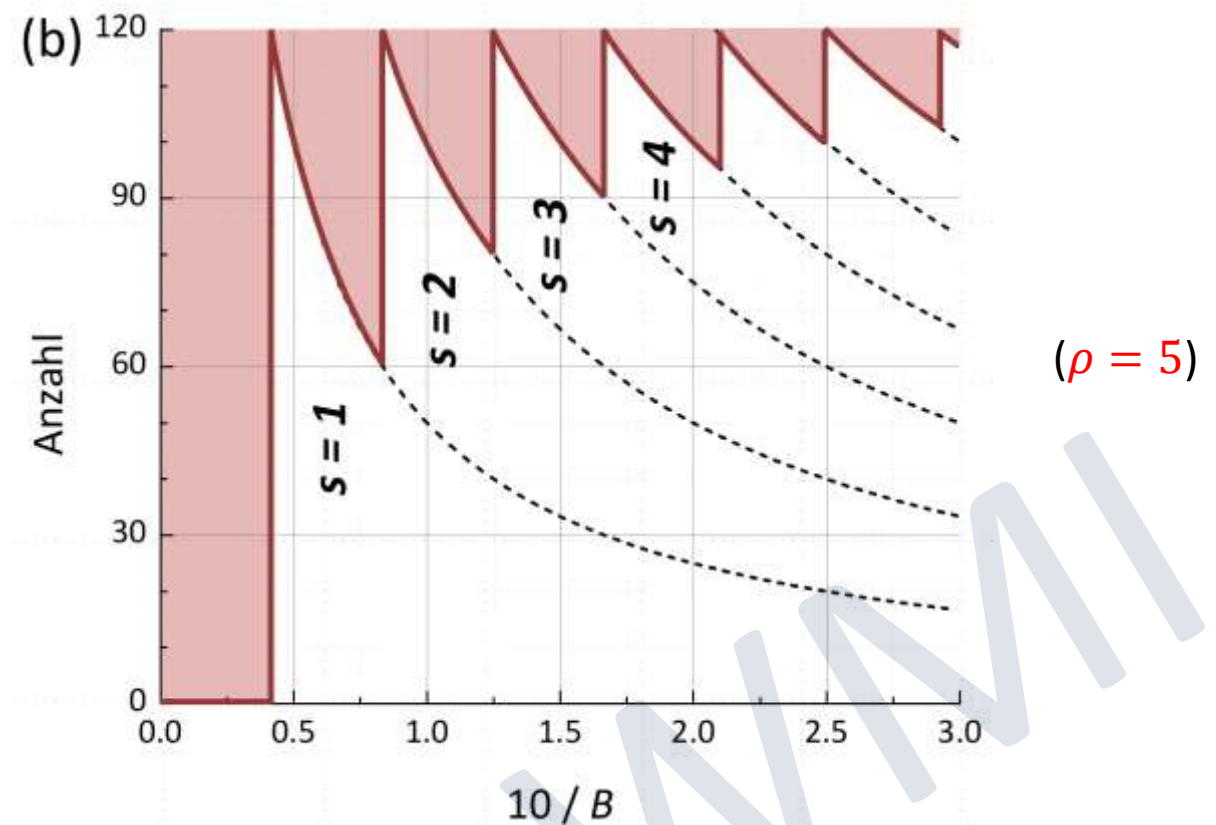
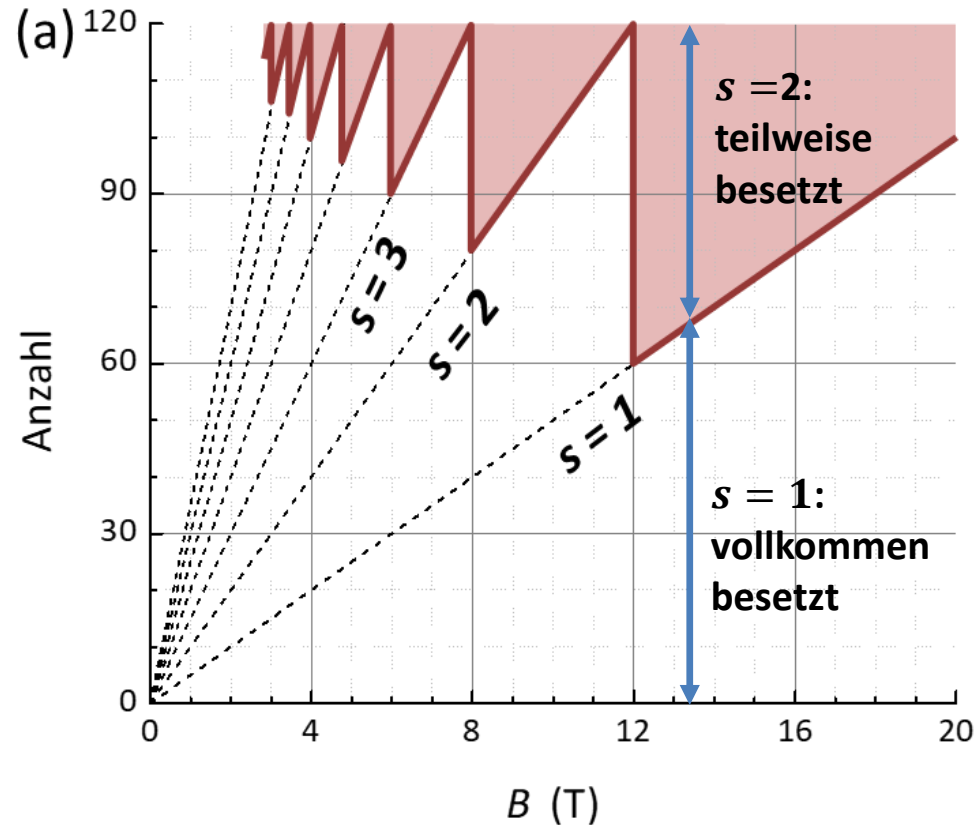


- $B = 0$, alle Zustände bis $\varepsilon = \mu$ besetzt (bei $T = 0$ ist chemisches Potenzial $\mu = \varepsilon_F$)
- $B = B_1$, Zustände werden auf Landau-Niveaus umverlagert, μ liegt im 4. Landau-Niveau
- $B = B_2$, da $B_2 > B_1$ ist Abstand der Landau-Niveaus angewachsen, μ liegt immer noch im 4. Landau-Niveau
- $B = 0$ (zum Vergleich)
- $B = B_3$, da $B_3 > B_2$ ist Abstand der Landau-Niveaus nochmals angewachsen, Entartung $p \propto B$ ist jetzt so groß, dass alle Zustände in die 3 untersten Niveaus passen $\rightarrow \mu$ rutscht ins 3. Landau-Niveau nach unten

Frage: Wie ändert sich die Gesamtenergie des Elektronensystems?

9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- Beispiel: Besetzungszahl der Landau-Niveaus für Elektronengas mit $N = 120$ als Funktion von B bzw. $1/B$



Entartung der Landau-Niveaus

$$p = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \cdot \frac{2\pi q B}{\hbar} = \rho B$$

9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- Berechnung der Gesamtenergie aller N Elektronen im 2D Elektronengas als Funktion von B

- es werden s Niveaus vollkommen gefüllt, das oberste Niveau $s + 1$ ist nur teilweise gefüllt

(1) vollkommen gefüllte Niveaus

$$\varepsilon_{\text{tot},1} = \sum_{n=1}^s p \cdot \hbar\omega_c \left(n - \frac{1}{2} \right) = \sum_{n'=0}^{s-1} p \cdot \hbar\omega_c \left(n' + \frac{1}{2} \right) = p \cdot \hbar\omega_c \frac{s^2}{2}$$

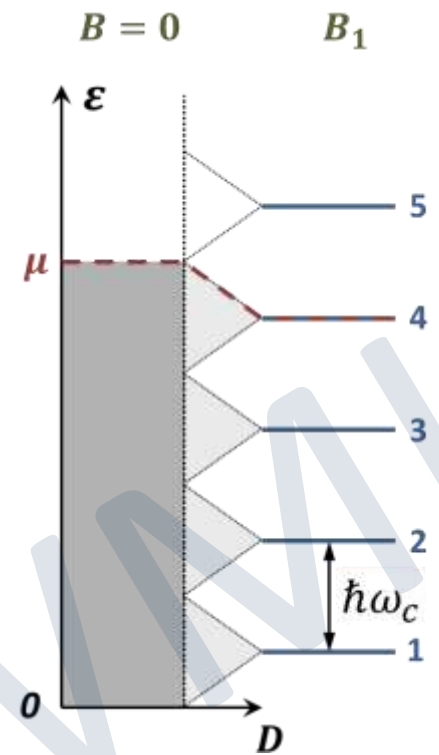
(2) oberstes, teilweise gefülltes Niveau (besetzt mit $(N - sp)$ Zuständen)

$$\varepsilon_{\text{tot},2} = \hbar\omega_c \left(s + \frac{1}{2} \right) (N - sp)$$

