

Einfluß eines elektrischen Feldes auf eine optische Absorptionskante

Von WALTER FRANZ

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Münster i. W.
(Z. Naturforschg. 13 a, 484—489 [1958] ; eingegangen am 20. März 1958)

In einem elektrischen Feld der Größenordnung 10^5 bis 10^6 V/cm hat man eine Veränderung der Absorptionskanten zu erwarten, welche in einer Verbreiterung des Kantenfußes auf Kosten höherer Frequenzen besteht. Man kann den Effekt verstehen entweder aus dem Eindringen von Elektronen in das verbotene Band (Vorstufe der inneren Feldemission) oder aus der Frequenzmodulation, welche der optische Übergang infolge der Beschleunigung der Elektronenzustände erfährt. Die exponentiell abfallende Flanke der Absorptionskante erleidet eine Verschiebung nach kleineren Frequenzen, welche proportional zum Quadrat der Feldstärke und zu der gemittelten reziproken effektiven Masse der Elektronen und der Löcher ist. Die Beobachtung der Flankenverschiebung liefert daher eine Bestimmung dieser effektiven Masse.

1. Problemstellung

Bekanntlich stehen den Elektronen eines Festkörpers (Kristalls) erlaubte Energiebänder zur Verfügung, welche durch verbotene Bänder getrennt sind. Ein äußeres elektrisches Feld erlaubt den Elektronen, als gedämpfte Welle etwas in die verbotenen Bänder einzudringen. In isolierenden Kristallen führt dies zu der Erscheinung der inneren Feldemission; außerdem sollte aber auch — wie H. Pück in einer Diskussion bemerkt hat — eine Verschiebung der optischen Bandkante nach kleineren Frequenzen eintreten, da optische Übergänge zwischen Termen des verbotenen Bandes möglich werden — ihre Wahrscheinlichkeit nimmt allerdings mit der Entfernung von der Bandkante exponentiell ab, wie die folgende heuristische Überlegung zeigt:

In einem eindimensionalen Kristall wird das Verhalten der Elektronen charakterisiert durch den funktionellen Zusammenhang zwischen dem Impuls p und der Energie $E(p)$; diese Funktion ist mehrdeutig, besitzt insbesondere zwei Zweige $E_v(p)$ und $E_l(p)$, welche die Energien des Valenzbandes und des Leitungsbandes annehmen, wenn p die reellen Impulswerte durchläuft. Die Energiewerte des verbotenen Bandes dagegen werden von keinem Zweig der Funktion $E(p)$ geliefert, solange p reell bleibt; hierfür sind imaginäre p -Werte erforderlich. Man kann jedoch die Energie stetig vom Valenzband ins Leitungsband wachsen lassen (s. Abb. 1), wenn man p in geeigneter Weise von der Kante des Valenzbandes ($p=0$) durch das Imaginäre zur Kante des Valenzbandes (erneut $p=0$) wandern läßt. — Legt man ein elektrisches Feld F an, welches die Elektronen in der x -Richtung beschleunigt, so gilt für ein Elektron der Energie E die Beziehung

$$E(p) = E + e F x. \quad (1)$$

Trägt man, wie in Abb. 1, x als Abszisse und $E(p)$ als Ordinate auf, so ergibt sich eine Gerade; die Lage des Elektrons im Valenzband, Leitungsband

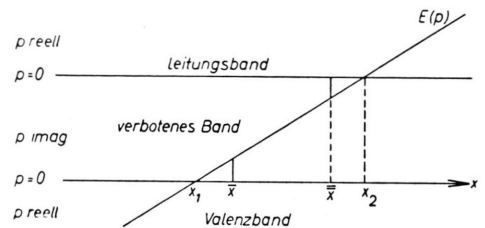


Abb. 1. Bandschema.

oder im verbotenen Gebiet wird eine Funktion von x . Da im verbotenen Band p imaginär ist, ist eine ebene Elektronenwelle $\exp(i p x/\hbar)$ dort gedämpft, ihre Amplitude an einer Stelle \bar{x} des verbotenen

Bandes ist also gegeben durch $\exp(i \int_{\bar{x}}^{\bar{x}} p dx/\hbar)$. Findet nun von \bar{x} aus ein optischer Übergang (Absorption eines Lichtquants) statt, so muß er wegen der kleinen Impulse der Lichtquanten nahezu zu dem gleichen Endimpuls \bar{p} führen, also wieder ins verbotene Band; die zugehörige Koordinate sei x . Da auch dieser Endzustand ohne Feld verboten ist und nur infolge des Feldes „gedämpft“ existiert, sollte man für den optischen Übergang eine Amplitude vermuten, welche proportional zu dem Produkt der beiden Dämpfungsfaktoren ist:

$$a \sim \exp \left(i \int_{x_1}^{\bar{x}} p dx/\hbar + i \int_{\bar{x}}^{x_2} p dx/\hbar \right). \quad (2)$$



