2. Übung (Abgabe Di. 8. November 2011 zu Beginn der Vorlesung oder spätestens bis 16:00 im Briefkasten im Sekretariat bei Frau Badow)

---

5. Parabolisches Verhalten von E(k) an der Zonengrenze

Am Rand der Brillouin-Zone entsteht aufgrund eines periodischen Potentials eine Energielücke E_g. Es sei dort das reelle Potential nur durch zwei Fourier-Koeffizienten gegeben:

$$U(x) = U_G e^{iGx} + U_{-G} e^{-iGx} = 2U\cos(Gx),\ \text{mit } U_G = U_{-G} = U \text{ und } |U| << E(k = \pm \tfrac{1}{2} G),$$

wobei G ein reziproker Gittervektor und E(k) die Energie des Elektrons ist. Man nehme weiter an, dass am Zonenrand bei $k = +\frac{1}{2}G$ in der Fourier-Darstellung der Bloch-Wellenfunktion des Elektrons, $\psi_k(x) = \sum_G C_{k-G}\, e^{i(k-G)x}$, nur die beiden Glieder C_k und C_{k-G} beitragen, die restlichen Glieder seien zu vernachlässigen. Daraus folgt $E_g = 2U$. Zeigen Sie nun, dass sich die Energiefunktion E(k) am Rand der Brillouin-Zone parabolisch verhält, d.h. dass gilt:

$$E_\pm(\Delta k) = E_{\frac{1}{2}G\pm} + \frac{\hbar^2 \Delta k^2}{2m}\left(1 \pm 2\frac{\lambda}{U_G}\right), \quad \text{mit} \quad E_{\frac{1}{2}G\pm} = \lambda \pm U_G, \quad \lambda = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\tfrac{1}{2}G\right)^2 \quad \text{und}$$

$$\Delta k = k - \tfrac{1}{2}G << G.$$

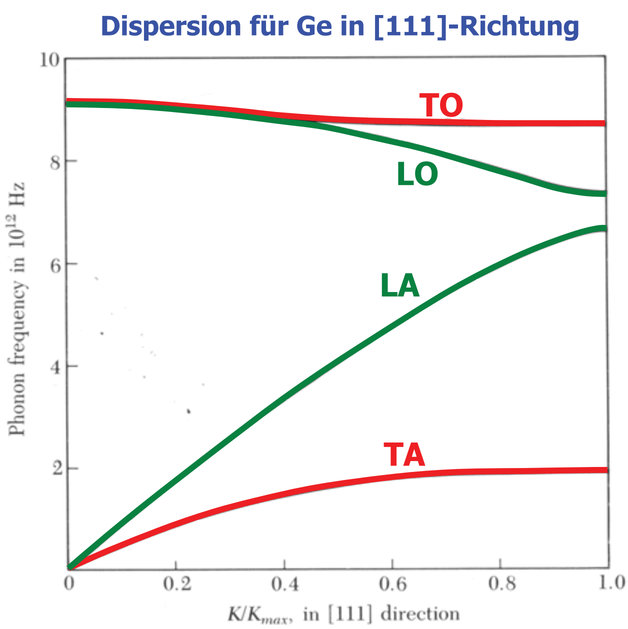
<u>Hinweis</u>: Bestimmen Sie die Energie-Eigenwerte der Bloch-Wellenfunktion $\psi_k(x)$ *in der Nähe von* $k = +\frac{1}{2}G$, *also am Rand der Brillouin-Zone durch Lösen der Schrödingergleichung im Impulsraum:* $(\lambda_k - E)C_k + \sum_G U_G C_{k-G} = 0,\ \ \lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. *Mit* $k = \Delta k + \frac{1}{2}G$ *und Näherung einer Wurzelfunktion führt dies zur gesuchten parabolischen Energiefunktion* $E_\pm(\Delta k)$.

(4 Punkte)

6. Indirekte Übergänge

Im reziproken Raum liegt das Leitungsbandminimum von Germanium [kubische Gitterkonstante $a = 5.658$ Å, Bandlücke $E_g = 0.722$ eV] bei $T = 300$ K genau am L-Punkt und das Valenzbandmaximum am Γ-Punkt. Ein indirekter optischer Übergang ist daher nur mit Hilfe von Phononen möglich.

Bestimmen Sie für einen indirekten optischen Übergang vom Valenzbandmaximum in das Leitungsbandminimum anhand der Phononendispersionsrelation von Germanium (siehe Abbildung) die maximale Anzahl der möglichen Ein-Phonon-Übergänge unter Vernachlässigung von Auswahlregeln (d.h. alle möglichen Übergänge sind auch erlaubt) sowie die dazugehörigen Laser-Wellenlängen.



