

# **Experimentalphysik C2**

## **Festkörperphysik II**

Markus Lippitz

21. März 2025

*cite as*

Lippitz, Markus, 2023.

Festkörperphysik II - Skript zur Vorlesung (Sommer 2023). Zenodo.

<https://doi.org/10.5281/zenodo.8279873>

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Wärmeleitung und anharmonische Effekte</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Fermi-Gas</b>	<b>17</b>
<b>3</b>	<b>Elektronen in Festkörpern</b>	<b>27</b>
<b>4</b>	<b>Kristall-Elektronen im Magnetfeld</b>	<b>43</b>
<b>5</b>	<b>Halbleiter</b>	<b>57</b>
<b>6</b>	<b>Supraleiter</b>	<b>71</b>
<b>7</b>	<b>Magnetismus</b>	<b>85</b>
<b>8</b>	<b>Optische Eigenschaften</b>	<b>99</b>
<b>9</b>	<b>Nanostrukturen</b>	<b>111</b>
<b>Anhang</b>		<b>122</b>
<b>A</b>	<b>Fourier-Transformation</b>	<b>125</b>



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International"](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) Lizenz.



# Kapitel 4

## Kristall-Elektronen im Magnetfeld

Markus Lippitz  
21. März 2025

### Ziele

- Sie können Methoden zur Vermessung der Fermi-Oberfläche wie beispielsweise die Zyklotron-Resonanz oder die De Haas-van Alphen-Oszillationen erklären und auf einfache Beispiele anwenden.
- Sie können das Konzept der Landau-Niveaus benutzen, um den hier dargestellten Quanten-Hall-Effekt phänomenologisch zu erklären.

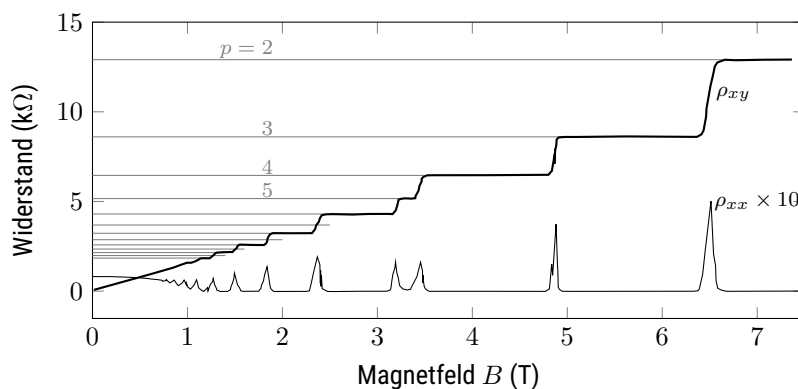


Abbildung 4.1: Quanten-Hall-Effekt in einem effektiv zweidimensionalen Elektronengas (Klaus v. Klitzing, 1984). Der Querwiderstand  $\rho_{xy}$  nimmt nur diskrete Werte  $25812 \Omega / p$  an, wobei  $p$  die Anzahl der voll besetzten Landau-Niveaus ist. An diesen Plateaus verschwindet der Längswiderstand  $\rho_{xx}$ .

### Überblick

Im vorigen Kapitel haben wir die Bandstruktur besprochen, die die möglichen Zustände eines Elektrons als Funktion des Wellenvektors  $\mathbf{k}$  und des Bandindex  $n$  beschreibt. Mit Hilfe eines externen Magnetfeldes können wir bestimmte Eigenschaften der Bandstruktur experimentell bestimmen. Dieses Kapitel kann daher als experimentelle Verifizierung des vorangegangenen Kapitels angesehen werden. Außerdem führt ein starkes Magnetfeld zu einer weiteren Quantisierung der Elektronenzustände.

Für diese Phänomene würde man idealerweise die zeitabhängige Schrödingergleichung verwenden, aber diese ist zu komplex. Daher verwenden wir



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International"](#) Lizenz.

semiklassische Modelle, die die Elektronenzustände quantenmechanisch beschreiben, während der Einfluss äußerer Kräfte klassisch behandelt wird. Ziel ist es zu verstehen, wie sich Elektronen in einem Magnetfeld bewegen und wie ihre Energieniveaus beeinflusst werden.

## Fermi-Flächen

Bevor wir uns der Bewegung der Elektronen unter dem Einfluss eines magnetischen Feldes zuwenden, müssen wir die Form der Fermiflächen diskutieren, die dabei eine Rolle spielen. Nur Elektronen in der Nähe der Fermifläche tragen zum Transport bei, wie wir im Drude-Sommerfeld-Modell gesehen haben. In einem freien Elektronengas und  $T = 0$  sind alle Zustände unterhalb einer charakteristischen Energie  $E_F$  und damit auch unterhalb eines charakteristischen Wellenvektors  $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$  vollständig besetzt. Im reziproken Raum entspricht dies einer Kugel mit dem Radius  $k_F$ , der Fermi-Kugel.

Die Bandstruktur führt dazu, dass die Form von einer Kugel abweichen wird. Wir bezeichnen dann als *Fermi-Fläche* die Fläche im reziproken Raum, die genau alle besetzten Zustände bei  $T = 0$  einschließt. Die möglichen Werte des Wellenvektors  $\mathbf{k}$  sind diskret. Die Gesamtzahl der  $\mathbf{k}$ -Werte in der ersten Brillouinzone entspricht der Anzahl primitiver Einheitszellen im Kristall. Weil ein Elektron zwei verschiedene Spin-Eigenwerte annehmen kann, gibt es in der ersten Brillouinzone also doppelt so viele Zustände für Elektronen wie Atome im Kristall, falls nur ein Atom in der Einheitszelle ist.

Falls jedes Atom ein Elektron zum quasi-freien Elektronengas beisteuert, dann ist das Band nur halb gefüllt und damit  $k_F$  knapp unterhalb der Grenze der Brillouinzone bei  $\pi/a$ . Wenn die Bandstruktur isotrop ist, dann nimmt die Fermi-Fläche auch hier die Form einer Kugel an. Ansonsten 'verbeult' die Form etwas. Beispiele sind die Alkali-Metalle.

Bei zwei Elektronen pro Atom würden zwar genügend Zustände innerhalb der ersten Brillouinzone existieren. Bei einer isotropen Bandstruktur ist der Kugel-Radius  $k_F$  aber größer als  $\pi/a$ . Eine Kugel reicht etwas über den Quader gleichen Volumens hinaus. Im reduzierten Zonenschema findet man also freie Zustände in den Ecken des ersten Bandes und besetzte Zustände in Taschen an den Kanten des zweiten Bandes (siehe Abbildung 4.2), die man sich durch Rückfaltung entstanden vorstellen kann.

