

2.4. Elektronen im Filterpotential und wirken schwach veränderliche Potentiale $U(\vec{r})$

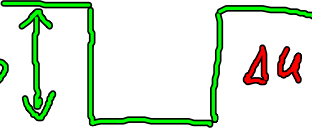
viel kleiner: Nanostrukturen

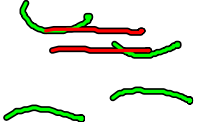


2 Materialien III III III

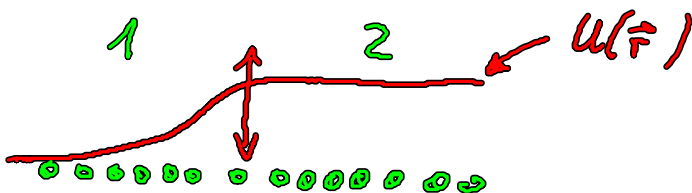
↔ Nanostruktur
 10^{-3} m

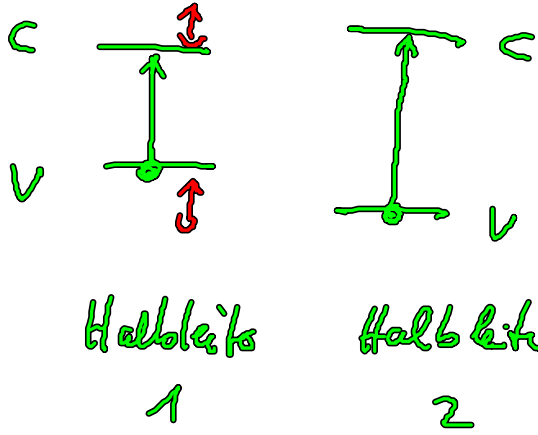
typische Werte: 10 eV

unterschiedliche
Bandlücken →  ΔU
der 2 Materialien

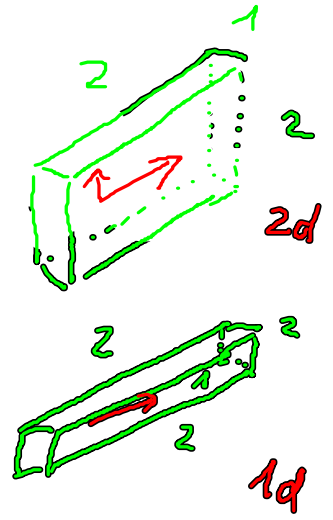
→ Sprung in  $= \Delta U$

durch Aufeinanderbringen von Materialien verschiedener Bandlücken.





herstellbar:
 von Quantenfilmen
 über Quantendrähte



bis Quantenpunkt



gilt \forall Punkte $U(\vec{r})$,

Schwach veränderlich $|\vec{\nabla}_r U(\vec{r})| \ll \frac{U(\vec{r})}{|\vec{a}_i|}$

Um $U(\vec{r})$ zu berücksichtigen machen wir neue Ansatz:

valid in 3d $\psi_\lambda(k, \vec{r}) = \sum_n \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n}}{\hbar v} \sum_j c_j^\lambda w_j(\vec{r} - \vec{R}_n)$

gilt in 2d, 1d, 0d:

$$\psi_\lambda(\vec{r}) = \sum_n c(R_n) \sum_j c_j^\lambda w_j(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

kann man hier über auf \vec{r} Punkt, $\vec{k} \approx 0$;
 weil $U(\vec{r}) \exists e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \rightarrow C(R)$.

$$\psi_\lambda(\vec{r}) = C(\vec{r}) \sum_n \sum_j c_j^\lambda w_j(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Näherung: $C(\vec{r})$ ist slow und veränderlich über eine Strukturzelle und $w_j(\vec{r} - \vec{R}_n) \sim \delta(\vec{r} - \vec{R}_n)$

$$\psi_\lambda(\vec{r}) = C(\vec{r}) \cdot \underline{u_{\lambda k=0}(\vec{r})}$$

(siehe letzte VL)

$C(\vec{r})$ bestimmen! aus der Hamiltonmatrix die die Energie bestimmt: nur für Quantenstufen

$$H_{el} \sum_{j^i n} C(\vec{R}_n) c_j^\lambda w_j(\vec{r} - \vec{R}_n) = \overset{\leftarrow}{E_\lambda} \sum_{j^i n} C(\vec{R}_n) c_j^\lambda w_j(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

↑

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_G(\vec{r}) + U(\vec{r}) \right)$$

$C(\vec{R}_n) \rightarrow C(\vec{r})$ wegen der Lokalisierung der w_j (oben)

$\Delta C(\vec{r}) \rightarrow 0$ (wegen kleiner Änderung.)

