Ballistischer Transport von Elektronen durch Nanostrukturen
Streuung am Potentialtopf mit periodischem Potential im Inneren

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie
Institut für Theoretische Physik, Institut für Festkörpertheorie
Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Wintersemester 2014/15

Ausarbeitung von Tobias Felkl

3. Dezember 2014

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung **2**
1.1 Motivation 2
1.2 Mathieu-Potential 2

2 Mathematische Modellierung **4**
2.1 Bloch-Theorem 4

3 Minima der Transmission **5**

4 Nebenmaxima der Transmission **8**

5 Änderung der Potentialamplitude **10**

6 Zusammenfassung **10**

1 Einführung

1.1 Motivation

Im ersten Teilvortrag zum Thema "Ballistischer Transport von Elektronen durch Nanostrukturen" wurde bereits viel über die Auswirkung stückweise konstanter Potentiale bzw. deren Komposition auf die Transmissionseigenschaften von Elektronen behandelt, und nun soll der Übergang zu einem periodischen Potential vollzogen werden. Dies hat den Hintergrund, dass in der Festkörperphysik oft Potentiale im Inneren von Kristallen modelliert werden. Für einen Kristall ist zunächst nur gefordert, dass sich seine Atome bzw. Moleküle in einer regelmäßigen Anordnung befinden. Somit zählen etwa auch Metalle zu den Kristallen. Für die vorzutragende Argumentation soll die zwar vereinfachende, aber dennoch zu interessanten Ergebnissen führende Annahme getätigt werden, dass diese Anordnung der Atome äquidistant ist, was auf ein Potential mit regelmäßiger Periodizität führt, welches durch eine Kosinus-Funktion approximiert werden kann. Ein unendlich ausgedehntes Potential dieser Form wird auch *Mathieu-Potential* genannt. Zudem wird im Folgenden von der dreidimensionalen Struktur abstrahiert, die jeder ausgedehnte Festkörper aufweist, und nur eindimensionale Quantenmechanik diskutiert. Diese Vereinfachung ist jedoch ebenfalls nicht zu stark, um etwa nur noch triviale Schlüsse zuzulassen. So wird vor diesem Hintergrund im Weiteren der Frage nachgegangen, wie sich ein periodisches Potential auf den Transport von Elektronen auswirkt.

1.2 Mathieu-Potential

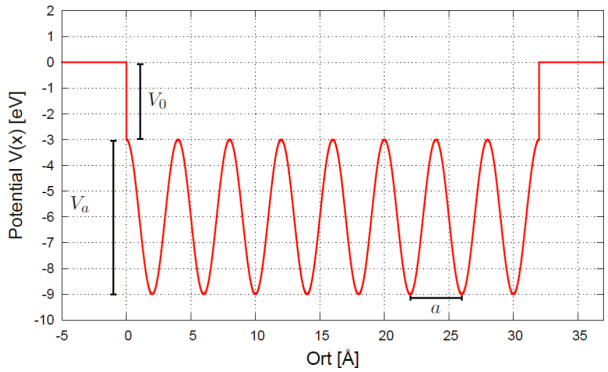

Abbildung 1: Potentialtopf mit periodischem Potential[1]

[1] Alle verwendeten Abbildungen stammen von M. Drüppel bzw. aus Quelle 1, siehe Verzeichnis am Ende.

Zum in Abbildung 1 dargestellten Potentialverlauf, welcher gleichsam einem Ausschnitt eines Mathieu-Potentials entspricht, kann man etwa über die Vorschrift

$$V(x) = -\frac{V_a}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\right) - V_0$$

gelangen. Hier treten der im Folgenden stets als konstant angenommene Abstand a zweier Atome, die Amplitude V_a des Potentials sowie eine mögliche Absenkung V_0 des Potentials als Parameter auf, wobei der letztgenannte nicht diskutiert und stets $V_0 = 0$ angenommen wird. Das Potential erstreckt sich über eine Breite $b = N_a \cdot a$, wobei N_a die Anzahl der im Potential berücksichtigten Atome und damit der Perioden darstellt.
Die Transmissionscharakteristik ergibt sich aus der Berechnung des Transmissionskoeffizienten, welcher hier durch $T = \frac{|A_{\text{trans}}|^2}{|A_{\text{ein}}|^2}$ gegeben ist. A_{trans} bezeichnet die Amplitude der transmittierten Wellenfunktion und A_{ein} entsprechend den einlaufenden Anteil. Für die Berechnung der Transmission müssen Werte für die ins Potential eingehenden Parameter gewählt werden, hier sind dies $V_0 = 0$, $V_a = 6\,\text{eV}$ und $a = 4\,\text{Å}$.