- Gesamtenergie**

$$U = p \cdot \hbar\omega_c \frac{s^2}{2} + \hbar\omega_c \left(s + \frac{1}{2} \right) (N - sp)$$

$$U = \hbar\omega_c \left[N \left(s + \frac{1}{2} \right) - p \frac{s^2}{2} - p \frac{s}{2} \right] \quad \text{mit} \quad p = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \cdot \frac{2\pi q B}{\hbar}$$

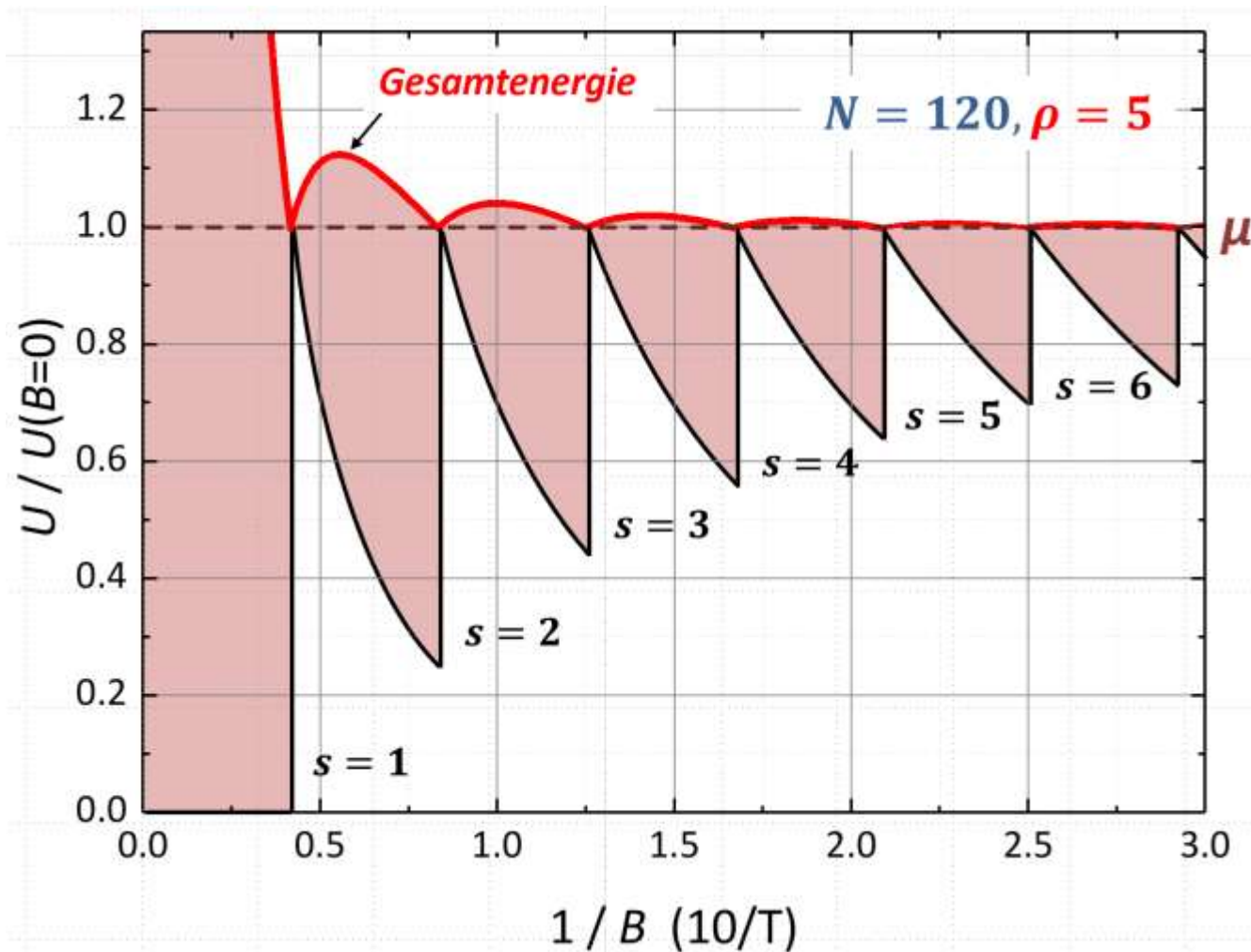


9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- Gesamtenergie

$$U = \hbar\omega_c \left[N \left(s + \frac{1}{2} \right) - p \frac{s^2}{2} - p \frac{s}{2} \right] \quad \text{mit}$$

$$p = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \cdot \frac{2\pi q B}{\hbar} = \rho B$$



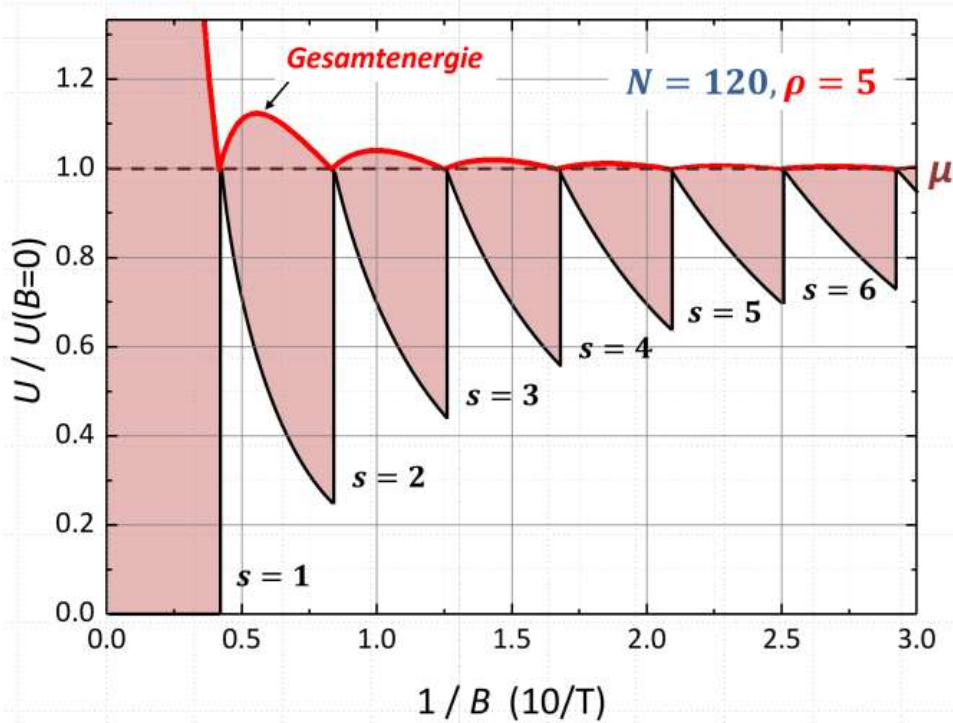
- U variiert periodisch auf $1/B$ – Skala
- $M \simeq -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial U}{\partial B} \right)_{T,V=const}$ variiert ebenfalls periodisch auf $1/B$ – Skala
- Phänomen heißt **de Haas – van Alphen – Effekt**
- bei hohen T ist oszillatorisches Verhalten durch großes $k_B T$ vollkommen verschmiert und nicht beobachtbar, es bleibt aber kontinuierliche Zunahme von U zu kleinen $1/B$ bzw. großen B

$$\rightarrow \chi = -\frac{\mu_0}{V} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial B^2} \right)_{T,V=const} < 0$$

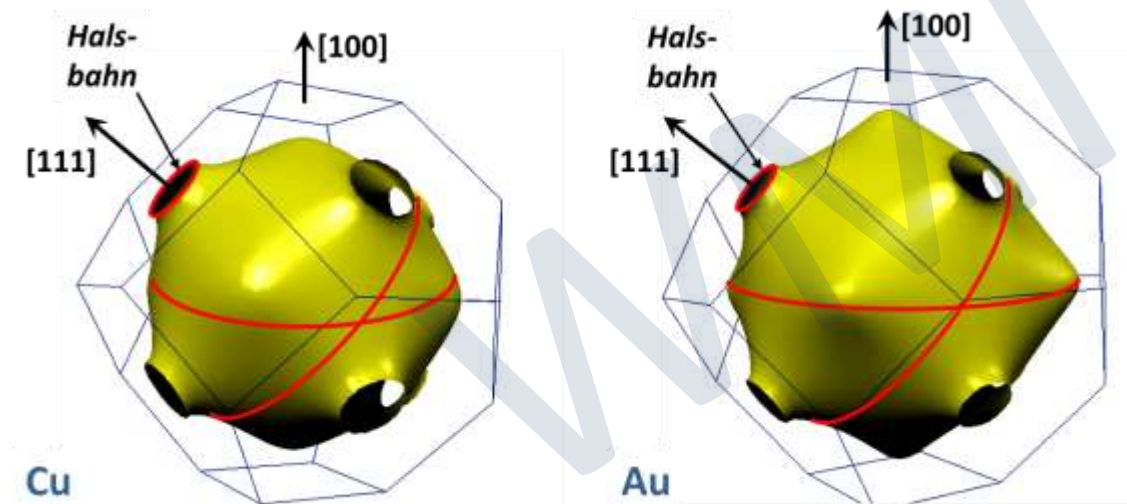
→ Landau-Diamagnetismus

9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- Welche Information erhalten wir durch Messung der Oszillationsperiode Δ auf $1/B$ – Skala?

