14 Metalle

14.a Fermiflächen

Im wesentlichen gibt es fünf topologisch unterschiedliche Möglichkeiten für die Besetzung von Bändern:
a) Die energetisch tiefstliegenden Bänder sind voll besetzt. Sie haben keine Fermifläche. Die Elektronen sind stark gebunden (Rumpfelektronen).
b) Ein Band ist fast voll besetzt. Ein kleiner Bereich der Brillouinzone ist aber unbesetzt. Im ausgedehnten Zonenschema sind die unbesetzten Bereiche nicht miteinander verbunden.
c) Das Band ist teilweise besetzt. Im ausgedehnten Zonenschema sind jedoch die Bereiche mit Energien kleiner als die Fermienergie wie auch die Bereiche mit Energien größer als die Fermienergie über beliebig weite Entfernung miteinander verbunden. Dies tritt zum Beispiel im Kupfer und im Gold auf. Man kann noch unterscheiden, ob diese Verbindung ein-, zwei- oder drei-dimensional ist.
d) Das Band ist fast unbesetzt. Im ausgedehnten Zonenschema sind die besetzten Bereiche nicht miteinander verbunden.
e) Die energetisch höchstliegenden Bänder sind vollständig unbesetzt und haben keine Fermifläche.

Hat man in einem Festkörper nur Bänder des Typs a) und e), so liegt die Fermienergie zwischen diesen beiden Typen von Bändern und das Material ist ein Halbleiter oder Isolator. Sonst ist der Festkörper in der Regel metallisch, falls nicht starke Wechselwirkungen zu einem anderen Verhalten führen.

14.b Zustandsdichte

Aus der Dichte der Elektronen bis zur Energie ϵ,

$$n(\epsilon) = \int^{\epsilon} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon) = \sum_n \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{Brioullinzone}} \mathrm{d}^3k \theta(\epsilon - \epsilon_n(\mathbf{k})) \tag{14.1}$$

erhält man die Zustandsdichte der Elektronen

$$D(\epsilon) = \sum_n \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{Brioullinzone}} \mathrm{d}^3k \delta(\epsilon - \epsilon_n(\mathbf{k})) = \sum_n \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\mathrm{d}f_n}{|grad_k \epsilon_n(\mathbf{k})|}. \tag{14.2}$$

Dabei erstreckt sich das letzte Integral über die Fläche der Energie ϵ. Der Index $_n$ ist der Bandindex. Die spezifische Wärme ist mit dieser Zustandsdichte $D(\epsilon_F)$ zu berechnen.

14.c Spinparamagnetismus

Vernachlässigen wir zunächst die Wirkung des Magnetfelds auf die Elektronen und betrachten nur die Wechselwirkung mit dem Spin, so ergibt sich die Einteilchen-Energie

$$\epsilon_{n,\mathbf{k},s} = \epsilon^0_{n,\mathbf{k}} - g\mu_\mathrm{B} s_z B_z, \quad s_z = \pm\frac{1}{2}, \quad \mu_\mathrm{B} = \frac{e\hbar}{2mc}, \quad g = 2.0023 = 2 + \frac{\alpha}{\pi} + ... \tag{14.3}$$

Damit ergibt sich die spinabhängige Teilchenzahldichte

$$n_s = \sum_n \frac{1}{8\pi^3} \int \mathrm{d}^3k f(\epsilon^0_{n,\mathbf{k}} - \mu - g\mu_\mathrm{B} s B_z) = \frac{n}{2} + \frac{1}{2} D(\epsilon_F) g\mu_\mathrm{B} s B_z \tag{14.4}$$

und damit der Unterschied in der Dichte der Elektronen in beiden Spinrichtungen

$$n_\uparrow - n_\downarrow = \frac{1}{2} D(\epsilon_F) g\mu_\mathrm{B} B_z \tag{14.5}$$

und die Magnetisierung (magnetisches Moment pro Volumen)

$$M = (\frac{g}{2}\mu_\mathrm{B})^2 D(\epsilon_F) B \tag{14.6}$$

Dieser Beitrag wird als Pauli-Paramagnetismus bezeichnet.