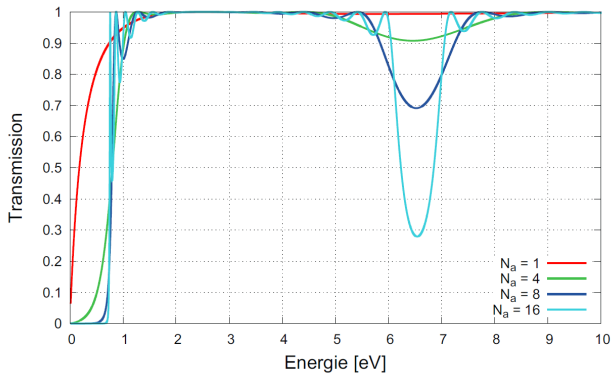

Abbildung 2: Transmissionskurve des Mathieu-Potentials

In Abbildung 2, welche die Transmission als Funktion der Elektronenenergie bei verschiedenen Periodenzahlen N_a zeigt, ist zu sehen, dass in weiten Bereichen von E praktisch $T = 1$ gilt, dort durchläuft das Elektron das System somit ohne jede relevante Interaktion. In den Energiebereichen zwischen 0 und 1 eV und zwischen 6 und 7 eV kommt es jedoch für $N_a > 1$ zu deutlichen Einbrüchen der Transmission. Für $N_a = 1$ trifft dies nur bedingt zu, da bei einem einzigen Atom keine Periodizität und somit der zu untersuchende Sachverhalt nicht mehr streng gegeben ist. Der Vollständigkeit halber wurde dieser Grenzfall jedoch mit ins Diagramm aufgenommen.
Mit Blick in die Grafik zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit der Transmissions-

minima von der gewählten Periodenzahl N_a. Zwar ist die Position der Gebiete mit verminderter Transmission nicht beeinflusst, wohl aber deren Ausprägung. Die Krümmung der Transmissionskurve zwischen 0 und 1 eV wie auch die Absenkung zwischen 6 und 7 eV nimmt mit steigendem N_a erkennbar zu. Darüber hinaus wird der Bereich mit verminderter Transmission offenbar schmaler. Weiterhin ist zu konstatieren, dass die Transmission für $E < 1\,\mathrm{eV}$ deutlich stärker abnimmt als bei $E \approx 6.5\,\mathrm{eV}$.
Als zweites Phänomen ist die Ausprägung von Nebenmaxima zu nennen. Diese sind durch einen periodischen Anstieg der Transmission bis auf 1 und nachfolgendes Abfallen gekennzeichnet und besonders gut in der Nähe der Transmissionsminima zu erkennen.
Im Folgenden soll es nun darum gehen, die Ursache für die Entstehung sowie für die Eigenschaften der Transmissionsminima und -nebenmaxima zu klären. Da auf mikroskopischer Ebene operiert und jedes einzelne Atom in der Modellierung des Potentials berücksichtigt wird, kann nur die Quantenmechanik hier wirklich weiterhelfen. Es ist also zu hoffen, dass sich in der Lösung der Schrödingergleichung für das Mathieu-Potential jene Charakteristika spiegeln, die soeben vorgestellt worden sind.

2 Mathematische Modellierung

Bevor die Schrödingergleichung gelöst werden kann, muss ein wenig mathematisches Rüstzeug entwickelt werden. Zu diesem Zweck wird im Folgenden das Bloch-Theorem motiviert.

