

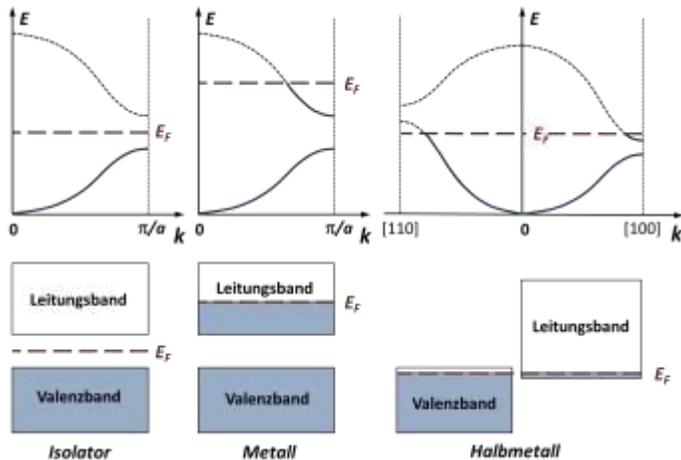


Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 22**

Vorlesungsstunde: 28.01.2021

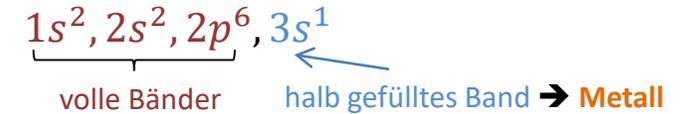
• Metalle, Halbmetalle, Halbleiter, Isolatoren



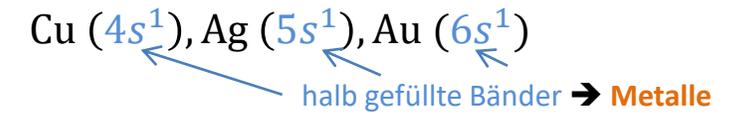
**2N
Zustände
pro
Band**

Faustregel:
gerade Elektronenzahl: **Isolator**
ungerade Elektronenzahl: **Metall**

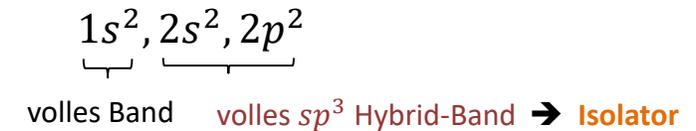
- Beispiel Natrium:



- Beispiel einfache Metalle:



- Beispiel Kohlenstoff (Diamant):



• Zustandsdichte

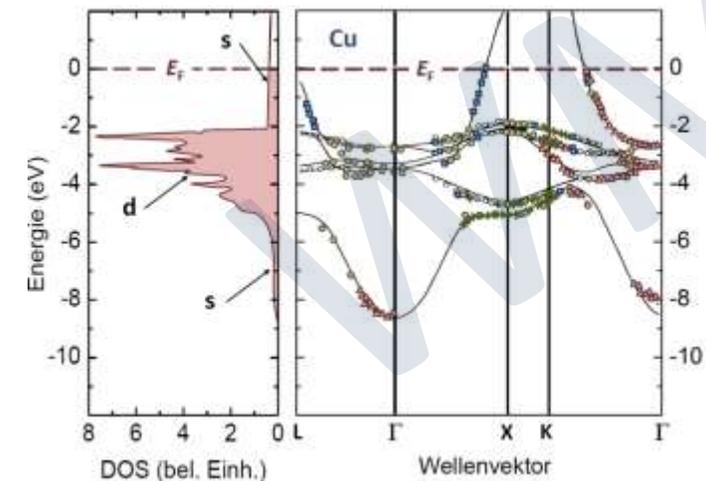
$$D(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{E(\mathbf{k})=const} \frac{dS_E}{|dE/dk_{\perp}|}$$

- Singularitäten an Stellen mit waagrechttem Bandverlauf → **van Hove Singularität**
- flacher Bandverlauf ($\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ ist klein) → hohe Zustandsdichte

• Beispiele für Bandstrukturen und Zustandsdichten

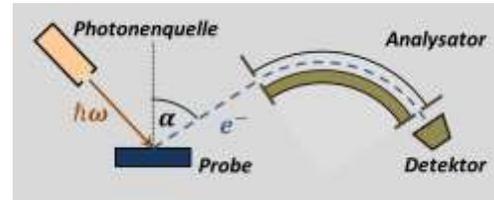
z.B. Cu → 3d Übergangsmetall:
 im Vergleich zu den 4s-Elektronen ist der Überlapp der 3d-Elektronen klein

- breites 4s-Band, geringe Zustandsdichte
- schmale 3d-Bänder, hohe Zustandsdichte



• Methoden zur Bestimmung der Bandstruktur $E(\mathbf{k})$

- ARPES: Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy



$$\hbar\omega = \Phi_A + E_{\text{kin}} + E_b$$

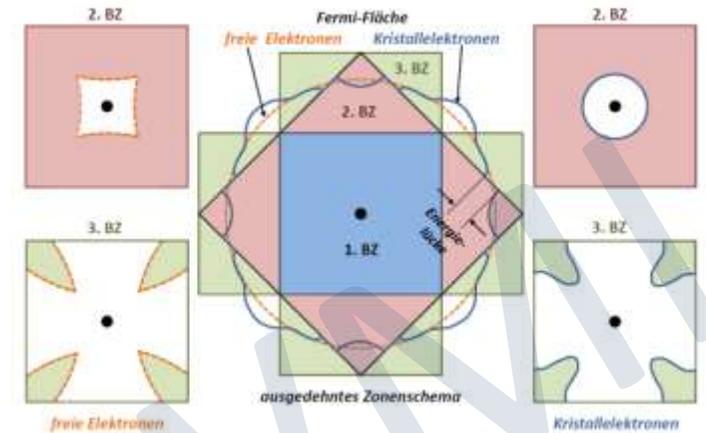
Photonenergie (bekannt) Austrittsarbeit (bekannt) gemessen Bindungsenergie der El. im Festkörper

- Energielücke von Halbleitern (→ Kapitel 10)
 - T -Abhängigkeit von R_H und σ bzw. ρ
 - optische Absorption
- effektive Zustandsdichtemasse
 - T -Abhängigkeit von c_V

- Zustandsdichte bei E_F
 - T -Abhängigkeit von c_V des Elektronensystems
- Fermi-Fläche (→ Kapitel 9)
 - de Haas – van Alphen – Effekt, Magnetotransport