14.d Bahnmagnetismus

Wir berechnen nun den Beitrag des Bahnmagnetismus für freie Elektronen zunächst im kleinen Magnetfeld ($\hbar\omega_c \ll k_\mathrm{B}T$). Sei ν die Nummer des Landau-Niveaus und $\hat{N} = F\frac{eB}{hc} = L_x L_y \frac{\omega_c m}{h}$ die maximale Anzahl der Zustände im Landau-Niveau. Dann ergeben sich Teilchenzahl und Energie zu

$$
\begin{aligned}
N &= 2\hat{N}\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{L_z}{2\pi}\int \mathrm{d}k_z f(\epsilon-\mu), && (14.7)\\
E &= 2\hat{N}\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{L_z}{2\pi}\int \mathrm{d}k_z \epsilon f(\epsilon-\mu). && (14.8)
\end{aligned}
$$

Wir haben nun die ν-Summen auszuwerten

$$
\sum_\nu g(\hbar\omega(\nu+\frac{1}{2})) = \int_0^\infty g(\hbar\omega\nu)\mathrm{d}\nu + \sum_\nu \left[g(\hbar\omega(\nu+\frac{1}{2})) - \int_0^1 g(\hbar\omega(\nu+\delta))\mathrm{d}\delta\right]. \qquad (14.9)
$$

Wir entwickeln nun

$$
g(\hbar\omega(\nu+\delta)) = g(\hbar\omega(\nu+\frac{1}{2})) + (\delta-\frac{1}{2})\hbar\omega g' + \frac{1}{2}(\delta-\frac{1}{2})^2(\hbar\omega)^2 g'' + ... \qquad (14.10)
$$

und erhalten damit

$$
\begin{aligned}
\sum_\nu g(\hbar\omega(\nu+\frac{1}{2})) &= \int_0^\infty g(\hbar\omega\nu)\mathrm{d}\nu - \frac{1}{24}(\hbar\omega)^2\sum_\nu g''(\hbar\omega(\nu+\frac{1}{2})) + ...\\
&= \int g\mathrm{d}\nu - \frac{1}{24}(\hbar\omega)^2\int \mathrm{d}\nu g''(\hbar\omega\nu)\\
&= \frac{1}{\hbar\omega}\int_0^\infty g(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon + \frac{\hbar\omega}{24}(g'(0)-g'(\infty)) + O(\hbar\omega)^3 && (14.11)
\end{aligned}
$$

Wir setzen nun ϵ ein und erhalten

$$
\begin{aligned}
&2\hat{N}\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{L_z}{2\pi}\int \mathrm{d}k_z g(\frac{\hbar^2}{2m}k_z^2 + \hbar\omega_c(\nu+\frac{1}{2}))\\
&= \frac{V_P m}{2\pi^2\hbar^2}\int \mathrm{d}k_z \int \mathrm{d}\epsilon g(\frac{\hbar^2}{2m}k_z^2+\epsilon_{xy}) + \frac{V_P m\omega_c^2}{48\pi^2}\int \mathrm{d}k_z \left.\frac{\partial g(\frac{\hbar^2}{2m}k_z^2+\epsilon)}{\partial\epsilon}\right|_{\epsilon=0} + ... && (14.12)
\end{aligned}
$$

Der erste Beitrag ergibt mit

$$
\epsilon_{xy} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2) = \frac{\hbar^2}{2m}k_\perp^2, \quad \mathrm{d}\epsilon_{xy} = \frac{\hbar^2}{m}k_\perp \mathrm{d}k_\perp = \frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y. \qquad (14.13)
$$

Damit wird aus dem ersten Term

$$
\frac{V_P}{4\pi^3}\int \mathrm{d}^3k g(\frac{\hbar^2}{2m}k^2) \qquad (14.14)
$$

wie für ein verschwindendes Magnetfeld.