An der Grenze der Brillouinzone, wo diese Rückfaltung stattfindet, entsteht durch das periodische Potential aber auch die Bandlücke. Dort ist die Gruppengeschwindigkeit Null, also

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E = 0 \quad . \quad (4.1)$$

Der Gradient der Energie verläuft also parallel zur Grenze der Brillouinzone und damit die Linien konstanter Energie und so die Fermi-Fläche senkrecht auf die Grenze der Brillouinzone. Dies führt lokal zu einer Abweichung von der (zurückgefalteten) Kugelform.

Im ausgedehnten Zonenschema findet man so durch 'Hälsen' verbundene Flächen, die sich periodisch wiederholen.

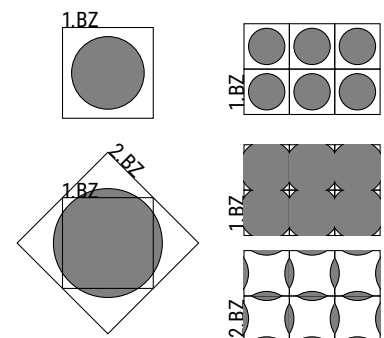


Abbildung 4.2: Wenn die Fermi-Kugel die Grenze der ersten Brillouinzone erreicht entstehen freie Zustände in den Ecken des ersten Bandes und besetzte Zustände in Taschen an den Kanten des zweiten Bandes.

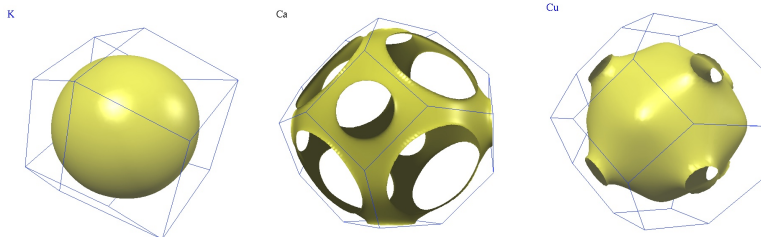


Abbildung 4.3: Fermi-Oberflächen von K, Ca und Cu (von links). Choy u. a., 2000

### Zur Selbstkontrolle

1. Machen Sie sich klar welche Formen von Fermi-Flächen durch den Kontakt mit der Grenze der Brillouinzone entstehen können, wenn man das periodische Zonenschema benutzt.

### Zyklotron-Resonanz

Die Zyklotron-Resonanz ist eine experimentelle Methode, mit der die Form der Fermi-Fläche bestimmt werden kann. Man legt ein statisches Magnetfeld  $\mathbf{B}$  an und bestimmt die Absorption einer Radiowelle variabler Frequenz.<sup>1</sup> Man findet charakteristische Frequenzen, bei denen die Absorption besonders hoch ist. Aus diesen Zyklotronresonanzfrequenzen kann man den Umfang der Fermi-Fläche bestimmen, die von einer Ebene senkrecht zum Magnetfeld geschnitten wird.

<sup>1</sup> Eigentlich macht man es genau umgekehrt: konstante Frequenz, variables Feld. Aber so ist es einfacher zu erklären.

Betrachten wir zunächst klassische freie Elektronen im Magnetfeld. Die Bewegungsgleichung ist

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = q [\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \quad (4.2)$$

Wir haben hier kein elektrisches Feld und setzen  $\mathbf{B} = B_0 \hat{e}_z$ . Damit ist die Bewegung in  $z$ -Richtung frei und wir erhalten ein Gleichungssystem für die Bewegung in der  $xy$ -Ebene

$$m\dot{v}_x = -eB_0 v_y \quad (4.3)$$

$$m\dot{v}_y = +eB_0 v_x \quad (4.4)$$

Die Lösung ist eine kreisförmige Bahn mit der Zyklotron-Frequenz  $\omega_c$

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \quad (4.5)$$

Im Kristall wird nun aus der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  die Gruppengeschwindigkeit  $\mathbf{v}_g$  und die Bewegungsgleichung

$$d\mathbf{k} = -\frac{e}{\hbar^2} [\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}] dt \quad (4.6)$$

Die Änderung des Wellenvektors steht also senkrecht auf dem Magnetfeld und dem Gradienten der Energie. Das Elektron bewegt sich auf einer Bahn, die senkrecht auf dem Magnetfeld steht und entlang konstanter Energie  $E(\mathbf{k}) = \text{const.}$  geht. Wir führen einen Vektor  $d\mathbf{k}_\perp$  ein, der senkrecht auf  $\mathbf{B}$  und  $d\mathbf{k}$  steht. Seine Länge ist  $dk_\perp$ . Damit erhalten wir wir

$$|d\mathbf{k}| = \frac{e}{\hbar^2} B |dE/dk_\perp| dt \quad (4.7)$$

Die Umlaufzeit  $T$  ist

$$T = \oint dt = \frac{\hbar^2}{eB} \oint \frac{|d\mathbf{k}|}{|dE/dk_{\perp}|} = \frac{\hbar^2}{eB} \oint \frac{dk_{\perp} |d\mathbf{k}|}{dE} = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{dS}{dE} \quad (4.8)$$

mit der Änderung der umschlossenen Fläche im reziproken Raum

$$dS = \oint dk_{\perp} |d\mathbf{k}| \quad (4.9)$$

Beim freien Elektron ändert sich die Länge des Wellenvektors  $k$  nicht. Die umschlossene Fläche ist also  $S = \pi k^2$  und die Energie  $E = (\hbar k)^2/2m$ .

Damit wird

$$\frac{dS}{dE} = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \quad \text{und} \quad \omega_c = \frac{2\pi}{T} = \frac{eB}{\tilde{m}} \quad (4.10)$$

Nur im Fall freier Elektronen ist die Masse  $\tilde{m}$  die Ruhemasse des Elektrons. Ansonsten behält man aber diesen Zusammenhang bei und steckt das Ergebnis von Gl. 4.8 in die *Zyklotron-Masse*, die sich von der effektivem Masse  $m^*$  unterscheidet.

