

# Geschwindigkeit im Teilchen- und Wellenbild

## Allgemeines und erstes Teilchenbild

Advanced

- Das Hyperskript, wie alle andern Texte zu dieser Materie, wechselt ständig (und häufig ohne Hinweise) zwischen **Teilchen-** und **Wellenbild**.
  - Das liegt nicht (nur) im Unvermögen der Autoren eine bestimmte Linie sauber durchzuhalten, sondern ist einfach erforderlich um ein Minimum an Anschaulichkeit zu behalten.
  - Ein Problem das man sich dabei einhandelt (und im Text meist stillschweigend übergeht), ist die **Geschwindigkeit**, mit der ein Teilchen im jeweiligen Bild durch den Kristall saust (oder diffundiert?).
  - Schauen wir uns retrospektiv mal an was bisher geschah und versuchen die mehr oder weniger gut versteckten Geschwindigkeitsprobleme heraus zu destillieren.
- Die wichtigen Kapitel [2.1.1](#) und [2.1.2](#) scheinen vollständig im Zeichen des *Teilchenbilds* zu stehen - kleine Teilchen sausen im Kristall herum und werden vollständig mechanistisch beschrieben.
  - Die Elektronen sind an einem eindeutigen Ort und bewegen sich bei nicht extrem kleinen Temperaturen mit erheblicher ("thermischer") Geschwindigkeit  $v_0$  durchs Gitter. Wir haben keinerlei Problem mit dem Begriff der Geschwindigkeit - oder doch?
  - Nun ja: Die Beschreibung der *Nettoeffekte* vieler Elektronen führt auf die Driftgeschwindigkeit  $v_D$  des *Ensembles*, die sehr viel kleiner ist als die  $v_0$  der individuellen Elektronen. Da die  $v_0$ 's sich wegmitteln, tun wir dann häufig so, als ob die Elektronen *nur* mit  $v_D$  durch den Kristall bummeln.
  - Je nachdem, *welches* Teilchen ich also betrachte - das *individuelle* "reale" Elektron, oder das *stilisierte*, und oft viel nützlichere "Modellelektron", das die aus trickreichen Mittelungen erhaltenen Ensembleeigenschaften wieder individuell verkörpert oder "codiert", habe ich [fundamental verschiedene Teilchengeschwindigkeiten](#).
- Trotzdem: Bis hierher war das Teilchenbild eine im Prinzip klare Sache - oder ?
  - Na ja - so ganz klar war's bei näherem Hinsehen dann auch wieder nicht. In [2.1.2](#) betrachten wir "*the most important scattering mechanism*", die [Streuung an Phononen](#), an "[gequantelten](#)" [Gitterschwingungen](#) - wie immer man es ausdrückt, es ist die Streuung eines *Teilchens* an einer *Welle*.
- Also wurde schon hier ganz sachte das Teilchen - und Wellenbild gemischt. Und wie soll man sich nun den Zusammenstoß eines Teilchens mit einer Welle "vorstellen", d.h. visualisieren?
  - Man soll nicht, denn es geht nicht. Man kann das Visualisierungsproblem nur umgehen: Indem wir uns die Phononen *für diesen Zweck* als Teilchen vorstellen. Mehr zur Begrenztheit der menschlichen Vorstellung und der darauf keine Rücksicht nehmenden Natur im [Link](#).
- Wir haben das Teilchenbild dann aber benützt um zu begründen warum die klassische Mechanik früher oder später ins Abseits führt, und warum wir besser daran tun, unsere Teilchen als *Welle* im Wellenbild der Quantentheorie zu beschreiben.

