2.4. Elektronen im Gitterpotential und weiteren schwach veränderlichen Potentialen $U(\vec{r})$

wichtig: Nanostrukturen

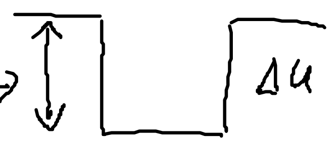
2 Materialien ||| $\equiv$

$\longleftrightarrow$ Nanometer

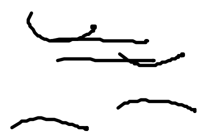
10^{-9} m

typische Werte: 10 nm

unterschiedliche Bandlücke der 2 Materialien $\rightarrow$

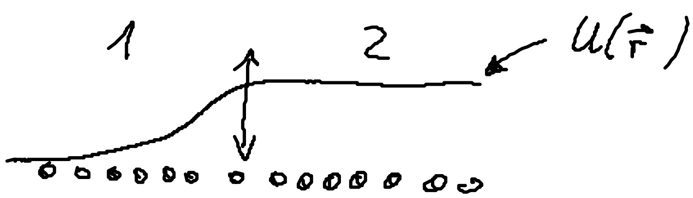


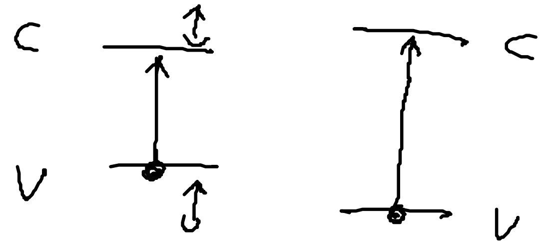
$\rightarrow$ Sprung in



$\hat{=} \Delta U$

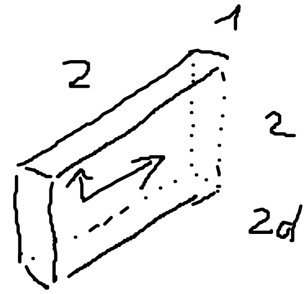
durch Aufeinanderbringen von Materialien verschiedener Bandlücken.

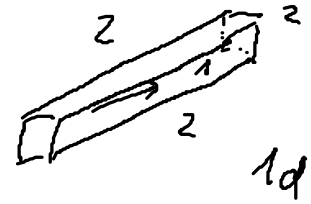


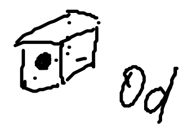


Halbleiter 1 Halbleiter 2

herstellbar:

von Quantenfilmen 

über Quantendrähte 

bis Quantenpunkt 

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

schwach veränderlich $\quad \left| \nabla_r \, U(\vec{r}) \right| \ll \dfrac{U(\vec{r})}{|\vec{a}_i|}$

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

<u>vorher im 3d</u> $\quad \varphi_\lambda(k,\vec{r}) = \sum_n \dfrac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}}{\underline{\underline{\sqrt{N}}}} \sum_j c_j^\lambda \, w_j(\vec{r}-\vec{R}_n)$

<u>geht in 2d, 1d, 0d:</u>

$$\varphi_\lambda(\vec{r}) = \sum_n \underline{C(R_n)} \sum_j c_j^\lambda \, w_j(\vec{r}-\vec{R}_n)$$

konzentrieren uns auf Γ Punkt, $\vec{k} \approx 0$;
weil $U(r)$ $\exists$ $e^{ikR} \to C(R)$.

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

<u>Näherung</u>: $C(r)$ ist schwach veränderlich über eine Elementarzelle und $w_j(\vec{r}-\vec{R}_n) \sim \delta(\vec{r}-\vec{R}_n)$

$$\varphi_\lambda(\vec{r}) = C(r) \cdot \underbrace{u_{\lambda k=0}(\vec{r})}_{\text{(siehe letzte VL)}}$$

$C(r)$ bestimmen! aus der Hamiltonmatrix die die Energie bestimmt:

gut für Quantenstrukturen

$$\underset{\uparrow}{H_{el}} \sum_{j,n} C(R_n) c_j^\lambda w_j(\vec{r}-\vec{R}_n) = \bar{\varepsilon}_\lambda \sum_{j,n} C(R_n) c_j^\lambda w_j(\vec{r}-\vec{R}_n)$$

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

$C(R_n) \to C(r)$ wegen der Lokalisierung der w_j (oben)

$\Delta C(r) \to 0$ (wegen kleiner Änderg.)