Bis hierher haben wir zwar Kreisfrequenzen, aber noch keine Absorption. Alle Elektronen bewegen sich auf geschlossenen Bahnen, nehmen aber keine Energie auf, weil eben  $E(\mathbf{k}) = \text{const.}$  gilt. Nun werden Mikrowellen mit der Frequenz  $\omega_{RF} = \omega_c$  eingestrahlt. Nur Elektronen in der Nähe der Fermikante können Energie aufnehmen. Die Zyklotronresonanz misst also die Länge der Bahnen auf der Fermifläche; je nach Orientierung des Magnetfeldes verlaufen die Bahnen in unterschiedlichen Bereichen. Scharfe Resonanzen erhält man nur, wenn die mittlere Stoßzeit groß gegenüber der Umlaufzeit ist, also mehrere Umläufe ungestört durchlaufen werden können. Man verwendet daher hohe Magnetfelder und damit hohe Umlauffrequenzen sowie tiefe Temperaturen und reine Substanzen.

Weiterhin tragen nur *extremale Bahnen* bei. Dies sind Bahnen, bei denen es viele Bahnen mit ähnlicher Frequenz gibt oder umgekehrt, bei denen sich die Frequenz nur wenig ändert, wenn sich die Komponenten des Wellenvektors parallel zum Magnetfeld ändern. Die Bahnen sind also stabil gegenüber Störungen.

Zur Selbstkontrolle

2. Welche extremale Bahnen erwarten Sie in den in Abb. 4.3 gezeigten Fermi-Flächen?

## Beispiel: Germanium

Germanium (Ge) ist ein indirekter Halbleiter mit kubisch-flächenzentrierter (fcc) Kristallstruktur. Die Fermi-Energie eines Halbleiters liegt in der Bandlücke, so dass eine Fermi-Fläche nicht definiert werden kann. Daher betrachten wir hier eine Isoenergiefläche für angeregte Elektronen im Leitungsband. Von der Idee her ist dies aber identisch mit der Spektroskopie von Fermi-Flächen. Die Bandstruktur von Germanium ist etwas speziell. Insbesondere liegt das Minimum des Leitungsbandes nicht am  $\Gamma$ -Punkt, sondern an den L-Punkten am Rand der Brillouin-Zone. Die iso-Energieflächen haben die Form

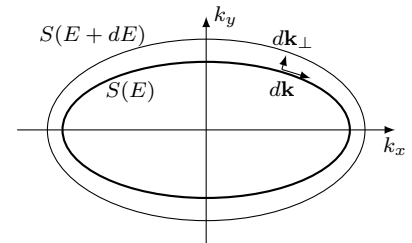


Abbildung 4.4: Die Fläche  $dS$  ist ein Kreisintegral über  $|d\mathbf{k}|$  mit der 'Dicke'  $dk_{\perp}$ .

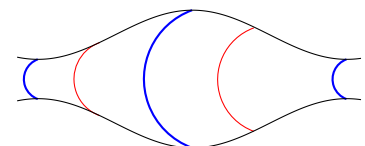


Abbildung 4.5: Nur extremale Bahnen (blau) entlang der Fermi-Oberfläche sind stabile tragen zur Zyklotron-Resonanz bei. Die rot gezeichneten Bahnen sind instabil.



von Ellipsoiden, deren Mittelpunkt in den L-Punkten liegt und deren lange Achse zum  $\Gamma$ -Punkt zeigt. Obwohl es 8 L-Punkte gibt, liegt die Hälfte der Ellipsoide außerhalb der ersten Brillouin-Zone, so dass effektiv nur 4 vollständige Ellipsoide betrachtet werden müssen.

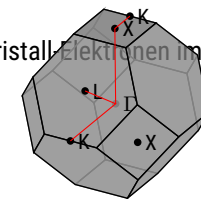


Abbildung 4.6: Brillouinzone eines fcc Kristalls.

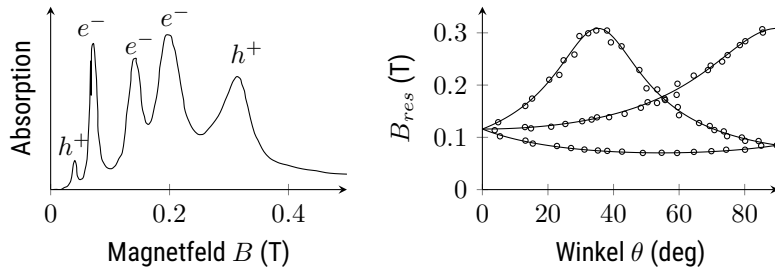


Abbildung 4.7: links: Zyklotron-Resonanz-Spektrum von Germanium bei einem Winkel  $\theta = 60^\circ$  zur  $[001]$ -Achse. rechts: Resonanzfeldstärke  $B$  als Funktion von  $\Theta$ .

Die Form dieser Iso-Energie-Fläche wurde von Dresselhaus, Kip und Kittel, 1955 durch Zyklotronresonanz bestimmt. Im Experiment ist es viel einfacher, den Mikrowellengenerator mit konstanter Frequenz zu betreiben und die Amplitude und Richtung des Magnetfeldes zu variieren. Die Frequenz ist dann immer  $\omega_c = 2\pi \cdot 24 \text{ GHz}$ . Abbildung 4.7(links) zeigt das Resonanzspektrum für eine bestimmte Orientierung des Magnetfeldes relativ zur Probe. Man findet fünf Resonanzen, von denen die drei mittleren den Elektronen im Leitungsband zugeordnet werden können. Bei der gewählten Anordnung von Probe und Magnetfeld sind zwei der vier Ellipsoide äquivalent, so dass effektiv drei verschiedene Ellipsoide sichtbar sind, die jeweils eine Resonanz im Spektrum ergeben.

Dann wird die Richtung des Magnetfeldes in der  $(110)$ -Ebene variiert.<sup>2</sup> Angegeben ist jeweils der Winkel  $\theta$  zur  $[001]$ -Achse. Mit dem Winkel ändert sich die Schnittebene, auf der die Zyklotronbahnen verlaufen, und damit ihre Fläche. Die Ellipsoide können durch zwei effektive Massen  $m_l, m_t$  in Längs- und Querrichtung beschrieben werden. Für einen Winkel  $\alpha$  zwischen dem Magnetfeld und der Längsachse des Ellipsoids ergibt sich eine effektive Masse  $m_{ell}$

$$\left( \frac{1}{m_{ell}} \right)^2 = \frac{\cos^2 \alpha}{m_t^2} + \frac{\sin^2 \alpha}{m_l m_l} \quad (4.11)$$

Diese effektive Masse bestimmt die Lage der Zyklotronresonanz. Der gesamte Datensatz in Abb. 4.7(rechts) kann daher durch  $m_l = 1.58 m_e$  und  $m_t = 0.082 m_e$  beschrieben werden, wobei  $m_e$  die Masse des freien Elektrons ist.

<sup>2</sup> Siehe Festkörperphysik I zur Definition von Ebenen und Richtungen. Insbesondere werden Richtungen in fcc-Kristallen mit sc-Koordinaten bezeichnet.