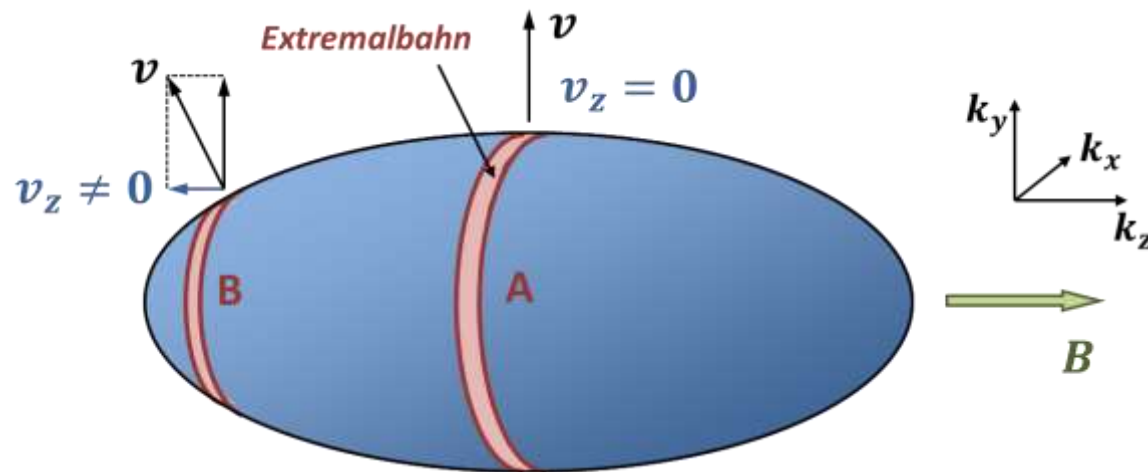


- Oszillationsperiode:
$$\Delta = \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi q}{\hbar S}$$
- Messung von Δ liefert S ohne Fitparameter (da q und \hbar Naturkonstanten)
- S ist Extremalfläche $\perp B$



9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- Warum spielen nur die extremalen Querschnittsflächen eine Rolle?



für 3D Fermi-Fläche gibt es unendlich viele Schnittflächen $S \perp B$ durch den Fermi-Körper

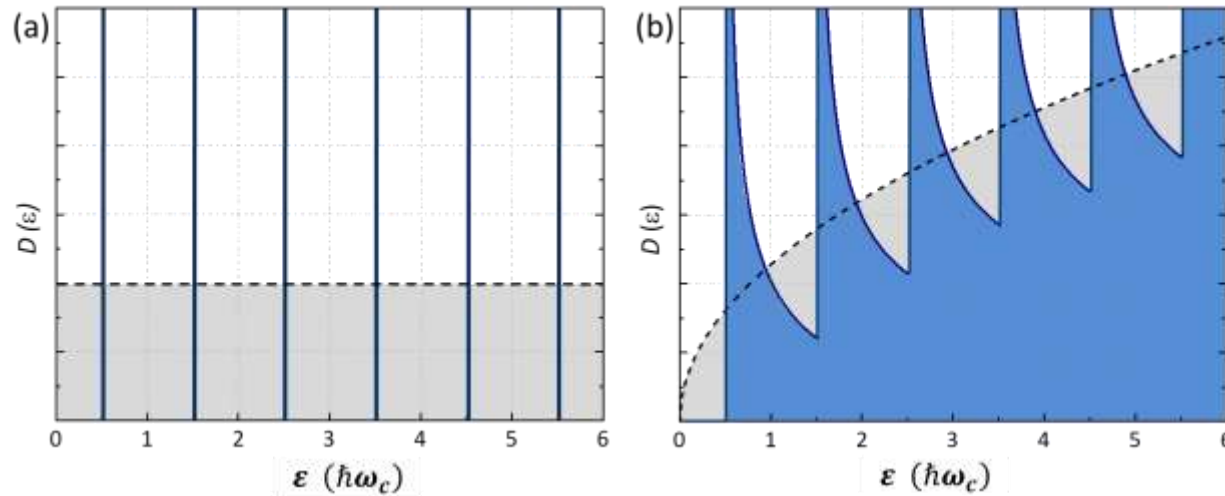
→ unterschiedliche Perioden Δ

→ nur extremale Bahnen werden im Experiment beobachtet

(Phasenfaktoren benachbarter Bahnen variieren hier nur wenig → ihre Beiträge interferieren sich deshalb nicht weg)

9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- Voraussetzungen für die experimentelle Beobachtung des de Haas – van Alphen – Effekts (Wiederholung)



→ der energetische Abstand der Landau-Niveaus muss größer als die thermische Energie sein

$$\hbar\omega_c = \frac{\hbar qB}{m_c} > k_B T$$

$$\frac{B}{T} > \frac{m_c k_B}{q\hbar} = 0.78 \left[\frac{\text{T}}{\text{K}} \right]$$

→ hohe B und niedrige T

→ die energetische Verbreiterung der Landau-Niveaus durch die endliche Streuzzeit τ der Ladungsträger muss kleiner als $\hbar\omega_c$ sein

