

Das Elektron im Magnetfeld

Teil 1

Fabian Gust

3. Februar 2014

Inhaltsverzeichnis

I	Freie Elektronen im Magnetfeld, Landau-Niveaus	2
1	Motivation	2
2	Lösung der Schrödingergleichung	2
3	Diskussion der Ergebnisse	3
4	Einfluss eines zusätzlichen elektrischen Feldes	4
II	Elektronen in einem Quantenpunkt im Magnetfeld	5
5	Was ist ein Quantenpunkt?	5
6	Fock-Darwin-Zustände	7
7	Diskussion der Ergebnisse	8
8	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	9
III	Quellen und Literatur	10

Teil I

Freie Elektronen im Magnetfeld, Landau-Niveaus

1 Motivation

Zunächst einmal stellt sich die Frage, warum hier die Betrachtung eines freien Elektrons im Magnetfeld erfolgt. Dies lässt sich schön an folgendem Zitat zeigen: *”Die Leitungselektronen in Metallen lassen sich in guter Näherung als Gas von freien Teilchen beschreiben.”*¹

Da in der heutigen sehr techniklastigen Zeit elektronische Bauteile immer mehr an Bedeutung gewinnen, ist es sinnvoll, das Verhalten der Ladungsträger in Metallen genauer zu untersuchen. Von besonderem Interesse sind dabei die Energieniveaus, die ein solches Elektron in einem Magnetfeld annehmen kann. Diese so genannten Landau-Niveaus werden im Folgenden berechnet.

2 Lösung der Schrödingergleichung

Zunächst werden zum Lösen der Schrödingergleichung einige Annahmen gemacht:

- zeitunabhängige Betrachtung und somit zeitunabhängige Energieniveaus

- Magnetfeld in z-Richtung: $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$

- Wahl des Vektorpotentials: $\vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix}$

Mit dem Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2$ ergibt sich die folgende zu lösende Schrödingergleichung:

$$\overbrace{\frac{1}{2m} \left(i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} - q \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix} \right)^2}^H \Psi = E\Psi$$

Durch Auflösen der Klammer lässt sich der Hamiltonoperator separieren in einen Anteil senkrecht und einen Anteil parallel zum Magnetfeld:

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}}_{H_{\parallel}} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{i\hbar}{2m} qBx \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2m} q^2 B^2 x^2}_{H_{\perp}}$$

Somit sind nun zwei Differentialgleichungen zu lösen:

$$H_{\parallel} \Psi_{\parallel} = E_{\parallel} \Psi_{\parallel} \text{ und } H_{\perp} \Psi_{\perp} = E_{\perp} \Psi_{\perp}$$

Die Energieeigenwerte des parallelen Anteils $H_{\parallel}\Psi_{\parallel} = E_{\parallel}\Psi_{\parallel} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi_{\parallel}$ ergeben sich mit dem Ansatz $\Psi_{\parallel} = e^{ik_z z}$:

$$E_{\parallel k_z} = \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2$$

Um die Eigenwerte des senkrechten Anteils zu bestimmen, bedient man sich des folgenden Ansatzes: $\Psi_{\perp} = e^{ik_y y}\Psi_x(x)$. Dieser ergibt nach Einsetzen und Umformen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{q^2 B^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2 k_y}{qB} - x\right)^2\right)\Psi_x(x) = E_{\perp}\Psi_x(x)$$

Diese Differentialgleichung ist die Schrödingergleichung eines verschobenen Oszillators. Daher ergibt sich mit den Substitutionen $\omega_c = \frac{qB}{m}$ und $\bar{x} = \left(x - \frac{\hbar k_y}{qB}\right)$ die Schrödingergleichung für einen harmonischen Oszillator:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} + \frac{m}{2}\omega_c^2 \bar{x}^2\right)\Psi_x(\bar{x} + \frac{\hbar k_y}{qB}) = E_{\perp}\Psi_x(\bar{x} + \frac{\hbar k_y}{qB})$$

Die Energieeigenwerte dafür sind bekannt:

$$E_{n\perp} = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

ω_c ist dabei die Zyklotronfrequenz.