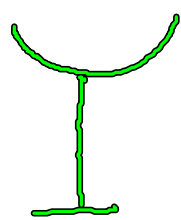
$$\sum_{ij} c(\vec{R}_n) c_j^\dagger \omega_j (\vec{r} - \vec{R}_n) =$$

$$\sum_{ijk} c(k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} c_j^\dagger \omega_j (\vec{r} - \vec{R}_n) =$$

$$\sum_k c(k) \varphi_\lambda(k, \vec{r}) \text{ Ef. Ref.}$$

kurz: $\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + U_a(\vec{r}) \right) \varphi_\lambda(k, \vec{r}) = \varepsilon_\lambda(k) \varphi_\lambda(k, \vec{r})$

an π -Plat.

$$\left. \begin{array}{l} \varepsilon_0^\lambda + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\lambda^*} \end{array} \right\}$$


$$\left(\varepsilon_0^\lambda - \frac{\hbar^2 \Delta}{2m_\lambda^*} + U(r) \right) c(r) = \overline{\varepsilon}_\lambda c(r)$$

Damit liegt eine Gleichung f. $c(r)$ vor:

Zusammenfassung.

Näherung der effektiven Masse ist schwer vorwählbar

Die Wellenfunktion ist durch

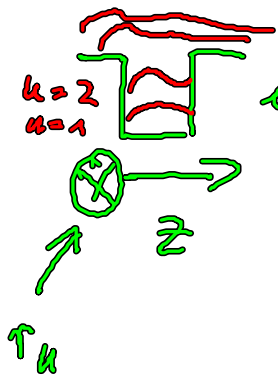
$$\psi_1(r) = C(r) \underbrace{u_{k=0, \lambda}(\vec{r})}_{\text{bekannt}},$$

$C(r)$ erfüllt eine Eigenwertgl.

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_\lambda^*} + U(r) \right) C(r) = (\bar{E}_1 - \varepsilon_0^\lambda) C(r)$$

Die Bewegung des Elektronen ist durch eine Schrödingergl. gegeben wie bei einem Elektron ohne Filterpotential, allerdings mit effektiver Masse!

$U(r)$ kann jetzt z.B. bei Quantenfiltern



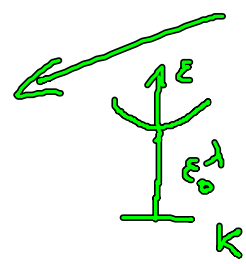
ein Kastenpotential sein

$$\psi_{\lambda n, k_\parallel}(r) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i k_\parallel \vec{r}_\parallel} \cdot \underbrace{\psi_n(z)}_{\text{}} \cdot u_{k=0, \lambda}(\vec{r})$$

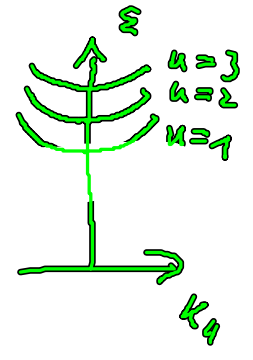
Die Energie sind durch $\bar{E}_1 = \varepsilon_0^\lambda + \text{Energie des Lösg}$

des gl. f. c

a) $U=0$ 3d: $\frac{k^2 \hbar^2}{2m^* \lambda}$



b) $U = \begin{matrix} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{matrix} \frac{\hbar^2}{2m^* \lambda} + \underline{E_n}$



Quantifizierung
in kante

u stellt verschiedene Subbänder dar.

c) bis zu Quantpunkt 0d: E_{n_1, n_2, n_3}

Quantzahl der
3 Richtungen des Quantpunkts

IV Quantisierung des lok. felds

Begriff: Photon als Quantfelder

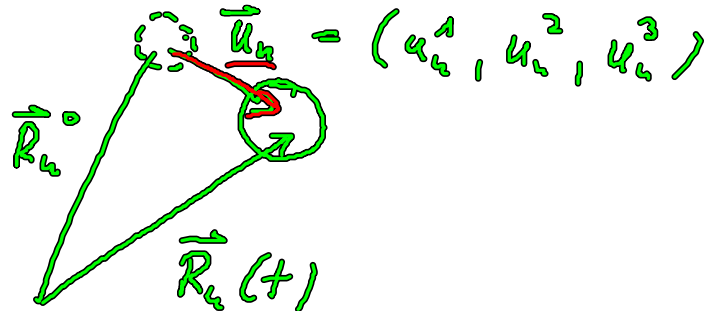
Modell: von Details des Elektronen absehen und

us die Ionen distribution:

$$H_{ion} = \sum_k \frac{p_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ \alpha\beta}} \phi_{\alpha\beta}^{kl} u_k^\alpha u_l^\beta \quad (u \neq m)$$

kinetisch E_k.
potentiell E_k der Ionen-*ion* WW

Ruhelage \vec{R}_k^0 des k -ten Ions



$\vec{u}_k(t)$ ist die Auslenkung des Ions

$\vec{p}_k(t)$ ist der Ionenimpuls $m_k \dot{\vec{u}}_k(t)$

sieht aus wie gekoppelt harmonische Oszillatoren $\{u_k^\alpha\}$

Kopplungskonstanten sind $\phi_{\alpha\beta}^{kl}$.