2.1 Bloch-Theorem

Im weiteren Verlauf wird davon ausgegangen, dass sich nur ein einzelnes Elektron im periodischen Potential befindet. Diese zunächst recht gewagt klingende Annahme wird darauf zurückgeführt, dass die Wechselwirkung zwischen einzelnen Elektronen zunächst vernachlässigt werden kann und letztlich über effektive Parameter wieder ins Potential einfließt. So kann von der gut bekannten zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

ausgegangen werden. Das Potential $V(\vec{r})$ ist nun jedoch translationsinvariant bezüglich Gittervektoren, es gilt also $V(\vec{r}) = V(\vec{r}+\vec{R})$ für einen beliebigen Gittervektor $\vec{R}$. Zur Ausnutzung dieser Symmetrie wird der Translationsoperator $T_{\vec{R}}$ eingeführt, dessen Wirkung durch

$$T_{\vec{R}} f(\vec{r}) = f(\vec{r}+\vec{R})$$

für eine beliebige Funktion $f(\vec{r})$ definiert ist. Eine kurze Rechnung zeigt, dass dieser Operator mit dem Hamiltonoperator $H = -\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ kommutiert, so

dass H und alle $T_{\vec{R}}$ gemeinsame Eigenfunktionen $\Psi(\vec{r})$ besitzen. Die zunächst unbekannten Eigenwerte $c(\vec{R})$ des Translationsoperators werden auf algebraischem Weg über die Anwendung von $T_{\vec{R}}T_{\vec{R}'}$ und $T_{\vec{R}+\vec{R}'}$ auf $\Psi(\vec{r})$ bestimmt. Da beide Male dieselbe Translation vorliegt, muss $c(\vec{R})c(\vec{R}') = c(\vec{R}+\vec{R}')$ gelten, was auf eine Exponentialfunktion hinweist. Mit der Normierung der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r})$ auf 1 kann wiederum durch eine kurze Rechnung gezeigt werden, dass auch $|c(\vec{R})|^2 = 1$ gelten muss. Diese Bedingungen werden durch

$$c(\vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}},$$

was die Ausbreitung einer ebenen Welle beschreibt, mit einem reellwertigen Wellenvektor $\vec{k}$ erfüllt. Es tritt somit ein komplexer Phasenfaktor bei der Translation von $\Psi(\vec{r})$ um den Gittervektor $\vec{R}$ auf, womit $\Psi(\vec{r})$ nicht unbedingt gitterperiodisch ist, wohl aber die Elektronendichte $|\Psi(\vec{r})|^2$.
Da der Translationsoperator zum vollständigen Satz von Operatoren für das behandelte System gehört und in eindeutiger Weise durch den Wellenvektor $\vec{k}$ charakterisiert werden kann, ist dieser eine gute Quantenzahl. Alle weiteren, bislang unbekannten Quantenzahlen werden mit n zusammengefasst. Somit können die Energieeigenwerte E und Energieeigenfunktionen $\Psi(\vec{r})$ durch n und k charakterisiert werden.
Um das Bloch-Theorem formulieren zu können, muss noch die Definition $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ $= e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{\vec{k}}(\vec{r})$ mit einer neuen Funktion $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ eingeführt werden. Dass diese Sinn macht, wird durch die Anwendung auf $\Psi(\vec{r}+\vec{R})$ erkennbar. Ein Vergleich mit der Darstellung dieses Ausdruck mittels Translationsoperator ergibt, dass die Funktion $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ selbst wieder gitterperiodisch sein muss. Damit kann nun das Bloch-Theorem formuliert werden:

- *Im gitterperiodischen Potential haben die normierten Eigenfunktionen eines Ein-Teilchen-Hamiltonoperators die Form $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{\vec{k}}(\vec{r})$ mit gitterperiodischem Bloch-Faktor $u_{\vec{k}}(\vec{r})$.*

3 Minima der Transmission

Die Gitterperiodizität des Blochfaktors erlaubt seine Entwicklung in eine Fourierreihe $u_{n,k}(x) = \sum_j c_j(n,k)e^{iG_jx}$ mit den Fourierkoeffizienten c_j und den reziproken Gittervektoren $G_j = \frac{2\pi}{a}j$. Setzen wir diese Fourierreihenentwicklung in die stationäre Schrödingergleichung für das Mathieu-Potential ein, so ergibt sich

$$\sum_j \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - E \right) e^{ikx}e^{iG_jx}c_j = 0.$$

Durch Multiplikation dieses Ausdrucks mit $\frac{1}{a}e^{-ikx}e^{-iG_{j'}x}$ und Integration über x von 0 bis a treten die Integraldarstellung des Kronecker-Deltas sowie die