Die als Landau-Niveaus bezeichneten Energieeigenwerte ergeben sich als Summe der Ergebnisse des parallelen und des senkrechten Anteils:

$$E_{n,k_z} = E_{\perp n} + E_{\parallel k_z} = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Die folgende Wellenfunktion beschreibt das freie Elektron im Magnetfeld:

$$\Psi_{n,k_y,k_z} = e^{i(k_z z + k_y y)} e^{-\frac{qB}{2\hbar}\bar{x}^2} \underbrace{H_n\left(\sqrt{\frac{qB}{\hbar}}\bar{x}\right)}_{\text{Hermite-Polynome}}$$

3 Diskussion der Ergebnisse

Es ist noch wichtig anzumerken, dass die Landau-Niveaus bezüglich k_y entarten und dass x und y keine ausgezeichneten Richtungen darstellen.

Eine geeignete Superposition dieser Wellenfunktion führt zu radialsymmetrischen Wellenfunktionen. Wellenpakete dieser Superposition bewegen sich im Magnetfeld analog zum klassischen Teilchen.

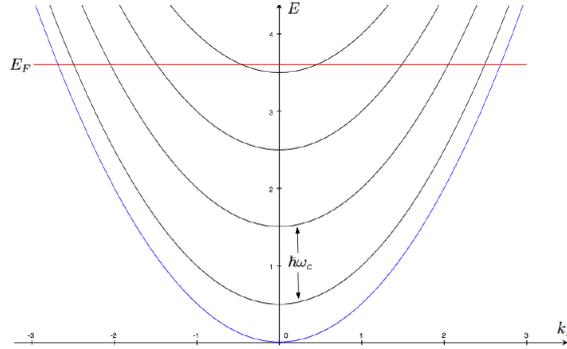


Abbildung 1: $E(k_z)$ -Diagramm²

Im Diagramm in Abbildung 1 ist die Energie gegen k_z aufgetragen. E_F beschreibt dabei eine hier willkürlich gewählte Fermienergie. Der blaue Graph beschreibt den Verlauf ohne Magnetfeld. Hervorzuheben ist, dass der Abstand der Parabeln immer $\hbar\omega_c$ beträgt.

4 Einfluss eines zusätzlichen elektrischen Feldes

Schaltet man nun ein zusätzliches elektrisches Feld hinzu, so hat dies Auswirkungen auf die Energieeigenwerte. Wie diese sich ändern wird im Folgenden gezeigt. Dazu wird eine neue Annahme gemacht:

- Das elektrische Feld wird in x-Richtung angenommen: $\vec{E} = \begin{pmatrix} E \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

Die restlichen Annahmen sind die gleichen wie ohne elektrisches Feld. Insbesondere wird das Vektorpotential wieder als $\vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix}$ gewählt. Da es sich um ein konservatives Feld handelt, ist der negative Gradient des Potentials ϕ gleich dem E-Feld. Somit gilt für das Potential:

$$\phi = -Ex$$

Daher lässt sich der Hamiltonoperator direkt angeben.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi = \frac{1}{2m} \left(i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} - q \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix} \right)^2 - qEx$$

Da das Potential nur von x abhängt, führt eine Separation analog zur Vorgehensweise ohne elektrisches Feld dazu, dass der parallele Hamiltonoperator sich durch das zusätzliche elektrische Feld nicht weiter ändert. Die Energieeigenwerte des parallelen Anteils sind daher:

$$E_{\parallel, k_z} = \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2$$

Der Hamiltonoperator für den senkrechten Anteil der Bewegung enthält den Term $-qEx$ und die entsprechende Schrödingergleichung hat folgende Form:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{q^2 B^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k_y}{qB} - x \right)^2 - qEx \right) \Psi_x(x) = E_{\perp} \Psi_x(x)$$