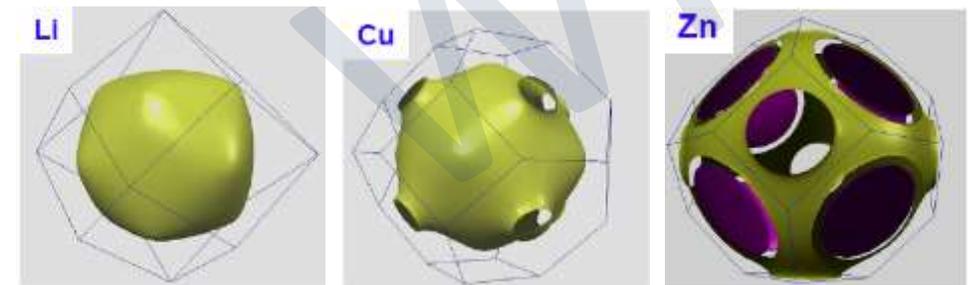
• qualitative Änderungen beim Übergang von freien zu fast freien Elektronen:

- Energielücken an Rändern der BZ
- $E(\mathbf{k})$ -Kurven schneiden Ränder der BZ senkrecht
- scharfe Strukturen am Rand der BZ werden abgerundet
- von Fermi-Fläche eingeschlossenes Volumen bleibt gleich
↔ Zahl der Elektronen



• Fermi-Flächen von Metallen

- Fermi-Fläche $E(\mathbf{k}) = E_F$ trennt bei $T = 0$ die besetzten von den unbesetzten Zuständen
- Form der Fermi-Fläche besitzt für die Eigenschaften von Metallen große Bedeutung
- für Bandelektronen: Fermi-Flächen \neq Kugeloberflächen



9 Dynamik von Kristallelektronen

- **bisher:**

- Beschäftigung mit Energieeigenwerten $E(\mathbf{k})$
 - folgen aus zeitunabhängiger Schrödinger-Gleichung
- Besetzung der Zustände unter Berücksichtigung von Pauli-Prinzip
 - **Fermi-Energie, Fermi-Flächen**

- **jetzt:**

- Diskussion des Verhaltens der Elektronen unter Wirkung äußerer Kräfte (z.B. durch \mathbf{E} - oder \mathbf{B} -Feld)
 - macht Übergang zu zeitabhängiger Schrödinger-Gleichung notwendig
- Beschreibung von Transportphänomenen, Verhalten in elektrischen und magnetischen Feldern
- Transportphänomene wurden bereits im Rahmen des Drude-Sommerfeld-Modells für freie Elektronen behandelt
 - jetzt Ausdehnung auf Bandelektronen
 - viele Konzepte können übernommen werden (Boltzmann-Transporttheorie)
 - **wichtig: zusätzlich zu äußeren Kräften wirken Kräfte durch Gitterpotenzial**

9 Dynamik von Kristallelektronen

- Gegenüberstellung: freie Elektronen (Drude/Sommerfeld) \Leftrightarrow Bandelektronen (Bloch)

	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 $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$

wir verwenden im Folgenden $\varepsilon(\mathbf{k})$ für Bandstruktur, um Verwechslungen mit elektrischem Feld \mathbf{E} zu vermeiden

9 Dynamik von Kristallelektronen

- zu diskutierende Punkte:
 - Gültigkeitsbereich des verwendeten ***semiklassischen Modells***
 - ➔ quantenmechanische Berechnung von Bandstruktur, klassische Bewegungsgleichungen
 - Bewegung von Kristallelektronen in elektrischen und magnetischen Feldern
 - Streuprozesse für Kristallelektronen
 - Boltzmann-Transporttheorie
 - Transportkoeffizienten (z.B. elektrische Leitfähigkeit, Wärmeleitfähigkeit, ...)
 - experimentelle Methoden zur Bestimmung von Fermi-Flächen

WMI

9.1 Semiklassisches Modell

- Dynamik von freien Elektronen wurde mit Gesetzen der *klassischen Mechanik* beschrieben (Kapitel 7)

Bewegungsgleichungen:

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

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

$q = -e$ für Elektronen

- zur Beschreibung der Dynamik von Kristallelektronen verwenden wir **semiklassisches Modell**

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

Problem: Kristallelektronen haben wir durch Bloch-Wellen beschrieben, die vollkommen delokalisiert sind

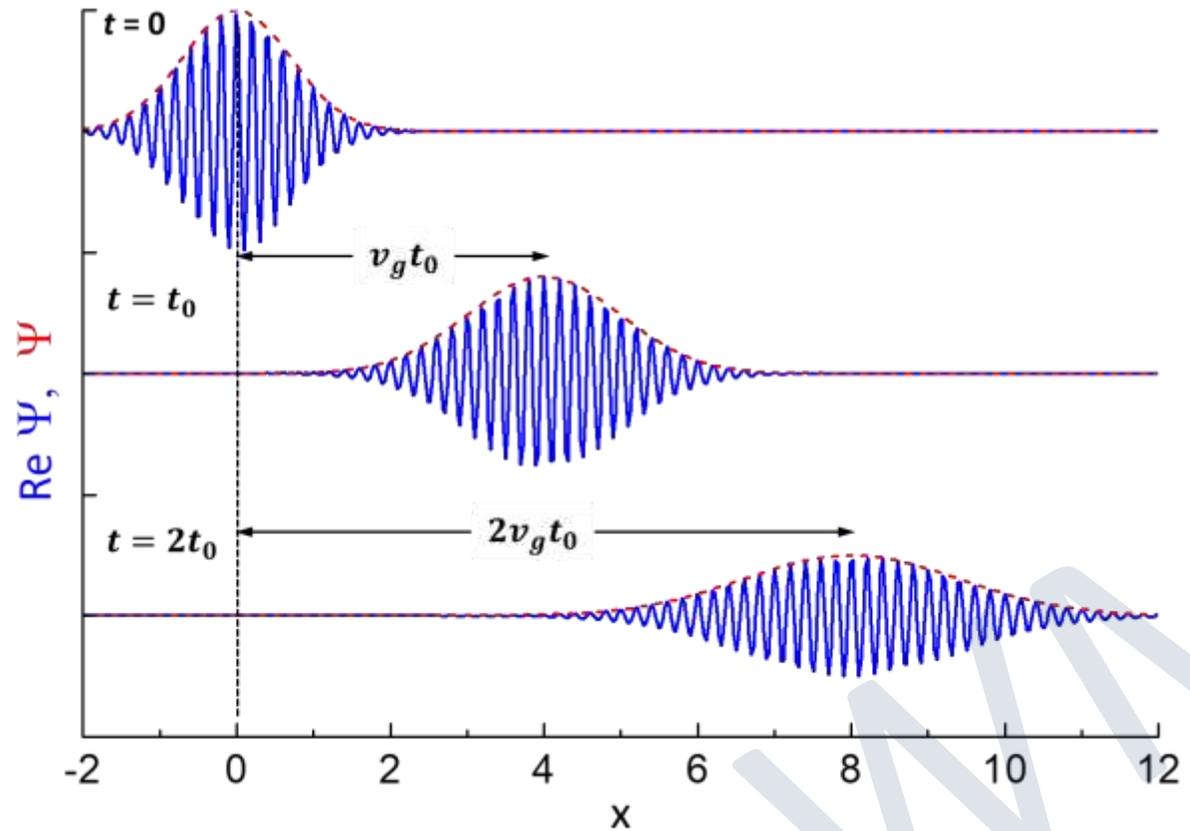
- ➔ bereitet Probleme bei der Diskussion der Bewegung von „Teilchen“ mit klassischen Bewegungsgleichungen
- ➔ Lösung: Konstruktion eines **Wellenpakets aus Blochwellen**