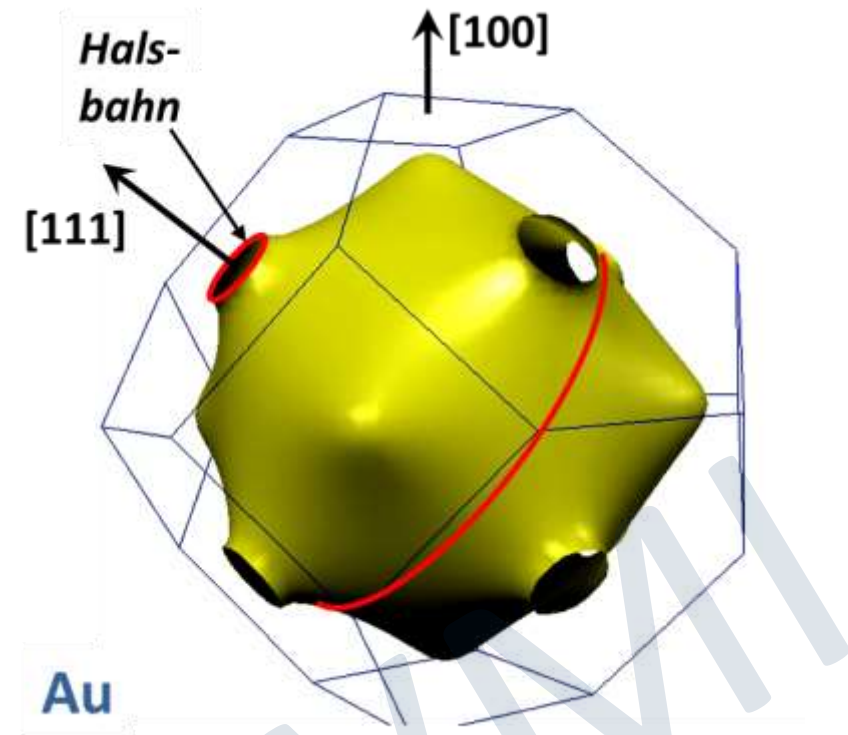
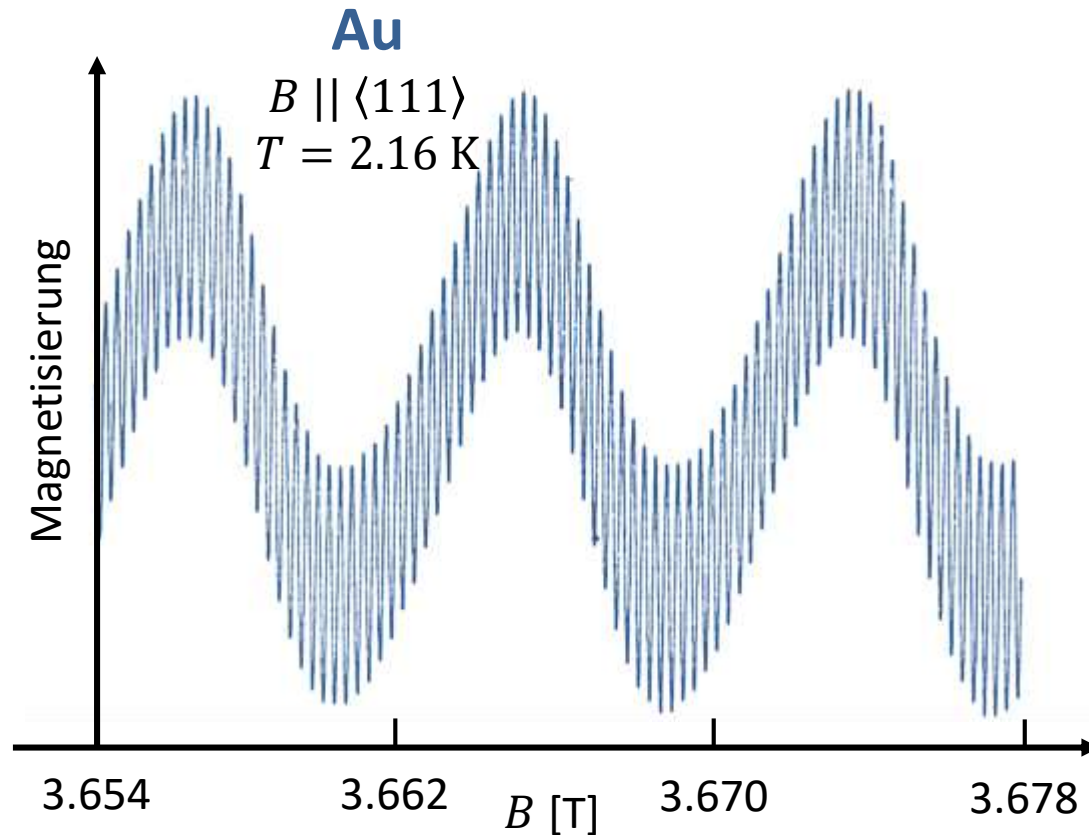
$$\Delta\varepsilon \simeq \frac{\hbar}{\tau} < \hbar\omega_c$$

$$\omega_c \tau = \frac{qB}{m_c} \tau > 1$$

→ hohe B und reine Proben

9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

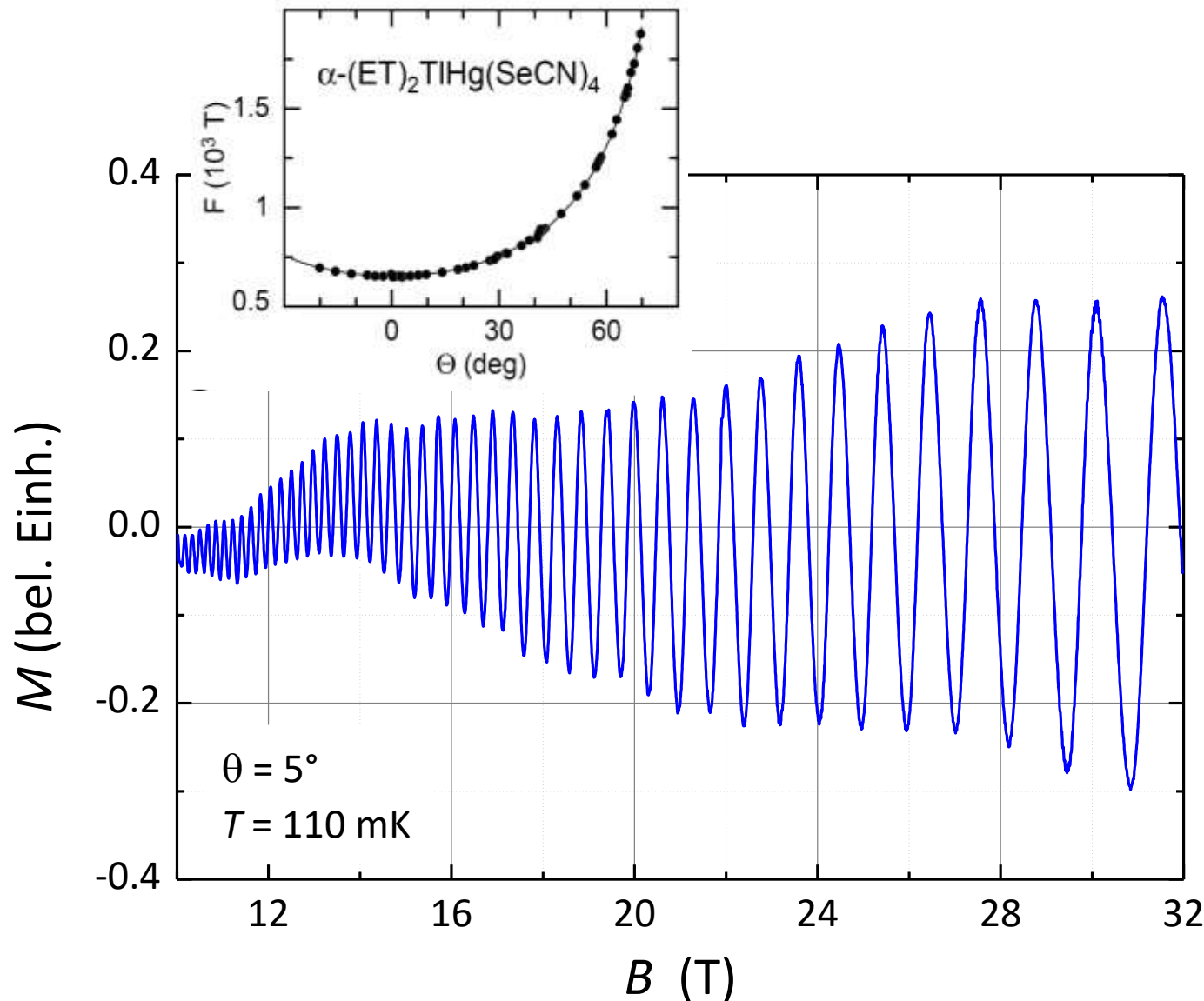
- *Beispiel: de Haas – van Alphen – Effekt in Gold*



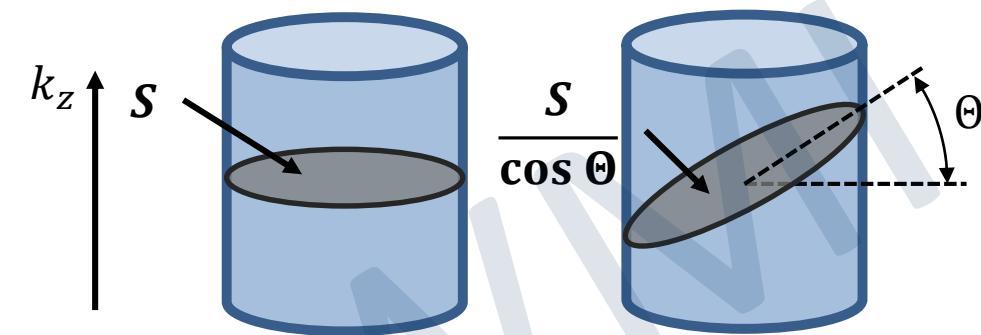
für $B \parallel \langle 111 \rangle$ werden auf B -Skala eine niederfrequente (kleine Halsbahn, $\Delta_{\text{Hals}} = \frac{2\pi q}{\hbar S_{\text{Hals}}}$) und eine hochfrequente (große Bauchbahn, $\Delta_{\text{Bauch}} = \frac{2\pi q}{\hbar S_{\text{Bauch}}}$) beobachtet