Das Lösungskonzept ist erneut das Zurückführen auf den harmonischen Oszillator. Dafür ist es notwendig, den Term $-qEx$ im Hamiltonoperator in die zuvorstehende Klammer zu bringen. Dies geschieht mit Hilfe der quadratischen Ergänzung:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{q^2 B^2}{2m} \left(\frac{\hbar k_y}{qB} - x \right)^2 - qEx - \frac{\hbar k_y E}{2B} + \frac{mE^2}{2B^2} + \frac{\hbar k_y E}{2B} - \frac{mE^2}{2B^2}$$

Dadurch lässt sich H umschreiben zu:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{q^2 B^2}{2m} \left(x - \frac{\hbar k_y}{qB} - \frac{Em}{eB^2} \right)^2 + \frac{\hbar k_y E}{2B} - \frac{mE^2}{2B^2}$$

Einsetzen dieses Hamiltonoperators in die Schrödingergleichung liefert:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{q^2 B^2}{2m} \left(x - \frac{\hbar k_y}{qB} - \frac{Em}{eB^2} \right)^2 + \frac{\hbar k_y E}{2B} - \frac{mE^2}{2B^2} \right) \Psi_x(x) = E_{\perp} \Psi_x(x)$$

Damit ergeben sich direkt die Eigenwerte des senkrechten Anteils mit $\omega_c = \frac{qE}{m}$:

$$E_{\perp} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar k_y E}{2B} - \frac{mE^2}{2B^2}$$

Die gesamten Energieeigenwerte ergeben sich erneut als Addition des parallelen und des senkrechten Anteils:

$$E_{n,k_y,k_z} = E_{\perp} + E_{\parallel} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar k_y E}{2B} - \frac{mE^2}{2B^2} + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2$$

In Abbildung 2 ist die Energie in Abhängigkeit von k_z dargestellt. Die gestrichelten Linien geben die Zustände ohne elektrisches Feld wieder, die durchgezogenen die Zustände mit E-Feld. Wie zu erkennen ist, führt ein zusätzliches elektrisches Feld in x-Richtung zu einer linearen Abhängigkeit der Energieeigenwerte von k_z . Die äquidistanten Landau-Niveaus steigen linear an.

Teil II

Elektronen in einem Quantenpunkt im Magnetfeld

5 Was ist ein Quantenpunkt?

Ein Quantenpunkt besteht typischerweise aus 1000 bis 10.000 Atomen eines Halbleiters. Dadurch sind seine Abmessungen im Nanometerbereich. Aufgrund

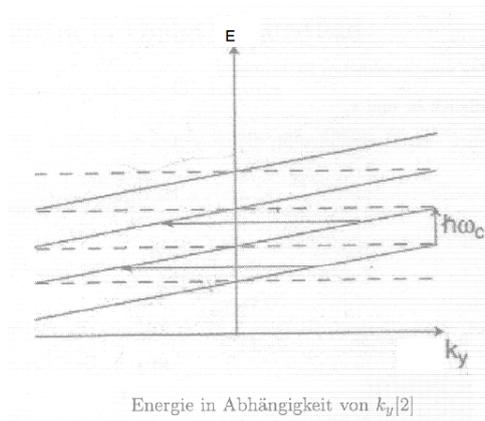


Abbildung 2: $E(k_y)$ -Diagramm³

dieser kleinen Ausmaße treten quantenmechanische Effekte auf, die zu diskreten Energieniveaus für eingeschlossene Elektronen führen. Diese Eigenschaft unterscheidet einen Quantenpunkt maßgeblich von einem gewöhnlichen Halbleiter, welcher eine kontinuierliche Verteilung der Energiezustände aufweist. Wegen dieser Eigenschaft wird ein Quantenpunkt auch als "riesiges Atom" bezeichnet. Im Folgenden sollen nach einer kurzen Darstellung einer Synthesemethode für Quantenpunkte die Energieniveaus eines Quantenpunktes in einem Magnetfeld berechnet werden. Diese werden auch als Fock-Darwin-Zustände bezeichnet.