Zur Auswertung des zweiten Beitrags für N ersetzen wir die Fermifunktion in (14.7) und (14.8) durch die Theta-Funktion und erhalten mit

$$
\int \mathrm{d}k_z \frac{\partial f(\epsilon_z-\mu)}{\partial\epsilon_z} = -\int \mathrm{d}k_z\delta(\epsilon_z-\mu) = -2\frac{\partial k_F}{\partial\epsilon_F} \qquad (14.15)
$$

(der Faktor 2 rührt von $k = \pm k_F$ her) und damit für die Teilchendichte

$$
n = n_0 + D(\epsilon_F)(\mu(B)-\mu(0)) - \frac{m\omega_c^2}{24\pi^2}\frac{\partial k_F}{\partial\epsilon_F} = n_0 \qquad (14.16)
$$

Der zweite Beitrag für E/V_P ergibt mit $g = \epsilon\theta(\epsilon_F - \epsilon)$

$$\int \mathrm{d}k_z \frac{\partial}{\partial \epsilon_z}(\epsilon_z \theta(\epsilon_F - \epsilon_z)) = 2k_F - 2\epsilon_F \frac{\partial k_F}{\partial \epsilon_F}. \tag{14.17}$$

Damit erhalten wir

$$\frac{E}{V_P} = \frac{E_0}{V_P} + \epsilon_F z(\epsilon_F)(\mu(B) - \mu(0)) + \frac{m\omega_c^2}{24\pi^2}(k_F - \epsilon_F \frac{\partial k_F}{\partial \epsilon_F}), \tag{14.18}$$

so dass unter Berücksichtigung von (14.16) schließlich

$$\frac{E}{V_P} = \frac{E_0}{V_P} + \frac{m\omega_c^2}{24\pi^2} k_F = \frac{E_0}{V_P} + \mu_B^2 B^2 \frac{D(\epsilon_F)}{6} \tag{14.19}$$

folgt. Daraus erhält man den Landau-Diamagnetismus. Aus dem Differential der elektromagnetischen Energiedichte

$$\mathrm{d}u = \frac{1}{4\pi} H \mathrm{d}B = (\frac{1}{4\pi} B - M)\mathrm{d}M \tag{14.20}$$

folgt für die Energie

$$\mathrm{d}E = T\mathrm{d}S - V_P M \mathrm{d}B \tag{14.21}$$

und damit

$$\chi_L = -\frac{\partial^2 E}{\partial B^2} = -\frac{1}{3}\mu_B^2 D(\epsilon_F), \quad \chi_P + \chi_L = (1 - \frac{1}{3})\mu_B^2 D(\epsilon_F). \tag{14.22}$$

Zusätzliche Rumpfelektronen geben den Langevin-Diamagnetismus

$$\chi_{L.D.} = -n_I \frac{Ze^2}{6mc^2}\langle r^2 \rangle \tag{14.23}$$

mit der Ionendichte n_I und den Van-Vleck-Paramagnetismus

$$\chi_V = 2n_I \sum_s \frac{|\langle s|\mu_z|0\rangle|^2}{E_s - E_0}. \tag{14.24}$$

14.e Starkes Magnetfeld

Im starken Magnetfeld, d.h. für $\hbar\omega_c \gg k_{\mathrm{B}}T$ beobachtet man den de Haas-van Alphen-Effekt. Wir betrachten zunächst eine vereinfachte Darstellung, in dem wir nur ein zweidimensionales System betrachten. Die Energien der Landau-Niveaus seien

$$\epsilon_\nu = (2\nu + 1)\mu_B B, \tag{14.25}$$

die Entartung

$$\hat{N} = F\frac{eB}{hc} = \xi B \tag{14.26}$$

(Wir betrachten nur eine Spineinstellung). Dann sei $\tilde{\nu}$ die Anzahl der Elektronen durch Entartung

$$\tilde{\nu} = \frac{N}{\hat{N}} = \frac{N}{\xi B}. \tag{14.27}$$

Wir zerlegen nun $\tilde{\nu}$ in seinen ganzzahligen Anteil und den Rest δ,

$$\nu = [\tilde{\nu}], \quad \tilde{\nu} = \nu + \delta, \quad 0 \le \delta < 1, \quad \nu \text{ ganz}. \tag{14.28}$$