9.11.1 de Haas – van Alphen – Effekt

- *Beispiel: quasi-zweidimensionaler organischer Supraleiter*



- quasi-2D-System, keine Dispersion in k_z -Richtung
- zylinderförmige Fermi-Fläche
- Schnittfläche $S \propto 1/\cos \Theta$
- Oszillationsperiode $\Delta = \frac{2\pi q}{\hbar S} \propto \cos \Theta$



M. Kartsovnik et al., Walther-Meißner-Institut

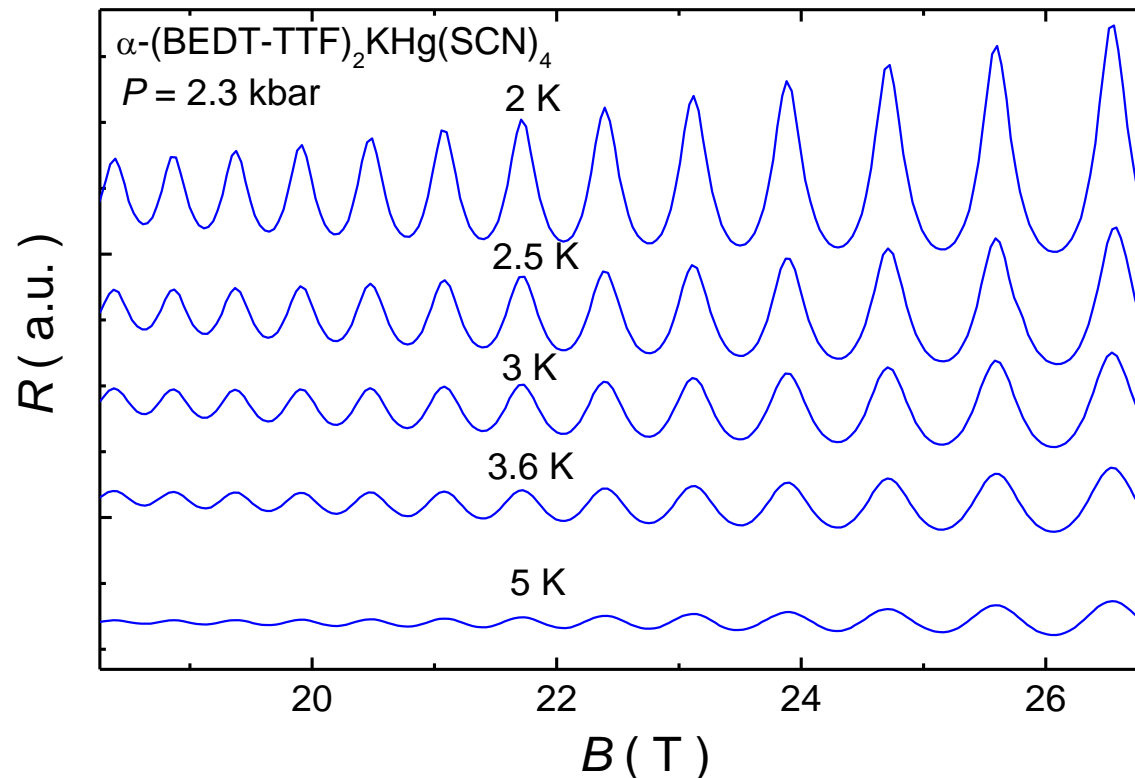
9.11.2 Shubnikov – de Haas – Effekt

- *Oszillationen des elektrischen Widerstands als Funktion des angelegten Magnetfeldes*

- erste Messungen von **Shubnikov** und **de Haas** im Jahr 1930
- qualitative Erklärung: Widerstand ist proportional zur Streuwahrscheinlichkeit und diese wiederum proportional zur Zustandsdichte bei ε_F

$$D(\varepsilon_F) \propto \left(\frac{m_c B}{S_{\text{extr}}} \right) \frac{\partial M}{\partial B}$$

S_{extr} : Fläche der Extremalbahn



Abnahme der Oszillationsamplitude durch thermische Verschmierung

D. Andres, Doktorarbeit, WMI 2005

9.11.3 Zyklotron-Resonanz

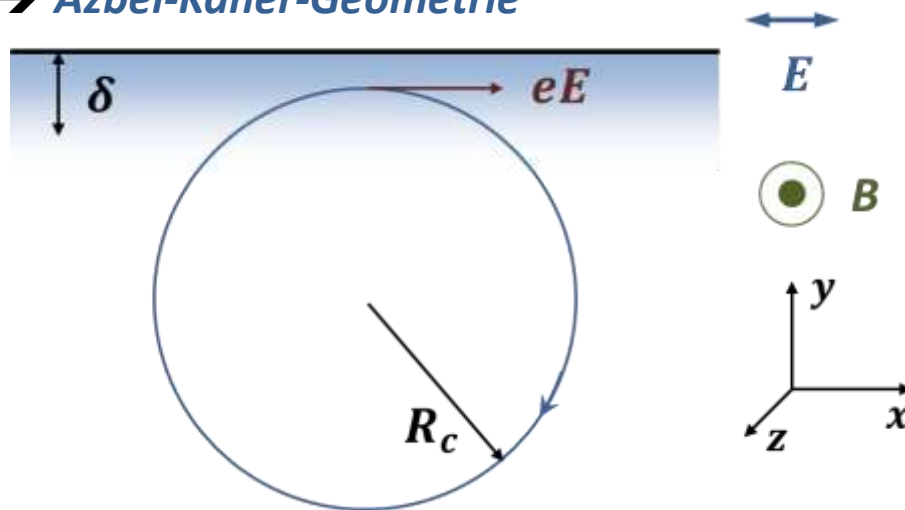
- *Messung der Frequenzabhängigkeit des Oberflächenwiderstandes, des Reflexionsvermögens oder der Absorption ergibt ω_c und damit m_c*

→ Information über S (Fermi-Fläche) aus Beziehung $m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S(k_\perp)}{\partial \epsilon}$

– Zyklotronresonanz bei Metallen:

- Problem ist kleine Skintiefe: $\delta \sim 10$ nm bei 10 MHz
- Skintiefe ist klein gegen Zyklotronradius $R_c \sim 10 \mu\text{m}$ @ 1T
- niedrigere Frequenzen/Felder nicht möglich, da $\omega_c \tau \gg 1$ gelten muss

→ Azbel-Kaner-Geometrie



Resonanzabsorption für $\omega = n \cdot \omega_c = n \cdot \frac{eB}{m_c}$, $n = 1, 2, 3, \dots$

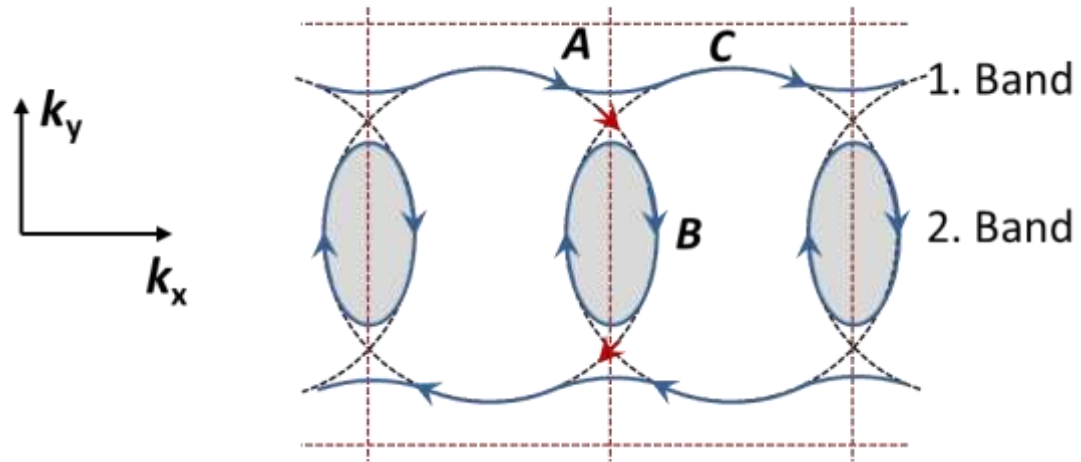
Experiment: $\omega = const.$, Variation von B

$$\frac{1}{B} = n \cdot \frac{e}{\omega m_c}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Information über die senkrecht zu B verlaufenden Extremalbahnen