## Erstes Wellenbild

- Bei den Kapiteln [2.2](#) zum freien Elektronengas sind wir jetzt eindeutig im *Wellenbild*.
  - Die Elektronen in den diversen, durch ihren Wellenvektor  $k$  beschriebenen Zuständen, haben nicht einmal entfernt mehr Teilcheneigenschaften; denn sie sind (im idealisierten Kristall) überall gleich wahrscheinlich zu finden.
  - Irgendwie scheinen sie aber auch durch den Kristall zu *laufen*, denn die vollständigen Lösungen der Schrödingergleichung beschreiben ja [laufende ebene Wellen](#) mit einer bestimmten Ausbreitungsgeschwindigkeit.
- Wie kann sich etwas, das überall schon ist, mit irgendeiner Geschwindigkeit ausbreiten? Was genau ist denn die Geschwindigkeit einer Welle? Eines Teilchens im Wellenbild?
  - In Kapitel [2.2.2](#) und danach wird darauf bewußt nicht so recht eingegangen - der normale Anfänger hat eh' schon genug zu verarbeiten und wird in der Regel nicht merken, dass hier ein Problem zu stecken scheint.
  - Zur Lösung dieses Rätsels muß man auch etwas tiefer in die Wellenmechanik eindringen als wir das in Kapitel [2.2](#) wollten und konnten; die wesentlichen Begriffe sind **Phasen-** und **Gruppengeschwindigkeit** (Mehr Details dazu im [Zusatzkapitel 2.5](#) und im [Link](#)).
- Der Unterschied zwischen diesen beiden Geschwindigkeiten ist im Grundsatz leicht zu verstehen:
  - Die *Phasengeschwindigkeit* ist die Geschwindigkeit mit der sich die Phase (z.B. der Wellenberg) einer "monochromatischen" Welle (also der einfachen  $\sin(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)$  Welle) bewegt. Solange ein Elektron durch diese einfachst mögliche Wellengleichung beschrieben wird, ist das auch die Geschwindigkeit, mit der sich das Elektron "bewegt". Bewegt ist aber in Anführungszeichen gesetzt, denn beim Wort Elektron denkt jeder unwillkürlich an ein Teilchen, an irgendwas "räumliches" - und das ist hier falsch. Die *Phase* der Welle bewegt sich zwar, die *Welle* selbst ist aber *trotzdem* zu jeder Zeit *überall* - man denke an Wasserwellen.

- Überlagern wir mehrere  $\sin(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)$  Wellen, können wir per Fourieranalyse jede beliebige Form erzeugen, zum Beispiel ein "Wellenpaket". Wie bewegt sich nun eigentlich das Produkt der Überlagerung? Es bewegt sich mit der **Gruppengeschwindigkeit** des Wellenensembles. Und die **Gruppengeschwindigkeit** muß nichts, aber auch rein gar nichts, mit der Phasengeschwindigkeit jeder Einzelwelle des Ensembles zu tun haben!

Das kann man sich mit zwei uns bekannten Beispielen schnell klarmachen

- Stehende Wellen:** Sie heißen zu Recht "stehend", denn ihre **Gruppengeschwindigkeit** ist Null - obwohl ihre beiden Teilwellen mit ihrer jeweiligen (entgegengesetzt gleich großen) **Phasengeschwindigkeit** ununterbrochen "laufen".
- Wellenpakete** - im "Backbone 2"; [Kapitel 2.5.2](#) kurz angedeutet. Hier ist ein relativ gut lokalisiertes Elektron durch Überlagerung  $\infty$  vieler, mit ihrer jeweiligen Phasengeschwindigkeit laufenden Wellen beschrieben. Das Paket selbst läuft mit der **Gruppengeschwindigkeit**  $v_G$  des **Ensembles**, und diese ist, um doch mal eine etwas fortgeschrittenere aber sehr einfache Formel einzuwerfen, gegeben durch

$$v_G = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE(\mathbf{k})}{d\mathbf{k}}$$

- $E(\mathbf{k})$  ist dabei die **Dispersionsfunktion** des System - eine einfache Parabel beim freien Elektronengas, aber etwas Komplizierteres bei realen Kristallen.

Langer Rede kurzer Sinn: Im Wellenbild ist die Geschwindigkeit **einer** Welle und die Geschwindigkeit des durch eine Überlagerung **vieler** Wellen dargestellten Teilchens mit Vorsicht zu genießen.

- Das gibt uns aber auch eine Art Regel: Solange wir - was auch immer - durch **einfache** Wellen beschrieben, ist das Wellenbild allemal vorzuziehen. Wenn wir viele Wellen überlagern, kann (aber muss nicht) was stark "teilchenartiges" entstehen.
- Außerdem muss man wiederum zwischen **Einzeleigenschaften** und **Ensembleeigenschaften** unterscheiden, wenn auch in anderer Art als bei den Teilchen [weiter oben](#).
- Insbesondere sollte man sich immer bewußt sein, dass die Näherung des freien Elektronengases reale Elektronen in realen Kristallen immer nur genähert beschreibt. Sobald man auf Geschwindigkeiten realer Elektronen schaut, sollte man sich ganz klar darüber sein, wieweit die verwendeten Näherungen, Bilder etc. überhaupt tragen können.

In den Kapiteln 2.3 folgende über Fermiverteilung, Wärmekapazität und Leitfähigkeit, haben wir Wellen- und Teilchenbild leicht gemischt.