## Zur Selbstkontrolle

3. Wie hängt die effektive Masse mit der Form der Ellipsoiden zusammen?

## Landau-Niveaus

Bei der Zyklotronresonanz haben wir die Elektronenbahnen klassisch behandelt. In der Quantenmechanik erwartet man eine einzige Wellenfunktion pro Bahn, d.h. insbesondere, dass sich die Phase nur um ein Vielfaches von  $2\pi$  pro Umlauf ändert. Dies führt zu quantisierten Bahnen und einer Aufspaltung

der Zustände in Landau-Niveaus. Wir vernachlässigen den Energiebeitrag der Elektronenspins im Magnetfeld.

Wir müssen also das Magnetfeld  $\mathbf{B}$  in die Schrödingergleichung einbeziehen<sup>3</sup>. Dies geschieht über das zugehörige Vektorpotential  $\mathbf{A}$

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 \psi = E\psi \quad . \quad (4.12)$$

Wir wählen die Eichung

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & Bx & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und somit} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & B \end{pmatrix} \quad . \quad (4.13)$$

Damit ist die Schrödingergleichung separierbar in einen  $z$ -Anteil und einen für  $xy$ . Der  $z$ -Anteil entspricht einem freien Teilchen, also

$$\psi(z) \propto e^{\pm i k_z z} \quad \text{und} \quad E_z = \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \quad . \quad (4.14)$$

Für den  $xy$ -Anteil machen wir den Ansatz

$$\psi(x, y) \propto u(x) e^{i k_y y} \quad (4.15)$$

und erhalten eine eindimensionale Gleichung für  $u(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \left( \frac{eB}{m} x - \frac{\hbar k_y}{m} \right)^2 u = (E - E_z) u \quad . \quad (4.16)$$

Das ist ein eindimensionaler harmonischer Oszillator in einem parabolischen Potential, dessen Gleichgewichtslage bei

$$x_0 = \frac{\hbar^2 k_y}{m \omega_c} \quad (4.17)$$

liegt. Die Eigenfrequenz ist  $\omega = \omega_c = eB/m$ , mit  $m$  wieder der Zyklotron-Masse. Die Gesamtenergie hat die Eigenwerte

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \quad . \quad (4.18)$$

Insgesamt gibt es eine freie Bewegung in  $z$ -Richtung, d.h. in Richtung des Magnetfeldes, und eine quantisierte geschlossene Kreisbahn in der  $xy$ -Ebene. Abbildung 4.8 zeigt die Dispersionsrelation entlang  $k_z$ . In Metallen liegen die Zustände jedoch viel dichter beieinander: Bei einem Magnetfeld von 1 T beträgt  $\hbar \omega_c$  etwa 0.1 meV, verglichen mit  $E_F \approx 10$  eV.

Die  $x$  und  $y$ -Komponente des Wellenvektors sind nicht mehr zeitlich konstant, und nicht mehr Eigenwerte des Hamilton-Operators. Dies sind keine 'guten' Quantenzahlen mehr. Die Energie ist gegeben durch die Komponente  $k_\perp$  senkrecht zum Magnetfeld

$$k_{\perp, n} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c} \quad . \quad (4.19)$$

Damit wird die Energie

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_{\perp, n}^2 + k_z^2) \quad . \quad (4.20)$$

<sup>3</sup> siehe Kap. 9.3.2 in Hunklinger, 2014 und Kap. 9.6.1 in Yu und Cardona, 2010

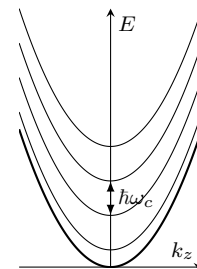


Abbildung 4.8: Dispersionsrelation entlang  $k_z$  ohne Magnetfeld (fett) und nach Quantisierung der Kreisbahnen (dünn).

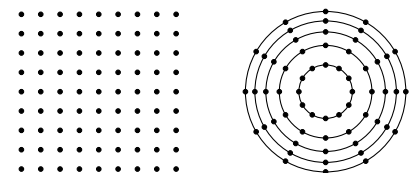


Abbildung 4.9: Durch das Magnetfeld in  $z$ -Richtung ändert sich die Anordnung der Zustände im reziproken Raum  $k_x - k_y$ .

In der  $xy$ -Ebene des reziproken Raums sind die Zustände also konzentrische Kreise, deren Durchmesser proportional zu  $\sqrt{n+1/2}$  ansteigt (Abb. 4.9). Der Kreis mit der Quantenzahl  $n$  hat im reziproken Raum die Fläche

$$S_n = \pi k_{\perp,n}^2 = \frac{2\pi eB}{\hbar} \left( n + \frac{1}{2} \right) . \quad (4.21)$$

Die Fläche zwischen zwei Kreisen ist im reziproken Raum für alle Kreise gleich

$$\Delta S = S_{n+1} - S_n = \frac{2\pi eB}{\hbar} . \quad (4.22)$$

Ohne Magnetfeld sind Zustände im reziproken Raum homogen verteilt, die Zustandsdichte konstant. Mit Magnetfeld werden die Zustände so umverteilt, dass sie in der  $xy$ -Ebene auf Kreisen liegen, und zwar auf jedem Kreis gleich viele. Das sind gerade die, die innerhalb des Kreises bis zum vorangegangenen liegen würden. Der Entartungsgrad  $g_e$  lässt sich schreiben als

$$g_e = \Delta S \frac{L^2}{(2\pi)^2} = \frac{eBL^2}{h} = \frac{\Phi}{2\Phi_0} \quad (4.23)$$

mit der Fläche der Probe  $L^2$  senkrecht zum Magnetfeld, dem magnetischen Fluss  $\Phi = L^2 B$  und dem *magnetischen Flussquant*  $\Phi_0$

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} . \quad (4.24)$$

Der Begriff *Flussquant* greift dem Kapitel über die Supraleitung vorweg. Dort wird auch der Faktor 2 deutlich, da die Elektronen dort paarweise auftreten. Die Stärke des Magnetfeldes kann (bei gegebener Probengröße) in Flussquanten gemessen werden. Genau diese Zahl bestimmt die Anzahl der Zustände auf den Landau-Kreisen, also deren Entartung.

In  $z$ -Richtung hat das Magnetfeld keinen Einfluss. Hier liegen die Zustände weiterhin homogen. Es bilden sich konzentrische Zylinder, die bis zur Fermi-Fläche mit Elektronen besetzt sind. Die Landau-Kreise sind also eigentlich Landau-Zylinder.