Dann sind die Niveaus 0,...$\nu - 1$ ganz gefüllt, im Niveau ν sind $\delta\hat{N}$ Elektronen. Die Energie ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned} E &= \hat{N}(1 + 3 + ... + (2\nu - 1))\mu_B B + (2\nu + 1)\mu_B B\delta\hat{N} \\ &= \hat{N}\mu_B B(\nu^2 + (2\nu + 1)\delta) = \hat{N}\mu_B B(\tilde{\nu}^2 + \delta(1 - \delta)) \\ &= \frac{\mu_B N^2}{\xi}(1 + \frac{\delta(1 - \delta)}{\tilde{\nu}^2}), \end{aligned} \tag{14.29}$$

da

$$\tilde{\nu}^2 = (\nu+\delta)^2 = \nu^2 + 2\nu\delta + \delta^2 \tag{14.30}$$

Daraus folgt die Magnetisierung

$$M = -\frac{\partial E}{V_P \partial B} \tag{14.31}$$

mit

$$E = \frac{\mu_B}{\xi} N^2 (1 + (1 - \frac{\nu\xi B}{N})(\frac{(1+\nu)\xi B}{N} - 1)), \tag{14.32}$$

woraus

$$\begin{aligned} M &= \mu_B n \left[\nu \left(\frac{(1+\nu)\xi B}{N} - 1 \right) + (1+\nu) \left(\frac{\nu \xi B}{N} - 1 \right) \right] \\ &= \mu_B N \frac{\nu - \delta(2\nu+1)}{\nu+\delta} \end{aligned} \tag{14.33}$$

folgt. Die Magnetisierung nimmt also jeweils (für $\nu > 0$) von $M(\delta = 0) = \mu_B n$ kontinuierlich auf $M(\delta = 1) = -\mu_B n$ ab, um dann wieder auf $+\mu_B n$ zu springen.

14.f Azbel-Kaner Resonanz

Im Rahmen einer halbklassischen Näherung schreiben wir die Bewegungsgleichungen der Band-Elektronen in der Form

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} = \frac{e}{\hbar c} \nabla_k \epsilon \times \mathbf{B}. \tag{14.34}$$

Wir haben nun zwei Konstanten der Bewegung, $k_\parallel = \mathbf{k} \cdot \mathbf{B}/B$ und $\epsilon(\mathbf{k})$. Die in der Brillouinzone für konstante $k_\parallel$ umlaufene Fläche ist dann

$$F_k(k_\parallel) = \int^\epsilon \mathrm{d}\epsilon' \oint \frac{\mathrm{d}k}{|\mathrm{grad}_\perp \epsilon'|}. \tag{14.35}$$

Dabei gibt der Index $_\perp$ den zu $\mathbf{B}$ senkrechten Anteil an. Aus der Bewegungsgleichung erhält man

$$\hbar |\dot{\mathbf{k}}_\perp| = \frac{eB}{\hbar c} |\mathrm{grad}_\perp \epsilon|. \tag{14.36}$$

Für die Umlaufdauer erhält man dann

$$T_c = \frac{\hbar^2 c}{eB} \oint \frac{\mathrm{d}k}{|\mathrm{grad}_\perp \epsilon|} = \frac{\hbar^2 c}{eB} \frac{\partial F_k}{\partial \epsilon}, \quad \omega_c = \frac{2\pi}{T_c}. \tag{14.37}$$

Die Azbel-Kaner-Resonanz, auch Zyklotron-Resonanz, wird für Frequenzen $\omega = n\omega_c$ beobachtet. Man legt das Magnetfeld und das elektrische Feld (Radiofrequenz) parallel zur Metalloberfläche an. Da das elektrische Feld im Inneren des Metalls rasch absorbiert wird, werden viele Vielfache von ω_c beobachtet.