Fourierentwicklung $\tilde{V}(G_j - G_{j'})$ des Potentials auf. Man wird so auf eine neues Eigenwertproblem

$$\sum_j \left(\frac{\hbar^2}{2m}(k + G_j)^2 \delta_{j,j'} + \tilde{V}(G_j - G_{j'}) \right) c_j = E_j c_{j'}$$

geführt, dessen Lösung in der Diagonalisierung der entstandenen "Hamilton-Matrix" besteht. Damit wurde eine der zentralen Charakteristika der Fourierentwicklung ausgenutzt, mit der analytische Probleme in algebraische Probleme überführt werden können.
Die Diagonalisierung der Matrix muss auf numerischem Weg erfolgen, was für das Mathieu-Potential vergleichsweise einfach ist. Damit die resultierenden Energieeigenwerte $E_{n,k}$ mit der eingangs vorgestellten Transmissionskurve verglichen werden können, werden die Parameter V_0, V_a und a natürlich gleich gewählt.

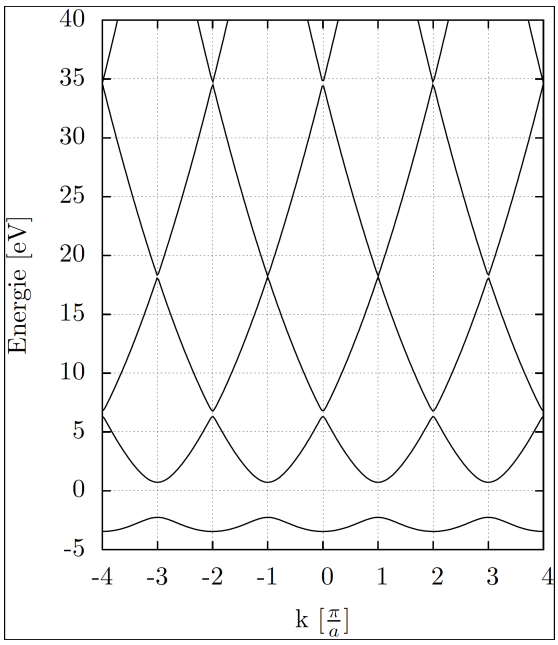

Abbildung 3: Bandstruktur

In Abbildung 3 sind die berechneten Energieeigenwerte in Abhängigkeit von der Wellenzahl k dargestellt. Die Form der entstandenen Dispersionsrelation ist keine Besonderheit des Mathieu-Potentials, sondern eine solche *Energiebandstruktur* tritt bei allen periodischen Potentialen auf. Augenscheinlich existieren für ein bestimmtes k mehrere Energien bzw. "Bänder", welche nun durch n indiziert werden können, d. h. es tritt Entartung auf.[2] Die vor allem für niedrige

[2]Die aus der Halbleiterphysik geläufigen Begriffe "Leitungs-" und "Valenzband" haben hier

Elektronenenergien sichtbare, deutliche Abweichung von der Dispersionsrelation $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ für freie Teilchen kann darauf zurückgeführt werden, dass das betrachtete Potential relativ stark und die Wechselwirkung mit "langsamen" Elektronen daher relativ groß ist. Da die Bandstruktur zudem offensichtlich k-periodisch ist, reicht zur Beschreibung die erste Brillouin-Zone, d. h. das Intervall $[-\frac{\pi}{a}; \frac{\pi}{a}]$ aus.