Zur Selbstkontrolle

4. Skizzieren Sie, wie in 3 Dimensionen die Landau-Zylinder in der Fermi-Kugel liegen, oder suche Sie solch ein Bild im Internet.

## Dimensionalität und Zustandsdichte

Betrachten wir zunächst die Zustandsdichte ohne Magnetfeld, aber mit reduzierter Dimensionalität, bevor wir zum Magnetfeld zurückkehren. Der Einfachheit halber nehmen wir ein freies Elektronengas an. Die Gruppengeschwindigkeit ist  $v_g = \hbar k/m$ . Damit ist die Zustandsdichte in  $n$  Dimensionen

$$D(E)^{(n)} dE = 2 \frac{L^n}{\hbar (2\pi)^n} \frac{m}{\hbar k} dE \int_{E=\text{const.}} dS_E \quad (4.25)$$

und somit

$$D(E)^{(3d)} = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} L^3 E^{1/2} \quad (4.26)$$

$$D(E)^{(2d)} = \frac{m}{\pi \hbar^2} L^2 = \text{const.} \quad (4.27)$$

$$D(E)^{(1d)} = \frac{1}{\pi \hbar} L E^{-1/2} . \quad (4.28)$$

Für punktförmige Objekte, also null Dimensionen erhält man wie für Atome diskrete Zustände

$$D(E)^{(0d)} = 2 \delta(E - E_0) \quad . \quad (4.29)$$

Nun kehren wir zum Magnetfeld zurück. Ein angelegtes Magnetfeld lässt auch im Dreidimensionalen eine freie Bewegung nur noch in der  $z$ -Richtung zu. Damit ändert sich effektiv die Dimensionalität der Probe. Nicht mehr alle drei Dimensionen sind relevant, sondern nur noch eine. Dies sieht man auch in der Zustandsdichte. Die Gesamtenergie jedes Zustands lässt sich aufspalten in die Energie der Kreisbewegung und die der freien Bewegung

$$E = E_n + E_z = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \quad . \quad (4.30)$$

Dann verschiebt  $E_n$  die Energieskala, die in  $D(E)^{(1)}$  eingeht. Die Gesamt-Zustandsdichte für 3 Dimensionen plus Magnetfeld ist also<sup>4</sup>

<sup>4</sup> Czycholl, 2016.

$$D(E)^{(3d+B)} = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} L^3 \sum_n \frac{\hbar \omega_c}{\sqrt{E - E_n}} \Theta(E - E_n) \quad (4.31)$$

wobei durch die Stufenfunktion  $\Theta$  nur Summanden mit  $E \geq E_n$  beitragen. Abbildung 4.10 zeigt diese Zustandsdichte im Vergleich zum Fall  $B = 0$ . Die Flächen unter den Kurven sind identisch. Bei kleiner werdendem Magnetfeld wird die Zyklotron-Frequenz  $\omega_c$  kleiner und damit der Abstand der Peaks kleiner. Wenn man dann über ein kleines Energieintervall mittelt<sup>5</sup> gehen beide Fälle ineinander über.

<sup>5</sup> beispielsweise durch thermische Einflüsse via  $k_B T$

Wenn wir von einer zweidimensionalen Probe ausgehen, dann ist ohne Magnetfeld die Zustandsdichte konstant. Mit Magnetfeld bleibt nur eine äquidistante Reihe von Delta-Funktionen  $\delta(E - E_n)$  bei den Zyklotron-Energien  $E_n$ , da keine freie Bewegung mit variabler Energie mehr möglich ist

$$D(E)^{(2d+B)} \propto \sum_n \delta(E - E_n) \quad . \quad (4.32)$$

## Innere Energie

Die Änderung der Zustandsdichte durch das Magnetfeld hat einen überraschenden Einfluss auf die innere Energie. Wir diskutieren dies für eine zweidimensionale Probe. Man kann sich den dreidimensionalen Zustandsdichte aber als etwas ausgeschmierte 2d Dichte vorstellen und erwartet somit ähnliche Ergebnisse.

Wenn kein Magnetfeld anliegt, sind alle Zustände bis zur Fermi-Energie  $E_F$  gefüllt (bei  $T = 0$ ), alle darüber leer. Jetzt schalten wir das Magnetfeld ein und wählen seine Stärke gerade so, dass die Entartung  $g_e$  (Gl. 4.23) passend ist (siehe Abb. 4.11), nämlich die Gesamtzahl  $N$  der Elektronen ein ganzzahliges Vielfaches des Entartungsgrads ist

$$N = p g_e \quad \text{mit} \quad p \in \mathbb{N} \quad . \quad (4.33)$$

In diesem Fall ändert sich die innere Energie nicht. Die Zustände ändern zwar ihre Energie, weil alle auf die Landau-Niveaus verschoben werden, aber gleich viele werden angehoben wie abgesenkt: die bis zum Abstand

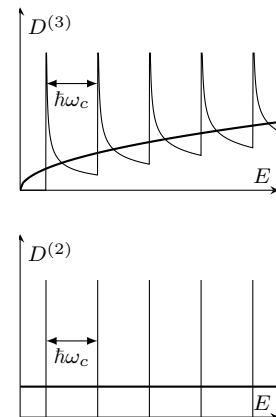


Abbildung 4.10: Zustandsdichte in 2 und 3 Dimensionen ohne (fett) und mit (dünn) angelegtem Magnetfeld.

$\hbar\omega_c/2$  unterhalb des Niveaus werden angehoben; die bis zu diesem Abstand darüber werden abgesenkt.

Ist aber die Feldstärke  $B$  anders, d.h. die Entartung  $g_e$  ist nicht genau gleich, so liegt ein nur teilweise besetztes Landau-Niveau vor. Beim allmählichen Füllen dieses letzten Niveaus werden jedoch zunächst nur Energien angehoben. Erst nach der halben Besetzung werden Energien abgesenkt. Insgesamt bleibt unabhängig von  $B$  immer eine Anhebung übrig.

Die innere Energie oszilliert also mit der Zahl der besetzten Niveaus  $p$ , wobei ein nicht-ganzzahliges  $p$  nun eine teilweise Besetzung bedeutet. Das Minimum der inneren Energie ist bei  $E_F(B=0)$ . Weil

$$E_F \approx p\hbar\omega_c = p \frac{e\hbar B}{m} \quad (4.34)$$

treten die Minima mit einer Periode des reziproken Feldes

$$\delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{e\hbar}{m E_F} \quad (4.35)$$

auf.