9.1 Semiklassisches Modell

- Wiederholung: Wellenpakete

Konstruktion von Wellenpaket durch lineare Überlagerung von Bloch-Wellen mit k -Werten aus Intervall $\left[k - \frac{\Delta k}{2}, k + \frac{\Delta k}{2} \right]$

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{k-\frac{\Delta k}{2}}^{k+\frac{\Delta k}{2}} a(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \frac{\epsilon_n}{\hbar} t]}$$



die grünen Punkte bewegen sich mit **Gruppen-**geschwindigkeit, der rote mit **Phasengeschwindigkeit**



9.1 Semiklassisches Modell

- Wiederholung: Wellenpakete

➤ Unschärferelation: $\Delta p \cdot \Delta x = \hbar \Delta k \cdot \Delta x \geq \hbar$

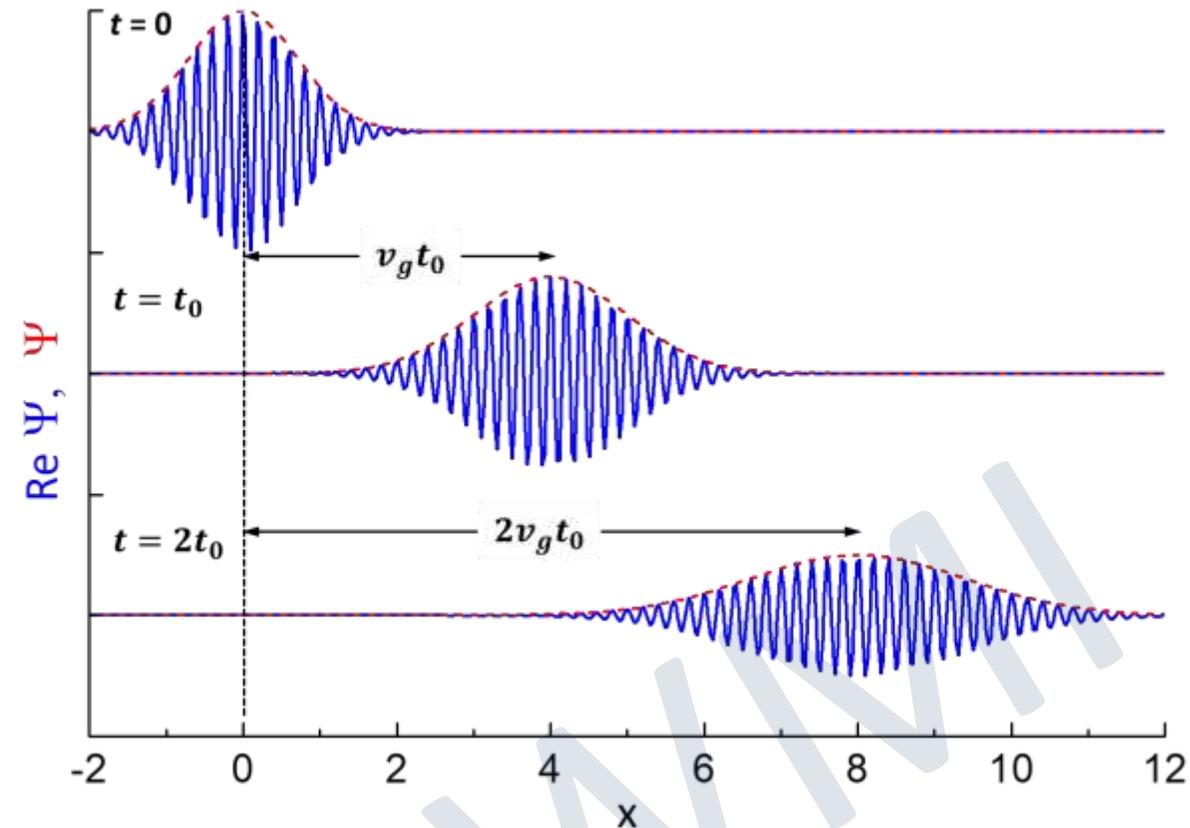
➤ Gruppengeschwindigkeit: $v_g = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k}$

➤ Phasengeschwindigkeit: $v_{ph} = \frac{\omega(k)}{k}$

➤ Dispersion (Zerfließen des Wellenpakets):
falls Wellen mit unterschiedlichem k
unterschiedliche Phasengeschwindigkeit besitzen

- Gruppengeschwindigkeit von Bloch-Wellenpaket:

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



9.1 Semiklassisches Modell

- Beschreibung von Transportprozessen:

- i. Beschreibung der Bewegung der Bloch-Elektronen zwischen Streuprozessen

- mit semiklassischem Modell möglich

- ii. Beschreibung von Stoßprozessen

- keine Antwort durch semiklassisches Modell

→ Streuintegrale

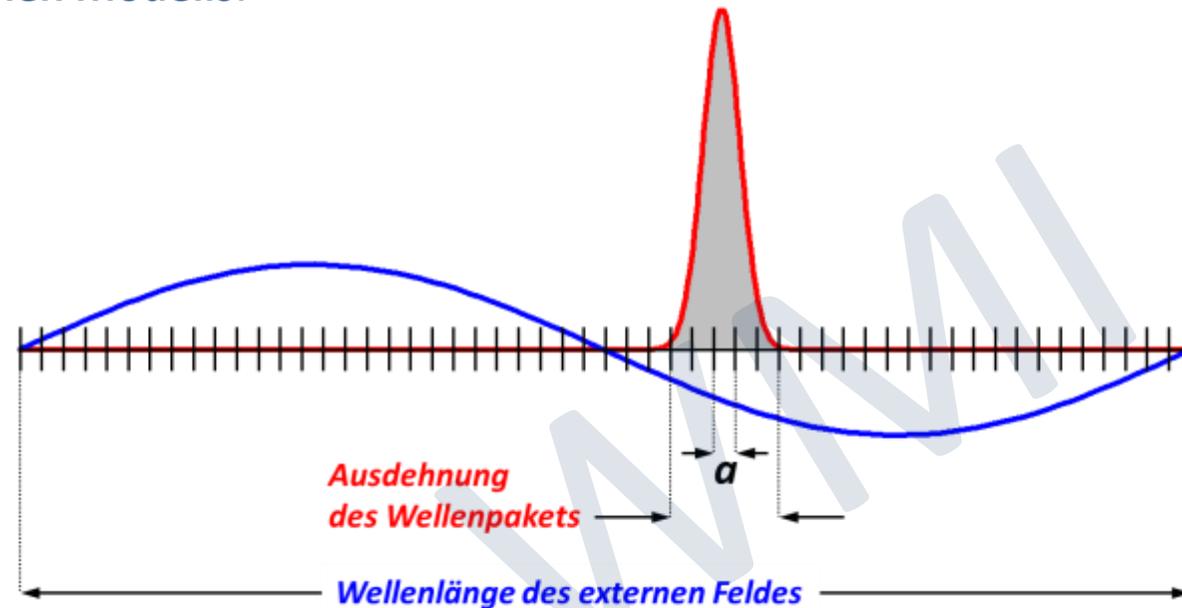
- Voraussetzungen für die Anwendbarkeit des semiklassischen Modells:

- i. da $\Delta k \ll 2\pi/a$ sein sollte, ist wegen $\Delta r \cdot \Delta k \geq 1$ dann $\Delta r \gg a$

- die Ausdehnung des Wellenpakets muss groß gegenüber dem Gitterabstand a sein

- ii. klassische Beschreibung der Bewegung zwischen den Stößen

- mittlere freie Weglänge ℓ und charakteristische Wellenlänge λ der externen Felder groß gegen die Ausdehnung des Wellenpakets



9.1 Semiklassisches Modell

- Beschreibung der Bewegung von Kristallelektronen mit semiklassischem Modell
 - beschreibt die Bewegung von Kristallelektronen, allerdings nur zwischen Streuprozessen
 - erfordert nur die Kenntnis der Bandstruktur $\varepsilon_n(\mathbf{k})$
- wir können jedem Kristallelektron eine Ladung q , einen Ort \mathbf{r} , eine Wellenzahl \mathbf{k} und einen Bandindex n zuordnen
 - unter der Wirkung von äußeren Kräften können sich Größen ändern
 - wir werden allerdings Einschränkungen machen

1. Bandindex n

der Bandindex n ist eine **Konstante der Bewegung**: semiklassisches Modell beschreibt **keine Band-Band-Übergänge**

2. klassische Bewegungsgleichungen: zeitliche Entwicklung von \mathbf{r} und \mathbf{k}

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

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

zum Vergleich: freie Elektronen

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

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

9.1 Semiklassisches Modell

3. effektive Masse

aus $\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$ folgt für die Zeitableitung der i -ten Geschwindigkeitskomponente

$$\frac{dv_{n,i}(\mathbf{k})}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right)_i = \frac{1}{\hbar} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \frac{dk_j}{dt}$$

mit $\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ folgt

$$\frac{dv_{n,i}(\mathbf{k})}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} F_j$$

Beziehung ist äquivalent zu klassischer Bewegungsgleichung $\dot{\mathbf{v}} = m^{-1} \mathbf{F}$, falls wir die skalare Masse m durch effektiven Massentensor ersetzen

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



Transformation auf Hauptachse
 → 3 effective Massen in
 Hauptachsenrichtung



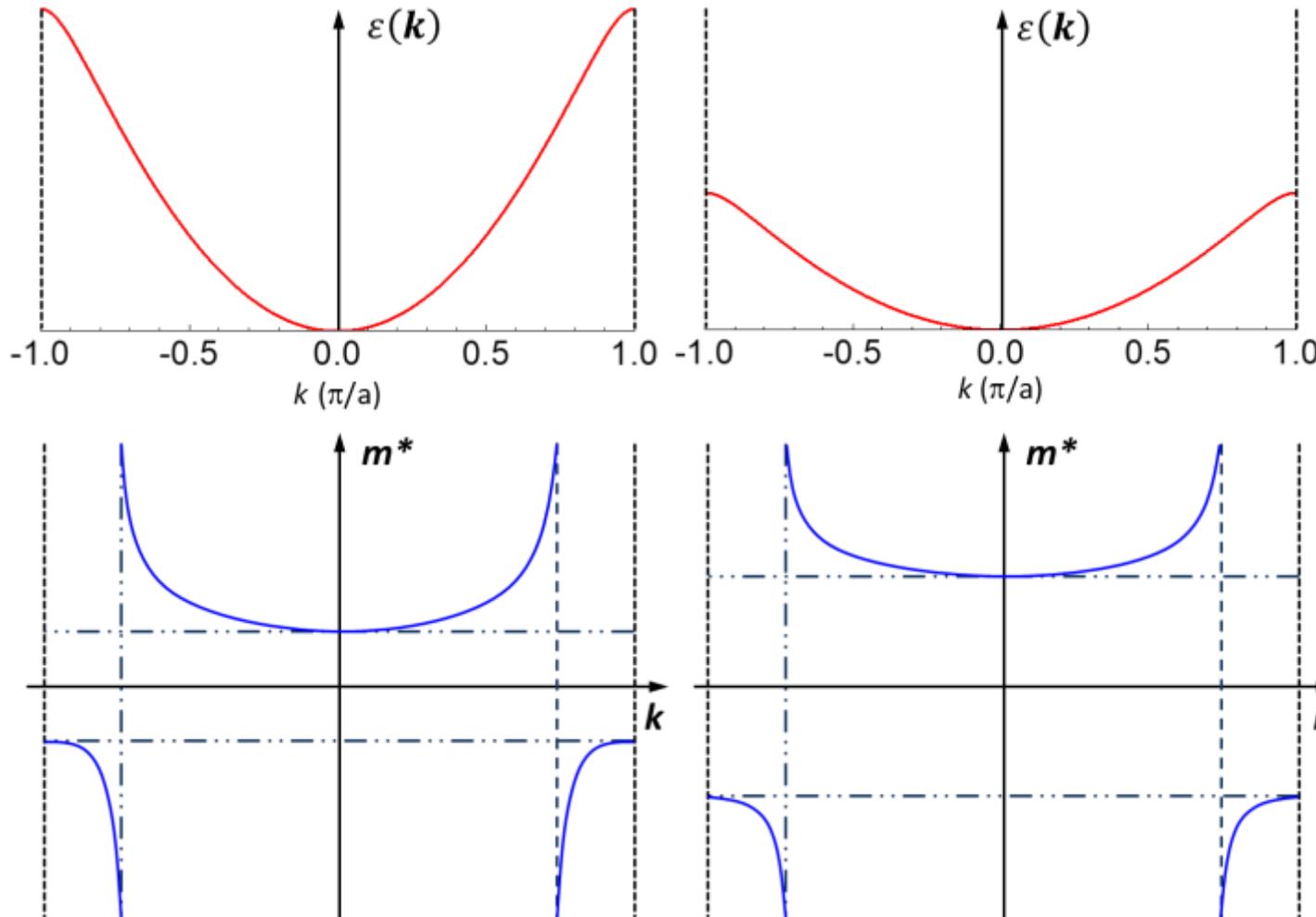
$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k^2}}$$