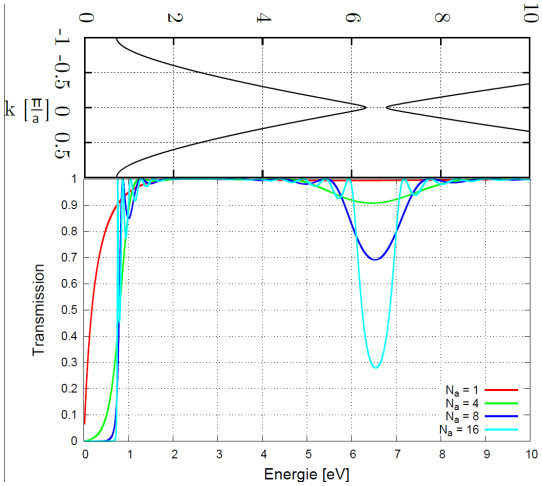

Abbildung 4: Vergleich von Transmissionskurve und Bandstruktur

Die Transmission wurde für Elektronenenergien von 0 bis 10 eV berechnet, somit sind insbesondere die Bänder mit $n = 2$ und $n = 3$ relevant. Ein direkter Vergleich von Transmissionskurve und Bandstruktur wie in Abbildung 4 zeigt, dass die Transmission genau an den Stellen einbricht, an denen die Bandstruktur eine Lücke aufweist. Minimale Abweichungen von etwa 0.01 eV rühren daher, dass die Transmission nur für ein endliches N_a berechnet wird. Sie können jedoch vernachlässigt werden, daher ist mit der Bandstruktur die Erklärung für die Transmissionseinbrüche beim Mathieu-Potential gefunden.
Die Bandlücken sind dadurch charakterisiert, dass hier keine Lösung der Schrödingergleichung für reelle Wellenvektoren $\vec{k}$ existiert. Gleichwohl existieren Lösungen für komplexe $\vec{k}$, was auf einen negativen, reellen Anteil im Argument der Exponentialfunktionen führt. Die Amplitude der Wellenfunktion wird beim Durchlaufen des Systems somit exponentiell gedämpft. Dies ist der Grund, warum die Transmission für Elektronenenergien zwischen 6 und 7 eV nicht exakt bis auf 0 zurückgeht. Weiterhin wird verständlich, dass die Transmission für größere N_a, somit für eine größere Potentialbreite stärker zurückgeht, da nun die exponentielle Dämpfung gleichsam über eine längere Strecke hinweg wirksam sein kann. Mit einer genügend großen Wahl von N_a wird die Transmission auf einen beliebig kleinen Wert über 0 abgesenkt werden können. Reale Festkörper entsprechen dem Grenzfall $N_a \to \infty$.

ihren Ursprung.

Mit Blick in die Bandstruktur bleibt noch zu erwähnen, dass offenbar auch für größere Elektronenenergien Bandlücken auftreten, so etwa bei $E \approx 28\,\mathrm{eV}$ und $E \approx 35\,\mathrm{eV}$. Bei einer Berechnung von T für größere Elektronenenergien wären an genau diesen Stellen wieder Einbrüche der Transmission zu verzeichnen gewesen, deren Ausprägung mit zunehmendem E jedoch immer weiter abnimmt, da die Bandlücken entsprechend immer kleiner und unscheinbarer werden.

4 Nebenmaxima der Transmission

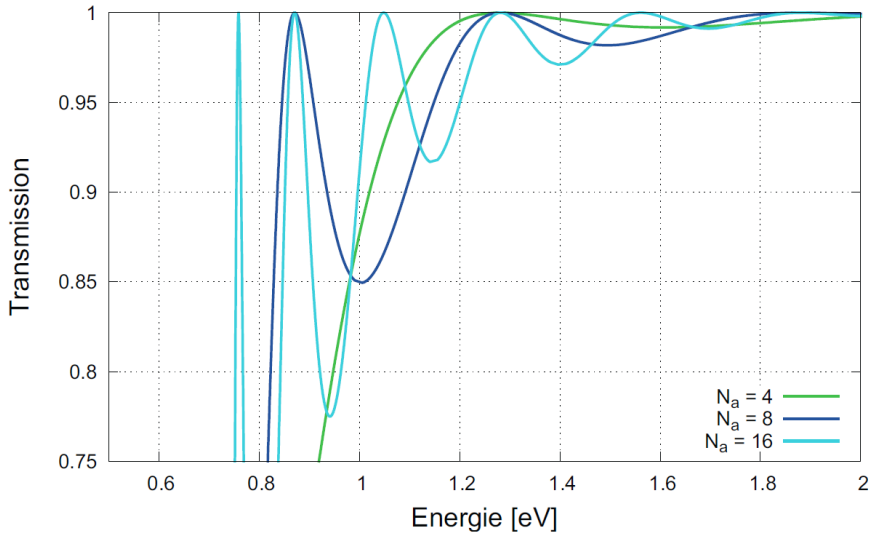

Abbildung 5: Nebenmaxima der Transmission

Für die Diskussion der Nebenmaxima der Transmission betrachten wir einen vergrößerten Ausschnitt der ursprünglichen Transmissionskurve wie in Abbildung 5, auf dem die Nebenmaxima gut zu erkennen sind. Offenbar verschieben sich diese für größere Periodenzahlen N_a zu geringeren Energien, so tritt etwa nur bei $N_a = 16$ ein Nebenmaximum bei einer Energie $E < 0.8\,\mathrm{eV}$ auf. Zudem sind mit zunehmendem N_a mehr Nebenmaxima vorhanden, so dass sich ihre Abstände verkleinern. Bei einer Verdopplung von N_a ist jedes zweite Nebenmaximum wieder bei exakt derselben Energie anzutreffen.

