

## Semiklass. Bewegung der Blochelektronen:

Ersetzt man den Mittelwert  $\langle \underline{p}_{kin} \rangle$  durch  $\hbar \underline{k}$ ,  
so gilt für kleine  $\underline{B}$ -Felder (und alle el. Felder!)

$$\begin{aligned} \hbar \dot{\underline{k}} &= -e \underline{E} - e \underline{v}_g(\underline{k}) \times \underline{B} \\ \dot{\underline{r}} &= \underline{v}_g(\underline{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\underline{k}} E_n(\underline{k}) \end{aligned}$$

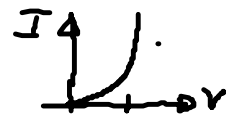
$\langle \underline{p}_{kin} \rangle +$  Gitterkraft  
ersetzt durch  $\hbar \underline{k}$

NB: (i) Die gesamte Information über die Dynamik ist  
in der stationären Bandstruktur  $E_n(\underline{k})$  enthalten.

(ii)  $\hbar \underline{k}$  ist Quasi-Impuls! (zeitl. Änderung nur  
durch äußere Felder)

$\neq \langle \underline{p} \rangle$  Elektronen-Impuls (Änderung durch  
äußere Felder und  
period. Gitterpot.  $V$ )

(iii)  $E$  darf nicht zu stark sein

$\Rightarrow$  keine Interbandübergänge induziert   
(Elektr. Durchbruch, Zener-Effekt)

$\Rightarrow$  Bandindex  $n$  fest

(iv) Keine Stoßprozesse der Elektronen berücksichtigt  
( $\rightarrow \S 6$ )

Kristallelektronen im el. Feld  $\underline{E} = -\nabla \phi$ :

zeitabh. Schrödingergl.:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r}) - e\phi(\underline{r}) \right] \psi_n(\underline{r}, t) = i\hbar \dot{\psi}_n(\underline{r}, t)$$

Wellenpaket  $\psi_n(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{k}'} c_n(\underline{k}', t) \psi_{n\underline{k}'}(\underline{r})$  :

$$\sum_{\underline{k}'} c_n(\underline{k}', t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r}) - e\phi \right] \psi_{n\underline{k}'}(\underline{r})$$

$$= \sum_{\underline{k}'} c_n(\underline{k}', t) [E_n(\underline{k}') - e\phi] \psi_{n\underline{k}'} = \sum_{\underline{k}'} c_n(\underline{k}', t) [H_n^* - e\phi] \psi_{n\underline{k}'}$$

wobei  $H_n^* := E_n(-i\nabla)$  ein äquivalenter  
Ham.op. des  $n$ -ten Bandes ist ( $\hbar \underline{k} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$ )

Beweis :  $E_n(\underline{k}) = \sum_m E_n^m e^{i\underline{R}_m \cdot \underline{k}}$  (\*) (Fourier-Reihe  
 period. im reziproken  
 Gitter)

$$\underbrace{E_n(-i\nabla)}_{H_n^*} \psi_{n\underline{k}}(\underline{r}) = \sum_m E_n^m e^{i\underline{R}_m \cdot \nabla} \psi_{n\underline{k}}(\underline{r})$$

$$= \sum_m E_n^m \left( 1 + \underline{R}_m \cdot \nabla + \frac{1}{2} (\underline{R}_m \cdot \nabla)^2 + \dots \right) \psi_{n\underline{k}}(\underline{r})$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_n E_n^m \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) \\
 &= \sum_n E_n^m e^{i\mathbf{R}_m \cdot \mathbf{k}} \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
 &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{E_n(\mathbf{k})} \quad (*)
 \end{aligned}$$