Interessanter ist jedoch die Größe des höchsten besetzten Landau-Niveaus im reziproken Raum, die wir mit  $S_F$  bezeichnen. Dies ist der Schnitt durch die Fermi-Fläche in einer Ebene senkrecht zum Magnetfeld und erlaubt somit die Fermi-Fläche auszumessen. Für ein Feld  $B_n$  seien gerade  $n$  Landau-Niveaus besetzt. Die Größe  $S_F$  des obersten Niveaus im reziproken Raum wird durch Gl. 4.21 gegeben:

$$S_F = \frac{2\pi e B_n}{\hbar} \left(n + \frac{1}{2}\right) \stackrel{!}{=} \frac{2\pi e B_{n+1}}{\hbar} \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right) \quad (4.36)$$

so dass

$$\delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar S_F} \quad (4.37)$$

Die innere Energie variiert also periodisch im  $1/B$ . Die Periodenlänge  $\delta(1/B)$  erlaubt es, die Größe  $S_F$  der Fermi-Fläche geschnitten senkrecht zum Magnetfeld zu bestimmen.

## Zur Selbstkontrolle

5. Machen Sie sich klar, was in Abb. 4.11 passiert. Wie ändert sich die Besetzung der Landau-Niveaus und die innere Energie, wenn man die magnetische Feldstärke variiert? Das ist der zentrale Punkt für den Rest des Kapitels.

## De Haas-van Alphen-Effekt

Viele messbaren Größen hängen mit der inneren Energie zusammen. Man findet diese Oszillationen mit  $1/B$  beispielsweise in der Wärmekapazität und in der Magnetisierung. Die Wärmekapazität ist

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \quad (4.38)$$

und die Magnetisierung  $M$  ist die Ableitung der freien Energie  $F$  bzw. (bei  $T=0$ ) der inneren Energie  $U$  nach  $B$ :

$$M = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_{T,V} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial U}{\partial B}\right)_{T=0,V} \quad (4.39)$$

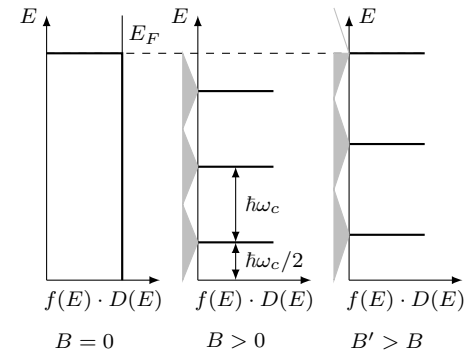
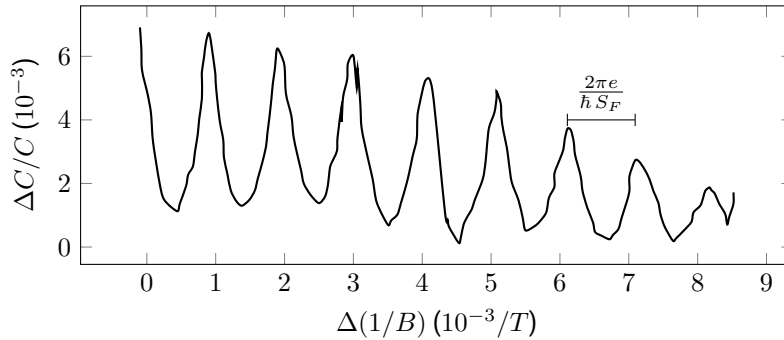


Abbildung 4.11: Zustandsdichte in zwei Dimensionen. Bei gewissen Feldstärken  $B$  ist die innere Energie größer als ohne Feld.

Die Oszillation von  $M$  mit  $1/B$  nennt man De Haas-van Alphen-Effekt nach W.J. de Haas und P.M. van Alphen.



Im Fall von Wärmekapazität Beryllium (Abb. 4.12) misst man bei passender Orientierung des Magnetfeldes die Querschnittsfläche der zigarrenförmigen Fermi-Flächen am Rand der Brillouinzone.

Zur Selbstkontrolle

6. Wie hängt die Oszillation in der Wärmekapazität von der Orientierung des Magnetfeldes ab?

## Hall-Effekt

Im letzten Teil dieses Kapitels verlassen wir die Resonanzen an der Oberfläche der Fermi-Fläche und betrachten den Hall-Effekt, aber wieder bei tiefen Temperaturen und hohen Magnetfeldern. Die Landau-Niveaus werden also weiterhin eine Rolle spielen. Ziel ist es, den Verlauf der Längs- und Querwiderstände in der Abbildung am Anfang des Kapitels zu erklären, eben den Quanten-Hall-Effekt.

Zunächst verlassen wir für einen Moment die quantenmechanische Beschreibung und betrachten den klassischen Hall-Effekt. Er erlaubt uns, die Ladungsträgerkonzentration zu bestimmen und zwischen Elektronen und Löchern zu unterscheiden. Er dient uns aber auch als Grundlage für den Quanten-Hall-Effekt im nächsten Abschnitt.

Wir betrachten die Bewegung eines quasi-freien Elektrons ( $q = -e$ ) unter elektrischen und magnetischen Feldern und berücksichtigen Stöße wie im Drude-Modell. Relevant ist die mittlere (Drift-) Geschwindigkeit  $\mathbf{v}_d = \langle \mathbf{v} \rangle$ , bei der also die thermische Bewegung herausgemittelt ist. Für diese gilt

$$m^* \frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = -e [\mathcal{E} + \langle \mathbf{v} \rangle \times \mathbf{B}] - m^* \frac{\langle \mathbf{v} \rangle}{\tau} \quad (4.40)$$

Das Magnetfeld zeigt in  $z$ -Richtung und wir sind nur am stationären Fall interessiert ( $d\langle \mathbf{v} \rangle / dt = 0$ ). Dann erhalten wir

$$v_{d,x} = -\frac{e\tau}{m^*} (\mathcal{E}_x + v_{d,y} B) \quad (4.41)$$

$$v_{d,y} = -\frac{e\tau}{m^*} (\mathcal{E}_y - v_{d,x} B) \quad (4.42)$$

$$v_{d,z} = -\frac{e\tau}{m^*} \mathcal{E}_z \quad (4.43)$$

Abbildung 4.12: Relative Änderung der Wärmekapazität von Beryllium (Be) mit dem Magnetfeld (Sullivan und Seidel, 1968). Das Feld ist parallel zur kristallographischen  $c$ -Achse.

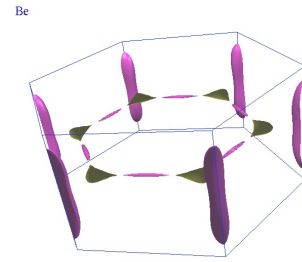


Abbildung 4.13: Fermi-Flächen von Beryllium (Choy u. a., 2000).

