

Lichttechnisches Institut

Karlsruher Institut für Technologie

Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

M. Sc. Benjamin Fritz

M. Sc. Henning Mescher

Engesserstraße 13

76131 Karlsruhe

Optik und Festkörperelektronik

6. Übungsblatt

Besprechung: Übung 19. Juni 2020

1. Bloch-Oszillationen

Das Leitungsband in Silizium lässt sich im Bereich $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ in der Kristallrichtung (100) (zwischen Γ - und X-Punkt) näherungsweise durch das Potential $W(k) = \frac{\Delta W}{2}(1 + \cos ka)$ mit $\Delta W = 2\text{eV}$ beschreiben.

- a) Berechnen Sie die Geschwindigkeit v und die effektive Masse m_{eff} des Elektrons bei $k = 0$, $k = \frac{\pi}{a}$ und $k = \frac{\pi}{2a}$ im angegebenen Kristallpotential. *Wir bestimmen zunächst die partiellen Ableitungen von $W(k)$.*

$$\begin{aligned} W(k) &= \frac{\Delta W}{2}(1 + \cos ka) \\ \frac{\partial W}{\partial k} &= -\frac{a\Delta W}{2} \sin ka \\ \frac{\partial^2 W}{\partial k^2} &= -\frac{a^2\Delta W}{2} \cos ka \end{aligned}$$

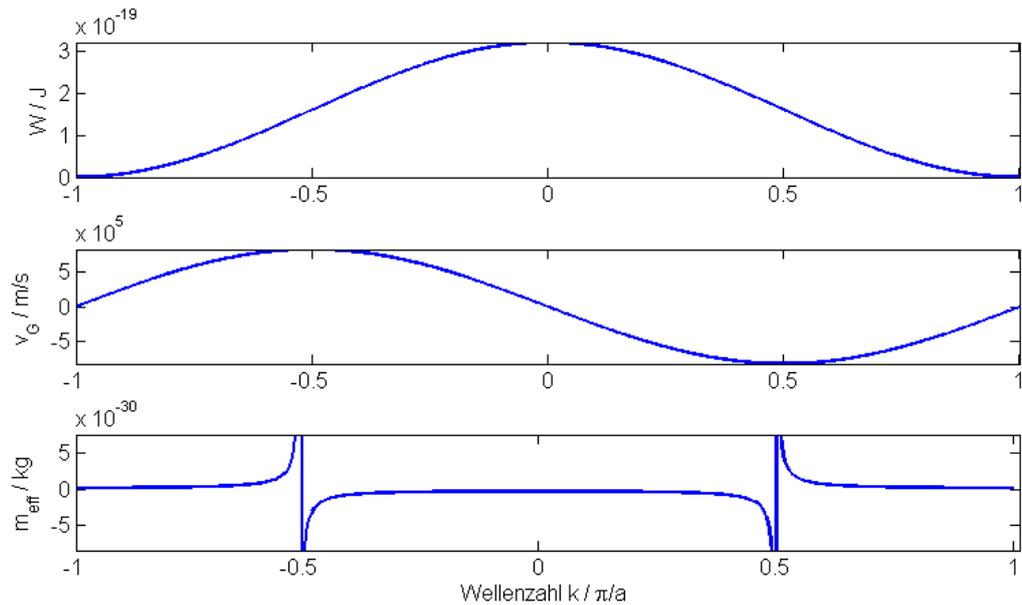
Daraus folgt:

$$\begin{aligned} v &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial k} = -\frac{a\Delta W}{2\hbar} \sin ka \\ (m_{\text{eff}})^{-1} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W}{\partial k^2} = -\frac{a^2\Delta W}{2\hbar^2} \cos ka \end{aligned}$$

Einsetzen der gegebenen k -Werte liefert somit:

\mathbf{k}	$\mathbf{W(k)}$	$\mathbf{v(k)}$	$(m_{\text{eff}}(k))^{-1}$	$m_{\text{eff}}(k)$
0	2eV	0	$-\frac{a^2\Delta W}{2\hbar^2}$	$-\frac{2\hbar^2}{a^2\Delta W} = -2,35 \cdot 10^{-31}\text{kg}$
$\frac{\pi}{2a}$	1eV	$-\frac{a\Delta W}{2\hbar} = -8,25 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	0	∞
$\frac{\pi}{a}$	0eV	0	$+\frac{a^2\Delta W}{2\hbar^2}$	$\frac{2\hbar^2}{a^2\Delta W} = +2,35 \cdot 10^{-31}\text{kg}$

b) Skizzieren Sie $W(k)$, $v(k)$ und $m_{\text{eff}}(k)$.