14.g de Haas-van Alphen Effekt

Wir betrachten noch den de Haas-van Alphen-Effekt in Kristallen. Für die Zyklotron-Frequenzen gilt $\Delta\epsilon = \hbar\omega_c \Delta\nu$. Mit (14.37) folgt daraus

$$\Delta F_k = \frac{2\pi}{\omega_c} \frac{eB}{\hbar^2 c} \Delta\epsilon = \frac{2\pi e B}{\hbar c} \Delta\nu, \tag{14.38}$$

woraus dann die Beziehung

$$F_k = \frac{2\pi e B}{\hbar c} \nu \tag{14.39}$$

folgt. Damit erhält man als Abstand der Magnetisierungsextreme

$$\Delta \frac{1}{B} = \frac{2\pi e}{\hbar c F_k}. \tag{14.40}$$

Aus diesen Abständen kann man die Querschnitte F_k bestimmen. Tatsächlich ist das nicht ganz so einfach, da man Beiträge aller $k_\parallel$ hat. Allerdings tragen die für extremes F_k am stärksten bei, da sich dort F_k mit $k_\parallel$ am wenigsten ändert. So kann man in Kupfer den Querschnitt der Bauch- und der Halsbahnen den Oszillationen klar entnehmen.

15 Halbleiter

In einem Halbleiter liegt die Fermi-Energie in einer Energielücke, das heißt einem Energiebereich, in dem es keine Energiezustände gibt. Das darunter liegende Band heißt Valenzband, das darüber liegende Leitungsband.

15.a Ladungsträger-Konzentration

15.a.α Elektronen

Die Dispersion an der unteren Kante des Leitungsbandes werde durch

$$\epsilon_e(\mathbf{k}) = \epsilon_c + \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{m_{xe}^*} + \frac{k_y^2}{m_{ye}^*}\frac{k_z^2}{m_{ze}^*}\right) \tag{15.1}$$

beschrieben, wobei wir die Hauptachsen des Massentensors als Koordinatenachsen gewählt haben. Tatsächlich kann das Energieminimum auch bei $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ liegen, was leicht berücksichtigt werden kann. Es kann auch mehrere entartete Energieminima geben, was als Faktor in der Zustandsdichte mitgenommen werden kann. Die Anzahl der Elektronen pro Volumen im Band bis zur Energie $\epsilon > \epsilon_c$ ergibt sich zu

$$\int_{\epsilon_c}^{\epsilon} \mathrm{d}\epsilon' D(\epsilon') = \frac{2}{8\pi^3} \underbrace{\frac{4\pi}{3} k_{x\mathrm{max}} k_{y\mathrm{max}} k_{z\mathrm{max}}}_{\mathrm{Volumen\,des\,Fermi-Ellipsoids}} = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2(\epsilon-\epsilon_c)m_\mathrm{e}^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \tag{15.2}$$

mit

$$m_\mathrm{e}^{*3} = m_{x\mathrm{e}}^* m_{y\mathrm{e}}^* m_{z\mathrm{e}}^*, \quad \hbar k_{\alpha\mathrm{max}} = \sqrt{2m_{\alpha\mathrm{e}}^*(\epsilon-\epsilon_c)}. \tag{15.3}$$

Damit folgt die Zustandsdichte

$$D(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3}(2m_\mathrm{e}^*)^{3/2}\sqrt{\epsilon-\epsilon_c}. \tag{15.4}$$