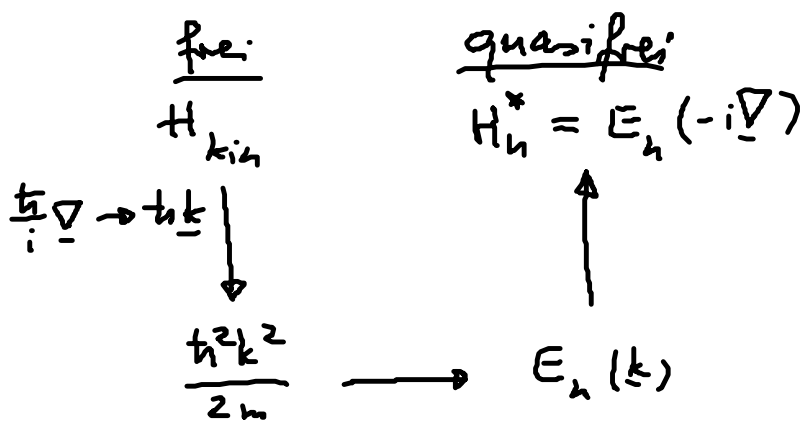
□

Also

$$(H_n^* - e\phi) \varphi_n = i\hbar \dot{\varphi}_n$$

per. Pot.  $V(\mathbf{r})$  in Blochfkt. inkorporiert!

Wellenpaket im period. Pot. + äusserem E-Feld  $\rightarrow$  quasifreies El. mit Energie dispersion  $E_n(\mathbf{k})$  im äusseren Feld



Eff.-Massen-Näherung (wichtig für Halbleiter)

Entw. von  $E_n(\mathbf{k})$  in der Nähe eines Bandextremums (z.B.  $\mathbf{k}=0$ ), vgl. § 4.1:

$$E_n(\mathbf{k}) \approx \underbrace{E_n(0)}_0 + \frac{1}{2} \sum_{ij} \underbrace{\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}}_{\hbar^2 \left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij}}(0) k_i k_j \approx \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}$$

isotropes Band

eff. Massentensor

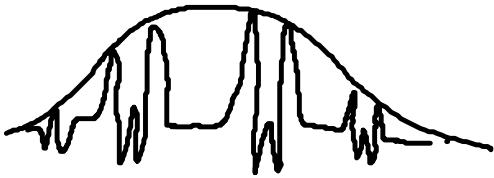
Entw. der Blochfkt. in der Umgebung von  $\mathbf{k}=0$ :

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n0}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_{n0}(\mathbf{r})$$

schnell langsam  
 $\rightarrow$   $\mathbf{r}$  verändert. in  $\mathbf{k}$

$$\Rightarrow \text{Wannier fkt. } \psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}'} c_n(\mathbf{k}', t) \psi_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$$

$$\approx \underbrace{\sum_{\mathbf{k}'} c_n(\mathbf{k}', t) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}_{\text{Envelope } F_n(\mathbf{r}, t)} \psi_{n0}(\mathbf{r})$$



Envelope  $F_n(\mathbf{r}, t)$  langsam veränderlich

$$E_n(-i\nabla) F_n(\mathbf{r}, t) \psi_{n0}(\mathbf{r}) = \sum_n E_n^n F_n(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n, t) \psi_{n0}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$$

$$= \psi_{n0}(\mathbf{r}) \sum_n E_n^n e^{i\mathbf{R}_n \cdot \nabla} F_n(\mathbf{r})$$

$E_n(-i\nabla) F_n(\mathbf{r})$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - e\phi(\mathbf{r}) \right] F_n(\mathbf{r}, t) = i\hbar \dot{F}_n(\mathbf{r}, t)$$

Effektiv-Massen-gl. (isotrop)

$$H_n^* = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (\text{anisotrop})$$

Voraussetz. der Eff.-Massen-Näherung

(i) El. Feld ändert sich wenig auf Längenskala des Wellenpak.

(ii) Wellenpaket aus Zuständen in der Nähe des Bandextrem. aufgebaut

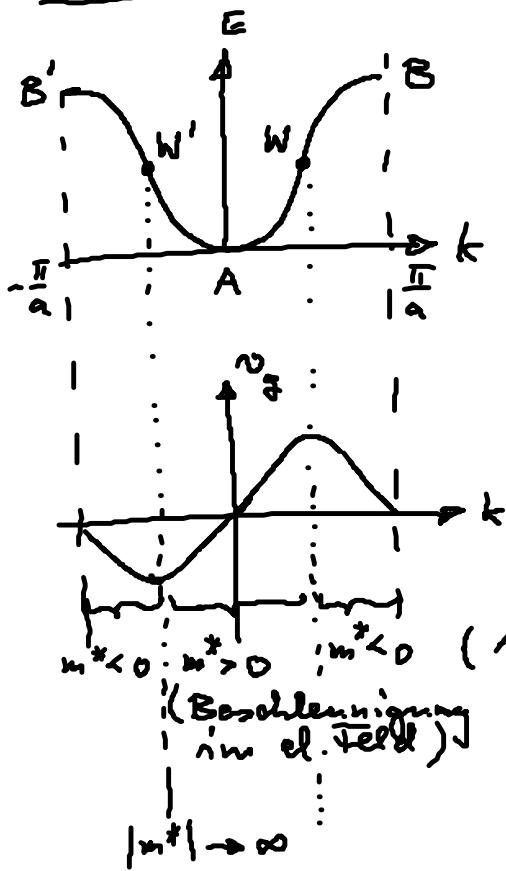
Ev.g. :  $\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \underline{\mathcal{E}}$