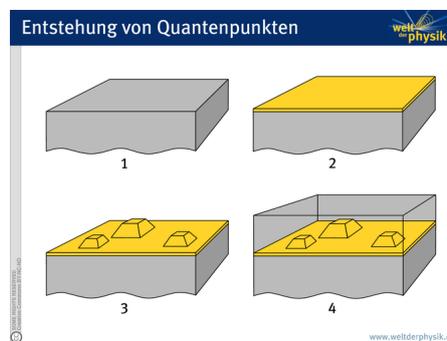


Abbildung 3: Quantenpunktsynthese via Epitaxie⁴

Die Epitaxie bildet eine mögliche Herstellungsmethode. Dabei wird auf ein Target ein anderer Halbleiter in dünnen Schichten aufgetragen. Der aufgetragene Halbleiter hat eine größere Gitterkonstante als die des Targets. Er setzt jedoch die Gitterstruktur des Targets fort. Dadurch kommt es zu Spannungen, die schon nach wenigen Schichten zur Ausbildung der Quantenpunkte führen. Zum Schluss wird mit dem Trägermaterial versiegelt.

6 Fock-Darwin-Zustände

Hier sollen die Energiezustände in einem "flachen" Quantenpunkt, der sich in einem homogenen Magnetfeld befindet, beschrieben werden. Dazu werden folgende Annahmen gemacht:

- Durch die flachen Abmessungen des Quantenpunkts lässt sich eine Bewegung in z-Richtung ausschließen. Daher behandelt man ein 2D-Problem.
- Man nähert das Einschlusspotential der Elektronen im Quantenpunkt parabolisch an: $V(x, y) = \frac{1}{2m}\omega_0^2(x^2 + y^2)$
- Das Magnetfeld zeigt weiterhin in z-Richtung: $\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$
- Als Vektorpotential wählt man dieses Mal: $\vec{A} = \frac{B}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$

Dadurch ergibt sich der Hamiltonoperator zu:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + \frac{m}{2}\omega_0^2(x^2 + y^2)$$

Mit der Substitution $\omega_1 = \frac{qB}{2m}$ lässt sich H umformen:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - i\hbar\omega_1 \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{m}{2} (\omega_0^2 + \omega_1^2) (x^2 + y^2)$$

Setzt man diesen Hamiltonoperator nun in die Schrödingergleichung ein, ergibt sich die folgende Differentialgleichung:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - i\hbar\omega_1 \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{m}{2} (\omega_0^2 + \omega_1^2) (x^2 + y^2) \right) \Psi = E\Psi$$

Durch Verwendung der Substitutionen $b = \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 (\omega_0^2 + \omega_1^2)^{-\frac{1}{4}}$, $\bar{\omega} = \frac{\omega_1}{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}}$

und $W = \frac{E}{\hbar\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}}$ sowie dem Umschreiben in dimensionslose Polarkoordinaten $x = br \cos(\varphi)$ und $y = br \sin(\varphi)$ ergibt sich:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \Psi + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \Psi + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi^2} \Psi + 2i\bar{\omega} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi + (2W - r^2) \Psi = 0$$

Durch eine weitere Substitution $W_1 = W - \bar{n}\bar{\omega}$ und Separation der Variablen $\Psi = e^{i\bar{n}\varphi} R(r)$ kommt man zu:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} R(r) + \left(2W_1 - \frac{\bar{n}^2}{r^2} - r \right) R(r) = 0$$

Dabei handelt es sich um den Radialanteil eines harmonischen Oszillators in Polarkoordinaten, dessen Eigenwerte sich durch einen Potenzreihenansatz¹⁰ ergeben zu:

$$W_1 = 2k + \bar{n} + 1$$

\bar{n} und k können dabei alle ganzzahligen Werte zwischen 0 und Unendlich einnehmen.

