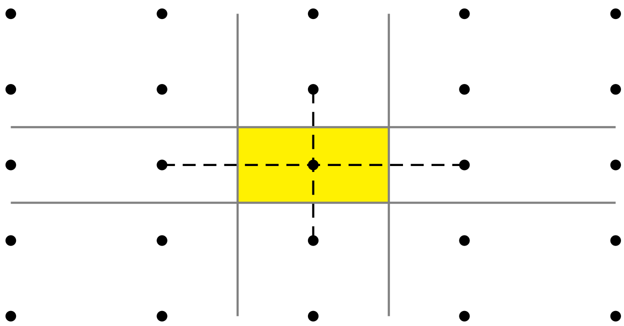
Heiko Dumlich 14. Januar 2007

10 Übungsblatt Festkörperphysik

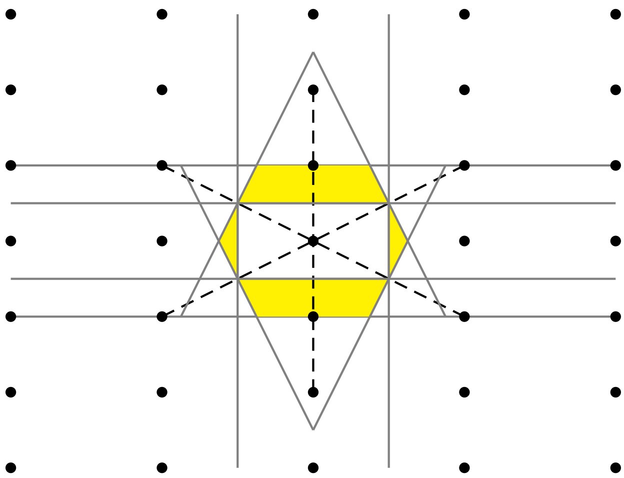
10.1 (Fermi-Flächen in 2D)

a)

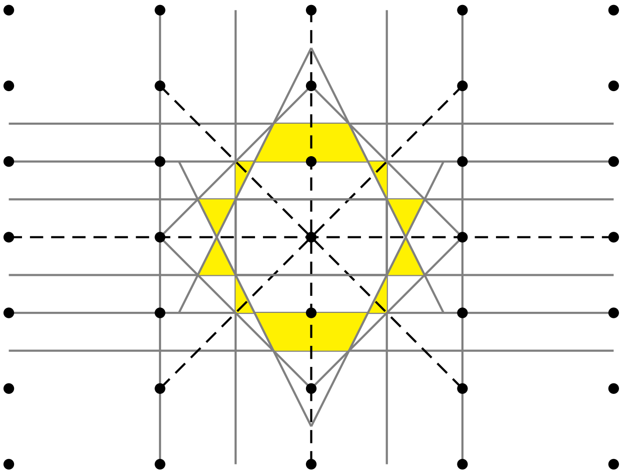
Es sind die ersten 4 Brillouin Zonen des zweidimensionalen Rechteckgitters mit den Gitterkonstanten a und $b = 2\,a$ zu zeichnen, wobei das reziproke Gitter wieder rechteckige Form besitzt und das Verhältnis der Seiten erhält:



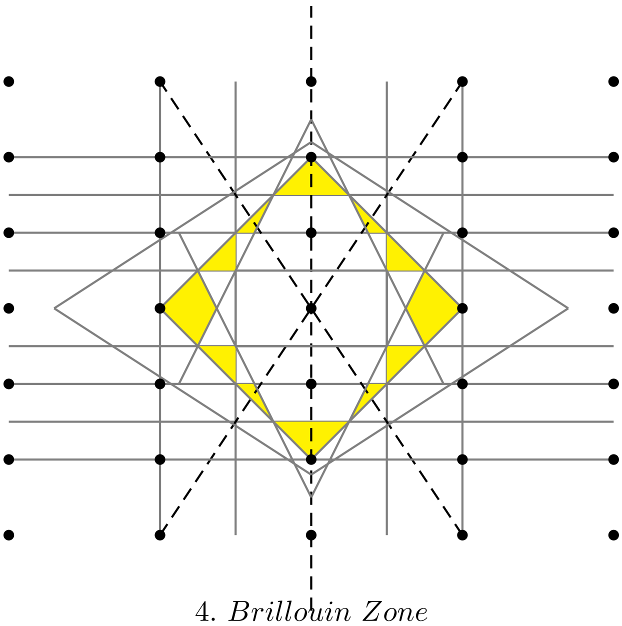
1. *Brillouin Zone*



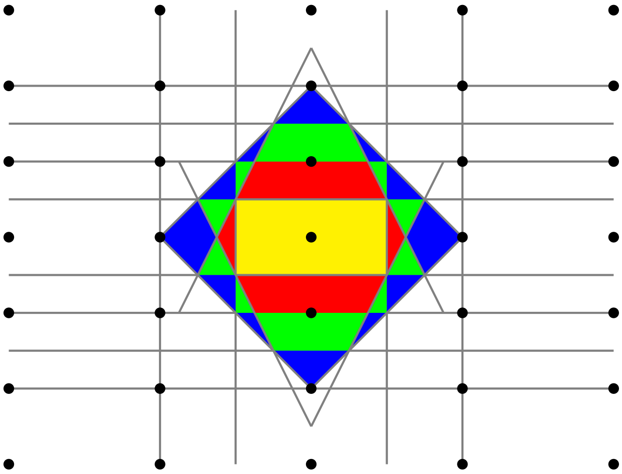
2. *Brillouin Zone*



3. *Brillouin Zone*



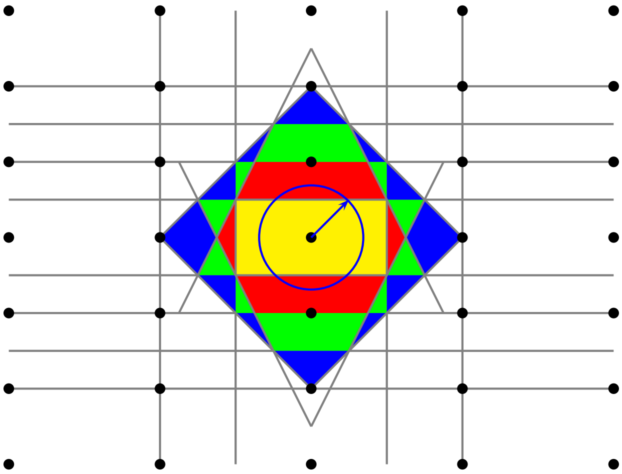
4. *Brillouin Zone*



$1. - 4.$ *Brillouin Zone*

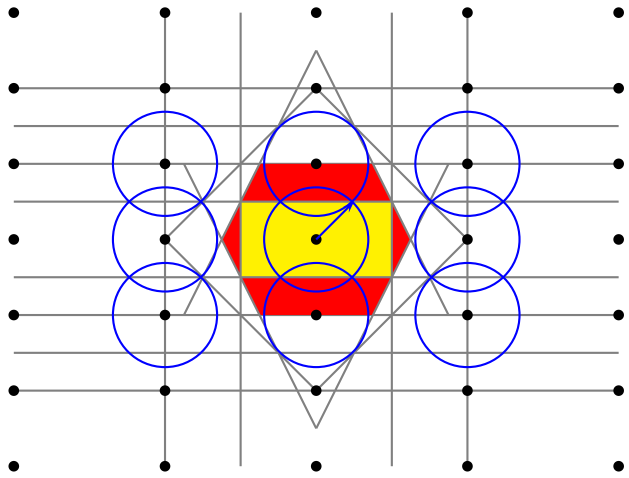
b)

Es sind die Fermi-Flächen im periodischen Zonenschema für den Fall zu zeichnen, dass der Fermi-Wellenvektor in [11] -Richtung gerade bis zum Rand der ersten Brillouin-Zone geht.



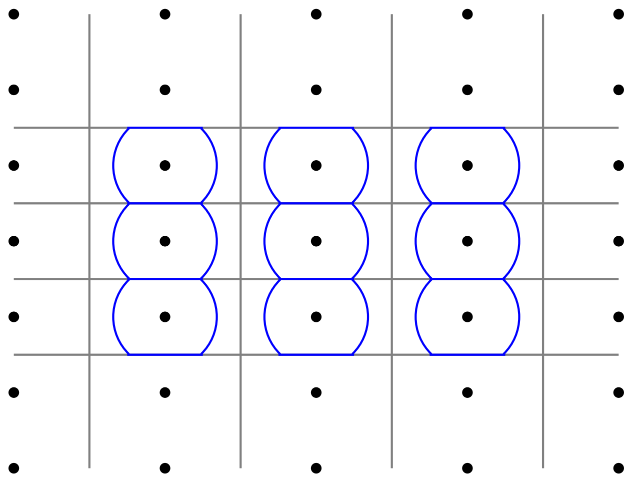
$Fermiflaeche$

In der Harrison-Konstruktion der Fermi-Flächen erhalten wir:

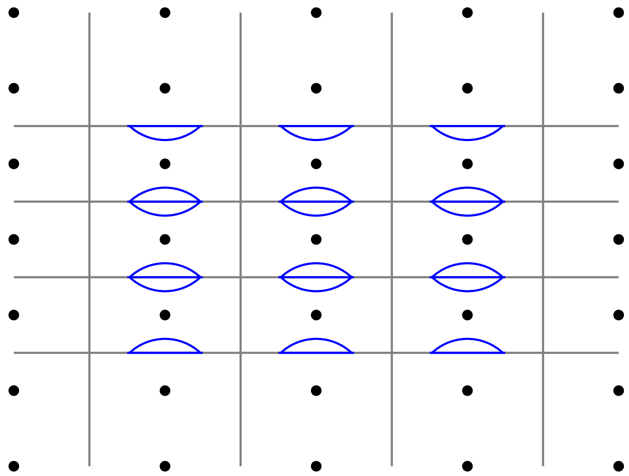


$Fermiflaeche\ in\ Harrison-Konstruktion$

Wir gehen nun über ins periodische Zonenschema:



$Fermiflaeche\ in\ der\ 1.BZ\ im\ periodischen\ Zonenschema$



Fermiflaeche in der 2.BZ im periodischen Zonenschema

10.2 (Indirekte Übergänge)

Das Leitungsbandminimum von Germanium (Bandlücke $E_g\,(80K) = 0.722\,eV$) liegt genau am L-Punkt und das Valenzbandmaximum am Γ-Punkt. Der indirekter optische Übergang ist nur mit Hilfe von Phononen möglich. Es sind alle möglichen Übergänge unter Vernachlässigung von Auswahlregeln mit dazugehörigen Laser-Wellenlängen zu bestimmen. Wir betrachten zur Bestimmung der Phonenfrequenzen Folie 10 Blatt 1 (glücklicherweise besitzen wir in diesem Fall $T = 80K$ und die [111]-Richtung, wie für unser gegebenes Problem benötigt, so dass wir direkt ablesen können), es ergeben sich mit einer Ablesegenauigkeit von $0.2 \cdot 10^{12}\,Hz$ folgende Frequenzen Ω:

$$\begin{aligned}
\Omega_{TO} &= 8.6 \cdot 10^{12}\,Hz \\
\Omega_{LO} &= 7.4 \cdot 10^{12}\,Hz \\
\Omega_{LA} &= 6.5 \cdot 10^{12}\,Hz \\
\Omega_{TA} &= 1.9 \cdot 10^{12}\,Hz
\end{aligned}$$

Für die indirekten Übergänge, müssen wir nun $E = E_g + \hbar\Omega$ berechnen. Die maximale Anzahl beträgt also 4 und die Ergebnisse für diese sind:

$$\begin{aligned}
E_{TO} &= 0.722\,eV + 6.626 \cdot 10^{-34} \frac{1}{1.602 \cdot 10^{-19}} \cdot 8.6 \cdot 10^{12}\,\frac{eV\,A\,s^2}{As^2} = 0.758\,eV \\
E_{LO} &= 0.722\,eV + 4.136 \cdot 7.4 \cdot 10^{-3}\,eV = 0.722\,eV + 0.031\,eV = 0.753\,eV \\
E_{LA} &= 0.722\,eV + 0.027\,eV = 0.749\,eV \\
E_{TA} &= 0.722\,eV + 0.008\,eV = 0.730\,eV
\end{aligned}$$