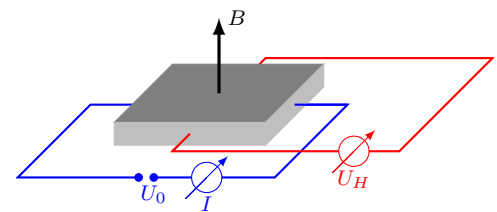


Abbildung 4.14: Geometrie zum Hall-Effekt.

Mit der Definition der Stromdichte  $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}_d = \sigma\mathcal{E}$  und der Zyklotron-Frequenz  $\omega_c = eB/m^*$  bekommen wir den Leitfähigkeitstensor  $\sigma$

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ \omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_c^2 \tau^2 \end{pmatrix} \quad (4.44)$$

wobei gerade  $\sigma_{zz} = \sigma_0 = ne^2\tau/m^*$  die Leitfähigkeit bei  $B = 0$  ist. Man benutzt immer flache Proben, ohne elektrisches Feld oder Stromfluss in  $z$ -Richtung. Aus Symmetriegründen reicht es aus  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$  und  $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$  zu betrachten.

Wir machen das Experiment so, dass nur Strom in  $x$ -Richtung fließt, also  $j_y = 0$ . Damit wird

$$\mathcal{E}_y = -\omega_c \tau \mathcal{E}_x = -\omega_c \tau \frac{j_x}{\sigma_0} = R_H B j_x \quad (4.45)$$

Das Magnetfeld bewirkt also ein elektrisches Hall-Feld in  $y$ -Richtung, obwohl der Strom in  $x$ -Richtung fließt. Die Hall-Konstante  $R_H$  ist definiert als

$$R_H = \frac{\mathcal{E}_y}{j_x B} = -\frac{1}{ne} \quad (4.46)$$

Da sich  $\mathcal{E}_y$ ,  $j_x$  und  $B$  messen lassen, kann man so die Ladungsträgerdichte  $n$  bestimmen und auch ihr Vorzeichen.

Falls sowohl Elektronen als auch Löcher zum Ladungstransport beitragen, dann werden deren Konzentrationen  $n$  und  $p$  mit der Beweglichkeit<sup>6</sup>  $\mu_n$  und  $\mu_p$  gewichtet

$$R_H = \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{e(p\mu_p + n\mu_n)^2} \quad (4.47)$$

Analog zum Querwiderstand  $\rho_{xy} = R_H B$  ist später auch der Längswiderstand

$$\rho_{xx} = \frac{\mathcal{E}_x}{j_x} = \frac{B}{ne} \frac{1}{\omega_c \tau} = \frac{m^*}{ne^2 \tau} \quad (4.48)$$

interessant.

## Zur Selbstkontrolle

7. Wahrscheinlich ist Ihnen der klassische Hall-Effekt schon früher einmal begegnet. Vergleichen Sie die damalige Darstellung (unter Umständen ohne Leitfähigkeitstensor) mit dieser hier.

## Quanten-Hall-Effekt

Beim klassischen Hall-Effekt hatten wir gefordert, dass die Probe flach ist, also kein Feld oder Stromfluss in  $z$ -Richtung geschieht. Das verschärfen wir jetzt und fordern eine quantenmechanisch-zweidimensionale Probe, also eine, bei der in  $z$ -Richtung keine Quantenzahlen mehr relevant sind, insbesondere kein  $k_z$ . Solche Strukturen nennt man zweidimensionales Elektronengas (2DEG) und kann sie an Grenzflächen zwischen zwei Halbleitern erzeugen.

Wenn wir ein starkes Magnetfeld anlegen und die Proben rein genug sind, so dass  $\omega_c \tau \gg 1$ , und die Temperatur  $T$  kalt genug, dann erhalten wir wie oben besprochen (Gl. 4.32) als Zustandsdichte eine äquidistante

Element	Li	Na	Be	Al
Wertigkeit	1	1	2	3
$n/\text{Atom}$	0.8	1.2	-0.4	-0.9

Tabelle 4.1: Ladungsträgerdichte  $n$  bestimmt aus der Hall-Konstanten  $R_H$  (aus Hunklinger, 2014). Ein negatives Vorzeichen bedeutet Löcherleitung.

<sup>6</sup>  $\mu = e\tau/m$ , siehe Gl. 2.24.

Reihe von Delta-Funktionen  $\delta(E - E_n)$ . Bei manchen Magnetfeldern  $B$  sind dann alle Landau-Niveaus vollständig gefüllt und das nächste Niveau  $\hbar\omega_c$  in der Energie entfernt. Damit sind keine Streuprozesse möglich und  $\tau$  wird unendlich. Wir wiederholen hier die relevanten  $x$  und  $y$ -Komponenten des Leitfähigkeitstensors (Gl. 4.44)

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*(1 + \omega_c^2\tau^2)} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau \\ \omega_c\tau & 1 \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

Für  $\tau \rightarrow \infty$  wird daraus

$$\sigma_{\tau \rightarrow \infty} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_\infty \\ \sigma_\infty & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.50)$$

Die Diagonal-Einträge verschwinden.  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0$ . Die Kreuz-Terme  $\sigma_{xy}$  und  $\sigma_{yx}$  bleiben aber von Null verschieden. Der Widerstandstensor ist das Inverse<sup>7</sup> des Leitfähigkeitstensors

$$\rho_{\tau \rightarrow \infty} = \sigma_{\tau \rightarrow \infty}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sigma_\infty \\ -1/\sigma_\infty & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.51)$$

<sup>7</sup> Man invertiert den Tensor (die Matrix), nicht jedes Element!

Das Längsfeld  $\mathcal{E}_x$  verschwindet, weil zwar  $j_x \neq 0$  aber  $\sigma_{xx} = 0$  und wie immer  $j_y = 0$ . Damit wird auch der Längs-Widerstand  $\rho_{xx} = 0$ . Das Hall-Feld  $\mathcal{E}_y$  bewirkt den Stromfluss in  $x$ -Richtung.