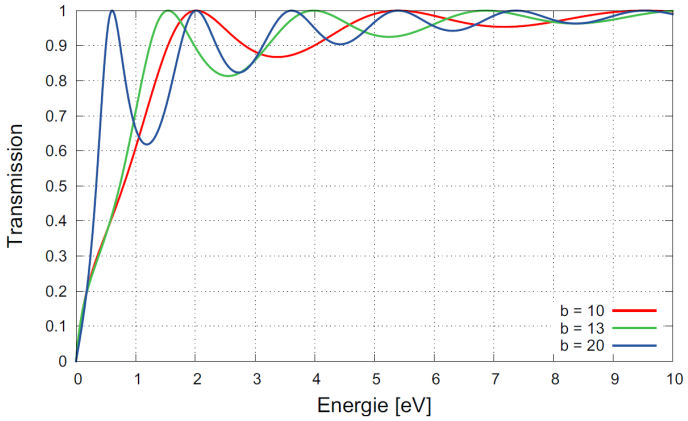

Abbildung 6: Transmissionskurve des endlich tiefen Potentialtopfs

Für die Erklärung dieses Verhaltens beobachtet man, dass die in Abbildung 6 für verschiedene Breiten b (Einheit Å) gezeigte Transmissionskurve für den endlichen tiefen Potentialtopf einen sehr ähnlichen Verlauf aufweist. Alle zuvor erwähnten Merkmale tauchen auch hier auf, nur dass b keiner Periodenzahl N_a mehr entspricht. Eine anschauliche Erklärung für das Auftreten der Nebenmaxima liefert der Umstand, dass die einlaufenden Wellen am Anfang und am Ende des Potentialtopfs teilweise reflektiert werden. Wenn der feste Gangunterschied der reflektierten Anteile gerade gleich π ist, so interferieren diese destruktiv und das System wird vollständig transparent.
Darüber hinaus treten die Maxima der Transmission bei einem *endlich* tiefen Potentialtopf bei genau den Energien auf, die bei einem *unendlich* tiefen Topf den Energien der gebundenen Zustände entsprechen. Die gebundenen Zustände entsprechen stehenden Wellen, was aus der Stetigkeitsbedingung $\Psi(x) = 0$ an den Wänden des Potentialtopfs folgt. An der Beziehung $d = n \cdot \frac{\lambda}{2}$ mit der Breite d des Potentialtopfs, einer natürlichen Zahl n und der Wellenlänge λ des gebundenen Zustands kann nun unmittelbar abgelesen werden, dass sich mit d auch λ vergrößert und somit E verringert, da die Energie direkt proportional zum Inversen der Wellenlänge ist. Wird d verdoppelt, so tritt der Zustand mit der ursprünglichen Energie wieder auf, da die entsprechende stehende Welle mit der doppelten Anzahl von "Schwingungsbäuchen" wieder im Potentialtopf vorhanden ist.
Der Zusammenhang zwischen den gebundenen Zuständen und dem Streuproblem, was ja prinzipiell zwei völlig verschiedene Sachverhalte sind, kann hergestellt werden, indem man sich daran erinnert, dass die Schrödingergleichung eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung ist und somit zwei Lösungen besitzt. Die eine sind die Sinus-Funktionen, die zwar bei den gebundenen Zuständen die Stetigkeitsbedingungen erfüllen, die Normierung der bis hierhin diskutierten Elektronenwellen auf 1 jedoch nicht erhalten können. Dies wird durch die Kosinus-Funktionen als zweite Klasse von Lösungen geleistet, mit

denen der Verlauf der ebenen Welle über dem Potentialtopf in stetiger Weise erfolgen kann, ohne dass es zu Verlusten bei der Transmission käme.