Es bleibt die Bestimmung der zugehörigen Wellenlängen, diese ergeben sich mit Hilfe der Energieerhaltung: $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = E_g + \hbar\Omega$ somit folgt für die Wellenlänge $\lambda = hc\frac{1}{E}$, dies liefert also für die Übergänge eine benötigte Anregung durch eine Wellenlänge von:

$$\begin{aligned}
\lambda_{TO} &= \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{1.602 \cdot 10^{-19}} \cdot \frac{1}{0.758} \frac{VAs^2 \frac{m}{s}}{VAs} = 1637 \cdot 10^{-9}\, m \\
\lambda_{LO} &= 1.241 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{1}{0.753}\, m = 1648 \cdot 10^{-9}\, m \\
\lambda_{LA} &= 1.241 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{1}{0.749} = 1657 \cdot 10^{-9}\, m \\
\lambda_{TA} &= 1.241 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{1}{0.730} = 1700 \cdot 10^{-9}\, m.
\end{aligned}$$

10.3 (Herleitung der Bewegungsgleichung aus der Heisenberg-Darstellung)

Es ist die Bewegungsgleichung für Bloch-Elektronen unter Einfluss einer äußeren konstanten Kraft $\vec{F}$ herzuleiten:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\vec{F}.$$

Hierbei ist die Heisenberg-Darstellung für die Zeitableitung eines Operators A zu benutzen, diese ist gegeben mit:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A] \text{ mit } H = H_0 - \vec{F} \cdot \vec{r},$$

wobei H_0 der translationsinvariante Hamilton-Operator des ungestörten Systems sei, d.h. es gilt $[H_0, T] = 0$ mit dem Translationsoperator $T : Tf(\vec{r}) = f\left(\vec{r} + \vec{T}\right)$, wobei $\vec{T}$ ein Gittervektor ist und f eine beliebige Funktion.

a)

Es ist zu zeigen, dass der Translationsoperator für Bloch-Wellen gegeben ist durch: $T = e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}$. Hierzu betrachten wir das Blochtheorem, dieses besagt:

$$\varphi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}\varphi(\vec{r}).$$

Zudem gilt aber für beliebige Funktionen, speziell also für $f(\vec{r}) = \varphi(\vec{r})$:

$$\varphi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = T\varphi(\vec{r}).$$

Es gelten beide Formeln, durch Vergleich erkennen wir also, dass der Translationsoperator in diesem Fall durch:

$$T = e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}$$

gegeben ist.

b)

Wir können nun in der Heisenbergdarstellung den Operator A durch T ersetzen und erhalten:

$$\begin{aligned}
\frac{dT}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[H,T] \\
&= \frac{i}{\hbar}\left\{\underbrace{[H_0,T]}_{=0} - \left[\vec{F}\cdot\vec{r},T\right]\right\} \\
&= \frac{i}{\hbar}\left\{T\left(\vec{F}\cdot\vec{r}\right) - \left(\vec{F}\cdot\vec{r}\right)T\right\} \\
&= \frac{i}{\hbar}\left\{\left[\vec{F}\cdot\left(\vec{r}+\vec{T}\right)\right]T - \left(\vec{F}\cdot\vec{r}\right)T\right\} \\
&= \frac{i}{\hbar}\left\{\left(\vec{F}\cdot\vec{r}\right)T + \left(\vec{F}\cdot\vec{T}\right)T - \left(\vec{F}\cdot\vec{r}\right)T\right\} \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\vec{F}\cdot\vec{T}\right)T
\end{aligned}$$

Wenden wir den konjugiert komplexen Operator T^* auf beide Seiten an, folgt:

$$\begin{aligned}
T^*\frac{dT}{dt} &= T^*\frac{i}{\hbar}\left(\vec{F}\cdot\vec{T}\right)T \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\vec{F}\cdot\vec{T}\right)|T|^2,
\end{aligned}$$

wobei sich mit $|T|^2 = T^*T = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{T}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}} = e^0 = 1$ folgendes ergibt:

$$\begin{aligned}
T^*\frac{dT}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left(\vec{F}\cdot\vec{T}\right) \\
e^{-i\vec{k}\cdot\vec{T}}\frac{d}{dt}\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}\right) &= \frac{i}{\hbar}\left(\vec{F}\cdot\vec{T}\right).
\end{aligned}$$

Wir führen die Ableitung aus, diese liefert:

$$\underbrace{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{T}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}}_{=0} i\vec{T}\cdot\frac{d\vec{k}}{dt} + 0 = \frac{i}{\hbar}\left(\vec{F}\cdot\vec{T}\right)$$

Kürzen durch i und Wegwerfen von $\vec{T}$ auf beiden Seiten liefert:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar}\vec{F}$$

□