dynamische Masse von Kristallelektronen

isotroper Festkörper

9.1 Semiklassisches Modell

3. effektive Masse: Beispiel für 1D-Band mit unterschiedlicher Bandbreite



- am Rand der BZ ist Krümmung negativ
 ➔ negative effektive Masse
 ➔ äußere Kraft bewirkt Abnahme der Geschwindigkeit (Ursache ist Rückstreuung durch WW mit Gitter)
- schmale/breite Bänder sind mit großer/kleiner effektiven Masse verbunden
- Kristallelektron kann wie freies Teilchen mit effektiver Masse m^* betrachtet werden
 ➔ WW mit Gitter steckt in m^*

4. Kristallimpuls

- Wellenvektor \mathbf{k} ist nur bis auf reziproken Gittervektor \mathbf{G} wohldefiniert
 - ➔ Elektronen mit Wellenvektoren \mathbf{k} und $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ können nicht unterschieden werden
 - ➔ Beschränkung auf 1. Brillouin-Zone möglich

- die Größe $\hbar\mathbf{k}$ ist nur ein **Quasi-Impuls oder Kristallimpuls**
 - ➔ zeitliche Änderung von Quasi-Impuls resultiert nur aus den äußeren Kräften $\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$
 - ➔ zeitliche Änderung des Impulses von Kristallelektronen resultiert aus Summe von äußeren Kräften und Gitterkräften



5. Fermi-Statistik

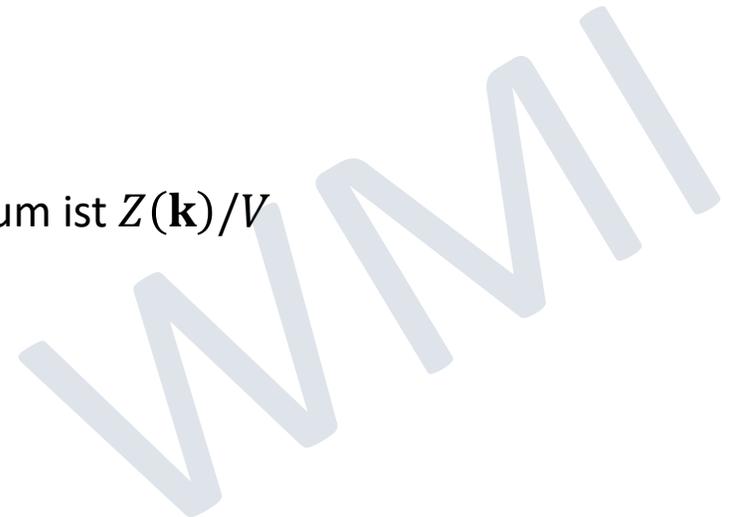
- der Beitrag von Elektronen aus Band n und Volumenelement d^3k zur Zustandsdichte ist gegeben durch

$$2 Z(\mathbf{k}) d^3k f[\varepsilon_n(\mathbf{k}), T] = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{d^3k}{\exp\left[\frac{\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mu}{k_B T}\right] + 1}$$

Spin Zustandsdichte im k -Raum Fermi-Dirac-Verteilung

- **Anmerkung:** Dichte der Elektronen im 6-dimensionalen (\mathbf{r}, \mathbf{k}) Phasenraum ist $Z(\mathbf{k})/V$

$$\frac{Z(\mathbf{k})}{V} = \frac{2}{(2\pi)^3}$$



9.1 Semiklassisches Modell

- Gültigkeit des semiklassischen Modells

- angelegte Felder müssen so klein sein, dass sie keine Band-Band-Übergänge verursachen können

Größe der äußeren Felder:

$$e|\mathbf{E}|a \ll \frac{[\varepsilon_g(\mathbf{k})]^2}{\varepsilon_F} \quad \text{kein elektrischer Durchbruch} \quad \text{(ohne Beweis)}$$

$$\hbar\omega_c \ll \frac{[\varepsilon_g(\mathbf{k})]^2}{\varepsilon_F} \quad \text{kein magnetischer Durchbruch}$$

Abschätzung: $|\mathbf{E}| \simeq 100 \text{ V/m}$, $a \simeq 0.1 \text{ nm} \rightarrow e|\mathbf{E}|a \simeq 10^{-8} \text{ eV}$
 da $\varepsilon_F \simeq \text{einige eV}$ muss $\varepsilon_g \gg 10^{-4} \text{ eV}$ sein \rightarrow fast immer erfüllt