Für die Leitungselektronen-Konzentration folgt

$$n_\mathrm{e} = \int_{\epsilon_c}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon-\mu), \tag{15.5}$$

wobei man die Fermifunktion annähern kann durch den Ausdruck für die Boltzmann-Statistik

$$f(\epsilon-\mu) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} \approx \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)}, \tag{15.6}$$

solange $\epsilon_c - \mu \gg k_\mathrm{B}T$. Damit folgt

$$\int_{\epsilon_c}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \sqrt{\epsilon-\epsilon_c}\,\mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\epsilon_c)} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}(k_\mathrm{B}T)^{3/2} \tag{15.7}$$

und damit die Konzentration der Ladungsträger

$$n_\mathrm{e} = 2\left(\frac{k_\mathrm{B}T m_\mathrm{e}^*}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_c-\mu)}. \tag{15.8}$$

15.a.β Löcher im Valenzband

Aus dem Valenzband sind einige Elektronen thermisch angeregt. Diese fehlenden Elektronen bezeichnet man als Löcher. Zur Berechnung ihrer Konzentration gehen wir aus von der Dispersion

$$\epsilon_L(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{|m_{x\mathrm{L}}^*|} + \frac{k_y^2}{|m_{y\mathrm{L}}^*|} + \frac{k_z^2}{|m_{z\mathrm{L}}^*|}\right), \tag{15.9}$$

wobei die Massen jetzt negativ sind, da wir um das Maximum des Valenzbandes entwickeln, das wir auf Energie 0 gelegt haben. Wir erhalten nun analog die Zustandsdichte

$$D(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3}(2|m_\mathrm{L}^*|)^{3/2}\sqrt{-\epsilon}, \quad m_\mathrm{L}^{*3} = m_{x\mathrm{L}}^* m_{y\mathrm{L}}^* m_{z\mathrm{L}}^*. \tag{15.10}$$

und damit die Konzentration der Löcher

$$n_\mathrm{L} = \int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)(1 - f(\epsilon - \mu)). \tag{15.11}$$

Solange $\mu \gg k_\mathrm{B}T$, approximieren wir

$$1 - f(\epsilon - \mu) = \frac{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)}}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \approx \mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)} \tag{15.12}$$

und erhalten damit

$$n_\mathrm{L} = 2\left(\frac{k_\mathrm{B}T|m_\mathrm{L}|^*}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\beta\mu}. \tag{15.13}$$

Daraus folgt das Massenwirkungsgesetz

$$n_\mathrm{e}n_\mathrm{L} = \frac{(k_\mathrm{B}T)^3(m_\mathrm{e}^* m_\mathrm{L}^*)^{3/2}}{2\pi^3\hbar^6}\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_c}. \tag{15.14}$$

Falls $n_\mathrm{e} = n_\mathrm{L}$, dann folgt für das chemische Potential die Temperaturabhängigkeit

$$\mu = \frac{\epsilon_c}{2} + \frac{3}{4}k_\mathrm{B}T\ln\frac{|m_\mathrm{L}^*|}{m_\mathrm{e}^*}. \tag{15.15}$$

Halbleiter werden häufig mit Donatoren und Akzeptoren dotiert, zum Beispiel

n-Halbleiter	p-Halbleiter
Donatoren: 5 wertige Atome	Akzeptoren: 3 wertige Atome
P, As, Sb	B, Al, Ga, In

in 4 wertigen Kristallen Si, Ge.

Da der Kristall im Wesentlichen seine Struktur beibehält, muss ein Donator-Elektron in das Leitungsband, während ein Akzeptor ein Elektron aus dem Valenzband holt. Daher gilt

$$n_\mathrm{e} - n_\mathrm{L} = n_\mathrm{D} - n_\mathrm{A}. \tag{15.16}$$

Die Situation wird dadurch komplizierter, dass durch die Dotierung Verunreinigungsniveaus entstehen, deren Bindungsenergien in der Größenordnung von 0.01 bis 0.1 eV liegen.