9.11.4 Magnetischer Durchbruch

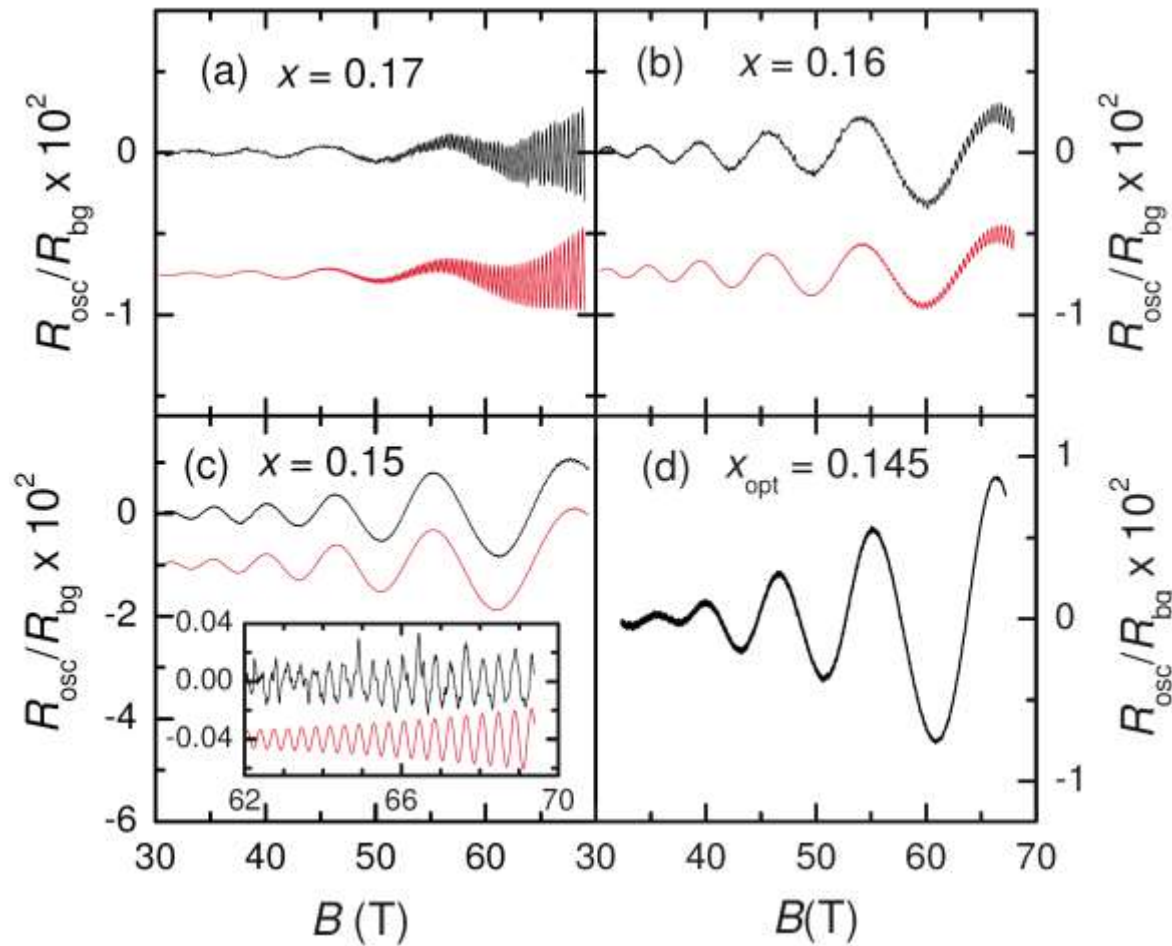
- bei genügend hohen B können Elektronen Gebiete im k -Raum, welche unterschiedliche Bahnen trennen, durchtunneln \rightarrow magnetischer Durchbruch



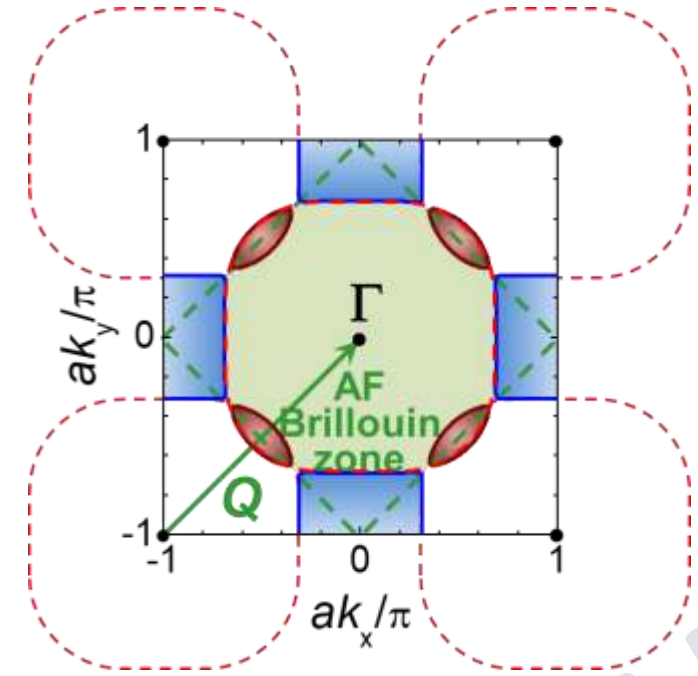
- durch den magnetischen Durchbruch entstehen zusätzlich zu den blau eingezeichneten Orbits die gestrichelten “Durchbruchsorts”
- in den Quantenoszillationen treten zusätzliche Frequenzen auf
- **Ursache:**
Lorentz-Kraft $\mathbf{F}_L = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ kann durch Gleichsetzen mit $\mathbf{F}_E = q\mathbf{E}$ mit $|\mathbf{E}| \simeq q|\mathbf{v} \times \mathbf{B}| = vB$ assoziiert werden
 $\rightarrow E \perp v$ wächst mit B an und kann Tunneln verursachen

9.11.4 Magnetischer Durchbruch

- *Beispiel: Hochtemperatur-Supraleiter $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4+x}$*



T. Helm, Doktorarbeit, WMI (2013)
 Phys. Rev. Lett. 103, 157002 (2009)



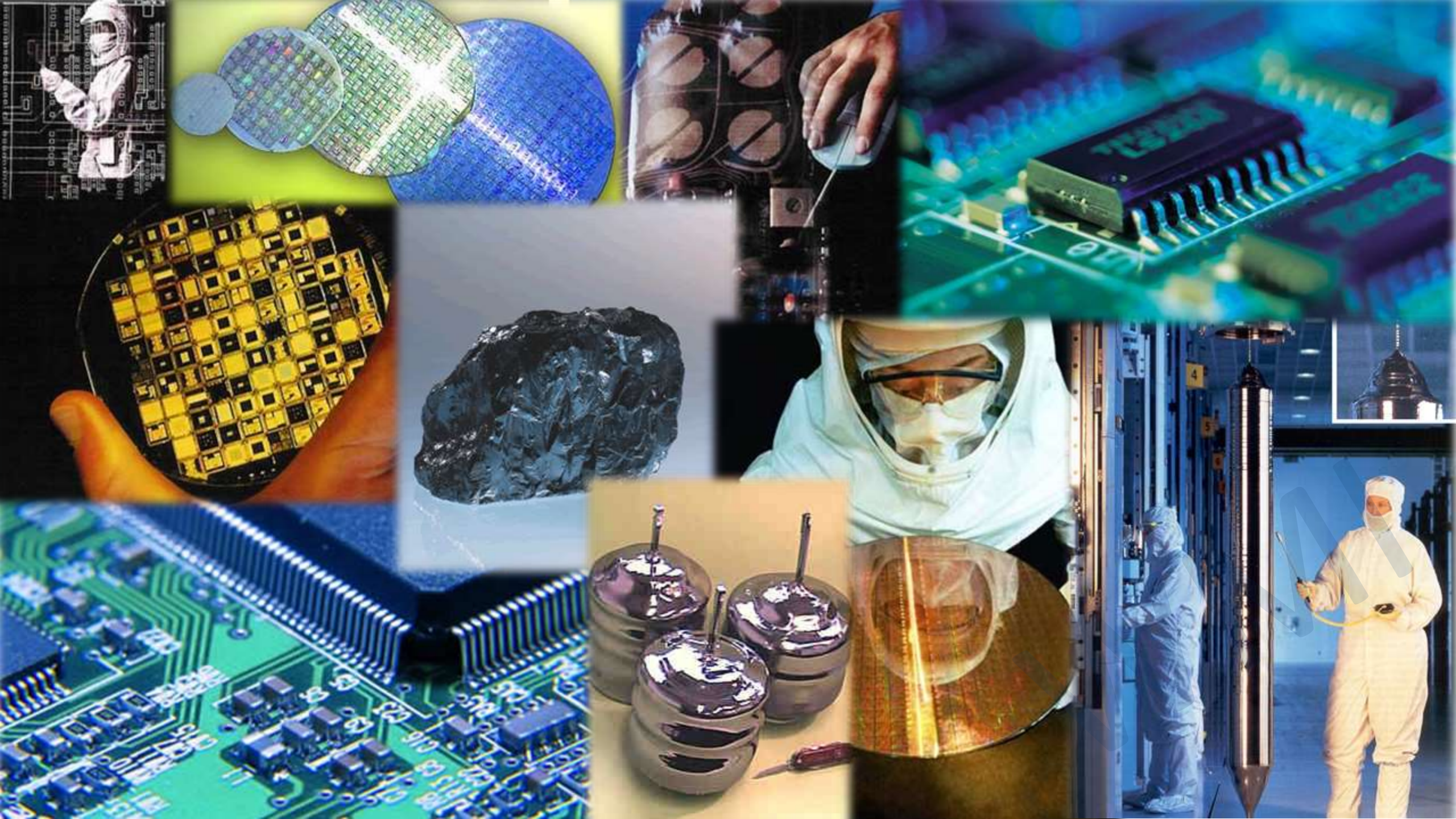
- rekonstruierte Fermi-Fläche von NCCO
- in den Subnikov – de Haas – Oszillationen wird eine niederfrequente (rot eingefärbte Taschen) und eine hochfrequente Komponente (gestrichelt gezeichnetes Durchbruchorbit) gemessen
- die Lücken zwischen den roten und blauen Orbits können durchtunnelt werden