$$\underline{v}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \dot{\mathbf{k}}}{m^*}$$

$$m^* \underline{v}_g = -e \underline{\mathcal{E}}$$

quantisiertes Teilchen der Masse  $m^*$

# Interpretation der Dynamik für bel. Bandstruktur



(konst. el. Feld)

"eff. Masse" ändert sich zeitlich mit Änderung von  $k(t) = k(0) - \frac{eE}{\hbar} t$ :

$$A \rightarrow W \rightarrow B \equiv B' \rightarrow W' \rightarrow A$$

Oszillation in der Energie, in  $v_g$  und im Ort:

Block-Oszillation!

Aber: i.a. nicht beobachtbar, da Streuprozesse mit Phononen zu Energie-relax. führen (mittl. Strenzzeit  $\tau = 10^{-14} s$ ,  $E = 1 V/cm$ )  
 $\Delta k = -\frac{eE\tau}{\hbar} \sim 10 \text{ cm}^{-1} \ll 1/a \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$

(Abbremsung durch Gitterkräfte)

↓  
 Bragg-Reflexion in Gegenrichtung zum el. Feld

In Übergitterstrukturen ( $d \gg a_{\text{Atom}}$ ): Minibänder ( $k_{\text{BZ}} \ll \frac{1}{a_{\text{Atom}}}$ )

⇒ Block-Oszillationen beobachtbar (K. Leo, H. Kuvz 1993)

Gleichspannung → Osz.  $f = 0.5 - 2 \text{ THz}$

$$\Delta k = \frac{eE}{\hbar} \frac{\tau}{2} = \frac{\pi}{d} \Rightarrow f = \frac{1}{\tau} = \frac{eEd}{h}$$

Gesamtstromdichte in Vol. V:

$$j = -\frac{e}{V} \sum_{\underline{k}} \underline{v}_g(\underline{k}) = 0 \text{ für vollbesetztes Band,}$$

da nach Kramers'schem Theorem ( $E_n(\underline{k}) = E_n(-\underline{k})$ ) zu jedem  $\underline{k}$  ein  $-\underline{k}$  ex., so dass  $\underline{v}_g(-\underline{k}) = -\underline{v}_g(\underline{k})$ .

Seien die Zustände  $\{\underline{k}_1\}$  besetzt,  $\{\underline{k}_2\}$  unbesetzt

$$\Rightarrow \underline{j} = -\frac{e}{V} \sum_{\underline{k}_1} \underline{v}_g(\underline{k}_1) = +\frac{e}{V} \sum_{\underline{k}_2} \underline{v}_g(\underline{k}_2)$$

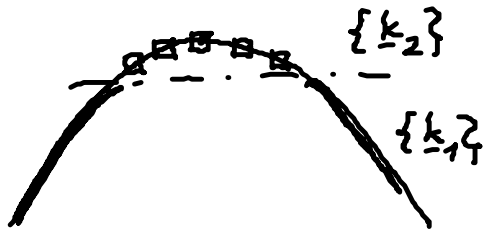
Elektronenstrom

$$(q = -e < 0)$$

„Löcherstrom“

(fiktive pos. gelad. Teilchen)

Fast gefülltes Band :  $E = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \stackrel{m^* < 0}{=} E_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2|m^*|}$



$$\underline{v}_g = -\frac{1}{|m^*|} \hbar \underline{k} = \frac{e}{|m^*|} \underline{E}$$

unbesetzt El. zustände mit  $q < 0$ ,  $m^* < 0$ ,  $\uparrow$



□ Löcher mit  $q > 0$ ,  $m^* > 0$ ,  $\downarrow$

(Quasi-Teilchen)

wichtig in Halbleitern

} äquivalente  
Beschreib.