Gilt mit Basis $\vec{u}_{ns}(t)$ $k \rightarrow (k, s)$

$\uparrow \quad \uparrow$
 k -te Zelle s -te Ion

$$\phi_{\alpha\beta}^{kl} \rightarrow \underline{\phi_{\alpha\beta}^{kl}(s, t)}$$

Interpretation gleich

Eigenschaften der ϕ 's:

a) Kraftkonstanten sind symmetrisch: $\phi_{\alpha\beta}^{u_n}(s, t) = \phi_{\beta\alpha}^{u_n}(s, t)$
(vertausch d. partielle Ableitungen)

b) Kraftkonstante dürfen nur von der Diff. z. zwischen u und v abhängen (Rigidität)

$$\phi_{\alpha\beta}^{u_n}(s, t) = \phi_{\alpha\beta}^{u-v}(s, t)$$

c) $\sum_{u, s} \phi_{\alpha\beta}^{u_n}(s, t) = 0$ (Beweis gleich)

$\hat{=}$ gleichmäßige Verschiebung aller LOs

Ideen: 1) kollektive Anregungen des LOs system
woraus Arbeit

2) kollektive Anreg. zu quantisieren

(bei Ausdehng. eines LOs wird sich

die Anregung kollektiv auf alle anderen LOs verteilen)

1.) Klassische Theorie

1.1) Beweis ausgleich ungen

$$\text{Hamilton formalismus: } \dot{\vec{p}} = - \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \quad (\vec{x} = \vec{u})$$

$$\dot{p}_n^\alpha = - \frac{\partial H}{\partial u_n^\alpha} = - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta, m \\ \beta \neq \alpha}} \underbrace{\phi_{\beta\alpha}^{m\beta}}_{\text{RIP}} \frac{\partial}{\partial u_n^\alpha} \underbrace{(u_n^\beta u_n^\beta)}_{\text{RIP}}$$

$$\boxed{m_n \ddot{u}_n^\alpha = - \sum_{\beta, m} \phi_{\alpha\beta}^{m\beta} u_n^\beta}$$

Bewegungsgleichg. für die α -te Komponente der Auslenkung der n -ten Los. (Newton).

Kraft wird durch Kraftkonstant ϕ bestimmt und

die andere Auslenkungen u_n^β

$\phi_{\alpha\beta}^{m\beta}$: bestimmte Kraftkonstant die in Richtg. α

auf der n -ten Los wirkt wenn in Richtg. β am

n -ten Los gezogen wird.

Gesamtkraft ist Summe aus alle Beiträge

Lsg. durch Ansatz: $u_n^\alpha = \underbrace{A^\alpha(\vec{q})}_{\text{Welle durch Medium mit Dispersion } \omega = \omega(\vec{q})} e^{i\vec{q}\vec{a}_n - \omega q t} (u_n N_0)^{-1/2}$

↓
Normierung

einsetzen:

$$\omega_q^2 A^\alpha(q) = \sum_{\beta, n} \underbrace{\phi_{\alpha\beta}^{un} (u_n u_n)^{-1/2} e^{i\vec{q}(\vec{a}_n - \vec{a}_n)}}_{\text{Matrix}} A^\beta(q)$$

$$\omega_q^2 A^\alpha(q) = \sum_{\beta} \underbrace{C_{\alpha\beta}^u}_{\text{Matrix}} A^\beta(q)$$

$$\omega_q^2 \vec{A}(q) = \vec{C} \cdot \vec{A}(q)$$

→ Eigenwertproblem da gehört ω und \vec{A}

Die Dispersionsrelation der Welle ist durch die Eigenwerte der Matrix gegeben.

Beweis:

a) es nicht $u=0$ anzusehen (Trivialisität)

b) bei \vec{q} mit Basis: $C_{\alpha\beta} \rightarrow C_{\alpha\beta}^{SS'}$

$$\omega_q^2 A_S^\alpha = \sum_{\beta S'} C_{\alpha\beta}^{SS'} A_{S'}^\beta$$

Dimension: $3 \cdot p$

\swarrow \searrow
 kartesisch Anzahl d.
 Koord. Lösungen
 $\alpha = (x, y, z)$ Zelle

\rightarrow also f. jed $q \exists 3p$ Lösg.

c) $C_{\alpha\beta}^{SS'}$ ist hermitisch.

$\rightarrow \omega_q^2$ ist reell

\rightarrow verschied. Lsg.: $e^{\pm i\omega_q t}$, $e^{\pm |\omega_q| t}$

\swarrow
 Sind physikalisch und
 bedeuten Schwingung
 Anregung

\searrow
 Unphysikalisch sind
 entweder verbot (+)
 oder schnell wachsend (-)

d) Man nennt die verschied. Lösungen f. ω_q :

$\omega_j(q)$, j heißt Mode (1... $3p$ Stück)

e) Klassifizierung:

$$\omega_{\vec{q}}(\omega) =$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \neq 0 \quad \text{(a) optisch Phonon} \\ = 0 \quad \text{(b) akustisch Phonon} \end{array} \right.$$