Bloch-Oszillationen

c) Nun werde ein elektrisches Feld angelegt, das auf die Elektronen eine Kraft F ausübt. Zeigen Sie, dass hiernach die Elektronen-Geschwindigkeit und der Elektronen-Ort zeitlich oszillieren (Bloch-Oszillationen).

Wie im Skript hergeleitet gilt

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (1)$$

Integrieren dieser Gleichung liefert bei zeitlich konstanter Kraft und bei Wahl von $t_0 = 0$:

$$\begin{aligned} \frac{Ft}{\hbar} &= k - k_0 \\ k(t) &= k_0 + \frac{Ft}{\hbar} \end{aligned}$$

Damit folgt für die Geschwindigkeit:

$$v(t) = -\frac{a\Delta W}{2\hbar} \sin k(t)a = -\frac{a\Delta W}{2\hbar} \sin \left(a \left(k_0 + \frac{Ft}{\hbar} \right) \right) \quad (2)$$

Entsprechend gilt für den Ort $x = x_0 + \int v dt$, erneut mit $t_0 = 0$:

$$x(t) = x_0 + \frac{\Delta W}{2F} \left(\cos \left(a \left(k_0 + \frac{Ft}{\hbar} \right) \right) - \cos(ak_0) \right) \quad (3)$$

Anhand der Gleichungen 2 und 3 sieht man, dass die Geschwindigkeit und der Ort des Elektrons zeitlich oszillieren.

d) Warum fließt dann ein Strom bei angelegtem elektrischen Feld? Berechnen Sie dazu aus der Beweglichkeit $\mu = 1300 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ der Elektronen in Silizium die mittlere

Streuzeit τ , verwenden Sie als Abschätzung für die effektive Masse der Elektronen den Wert $0.32 m_0$. Vergleichen Sie diese Streuzeit mit einer Bloch-Oszillationsperiode für eine Feldstärke von 10^6 V/m.

Benutzen Sie:

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial W}{\partial k}, \quad \frac{1}{m_{\text{eff}}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W}{\partial k^2}, \quad \mu = \frac{e\tau}{m_{\text{eff}}}$$

Die Gitterkonstante beträgt $a_{Si} = 5.43 \text{ \AA}$.

Zunächst berechnen wir die Streuzeit der Elektronen im Kristall:

$$\mu = \frac{e_0\tau}{m_{\text{eff}}} \rightarrow \tau = \frac{\mu m_{\text{eff}}}{e_0} = 2.37 \cdot 10^{-13} \text{ s} \quad (4)$$

Im Vergleich dazu betrachten wir die Periode der Bloch-Oszillation. Dazu benutzen wir die Ergebnisse aus den vorherigen Aufgabenteilen. Die Gleichungen 2 und 3 sind abhängig von dem Argument $a(k_0 + \frac{Ft}{\hbar})$. Der Vergleich mit einem phasenverschobenen Cosinus, $\cos(\omega t + \phi)$, liefert

$$\omega = \frac{aF}{\hbar} = \frac{2\pi}{T} \quad (5)$$

Die Blochoszillationsperiode beträgt dann mit $F = e_0E$:

$$T = \frac{2\pi\hbar}{aF} = \frac{2\pi\hbar}{ae_0E} = 7.6 \cdot 10^{-12} \text{ s} \quad (6)$$

Die Periode der Blochoszillation ist also mehr als 30-mal länger als die Streuzeit. Damit werden fast immer Streuungen verhindert, dass das Elektron eine Blochoszillation ausführt. Es kann also ein gerichteter Strom fließen.

2. Kronig-Penney-Modell

Bisher haben wir nur qualitative Aussagen über das Entstehen der Bandstruktur gemacht. Eine Möglichkeit, quantitative Aussagen zu machen, bietet das Kronig-Penney-Modell. Hier wird das periodische Potential im eindimensionalen Kristall durch ein Rechteckprofil angenähert (Abbildung 1).