- Zwar bewegen wir uns prinzipiell im Wellenbild des freien Elektronengases, aber beim Besetzen von Energieniveaus mit Elektronen, Begriffen wie "**Fermigeschwindigkeit**" oder "**mittlere freie Weglänge**" denkt halt jede(r) an Teilchen.
- Und das ist auch besser so! Man (und frau) kann zwar, wenn es sein muß, auch völlig abstrakt (und **gelegentlich inhaltsfrei**) denken (wie schon Goethe wußte: "Denn eben wo Begriffe fehlen, da stellt ein Wort zur rechten Zeit sich ein."), aber begrifflich ist schon besser.

[Kapitel 3](#) ist einfach: Wir sind komplett und durchgehend im Wellenbild - selbst für richtig massive Teilchen wie Neutronen. Geschwindigkeiten kommen nicht vor - also keine Probleme.

## Zweites Wellenbild und Übergang zum Halbleiter - Teilchenbild

In [Kapitel 4](#) werden aus einfachen ebenen Wellen, die ein Elektron repräsentieren, jetzt kompliziertere Überlagerungsstrukturen.

- Zwar wurde das nur für die Elektronen mit Wellenvektoren auf der Brillouinzone besprochen, die dann als stehende Welle, d.h. als Überlagerung zweier ebener Wellen dargestellt sind, aber es war auch relativ klar, dass damit nur das Prinzip angesprochen ist.
- Spätestens nach der Einführung realer Bandstrukturen, die eben nicht nur in der unmittelbaren Umgebung einer **BZ** von der freien Elektronengasparabel abweichen, ist eigentlich klar, dass alle Elektronen durch die Überlagerung ebener Wellen beschrieben werden (oder eben durch die dafür "erfundenen" **Blochwellen**).

Wenn wir jetzt über Geschwindigkeiten reden; können wir nur noch die Gruppengeschwindigkeit der "Blochwelle" meinen - und zu dieser Geschwindigkeit haben wir mit **obiger Formel** ein entspanntes und einfaches Verhältnis:

- Wir schauen schlicht auf die Ableitung der Dispersionsfunktion -  $dE(\mathbf{k}) / d\mathbf{k}$  - d.h. auf das reale Banddiagramms im  $\mathbf{k}$ -Raum: Ist die Kurve flach, sind die Elektronen langsam; ist sie steil sind sie schnell.