$|\mathbf{B}| \simeq 1 \text{ T}$, $\hbar\omega_c \simeq 10^{-4} \text{ eV}$
 da $\varepsilon_F \simeq \text{einige eV}$ muss $\varepsilon_g \gg 10^{-2} \text{ eV}$ sein \rightarrow oft sehr gut erfüllt

- Frequenz der äußeren Felder muss klein genug sein, um keine Band-Band-Übergänge zu induzieren

$$\hbar\omega \ll \varepsilon_g(\mathbf{k})$$

9.2 Bewegung von Kristallelektronen

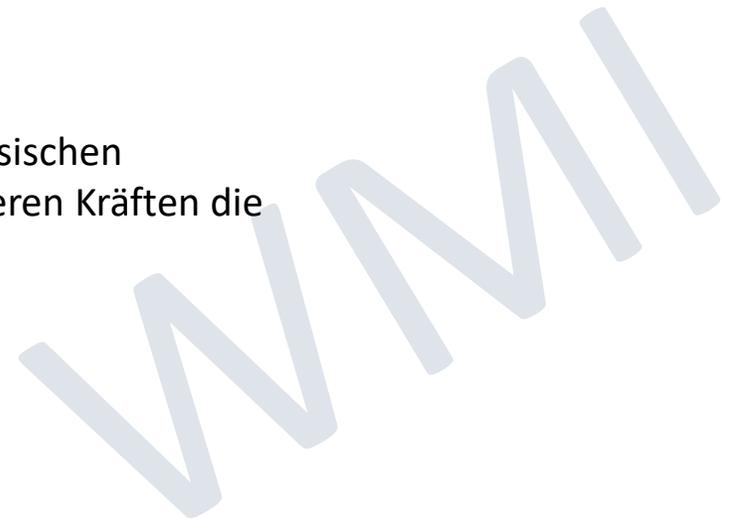
- Diskussion mit zwei Grundannahmen:
 - i. Wir betrachten nur ein Band und lassen den Bandindex weg
 - ii. Wir diskutieren Fall $T = 0 \rightarrow f(\varepsilon, T) = f(\varepsilon, T = 0)$

- vollkommen gefüllte Bänder
 - Wiederholung: Liouville Theorem

Das Phasenraumvolumen bleibt während einer klassischen Bewegung erhalten

da wir die Dynamik der Kristallelektronen im semiklassischen Modell mit klassischen Bewegungsgleichungen beschreiben, ändert sich unter der Wirkung von äußeren Kräften die Konfiguration eines gefüllten Bandes nicht

\rightarrow ein volles Band bleibt ein volles Band



9.2.1 Ströme in vollkommen gefüllten Bändern

- Ströme in vollkommen gefüllten Bändern

- Beitrag der Elektronen aus k -Raumelement d^3k zur Teilchenstromdichte \mathbf{J} :

$$d\mathbf{J} = n \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) = (2 Z(\mathbf{k}) d^3k) / V \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \mathbf{v}(\mathbf{k}) 2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) d^3k$$

Geschwindigkeit
Zustandsdichte im k -Raum
Volumenelement im k -Raum

mit $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})$
 $n =$ Teilchendichte

elektrische Stromdichte $\mathbf{J}_q = q \cdot \mathbf{J}$ ergibt sich durch Integration über die 1. Brillouin-Zone

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

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

Wärmestromdichte $\mathbf{J}_h = (\varepsilon - \mu) \cdot \mathbf{J}$ ergibt sich analog zu

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

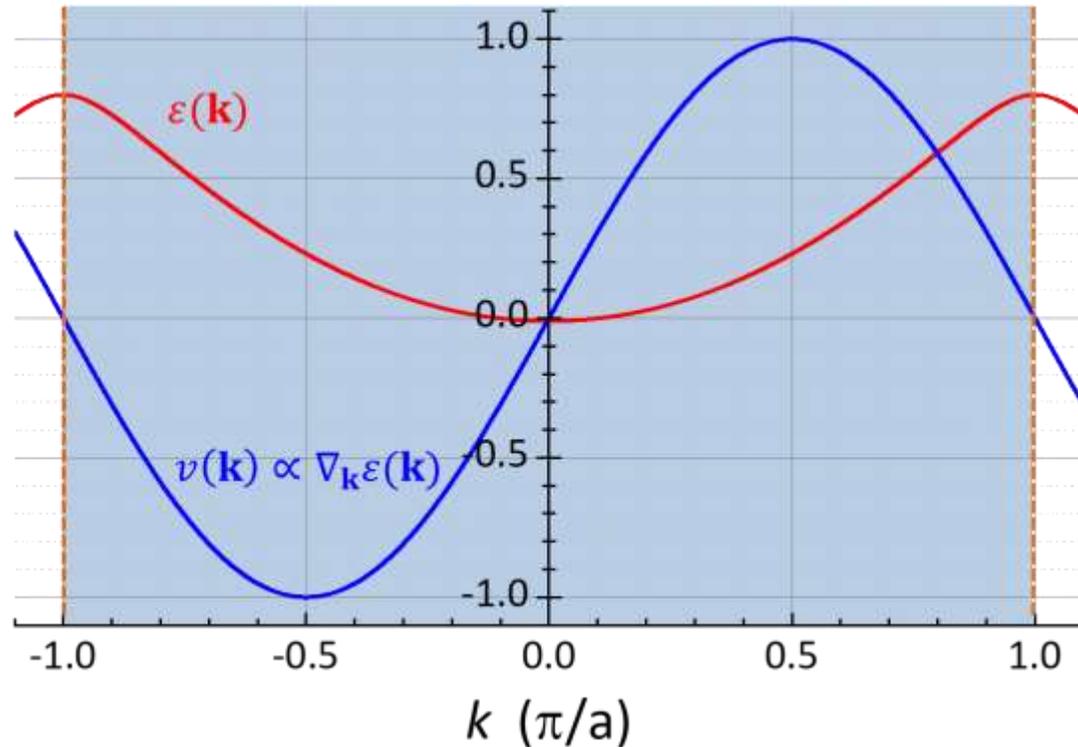
$(\varepsilon - \mu) =$ pro Teilchen transportierte Wärmemenge

Hinweis: $dU = TdS + \mu dN \Rightarrow dQ = dU - \mu dN$

9.2.1 Ströme in vollkommen gefüllten Bändern

- Ströme in vollkommen gefüllten Bändern

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



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

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

Der Beitrag von gefüllten Bändern zur elektrischen und zur Wärme-
stromdichte von gefüllten Bändern verschwindet. Elektrische und
Wärmeleitung kommt nur durch teilweise gefüllte Bänder zustande.