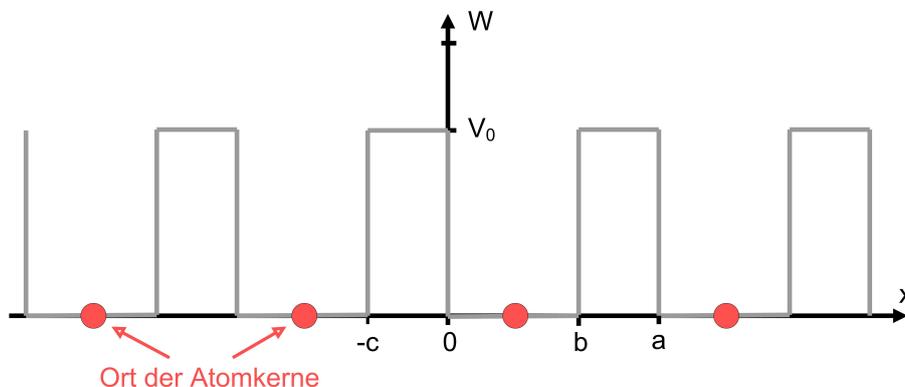


Abb. 1: Potentialverlauf im Kronig-Penney-Modell

- a) Geben Sie den Ansatz für ein Elektron als Blochwelle im Kristall an. Welche Eigenschaften haben die Bestandteile des Bloch-Ansatzes?

Der Blochansatz besteht aus einer ebenen Welle moduliert mit einem Term, der die Periode des Gitters hat. In unserem Fall schreiben wir also für die Wellenfunktion $\psi(x) = u(x)e^{jkx}$ mit $u(x+a) = u(x)$.

- b) Nun betrachten Sie eine Einheitszelle des Kristalls ($-c \leq x \leq b$). Setzen Sie den Ansatz aus a) für die beiden Bereiche konstanten Potentials in die Schrödingergleichung ein. Leiten Sie ab, vereinfachen Sie die Gleichung und führen Sie die Abkürzungen $\kappa_1 = \sqrt{(2mW/\hbar^2)}$ und $\kappa_2 = \sqrt{(2m(V_0 - W)/\hbar^2)}$ ein.

Wir betrachten eine Einheitszelle unseres Potentials bestehend aus zwei Gebieten mit konstantem Potential. Im Gebiet I mit $-c \leq x < 0$ ist $V(x) = V_0$, die Schrödingergleichung lautet also:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = W \psi(x) \quad (7)$$

Setzen wir nun den Bloch-Ansatz hier ein und differenzieren nach der Produktregel, so erhalten wir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (u''(x)e^{jkx} + 2jku'(x)e^{jkx} - k^2 u(x)e^{jkx}) = (W - V_0)u(x)e^{jkx} \quad (8)$$

Wir können den Exponentialterm ausklammern und mit $-\frac{2m}{\hbar^2}$ multiplizieren und umsortieren, so folgt:

$$u''(x) + 2jku'(x) - (k^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - W))u(x) = 0 \quad (9)$$

Mit der oben eingeführten Abkürzung folgt weiterhin:

$$u''(x) + 2jku'(x) - (k^2 + \kappa_2^2)u(x) = 0 \quad (10)$$

Für das Gebiet II im Bereich $0 \leq x < b$ kommen wir in gleicher Weise auf:

$$u''(x) + 2jku'(x) - (k^2 - \kappa_1^2)u(x) = 0 \quad (11)$$

- c) Finden Sie in den beiden Gebieten Lösungsansätze für die Differentialgleichungen.

In beiden Fällen handelt es sich um homogene Differentialgleichungen zweiter Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Diese lösen wir nach den entsprechenden Regeln zum Lösen einer solchen DGL, z.B. entsprechend des Gelben Rechenbuchs, Band 3, S. 49. Zunächst bestimmen wir das charakteristische Polynom, in welchem alle Ableitungen durch entsprechende Potenzen von λ ersetzt werden. Wir erhalten die quadratische Gleichung

$$\lambda^2 + 2jk\lambda - \kappa_2^2 - k^2 = 0. \quad (12)$$

Wir erhalten die Nullstellen zu

$$\lambda_{1,2} = -jk \pm \sqrt{-k^2 + k^2 + \kappa_2^2} = -jk \pm \kappa_2. \quad (13)$$