5 Änderung der Potentialamplitude

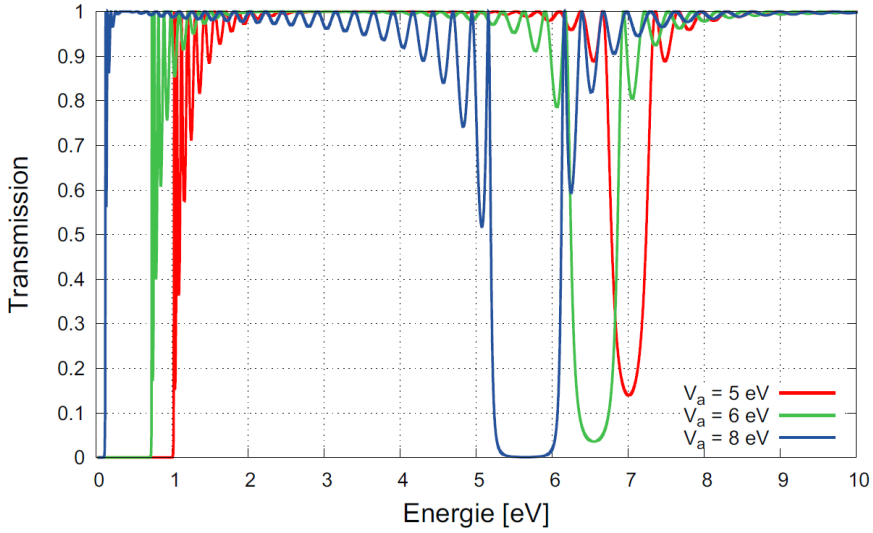

Abbildung 7: Änderung der Potentialamplitude

Im Folgenden soll noch kurz die Auswirkung einer Änderung der Potentialamplitude V_a auf die Transmission diskutiert werden. In Abbildung 7 ist die Transmissionskurve für drei verschiedene Werte von V_a dargestellt. Zu beobachten ist im Wesentlichen, dass die Einbrüche der Transmission mit steigendem V_a bereits bei geringeren Energien erfolgen, die Transmissionskurven sind also auf der Abszisse nach links verschoben. Zudem nimmt die Ausprägung der Minima mit V_a zu, für $V_A = 8\,\mathrm{eV}$ nimmt die Transmission im Bereich zwischen 5 und 6 eV schon bis auf 0 ab. Darüber hinaus verbreitern sich die Energiebereiche mit verminderter Transmission. Diese Eigenschaften der Transmissionskurven sind unmittelbar in den zugehörigen Bandstrukturen wiederzufinden. Die Bandlücke wird mit größerem V_a breiter und verschiebt sich hin zu einer geringeren Energie.

6 Zusammenfassung

Das Potential im Inneren eines Kristalls, der eine regelmäßige Anordnung seiner Atome bzw. Moleküle aufweist, wurde durch ein kosinusförmiges Mathieu-

Potential approximiert. Bei der Berechnung der Transmission traten sowohl ausgeprägte Minima als auch Nebenmaxima auf. Zur Interpretation dieser Resultate wurde zunächst unter Ausnutzung des Bloch-Theorems die Schrödingergleichung für ein periodisches Potential gelöst. Die numerische Berechnung der Energieeigenwerte ergab eine Bandstruktur, die genau bei den Energien Lücken aufweist, an denen die Transmission einbricht. Die Ausprägung der Minima hängt im Wesentlichen mit der Breite des Potentials zusammen, welche festlegt, über welche Strecke hinweg die Amplitude der Wellenfunktion exponentiell gedämpft wird. Für die Nebenmaxima der Transmission wurde auf den bekannten endlich tiefen Potentialtopf verwiesen, welcher im Prinzip die gleiche Transmissionskurve besitzt und genau für die Energien transparent wird, deren zugehörige Wellenlänge der Beziehung $d = n \cdot \frac{\lambda}{2}$ mit der Topfbreite d und einer natürlichen Zahl n genügt. Der Kosinus als (eigentlich zu den gebundenen Zuständen in einem unendlich hohen Potentialtopf gehörende) Lösung der Schrödingergleichung entspricht einem stetigen und verlustfreien Verlauf der Wellenfunktion über dem Potentialtopf.

Dem Inhalt dieser Ausarbeitung liegen die folgenden Quellen zugrunde:

1. M. Drüppel: *Elektronen in Nanostrukturen: Berechnung der Transmission und Reflexion*, Bachelorarbeit, WWU Münster (2012)

2. G. Czycholl: *Theoretische Festkörperphysik*, Springer-Verlag

3. P. Krüger: *Einführung in die Festkörpertheorie*, Vorlesungsmitschrift WS 2011/12, WWU Münster