Kapitel 10

Halbleiter

WZL





© Walther-Meißner-Institut

10.1 Grundlegende Eigenschaften

- **“alte” Definition:**

- Isolator mit kleiner Bandlücke E_g
- elektrische Leitfähigkeit liegt zwischen Metall und Isolator

$$\sigma \sim 10^2 - 10^{-9} \frac{1}{\Omega\text{m}} \quad \rightarrow \text{gro\ss e technische Bedeutung}$$

Wahrscheinlichkeit für thermische Anregung von LT von VB ins LB

$$\propto \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \sim 10^{-5} \quad @ E_g = 0.5 \text{ eV und } T = 300 \text{ K}$$

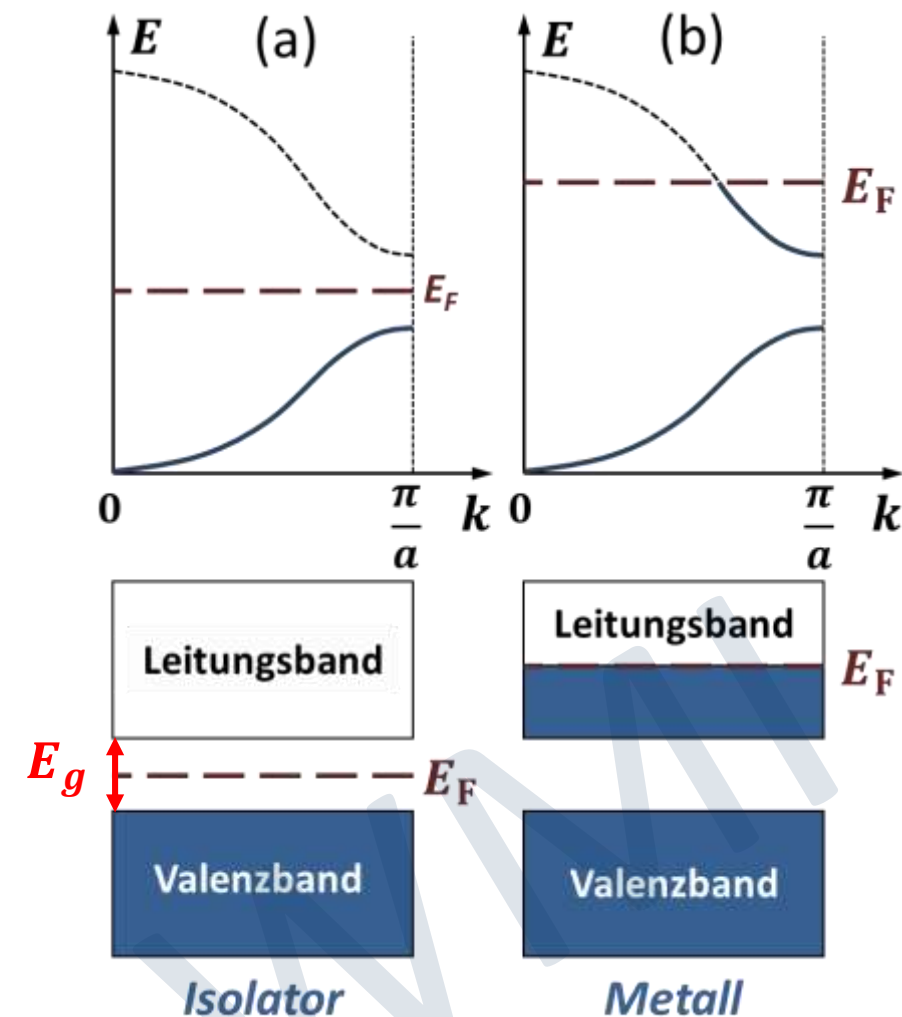
$$\sim 10^{-60} \quad @ E_g = 3.0 \text{ eV und } T = 300 \text{ K}$$

→ große Energielücke $E_g \Rightarrow$ kleine LT-Dichte \Rightarrow kleines σ

- **“neue” Definition:**

- Isolator, der dotiert werden kann (E_g ist nicht sehr relevant)
- Variation der LT-Dichte durch gezieltes Einbringen von Dotieratomen

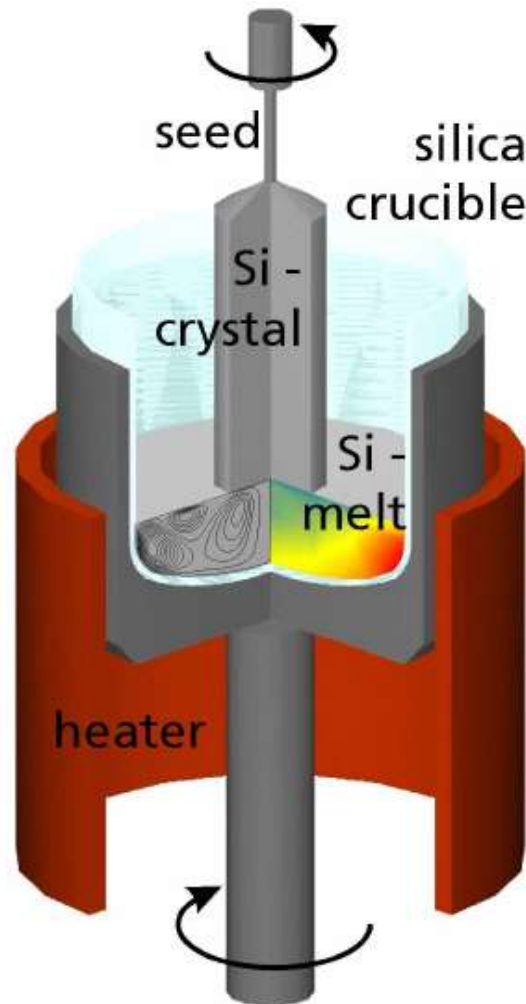
→ LT-Dichte und σ hängen weniger mit Größe von E_g sondern mehr mit der Dichte der Dotieratome zusammen



10.1 Grundlegende Eigenschaften

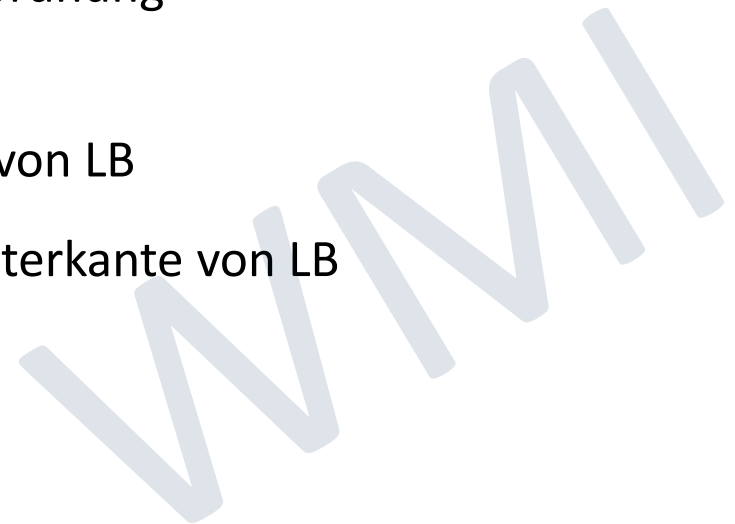
- *zahlreiche großtechnische Herstellungsverfahren*

z.B.
Czochralski-
Verfahren



10.1.1 Klassifizierung von Halbleitern

- *unabhängig von chemischer Zusammensetzung*
 - **intrinsisch:** keine Dotieratome, freie LT nur durch Anregung von VB ins LB
 - **dotiert:** endliche Dichte von Dotieratomen, freie LT hauptsächlich durch Ionisierung der Dotieratome
 - **kristallin:** streng periodische Anordnung der Atome
 - **amorph:** Atome besitzen nur Nahordnung, aber keine Fernordnung
 - **direkt:** Oberkante von VB bei gleichem k wie Unterkante von LB
 - **indirekt:** Oberkante von VB bei unterschiedlichem k wie Unterkante von LB