Mit Hilfe des Fundamentalsystems

$$e^{\lambda_1 x}, e^{\lambda_2 x} \quad (14)$$

finden wir den Lösungsansatz

$$u_I(x) = Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x} = Ae^{(\kappa_2 - jk)x} + Be^{-(\kappa_2 + jk)x}. \quad (15)$$

In gleicher Weise kann man die Gleichung für das Gebiet II lösen. Hier finden wir:

$$\lambda^2 + 2jk\lambda + \kappa_1^2 - k^2 = 0 \quad (16)$$

$$\rightarrow \lambda_{3,4} = -jk \pm \sqrt{-k^2 + k^2 - \kappa_1^2} = -jk \pm j\kappa_1, \quad (17)$$

woraus die Lösung

$$u_{II}(x) = Ce^{\lambda_3 x} + De^{\lambda_4 x} = Ce^{j(\kappa_1 - k)x} + De^{-j(\kappa_1 + k)x} \quad (18)$$

folgt.

- d) Stellen Sie die Gleichungen zur Bestimmung der in den im letzten Aufgabenteil gefundenen Lösungen auftretenden Konstanten mit Hilfe der Stetigkeitsbedingungen und der Periodizität der Bloch-Funktionen auf.

Gleichungen 15 und 18 enthalten mit $A, B, C,$ und D noch vier unbekannte Parameter. Es gilt also nun entsprechend vier Randbedingungen aufzustellen. Zunächst müssen am Punkt $x = 0$ die Wellenfunktionen stetig differenzierbar sein ($u_I(0) = u_{II}(0)$ und $u_I'(0) = u_{II}'(0)$), daraus folgt:

$$A + B = C + D \quad (19)$$

$$(\kappa_2 - jk)A - (\kappa_2 + jk)B = j(\kappa_1 - k)C - j(\kappa_1 + k)D \quad (20)$$

Außerdem fordern wir aufgrund der Periodizität der Bloch-Funktion, dass die Funktion und ihre erste Ableitung am Punkt $x = -c$ die gleichen Werte haben wie am Punkt $x = b$, also $u_I(-c) = u_{II}(b)$ und $u_I'(-c) = u_{II}'(b)$. Einsetzen von u_I und u_{II} liefert:

$$Ae^{-(\kappa_2 - jk)c} + Be^{(\kappa_2 + jk)c} \quad (21)$$

$$= Ce^{j(\kappa_1 - k)b} + De^{-j(\kappa_1 + k)b}$$

$$(\kappa_2 - jk)Ae^{-(\kappa_2 - jk)c} - (\kappa_2 + jk)Be^{(\kappa_2 + jk)c} \quad (22)$$

$$= j(\kappa_1 - k)Ce^{j(\kappa_1 - k)b} - j(\kappa_1 + k)De^{-j(\kappa_1 + k)b}$$

- e) Das aus den Randbedingungen folgende Gleichungssystem ist wie üblich nur lösbar, falls seine Determinante Δ verschwindet. In diesem Fall ergibt sich:

$$\Delta = j8\kappa_1\kappa_2e^{jk} \left(\cos(ka) - \frac{\kappa_2^2 - \kappa_1^2}{2\kappa_1\kappa_2} \sinh(\kappa_2 c) \sin(\kappa_1 b) - \cosh(\kappa_2 c) \cos(\kappa_1 b) \right)$$

Werten Sie die Bedingung $\Delta = 0$ aus, indem Sie nach k auflösen und zusätzlich für κ_1 und κ_2 die mit V_0 erweiterten Ausdrücke $\kappa_1 = \sqrt{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{W}{V_0}\right)}$ und $\kappa_2 = \sqrt{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{W}{V_0}\right)\right)}$ einsetzen. Sie sollten am Ende eine Gleichung der Form $k = \frac{1}{a} \arccos\left(L\left(\frac{W}{V_0}\right)\right)$ erhalten, wobei L eine Funktion ist.