Rücksubstitution führt auf die Energieeigenwerte des Elektrons im Quantenpunkt, den Fock-Darwin-Zuständen:

$$E_{\bar{n},k} = \hbar\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \left(2k + \bar{n} + 1 \right) + \hbar\omega_1\bar{n}$$

Dabei ist ω_0 ein Maß für die Stärke des parabolischen Einschlusspotential und $\omega_1 = \frac{qB}{2m}$ ein Maß für die Stärke des Magnetfelds.

7 Diskussion der Ergebnisse

In Abbildung 4 ist der Energieverlauf der Fock-Darwin-Zustände in Abhängigkeit vom Magnetfeld dargestellt. Oberhalb des Grundzustandes führt eine Variation der verschiedenen Quantenzahlen zu einem Aufspalten der Energieniveaus bei einem endlichen Magnetfeld.

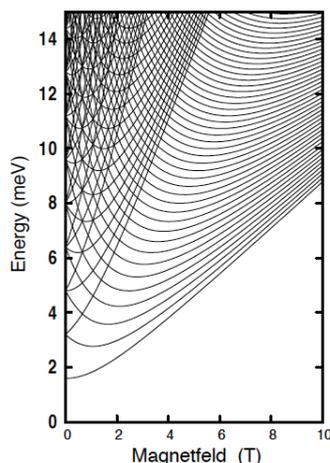


Abbildung 4: Energie der Fock-Darwin-Zustände in Abhängigkeit vom Magnetfeld

Lässt man die Magnetfeldstärke B gegen Null gehen, so gehen die Fock-Darwin-Zustände in die Energieeigenzustände des zweidimensionalen harmonischen Oszillators über. Dies ist Abbildung 5 durch die blauen Geraden dargestellt.

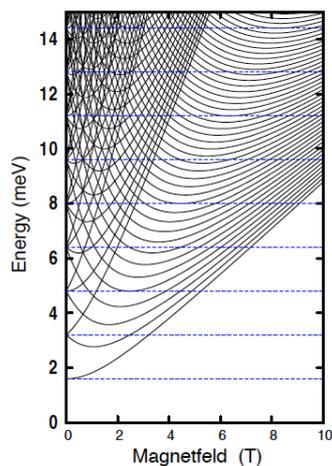


Abbildung 5: Vergleich der Fock-Darwin-Zustände mit den Eigenenergien des harmonischen Oszillators.

Wenn man dagegen die Stärke des Einschlusspotentials ω_0 gegen Null gehen lässt, so gehen die Fock-Darwin-Zustände in die zu Beginn der Ausarbeitung dargestellten Landau-Niveaus mit $k_z = 0$ über. Man erhält wieder ein freies Elektron im Magnetfeld, dessen Bewegung in z-Richtung gemäß der obigen Annahme ausgeschlossen ist. Dies ist in Abbildung 6 zu sehen. Die roten Linien sind dabei die Landau-Niveaus.

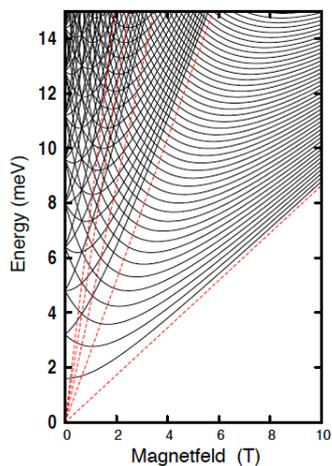


Abbildung 6: Vergleich der Fock-Darwin-Zustände mit den Landau-Niveaus

8 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

Experimentell wurden die Grundzustände von Quantenpunkten im Magnetfeld durch die SECS-Methode ⁵ (single-electron capacitance spectroscopy) untersucht. Dabei wird eine Elektrode sehr nah an einen Quantenpunkt gebracht.