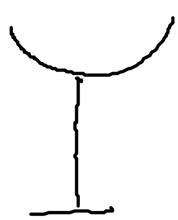
$$\sum_{n,j} \underbrace{C(R_n)}\, c_j^\lambda\, w_j(\vec r - \vec R_n) =$$

$$\sum_{n,j,k} \underbrace{C(k)\, e^{i\vec k \cdot \vec R_n}}\; c_j^\lambda\, w_j(\vec r - \vec R_n) =$$

$$\sum_{K} C(k)\, \varphi_\lambda(k, \vec r) \quad \text{lf. Def.}$$

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

am Γ-Pkt.



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

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

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

<u>Zusammenfassg.</u>

Näherung der effektiven Masse in schwach veränderlichem Potential

Die Wellenfunktion ist dann

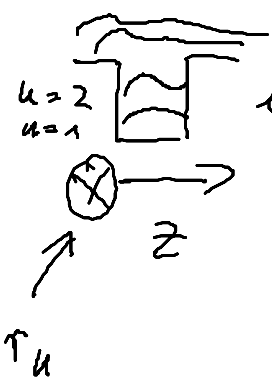
$$\varphi_\lambda(r) = C(r)\,\underbrace{u_{k=0\,\lambda}(\vec r)}_{\text{bekannt}},$$

$c(r)$ erfüllt eine Eigenwertgl.

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

Die Bewegung der Elektronen ist dann eine Schrödingergl. gegeben wie bei einem Elektron ohne Gitterpotential, allerdings mit <u>effektiver Masse</u>!

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

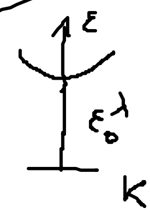


ein Kastenpotential sein

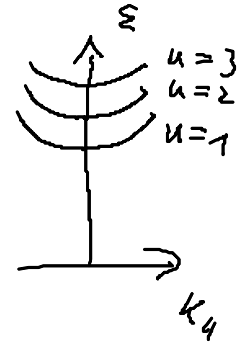
$$\varphi_{\lambda n\,k_\parallel}(r) = \frac{1}{\sqrt{A}}\, e^{i\vec{k}_\parallel\cdot\vec{r}_\parallel}\cdot \underline{\underline{\xi_n(z)}}\; u_{k=0\,\lambda}(\vec r)$$

Die Energie sind dann $\bar{E}_\lambda = \varepsilon_0^\lambda$ + Energie der Lösung der gl. f. C

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



b) $U=$ 2d: $\frac{k_{\parallel}^2\hbar^2}{2m^*_\lambda} + \underline{\varepsilon_n}$



Quantisierungsenergie im Kasten

n stellt verschiedene Subbänder dar.

c) bis zum Quantenpunkt 0d: $\varepsilon_{n_1 n_2 n_3}$

Quantenzahlen der 3 Richtungen des Quantenpunkts

IV Quantisierung des Ionfelds

Begriff: Phononen als Quasiteilchen

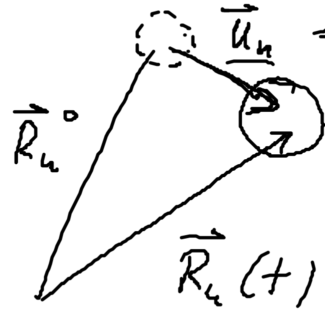
Modell: von Details der Elektronen absehen und nur die Ionen diskutieren:

$$H_{ion} = \sum_n \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{n,m\\ \alpha\beta}} \phi^{nm}_{\alpha\beta}\, u_n^\alpha u_m^\beta \qquad (n \neq m)$$

kinetische En. — potentielle En. der Ion-Ion WW

Ruhelage $\vec{R}_n^0$ des n-ten Ions

$\vec{u}_n = (u_n^1, u_n^2, u_n^3)$



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

$\vec{p}_n(t)$ ist der Ionimpuls $m_n \dot{\vec{u}}_n(t)$

sieht aus wie gekoppelte harmonische Oszillatoren $\{u_n^\alpha\}$

Kopplungskonstanten sind $\phi^{nm}_{\alpha\beta}$.