9.2.2 Ströme in teilweise gefüllten Bändern

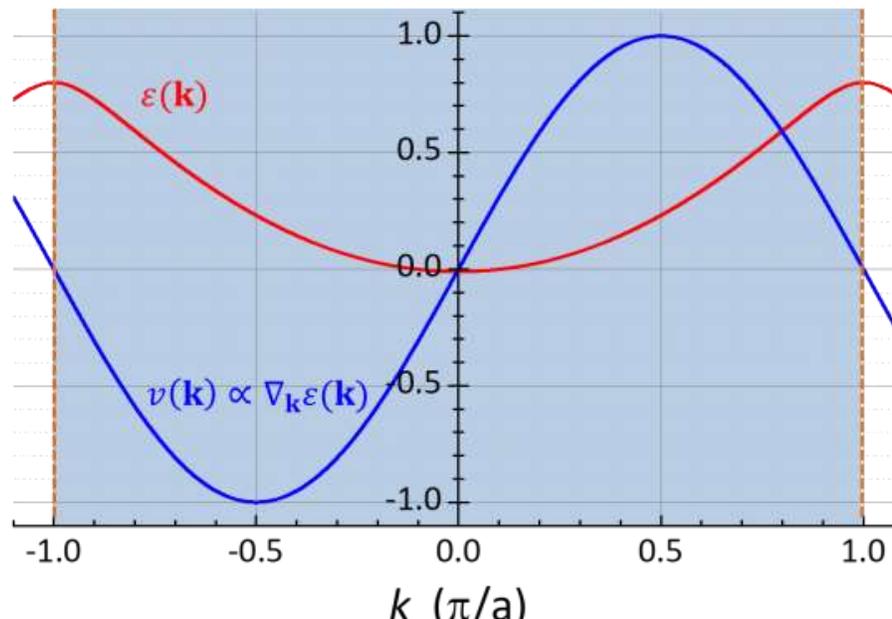
- Ströme in teilweise gefüllten Bändern

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

- Bewegung im elektrischen Feld

- Änderung der Wellenzahl bei Abwesenheit von Streuprozessen

$$\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0) + \delta\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0) - \frac{e\mathbf{E}}{\hbar}t$$

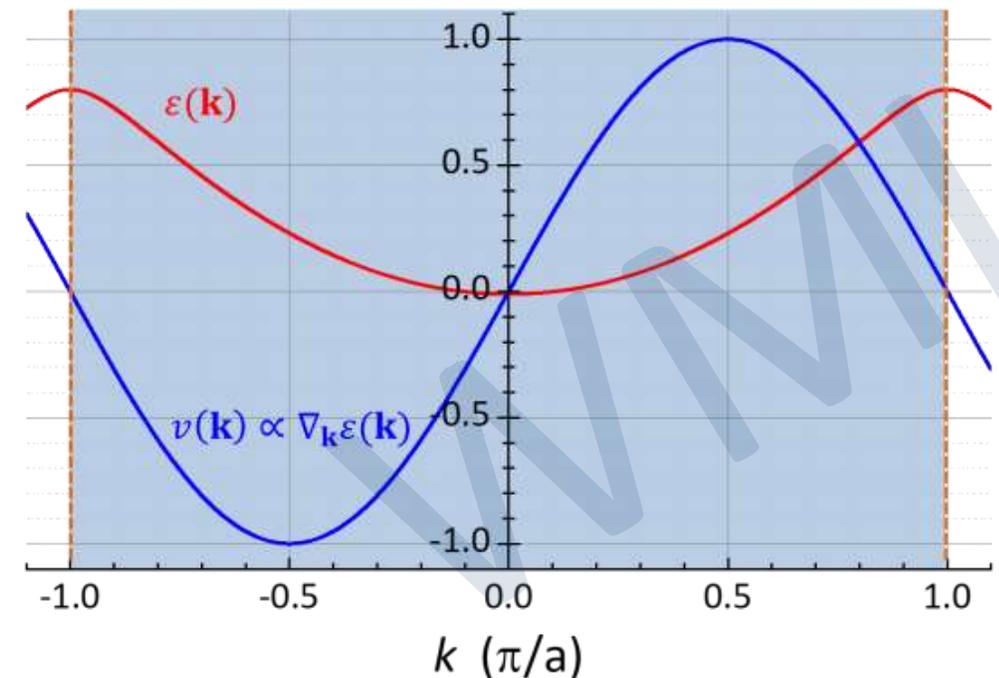
- da sich Wellenzahl pro Zeiteinheit um den gleichen Betrag ändert, folgt für Geschwindigkeit

$$\mathbf{v}[\mathbf{k}(t)] = \mathbf{v}\left[\mathbf{k}(0) - \frac{e\mathbf{E}}{\hbar}t\right]$$

→ da $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ eine beschränkte Funktion in k -Raum ist, ist $\mathbf{v}[\mathbf{k}(t)]$ eine beschränkte Funktion in der Zeit

in der Nähe des Zonenrands nimmt $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ bei einer Erhöhung von \mathbf{k} ab

- Beschleunigung des Elektrons ist äußerer Kraft entgegengerichtet
- Ursache: es wirkt nicht nur externe Kraft, sondern auch Gitterkräfte



9.2.2 Ströme in teilweise gefüllten Bändern

- **Beispiel: Bloch-Oszillationen**

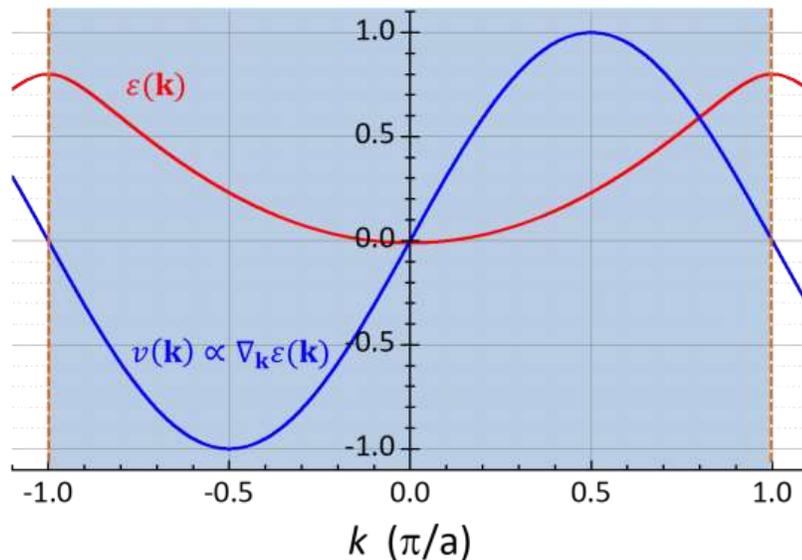
- wir gehen von einfacher 1D Tight-Binding Bandstruktur $\varepsilon(k) = A \cos(ka)$ aus und vernachlässigen Streuung