- Auf den **BZ** ist die Dispersionsfunktion immer mehr oder weniger flach - die Gruppengeschwindigkeit ist dann klein oder gar Null, wie es sich für eine stehende Welle auch geziemt.
- ▶ Die Thematik "Einzeleigenschaft" oder Ensembleeigenschaft" erscheint auch wieder - noch leicht getarnt:
  - In [Kapitel 4.3.2](#) haben wir auch die "Löcher" laufen lassen. Ein Loch aber kann nur "laufen", wenn *vielen* Elektronen *gemeinsam* was tun; Löcher sind eigentlich immer spezifische Elektronenensembles.
- ▶ Der Hauptpunkt in Kapitel **4.3.2** ist aber, dass jetzt ohne Vorwarnung die *Teilchen* (= Elektronen und Löcher) nicht mehr nur mit irgendeiner mehr oder weniger wohldefinierten Geschwindigkeit durch den Kristall laufen oder "wellen", sondern jetzt per "random walk" **diffundieren**.
  - Natürlich gehört zu "random walk" und Diffusion auch eine Art Geschwindigkeit - aber sie jetzt eigentlich sekundär. Die Beziehung zwischen zurückgelegter Strecke und Zeit ist zwar noch linear für die *Gesamtstrecke*, aber eben nicht mehr für die *Diffusionslänge*, für die Entfernung zwischen Start und Stop.
  - Außerdem ist auch gar nicht mehr eine *konstante*, oder auch nur ununterbrochene Bewegung gefordert (ohne dass das offen gesagt wird; wiederum um nicht mehr Konfusion als unbedingt notwendig zu verursachen). Aber eigentlich ist jedem und jeder klar (hoffentlich) dass ein *Diffusionsergebnis* für Teilchen, die mit hoher Geschwindigkeit von einem Ort zum anderen rasen, dort eine Weile bewegungslos "sitzen" bleiben, und dann zum nächsten Stop weiterrasen, genau dasselbe sein kann wie das für Teilchen, die gemächlich von Ort zu Ort schlendern ohne sitzen zu bleiben.
- ▶ Wie auch immer; der Schlüsseffekt ist jetzt "random walk", und weder das bisherige Wellenbild noch das Teilchenbild enthalten den realen "random walk" realer Elektronen und Löcher in realen Halbleitern.
  - Im beiden Bildern kann zwar ein gewisses "random" Element durch die im frühen Teilchenbild des Kapitels **2.1** postulierten *Stöße* eingebracht werden. Leider paßt das quantitativ gar nicht, denn in diesem Bild (und auch in den durch die Quantentheorie modifiziertem Bild) waren die Elektronen entsetzlich schnell.
  - In der (langen) Lebensdauer von **1 ms**, wie wir sie für indirekte Halbleiter [postuliert haben](#), und mit einer [Fermigeschwindigkeit](#)  $v_F$  die wir einfach mal mit  $\gg 100 \cdot v_0 \gg 2 \cdot 10^7 \text{ km/hr}$  annehmen, würden die Elektronen einen Weg von rund und roh  $7,2 \cdot 10^{10} \text{ m}$  zurücklegen. Man kann das drehen und wenden wie man will - das gibt keine Diffusionslängen im **mm** Bereich
- ▶ Wie kommt man auf reale Diffusionslängen? Und offenbar recht langsame Geschwindigkeiten? Das ist nun nicht mehr so ganz einfach.
  - *Wird fortgesetzt*
- ▶ Wie kommt man auf reale Diffusionslängen? Und offenbar recht langsame Geschwindigkeiten? Das ist nun nicht mehr so ganz einfach.
  - Zunächst müssen wir uns klar machen, dass wir jetzt immer eine Ensembleeigenschaft betrachten. Wir haben zwar im "backbone" ein einzelnes, durch ein Photon generiertes Elektron verfolgt, aber das ist ein hoch stilisiertes Visualisierungskonzept.
- ▶ Gehen wir kurz zurück zum [Fliegenschwarmbild](#) und verallgemeinern vom Fliegenschwarm auf die Luftmoleküle im geschlossenen Zimmer.
  - Auch diese sausen wie verrückt mit hoher Geschwindigkeit durcheinander; aber die Dichte und damit der *Druck* ist überall ziemlich konstant.
  - Jetzt ändern wir gedanklich lokal die Dichte ein wenig - zum Beispiel indem ein paar zusätzliche Moleküle generieren, oder viel einfacher indem wir *sprechen*. Der Effekt ist derselbe: Wir generieren eine lokale Abweichung des Drucks vom Mittelwert, eine kleine *Störung*. Diese Störung breitet sich nun als Druckschwankung aus - und zwar mit *Schallgeschwindigkeit*, nicht mit der (sehr viel schnelleren) mittleren Geschwindigkeit der Teilchen.
  - Man kann sich das so vorstellen: Die "Zusatzmoleküle" verschwinden zwar sehr schnell aus dem Volumenelement, in das wir sie gebracht haben - aber dafür fliegen fast exakt genau so viele von anderswo hinein. Da wir Moleküle nicht unterscheiden können, passiert im wesentlichen gar nichts.
  - Um die real vorhandene Störung auszugleichen, müssen die Teilchen untereinander einige Zeit lang wechselwirken, und die dafür benötigte Zeit kann recht lang sein.
- ▶ Anders ausgedrückt: Die Schallgeschwindigkeit ist die Geschwindigkeit, mit der sich eine *Störung* im Gas ausbreitet, sie ist nicht identisch mit der Geschwindigkeit der Teilchen selbst. Es gibt auch keine einfache Beziehung zwischen den beiden, denn man braucht grundsätzlich noch ein weiteres Phänomen.
- ▶ Unser Elektronengas ist auch nicht anders. Das von einem Photon erzeugte Elektron ist *eine* Sache, die damit verbundene lokale Störung der Elektronendichte eine *andere*.
  - Und obwohl in allen Bildchen *ein* Elektron visualisiert wurde, das nach seiner Generation im Kristall herumläuft, ist dieses Elektron im Lichte obiger Betrachtungen natürlich ein "*Ensemble-Elektron*", d.h. wir haben ihm die Eigenschaften zugeschrieben, die *ein* Elektron haben *müßte*, das in seinem Verhalten das ganze Ensemble repräsentiert, das wir eigentlich betrachten müßten.

- Außerdem kann man zur Beruhigung noch zur Kenntnis nehmen, daß die für uns jetzt wichtigen Elektronen (oder Löcher) praktisch immer an den *Bandkanten* sitzen - und das sind die Plätze mit kleinem  $dE(\mathbf{k})/d\mathbf{k}$ , d.h. mit kleiner Gruppengeschwindigkeit.

Alles nicht so ganz einfach! Aber es gibt (leider? Oder doch eher gottseidank?) kein Menschenrecht auf einfache Natur. Und die gute Nachricht ist doch auch nicht schlecht:

- Egal wie man denkt, visualisiert oder rechnet: Alles ist richtig solange man die richtigen Beziehungen verwendet.