Gitter mit Basis $\vec{u}_{ns}(t)$ $\qquad$ $\underline{n \to (n,s)}$

n-te Zelle $\quad$ s-tes Ion

$$\phi^{nm}_{\alpha\beta} \to \underline{\phi^{nm}_{\alpha\beta}(s,t)}$$

Interpretation gleich

Eigenschaften der ϕ's:

a) Kraftkonstanten sind symmetrisch: $\phi_{\alpha\beta}^{nm}(s,t) = \phi_{\beta\alpha}^{mn}(t,s)$

(vertausch d. partiellen Ableitungen)

b) Kraftkonstanten dürfen nur von der Differenz zwisch. n und m abhängen (Periodizität)

$$\phi_{\alpha\beta}^{nm}(s,t) = \phi_{\alpha\beta}^{n-m}(s,t)$$

c) $\sum\limits_{n,s} \phi_{\alpha\beta}^{nm}(s,t) = 0$ (Beweis gleich)

$\hat{=}$ gleichmäßige Verschiebung aller Ionen

Idee: 1) kollektiven Anregungen des Ionen systems herausarbeiten

2) kollektiv. Anregg. zu quantisieren

(bei Auslenkg. eines Ions wird sich die Anregung <u>kollektiv</u> auf alle anderen Ionen verteilen)

1.) Klassische Theorie

1.1) Bewegungsgleichungen

Hamiltonformalismus: $\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}}$ $\quad (\vec{x} \hat{=} \vec{u})$

$$\dot{p}_n^\alpha = -\frac{\partial H}{\partial u_n^\alpha} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{o,m \\ \gamma,\beta}} \Phi^{om}_{\gamma\beta} \frac{\partial}{\partial u_n^\alpha} \left(u_o^\gamma u_m^\beta \right)$$

$$\boxed{m_n \ddot{u}_n^\alpha = - \sum_{\beta,m} \Phi^{nm}_{\alpha\beta} u_m^\beta}$$

Bewegungsgleichg. für die α-te Komponente der Auslenkg des n-ten Ions. (Newton).

Kraft wird durch Kraftkonstante Φ bestimmt und die anderen Auslenkungen u_m^β

$\Phi^{nm}_{\alpha\beta}$: bestimmen Kraftkonstante die in Richtg. α auf das n-te Ion wirkt wenn in Richtg β am m-ten Ion gezogen wird.

Gesamtkraft ist Summe aus allen Beiträgen

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

Einsetzen:

$$\omega_q^2\, A^\alpha(q) = \sum_{\beta, m} \underbrace{\phi_{\alpha\beta}^{nm}\, (m_n m_m)^{-1/2}\, e^{i\vec q(\vec a_m - \vec a_n)}}\, A^\beta(q)$$

$$\omega_q^2\, A^\alpha(q) = \underbrace{\sum_{\beta} C^n_{\alpha\beta}\, A^\beta(q)}$$

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

$\longrightarrow$ Eigenwertproblem das gelöst werden muss

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

Bemerkg:

a) es reicht $n = 0$ anzusehen (Periodizität)

b) bei Gitter mit Basis: $C_{\alpha\beta} \to C_{\alpha\beta}^{ss'}$

$$\omega_q^2 A_s^\alpha = \sum_{\beta s'} C_{\alpha\beta}^{ss'} A_{s'}^\beta$$

Dimension: $3 \cdot p$

$\swarrow$ kartesisch Koordin. $\alpha = (x, y, z)$

$\searrow$ Anzahl d. Ionen in Zelle

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

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

$\rightarrow$ ω_q^2 ist reell

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

$\swarrow$ Sind physikalisch und beschreiben wellenartige Anregungen

$\downarrow$ unphysikalisch weil entweder verboten (+) oder schnell weg (−)

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

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

e) Klassifizierung:

$$\omega_j(0) = \begin{cases} \neq 0 & \text{(a) optisch Phonon} \\ = 0 & \text{(b) akustisch Phonon} \end{cases}$$