➔
$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \left[\frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} \right] = \frac{Aa}{\hbar} \sin(ka)$$

➔
$$x(t) = \int_0^t v[k(t')] dt' = x(0) - A' \cos \omega_B t \quad \text{mit } \omega_B = eaE/\hbar$$

$$\mathbf{k}(t) = -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} t$$

ein von außen angelegtes statisches elektrisches Feld führt zu einer oszillierenden Elektronenbewegung



➔ **Bloch-Oszillationen**

mit $a \sim 4 \text{ \AA}$ wird mit $E \simeq 10^3 \text{ V/m}$ bereits $\omega_B \sim 10^9 \text{ 1/s}$ erreicht

➔ GHz bis THz-Oszillatoren

➔ Schwingsamplitude $\simeq \frac{v_F}{\omega_B} \sim 100 \text{ \mu m}$ @ 10^9 1/s

➔ sehr reine Materialien notwendig

- Bloch-Oszillationen

PHYSICAL REVIEW B

VOLUME 51, NUMBER 23

15 JUNE 1995-I

Bloch oscillations at room temperature

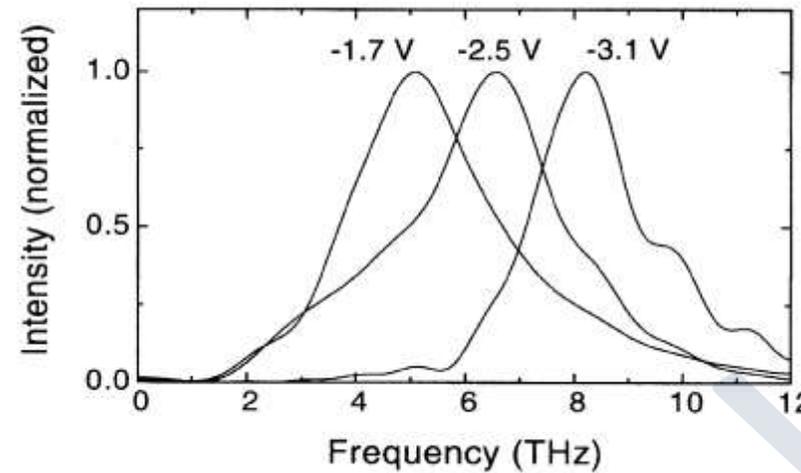
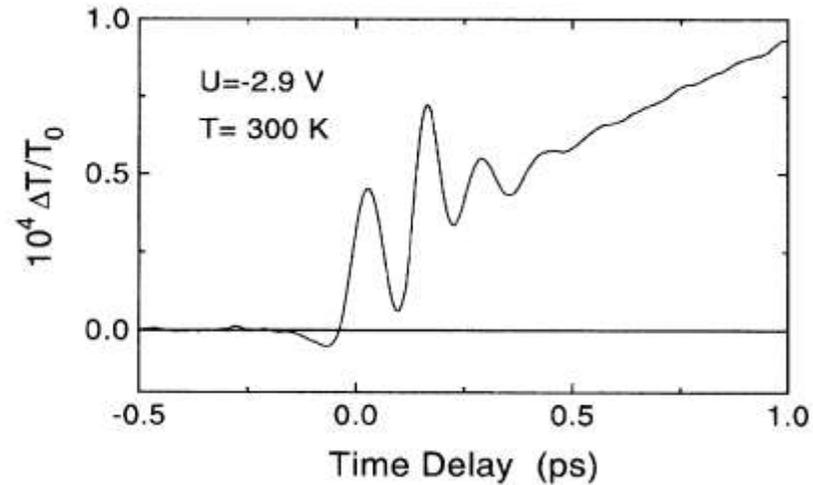
T. Dekorsy, R. Ott, and H. Kurz

Institut für Halbleitertechnik, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, D-52056 Aachen, Germany

K. Köhler

Fraunhofer-Institut für Angewandte Festkörperphysik, D-79108 Freiburg, Germany

(Received 10 March 1995)



- treten nur in sehr reinen Materialien auf
- praktische Anwendung: Erzeugung von THz-Strahlung

• **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

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

effektive
Massetensor

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

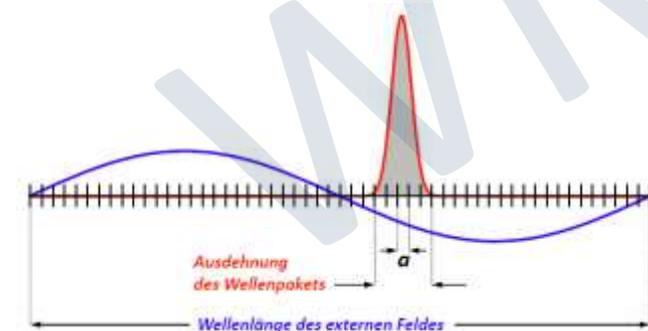
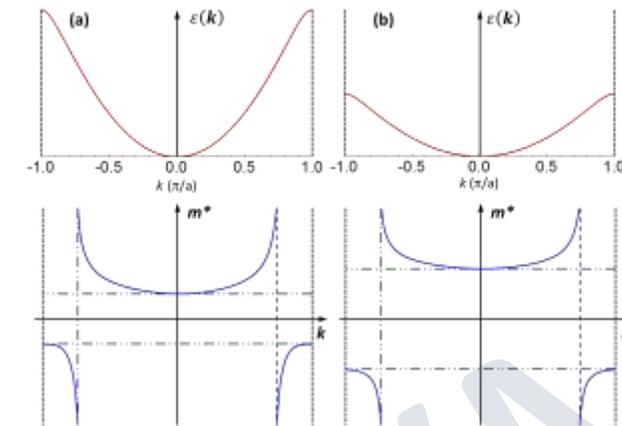
→ Bandindex ist Konstante der Bewegung → keine Band-Band-Übergänge

→ 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**

WMI