

Semiklass. Bewegung der Bloch-Elektronen:

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

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


$\langle \hat{p}_{kin} \rangle +$ 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)

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

(iii) E darf nicht zu stark sein

\Rightarrow keine Interbandübergänge induziert $I \uparrow$
(Elektr. Durchbruch, Zener-Effekt) 
 \Rightarrow Bandindex n fest

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

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)

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

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

$$\begin{aligned}
 &= \sum_n E_n^m \varphi_{nk}(r+R_m) \\
 &= \sum_n E_n^m e^{iR_{nk}} \varphi_{nk}(r) \\
 &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{E_n(k)} \quad \textcircled{*}
 \end{aligned}$$

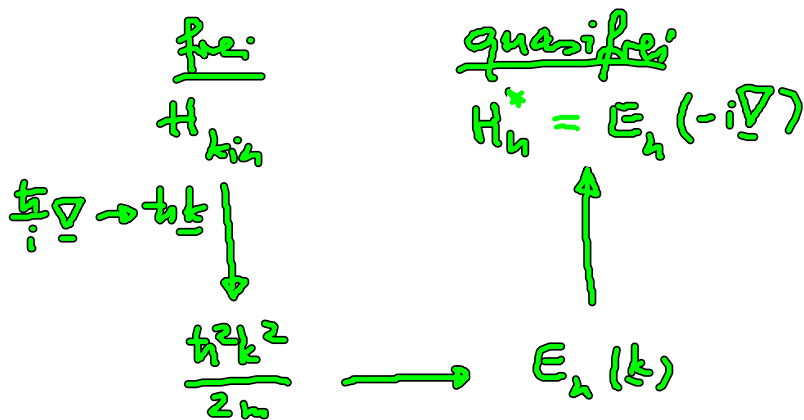
□

Also

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

per. Pot. $V(r)$ in Blochfkt. inkorporiert!

Wellenpaket im period. Pot. + äusserem E-Feld \rightarrow quasifreies E! mit Energie dispersion $E_n(k)$ in äusserem Feld



Eff.-Massen-Näherung (wichtig für Halbleiter)

Entw. von $E_n(k)$ in der Nähe eines Bandextremums

(z.B. $\underline{k}=0$), vgl. § 4.1: isotropes Band

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

eff. Massentensor

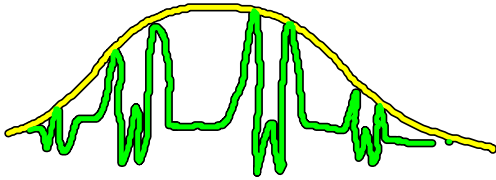
Entw. der Blochfkt. in der Umgebung von $\underline{k}=0$.

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

schnell langsam
↗ ↘ verändert.
in \mathbf{k}

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

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



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

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

$= \psi_{n0}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{R}_n \cdot \mathbf{k}} \dots$

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

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

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

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

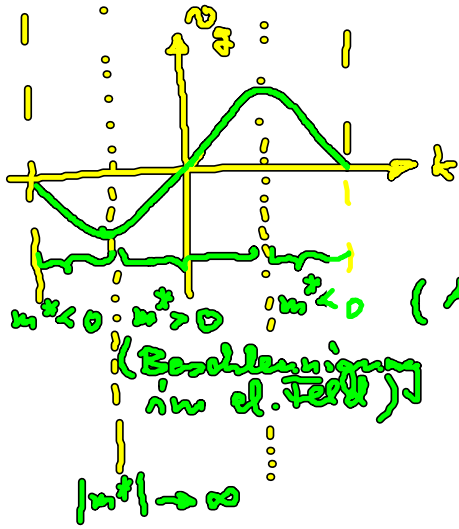
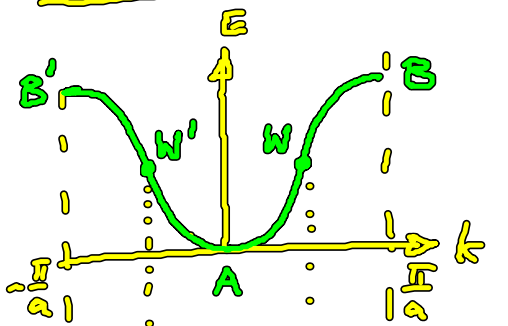
Ev.: $\hbar \mathbf{k} = -e \underline{\mathcal{E}}$

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

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

quantifiziertes 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 in Ort:
Block-Oszillation!

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

(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. Kurz 1993)

gleichspannung → Ose. $f = 0.5 - 2 \text{ THz}$

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

Gesamtstromdichte in Vol. V:

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

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

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

$$\rightarrow j = -\frac{e}{V} \sum_{k_1} v_g(k_1) = +\frac{e}{V} \sum_{k_2} v_g(k_2)$$

Elektronenstrom

($q = -e < 0$)

„Löcherstrom“

(fiktive pos. gelad. Teilchen)

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



$$v_g = -\frac{1}{|m^*|} \hbar k = \frac{e}{|m^*|} \mathcal{E}$$

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



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

(Quasi-Teilchen)

wichtig in Halbleitern

} äquivalente
Beschreib.