<u>Hinweis</u>: Bestimmen Sie die Phononenfrequenzen aus der Abbildung mit einer Genauigkeit von $2\cdot 10^{11}$ *Hz. Die Phononendispersion sei in der Nähe vom L-Punkt konstant.*

(4 Punkte)

7. Herleitung der Bewegungsgleichung aus der Heisenberg-Darstellung

Leiten Sie die Bewegungsgleichung für Bloch-Elektronen unter Einfluss einer äußeren, konstanten Kraft $\vec{F}$ her: $\vec{F} = \hbar\, d\vec{k}/dt$. Benutzen Sie dazu die Heisenberg-Darstellung der Zeitableitung eines Operators *A*: $dA/dt = (i/\hbar)[H, A]$, mit $H = H_0 - \vec{F}\cdot\vec{r}$. H_0 ist der translationsinvariante Hamilton-Operator des ungestörten Systems, d.h. es gilt $[H_0, T] = 0$ mit dem Translationsoperator *T*: $Tf(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{T})$, wobei $\vec{T}$ ein Gittervektor ist und *f* eine beliebige Funktion.

(a) Zeigen Sie, dass der Translationsoperator für Bloch-Wellen gegeben ist durch: $T = e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}$.

(b) Leiten Sie nun die Bewegungsgleichung her, indem Sie in der Heisenberg-Darstellung den Operator *A* durch *T* ersetzen.

(4 Punkte)

8. Gruppengeschwindigkeit eines Lochzustands

Es sei in zwei Dimensionen im Zonenzentrum eines Halbleiters die Energie der Elektronen im Valenzband durch $E_e(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)$ gegeben (= Rotationsparaboloid). Zeigen Sie anhand einer „Fläche" konstanter Energie in zwei Dimensionen (= Kreis in k_x-k_y-Ebene), dass für die Gruppengeschwindigkeit $v_h(\vec{k}_h)$ eines Lochs einerseits $\vec{v}_h(\vec{k}_h) = \vec{v}_e(\vec{k}_e)$ gilt und dennoch $\vec{v}_h(\vec{k}_h)$ die gleiche Richtung hat wie $\vec{k}_h$. Daraus folgt zwangsläufig, dass für die Lochstromdichte eines Lochs gilt: $\vec{j}_h = e\vec{v}_h(\vec{k}_h) = \frac{e\hbar}{m_h}\vec{k}_h$.

Sei ein konstantes äußeres elektrisches Feld $\vec{\mathcal{E}}_{el} = \mathcal{E}_{el}\vec{e}_x$ gegeben.

(a) Zeigen Sie zunächst für $\mathcal{E}_{el} = 0$ anhand einer Skizze, dass eine Elektronenfehlstelle bei $\vec{k}_e$ im Valenzband äquivalent zu einem voll besetzten Valenzband plus einem einzelnen (positiv geladenen) Lochzustand bei $\vec{k}_h = -\vec{k}_e$ ist. Es genügt dazu, die Zustände auf einem Kreis konstanter Energie mit Radius k_e zu betrachten.

(b) Zeigen Sie nun für $\mathcal{E}_{el} > 0$, dass die Wirkung von $\mathcal{E}_{el}$ auf das mit einer Elektronenfehlstelle bei $\vec{k}_e$ versehene Valenzband einem positiven Strom in Richtung von $\vec{\mathcal{E}}_{el} = \mathcal{E}_{el}\vec{e}_x$ entspricht, indem Sie die Verschiebung des Kreises konstanter Energie im elektrischen Feld unter Berücksichtigung von Teilaufgabe (a) betrachten.

(c) Betrachten Sie nun wiederum eine Elektronenfehlstelle bei $\vec{k}_e$ im Valenzband und zeichnen Sie dort die Gruppengeschwindigkeit $\vec{v}_e(\vec{k}_e)$ ein. Nutzen Sie dazu den Zusammenhang zwischen $\vec{v}_e$, $E_e(\vec{k})$ und einem Kreis konstanter Energie. Machen Sie nun das Gleiche für den Lochzustand, indem Sie auch hier einen Kreis konstanter Energie definieren und berücksichtigen, dass der der Elektronenfehlstelle entsprechende Lochzustand sich in einem (Loch-)Leitungsband befindet [d.h. $E_h(\vec{k}_h) > 0$!].

<u>Hinweis</u>: Die Wirkung eines elektrischen Feldes auf einen Kreis konstanter Energie im Valenzband entspricht einer Verschiebung des gesamten Kreises um $\delta\vec{k} = -\frac{e}{\hbar}\vec{\mathcal{E}}_{el}\,\delta t$.

(4 Punkte)