10.1.1 Klassifizierung von Halbleitern

- abhängig von chemischer Zusammensetzung

Element-Halbleiter	Verbindungshalbleiter		Organische Halbleiter
Ge, Si, α -Sn, C (Diamant, Fulleren), B, Se, Te <i>unter Druck:</i> Bi, Ca, Sr, Ba, Yb, P, S, I	III-V	GaAs, GaP, , InP, InSb, InAs, GaSb, GaN, AlN, InN, $Al_xGa_{1-x}As$	Tetracen, Pentacen, Phthalocyanine, Polythiophene, PTCDA ($C_{24}H_8O_6$), MePTCDI ($C_{26}H_{14}N_2O_4$), Chinacridon, Acridon, Indanthron, Flavanthron, Perinon, Alq3 ($C_{27}H_{18}AlN_3O_3$)
	II-VI	ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe, HgS, $Hg_{1-x}Cd_xTe$, BeSe, BeTe,	
	III-VI	GaS, GaSe, GaTe, InS, InSe, InTe	
	IV-VI	PbS, PbTe, SnS	
	IV-IV	SiC, SiGe	
	I-VII	CuCl	
	I-III-VI	$CuInSe_2$, $CuInGaSe_2$, $CuInS_2$, $CuInGaS_2$	

- Oxidische HL:** ZnO, CuO
- Schicht-HL:** PbI_2 , MoS_2 , GaSe
- Magnetische HL:** (Ga,Mn)As

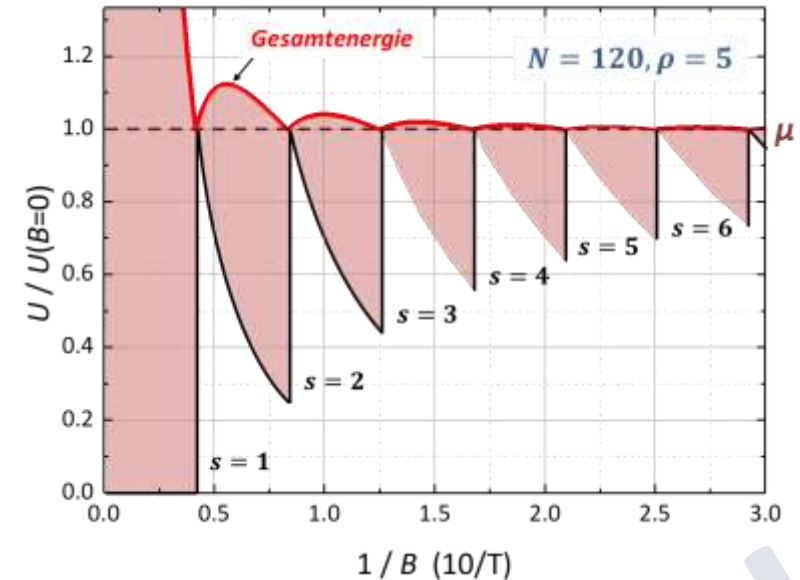
- experimentelle Bestimmung der Fermi-Flächen mit Bahnquantisierungseffekten

(i) **de Haas – van Alphen – Effekt: Oszillation von $M(B)$**

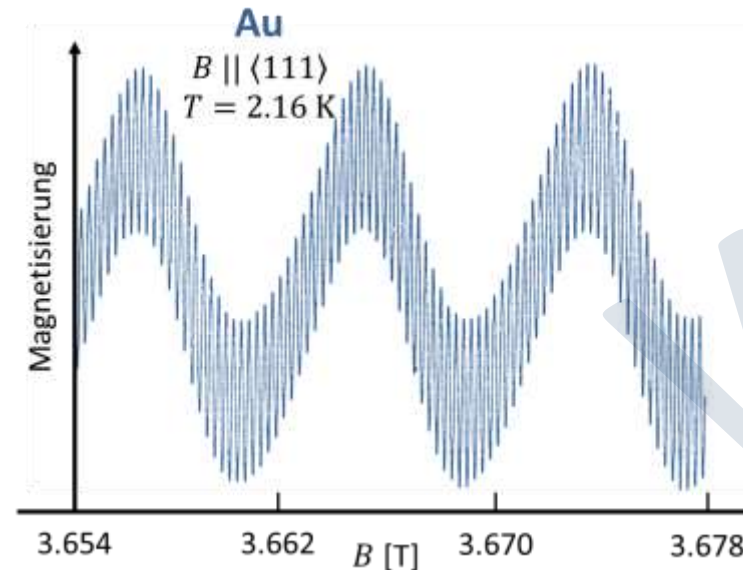
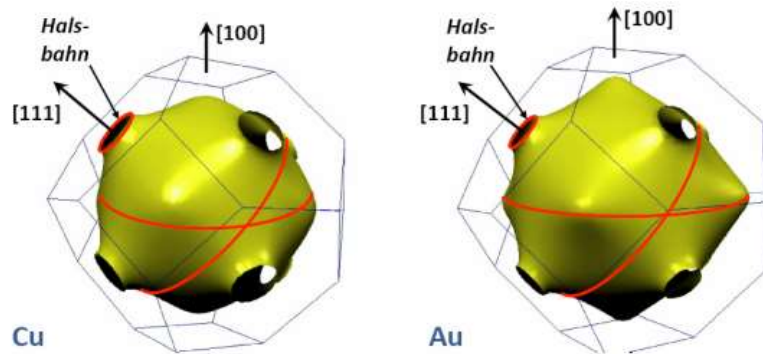
$$M = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_{T,V} \approx -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial U}{\partial B} \right)_{T,V} \quad F = U - TS \approx U \text{ bei tiefen } T$$

$$U = \hbar\omega_c \left[N \left(s + \frac{1}{2} \right) - p \frac{s^2}{2} - p \frac{s}{2} \right] \quad \text{mit Entartung } p = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} \cdot \frac{2\pi q B}{\hbar}$$

$$\Delta = \left(\frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi q}{\hbar S} \quad \text{Oszillationsperiode } \Delta \text{ liefert Größe der Extremalfläche } S \perp B$$



Extremalbahnen



(ii) **Shubnikov - de Haas - Effekt:**

Oszillation von R als Funktion von B

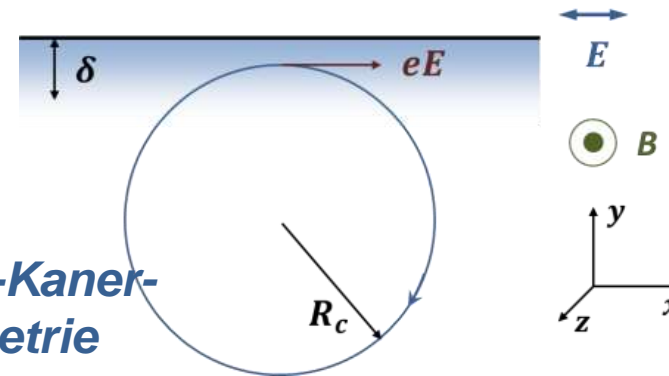
(iii) **Zyklotronresonanz:**

resonante Mikrowellenabsorption bei

$$\omega = n \cdot \omega_c = n \cdot \frac{eB}{m_c}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\rightarrow \text{Zyklotronmasse } m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S(k_{\perp})}{\partial \epsilon}$$

**Azbel-Kaner-
Geometrie**



• **Klassifizierung von Halbleitern**

- intrinsisch ↔ dotiert, kristallin ↔ amorph, direkt ↔ indirekt,
- Element-HL, Verbindungs-HL (binär, ternär, ...), organische HL
- oxidische HL, Schicht-HL, magnetische HL, ...

WMI