15.b Dynamik der Kristall-Elektronen

Unter einer äußeren Kraft $\mathbf{F}$ erhält man einen Hamilton-Operator

$$H = H_0 - \mathbf{F}\cdot\mathbf{r}. \tag{15.17}$$

Sei unser Elektron zur Zeit $t = 0$ im Zustand $\psi_n(\mathbf{k}_0)$. Dann ist es zur Zeit $\mathrm{d}t$ im Zustand

$$\psi(\mathrm{d}t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H\mathrm{d}t/\hbar}\psi_n(\mathbf{k}_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0\mathrm{d}t/\hbar + \mathrm{i}\mathbf{F}\cdot\mathbf{r}\mathrm{d}t/\hbar}\psi_n(\mathbf{k}_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon_n(\mathbf{k}_0)\mathrm{d}t + \mathrm{i}\mathrm{d}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_n(\mathbf{k}_0). \tag{15.18}$$

Mit

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{F}, \quad \frac{1}{\hbar}\mathbf{F}\mathrm{d}t = \mathrm{d}\mathbf{k} \tag{15.19}$$

folgt

$$\psi(\mathrm{d}t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon_n(\mathbf{k}_0)\mathrm{d}t/\hbar}\psi_n(\mathbf{k}_0 + \mathrm{d}\mathbf{k}), \tag{15.20}$$

falls keine Übergänge von Band n in andere Bänder m erfolgen. Tatsächlich finden jedoch solche Übergänge statt. Da aber $\epsilon_n \neq \epsilon_m$, oszillieren sich diese Beiträge vor allem bei niedrigen Feldstärken sehr gut weg. Bei hohen Feldstärken tritt der Zener-Effekt auf. Dies ist eine Art Tunneleffekt im k-Raum, das heißt ein Tunneln durch den verbotenen Energiebereich. Dieser Übergang ist störungstheoretisch nicht erfassbar.

Unter einem elektrischen Feld,

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{\mathrm{d}t} = -e\mathbf{E}, \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}_0 - \frac{e\mathbf{E}}{\hbar}t \tag{15.21}$$

durchläuft der $\mathbf{k}$-Vektor das Band, was einmal positive, einmal negative Geschwindigkeit bedeutet. Das Elektron oszilliert. Diese Bloch-Oszillationen haben jedoch nur sehr selten Bedeutung, da in der Regel eine Streuung nach etwa $\tau \approx 10^{-14}$ Sekunden stattfindet. Die Feldstärke müsste etwa 10^7 V/cm sein, damit die Oszillation vor der Streuung erfolgt. Diese extremen Felder führen in der Regel zum Durchschlag. Jedoch hat man diese Oszillationen in periodischen Schichtstrukturen, in denen die Gitterperiode groß und damit die reziproken Gittervektoren $\mathbf{b}_i$ klein sind, bei sehr tiefen Temperaturen und reinen Substanzen beobachten können.

Wir betrachten die Bewegungsgleichung

$$\dot{v}_\alpha = \frac{\dot{p}_\alpha}{m} = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\partial\epsilon}{\partial k_\alpha}\right)^{\cdot} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2\epsilon}{\partial k_\alpha\partial k_\beta}\dot{k}_\beta = \left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta}F_\beta, \tag{15.22}$$

das heißt

$$m^*\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{F}. \tag{15.23}$$

Leitungselektronen erfahren eine positive Beschleunigung ($m^* > 0$) im Sinne von $\dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{F} \geq 0$, während Elektronen am oberen Bandende eine negative Beschleunigung erfahren ($m^* < 0$, $\dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{F} \leq 0$). Einige der Elektronen fehlen im Valenzband: Daher hat man einen Strom *in* Richtung der Feldstärke, da das ganz gefüllte Band nichts beiträgt.

Ohne Feld ergibt ein Band die Stromdichte

$$\mathbf{j}_\mathrm{e} = -e\langle n\mathbf{v}\rangle = -\frac{2e}{8\pi^3}\int \mathrm{d}^3k f(\epsilon_\mathbf{k} - \mu)\frac{1}{\hbar}\nabla_k\epsilon_\mathbf{k} = -\frac{2e}{8\pi^3}\int \mathrm{d}^2k\mathbf{n}f^*(\epsilon_\mathbf{k} - \mu) = 0. \tag{15.24}$$

Das letzte Integral ist über die Oberfläche der Brillouinzone zu erstrecken. f^* ist das Integral der Fermi-Funktion f. Das Integral ergibt 0, da sich die Beiträge an der Oberfläche der Brillouinzone paarweise gegenseitig wegheben.