Das hat Klaus von Klitzing 1980 auch genau so gefunden<sup>8</sup>. Etwas neuere Daten sind in Abbildung 4.1 gezeigt. An den Stellen, an denen der Längs-Widerstand  $\rho_{xx}$  verschwindet, also gerade alle Landau-Niveaus vollständig gefüllt sind, ist die Elektronendichte

<sup>8</sup> siehe Klitzing, Dorda und Pepper, 1980. Nobelpreis K. von Klitzing 1985

$$n = \frac{N}{L^2} = \frac{pg_e}{L^2} = \frac{peB}{h} \quad (4.52)$$

mit ganzzahligem  $p$ . Der Quer-Widerstand wird somit

$$\rho_{xy} = R_H B = -\frac{B}{ne} = \frac{1}{p} \frac{h}{e^2} = \frac{1}{p} R_K \quad (4.53)$$

mit der Naturkonstanten  $R_K = 25812,8 \dots \Omega$ , die als von Klitzing-Widerstand bezeichnet wird. Dies wird heute als Widerstandsnormale genutzt, auch um die Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante  $\alpha$  zu bestimmen

$$\alpha = \frac{\mu_0 c}{2} \frac{e^2}{h} = \frac{\mu_0 c}{2} \frac{1}{R_K} \approx \frac{1}{137} . \quad (4.54)$$

Überraschend war jedoch, dass sich Plateaus ausbilden, also  $\rho_{xx}$  und  $\rho_{xy}$  über ein gewisses Intervall von  $B$  einen konstanten Wert annehmen. Eigentlich sollte ja nur für genau einen Wert von  $B$  alle Landau-Niveaus gefüllt sein. Der Längswiderstand  $\rho_{xx}$  ist in Abbildung 4.1 aber beinahe durchgängig Null. Eine einfache phänomenologische Erklärung findet sich in der Zustandsdichte einer realen Probe. In Wirklichkeit wird die nicht allein eine Sequenz von Delta-Funktionen sein. Defekte und Verunreinigungen führen zu einer kontinuierlichen Verteilung von Zuständen auf der Energieskala. Diese Defekt-Zustände sind aber im Gegensatz zu den Landau-Niveaus im Raum lokalisiert und tragen nicht zur Leitfähigkeit bei, aber zur Fermi-Energie. Wenn das Magnetfeld etwas erhöht wird, sollte in einer idealen Probe sofort das



nächst tiefere Landau-Niveau depopuliert werden, weil die Fermi-Energie direkt zu diesem Niveau springt. In einer realen Probe werden aber zunächst alle Defekt-Zustände dazwischen depopuliert und das Landau-Niveau bleibt vollständig besetzt. Solange es also noch besetzte Defekt-Zustände zwischen zwei Landau-Niveaus gibt, bleibt der Quanten-Hall-Effekt bestehen.

Tiefergehende Erklärungen verwenden 'skipping orbits' in den Randkanälen (am Rand der Probe). In gewissem Sinne ist es auch hier die Abweichung von der unendlich ausgedehnten Idealform, die den Quanten-Hall-Effekt erzeugt. Heutzutage wird der Quanten-Hall-Effekt als ein topologischer Effekt gesehen, der also unter stetigen Verformungen erhalten bleibt. Er wird auch als ganzzahliger Quanten-Hall-Effekt bezeichnet, weil es auch einen 'fractional quantum Hall effect' gibt, bei dem  $p$  rationale Zahlen annimmt. Für diesen haben Robert Laughlin, Horst Störmer und Daniel Tsui 1998 den Nobelpreis bekommen. Mehr zum Quanten-Hall-Effekt findet sich in Kapitel 10.5 von Gross und Marx, 2023 oder Kapitel 4.6 von Czycholl, 2017.

#### Zur Selbstkontrolle

8. Warum muss die Probe zweidimensional sein, damit der Quanten-Hall-Effekt auftritt?

## Zusammenfassung

Schreiben Sie hier ihre persönliche Zusammenfassung des Kapitels auf. Konzentrieren Sie sich auf die wichtigsten Aspekte und die am Anfang genannten Ziele des Kapitels.

## Literatur

- Choy, T.-S. u. a. (2000). "A database of fermi surface in virtual reality modeling language (vrml)". In: *Bulletin of The American Physical Society* 45.1, S. L36–42. [↗](#)
- Czycholl, Gerd (2016). *Theoretische Festkörperphysik, Band 1*. 4. Aufl. Springer. [↗](#)
- (2017). *Theoretische Festkörperphysik, Band 2*. 4. Aufl. Springer. [↗](#)
- Dresselhaus, G, AF Kip und C Kittel (1955). "Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals". In: *Physical Review* 98.2, S. 368. [↗](#)
- Gross, Rudolf und Achim Marx (2023). *Festkörperphysik*. 4. De Gruyter. [↗](#)
- Hunklinger, Siegfried (2014). *Festkörperphysik*. 4. aktualisierte Auflage. München: De Gruyter. [↗](#)
- Klitzing, K, G Dorda und M Pepper (1980). "New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance". In: *Phys. Rev. Lett.* 45.6, S. 494–497. [↗](#)
- Klitzing, Klaus v. (1984). "The quantized hall effect". In: *Physica B+C* 126.1, S. 242–249. [↗](#)
- Sullivan, Paul F. und G. Seidel (1968). "Steady-State, ac-Temperature Calorimetry". In: *Phys. Rev.* 173 (3), S. 679–685. [↗](#)

Yu, Peter Y. und Manuel Cardona (2010). *Fundamentals of semiconductors*. Springer. [↗](#).



# Anhang



# Literatur

- Choy, T.-S. u. a. (2000). "A database of fermi surface in virtual reality modeling language (vrml)". In: *Bulletin of The American Physical Society* 45.1, S. L36–42. [↗](#).
- Czycholl, Gerd (2016). *Theoretische Festkörperphysik, Band 1*. 4. Aufl. Springer. [↗](#).
- (2017). *Theoretische Festkörperphysik, Band 2*. 4. Aufl. Springer. [↗](#).
- Dresselhaus, G, AF Kip und C Kittel (1955). "Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals". In: *Physical Review* 98.2, S. 368. [↗](#).
- Gross, Rudolf und Achim Marx (2023). *Festkörperphysik*. 4. De Gruyter. [↗](#).
- Hunklinger, Siegfried (2014). *Festkörperphysik*. 4. aktualisierte Auflage. München: De Gruyter. [↗](#).
- Klitzing, K, G Dorda und M Pepper (1980). "New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance". In: *Phys. Rev. Lett.* 45.6, S. 494–497. [↗](#).
- Klitzing, Klaus v. (1984). "The quantized hall effect". In: *Physica B+C* 126.1, S. 242–249. [↗](#).
- Sullivan, Paul F. und G. Seidel (1968). "Steady-State, ac-Temperature Calorimetry". In: *Phys. Rev.* 173 (3), S. 679–685. [↗](#).
- Yu, Peter Y. und Manuel Cardona (2010). *Fundamentals of semiconductors*. Springer. [↗](#).