Aus der Forderung $\Delta = 0$ folgt direkt, dass der Term in der Klammer des Ausdrucks für die Determinante verschwinden muss.

$$\cos(ka) - \frac{\kappa_2^2 - \kappa_1^2}{2\kappa_1\kappa_2} \sinh(\kappa_2 c) \sin(\kappa_1 b) - \cosh(\kappa_2 c) \cos(\kappa_1 b) = 0 \quad (23)$$

Das Resubstituieren der erweiterten Ausdrücke für κ_1 und κ_2 führt auf:

$$\begin{aligned} \cos(ka) - \frac{1 - 2W/V_0}{2\sqrt{(W/V_0) - (W/V_0)^2}} \sinh\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{W}{V_0}\right) c}\right) \sin\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{W}{V_0} b}\right) \\ - \cosh\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{W}{V_0}\right) c}\right) \cos\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{W}{V_0} b}\right) = 0 \end{aligned} \quad (24)$$

Diese Gleichung kann nach k aufgelöst werden und der gewünschte Ausdruck $k = \frac{1}{a} \arccos\left(L\left(\frac{W}{V_0}\right)\right)$ ist gefunden:

$$\begin{aligned} k = \frac{1}{a} \arccos\left(\frac{1 - 2W/V_0}{2\sqrt{(W/V_0) - (W/V_0)^2}} \sinh\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{W}{V_0}\right) c}\right) \sin\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{W}{V_0} b}\right) \right. \\ \left. + \cosh\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} \left(1 - \frac{W}{V_0}\right) c}\right) \cos\left(\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{W}{V_0} b}\right)\right) \end{aligned} \quad (25)$$

- f) In Abbildung 2 ist die Funktion $L\left(\frac{W}{V_0}\right)$ für ein Verhältnis der Längen c und b von $c/b = 0.1$ und für $\frac{2mV_0 b^2}{4\hbar^2} = 36$ (hiermit wird die Höhe des Potentials V_0 festgelegt) aufgetragen. Beachten Sie, dass nicht L über W/V_0 aufgetragen ist, sondern W/V_0 über L . Mit Hilfe des Ergebnisses aus dem letzten Aufgabenteil können Sie nun in der Abbildung die Bildung von Bändern und Bandlücken visualisieren.

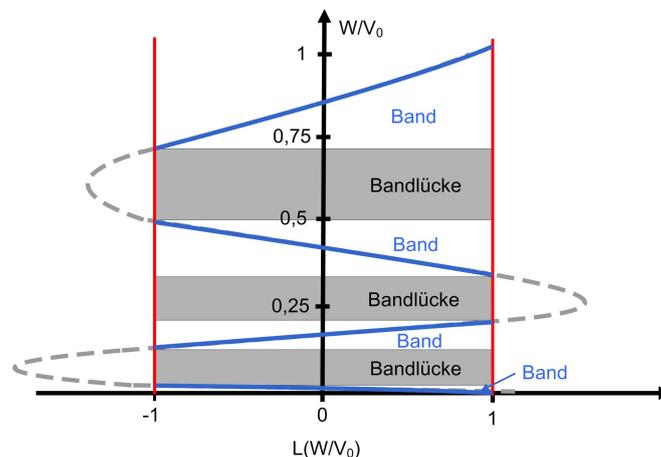


Abb. 2: Zeichnerische Lösung zum Kronig-Penney-Modell

Der Schlüssel zur Lösung liegt in der Betrachtung des Wertebereichs des Arcus-Cosinus. Als Umkehrfunktion des Cosinus liefert er nur reelle Werte für k , falls sein Argument zwischen -1 und 1 liegt. Für die übrigen Werte wird der Arcus-Cosinus imaginär und damit auch die Propagationskonstante für die ebene Welle in der Lösung $\psi(x)$. Damit erhalten wir eine exponentiell abfallende Welle, die im Kristall nicht propagieren kann. Die Energiebereiche, in denen das der Fall ist, können zeichnerisch ermittelt werden. Dazu muss man lediglich bei den Werten -1 und $+1$ senkrechte Linien in das Diagramm 2 einfügen. Zwischen diesen nimmt die Funktion $L(W/V_0)$ Werte zwischen -1 und $+1$ an, die auf reelle Wellenzahlen führen. Man sieht, dass für einige Energiebereiche keine reellen Lösungen existieren, dieses sind die Bandlücken des Kristalls. Zwischen diesen Lücken kann die Forderung erfüllt werden, es existieren hier propagierende Lösungen.