Wenn die Fermienergie der Elektronen in der Elektrode den gleichen Wert erreicht wie die Elektronen im Grundzustand im Quantenpunkt, so können diese zwischen Quantenpunkt und Elektrode hin und her tunneln. Dieses Tunneln ist messbar und man erhält die in Abbildung 7 dargestellten Energieverläufe. Im Experiment wurden die Grundzustände für unterschiedliche Anzahlen an Elektronen im Quantenpunkt untersucht. Da die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen in der obigen Rechnung nicht berücksichtigt worden ist, sind nur die untersten Energieverläufe in der rechten und linken Grafik direkt vergleichbar. Wie man sieht, ist ihr Verlauf gleich. Daher kann man sagen, dass die theoretisch errechneten Energieniveaus für den Grundzustand eines Elektrons im Quantenpunkt im Magnetfeld experimentell bestätigt wurden.

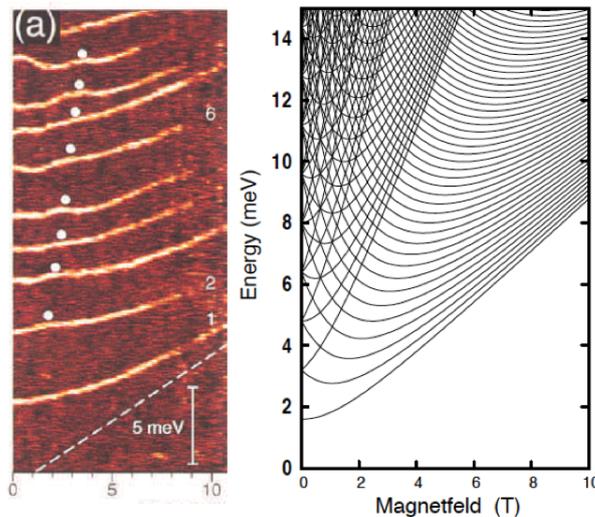


Abbildung 7: Vergleich des theoretischen Fock-Darwin-Grundzustands (rechtes Bild) mit dem experimentellen Resultat ⁵ aus Referenz 5

Teil III

Quellen und Literatur

1. Münster, Gernot; Quantentheorie; 2. Auflage; S.176; Berlin; De Gruyter; 2010
2. Friedberger, Andreas; Universität Augsburg; Landau Niveaus in topologischen Oberflächenzuständen; S.10; <http://www.physik.uni-augsburg.de/theo2/downloads/friedberger.pdf>; 2011; Stand 12.12.2013
3. Guilianì, Gabriele; Vignale, Giovanni; Quantum Theory of the Electron Liquid, Cambridge University Press, Cambridge (2005)
4. Rodt, Sven; Bimberg, Dieter; Quantenpunkte: Design-Atome in Halbleitern; <http://www.weltderphysik.de/gebiet/technik/quanten-technik/halbleiter-quantenpunkte/>; Stand 12.12.2013
5. Ashoori, R.C. et al.; N-Electron Ground State Energies of a Quantum Dot in Magnetic Field; Physical Review Letters 71, 613 (1993)
6. Conradi, Hauke; Zusammenfassung eines Seminarvortrags über Elektronen

im Magnetfeld; Münster (2013)

7. Jacak, L.; Hawrylak, A.; Woys, A.; Quantum dots; Springer; Berlin (1998)

8. Raker, Thomas; Zusammenfassung eines Seminarvortrags über Quantenpunkte; Münster; 1997

9. Hansen, W., et al; Zeeman Bifurcation of Quantum-Dot Spectra; Physical Review Letters 62, 2168 (1989)

10. Fock, V.; Bemerkung zur Quantelung des harmonischen Oszillators im Magnetfeld; Göttingen (1928)