Bei Anlegen eines Felds macht man häufig einen Relaxationszeitansatz. Das heißt man geht davon aus, dass im Mittel die zusätzliche Geschwindigkeit, die das Elektron durch ungestörte Beschleunigung in der Zeit τ erreicht, hinzukommt,

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 - (m_\mathrm{e}^*)^{-1}e\mathbf{E}\tau, \tag{15.25}$$

was auf

$$\mathbf{j}_\mathrm{e} = (m_\mathrm{e}^*)^{-1}n_\mathrm{e}e^2\mathbf{E}\tau_\mathrm{e} \tag{15.26}$$

führt. Ähnlich erhält man für die Valenzelektronen

$$\mathbf{j}_\mathrm{L} = (-m_\mathrm{L}^*)^{-1}n_\mathrm{L}e^2\mathbf{E}\tau_\mathrm{L} \tag{15.27}$$

Das Minus-Zeichen rührt daher, dass diese Elektronen im vollen Band fehlen.

15.c Zyklotron-Resonanz

Falls $\omega_c \tau \gg 1$, dann kann ein Elektron viele Zyklotronumläufe bis zu einer Streuung durchlaufen und man kann die Zyklotronresonanz beobachten. Aus der Bewegungsgleichung

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \tag{15.28}$$

folgt, wenn wir die Koordinatenachsen in Richtung der Hauptachsen von m^* wählen und wir das Magnetfeld in Richtung der Hauptachse z legen, $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$,

$$\dot{k}_x = \frac{eB}{m_y^* c} k_y, \quad \dot{k}_y = -\frac{eB}{m_x^* c} k_x \tag{15.29}$$

die Gleichung

$$\ddot{k}_x = -\frac{e^2 B^2}{m_x^* m_y^* c^2} k_x \tag{15.30}$$

und damit die Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{eB}{\sqrt{m_x^* m_y^*} c}. \tag{15.31}$$

In einer allgemeinen Richtung von $\mathbf{B}$ folgt

$$\dot{k}_x = \frac{e}{c} \left(B_z \frac{k_y}{m_y^*} - B_y \frac{k_z}{m_z^*} \right). \tag{15.32}$$

Durch Division der Komponenten von $\mathbf{k}$ und $\mathbf{B}$ durch geeignete Potenzen von m^* können wir die Gleichung in die Form

$$\frac{\dot{k}_x}{\sqrt{m_x^*}} = \frac{e}{c} \left(\frac{B_z}{\sqrt{m_x^* m_y^*}} \frac{k_y}{\sqrt{m_y^*}} - \frac{B_y}{\sqrt{m_x^* m_z^*}} \frac{k_z}{\sqrt{m_z^*}} \right) \tag{15.33}$$

bringen. Wir führen daher

$$\tilde{k}_\alpha = \frac{k_\alpha}{\sqrt{m_\alpha^*}}, \quad \tilde{B}_\alpha = \frac{B_\alpha \sqrt{m_\alpha^*}}{\sqrt{m_x^* m_y^* m_z^*}} \tag{15.34}$$

ein und erhalten

$$\dot{\tilde{\mathbf{k}}} = \frac{e}{c} \tilde{\mathbf{k}} \times \tilde{\mathbf{B}} \tag{15.35}$$

und damit die Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{e}{c} |\tilde{B}| = \frac{e}{c} \sqrt{\frac{B_x^2}{m_y^* m_z^*} + \frac{B_y^2}{m_x^* m_z^*} + \frac{B_z^2}{m_x^* m_y^*}}. \tag{15.36}$$

Man kann daher aus gemessenen Zyklotronfrequenzen auf die effektiven Massen schließen.