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition “no derivative works”). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

Da an den Bandkanten x_1 und x_2 der Impuls verschwindet, erhält man nach partieller Integration

$$a \sim \exp \left(i \int_{\bar{p}}^0 [x_v - \bar{x}] dp/\hbar + \int_0^{\bar{p}} i [x_1 - \bar{x}] dp/\hbar \right).$$

Darin bedeuten x_1 und x_v die durch (1) gegebenen Zusammenhänge zwischen x und p im Leitungs- bzw. Valenzband. Setzt man dies ein, so folgt

$$a \sim \exp \left(i \int_0^{\bar{p}} [E_1(p) - E_v(p) - \hbar \omega] dp/\hbar e F \right). \quad (3)$$

$$\text{Dabei ist} \quad \omega = [E_1(\bar{p}) - E_v(\bar{p})]/\hbar. \quad (4)$$

die zu dem Übergang gehörige Kreisfrequenz.

Für das zu erwartende Spektrum erhält man die Intensität

$$A(\omega) = |a|^2. \quad (5)$$

Da die Energiedifferenz des Integranden von (3) positiv, dagegen \bar{p} positiv imaginär ist, fällt, wie erwartet, A mit abnehmendem ω exponentiell ab. In der Nähe der Bandkanten läßt sich der Abfall leicht angeben. Dort ist

$$E_1(p) - E_v(p) = I + p^2/m^*. \quad (6)$$

Dabei ist

$$1/m^* = 1/2 m_1 + 1/2 m_v \quad (7)$$

die mittlere reziproke effektive Masse der Elektronen des Leitungsbandes und der Löcher des Valenzbandes, und I die Energielücke. Aus (6) und (3) folgt mit Rücksicht auf (4) und (5):

$$A(\omega) = \exp \left(\frac{4\sqrt{m^*}(I - \hbar \omega)^{3/2}}{3 \hbar e F} \right). \quad (8)$$

Da die vorstehende heuristische Theorie – abgesehen davon, daß sie nur eindimensional ist – weder genau noch überzeugend ist, wird im folgenden der Absorptions-Prozeß mit geeigneteren Methoden untersucht.

2. Optischer Übergang für das Einzel-Elektron

Die Band-Elektronen lassen sich durch BLOCHSche Eigenfunktionen

$$\psi(\mathbf{f}, \mathbf{r}, t) = u(\mathbf{f}, \mathbf{r}) \cdot \exp \left(i \mathbf{f} \cdot \mathbf{r} - i \int^t E(\mathbf{f}) d\tau/\hbar \right) \quad (9)$$

beschreiben. $\mathbf{f} = \mathbf{p}/\hbar$ ist die Wellenzahl, u ist als Funktion des Ortsvektors \mathbf{r} mit dem Gitter periodisch, und $E(\mathbf{f})$ ist die Energie als Funktion der Wellenzahl. Als Funktion von \mathbf{f} besitzt ψ die Periode des

reziproken Gitters. – Im äußeren elektrischen Feld \mathfrak{F} kann man nach HOUSTON¹ in guter Näherung die Funktionen ψ verwenden, wenn man darin nur die Wellenzahl gemäß

$$d\mathbf{f}/dt = e \mathfrak{F}/\hbar \quad (10)$$

von der Zeit abhängen läßt. Der Zustand des Elektrons pendelt dabei (entsprechend der periodischen Abhängigkeit von \mathbf{f}) in einem erlaubten Energieband hin und her; die Umkehr wird durch BRAGG'sche Reflexionen bewirkt.

Berechnet man mit den HOUSTONSchen Funktionen die optischen Übergangswahrscheinlichkeiten vom Valenz- zum Leitungsband (wobei außer dem Lichtquant auch noch Phononen umgesetzt werden dürfen), so erhält man genau dieselben Matrix-Elemente, wie wenn \mathbf{f} nicht von der Zeit abhängt. Auch kommen keinerlei „Zustände“ im verbotenen Energiegebiet ins Spiel, von denen wir im vorigen Abschnitt gesprochen haben. Somit wäre keinerlei Einfluß des elektrischen Feldes zu verzeichnen, wenn nicht infolge der Zeitabhängigkeit von \mathbf{f} die (bei festem \mathbf{f} rein periodische) Schwingung in ihrer Amplitude wie in der Frequenz moduliert würde. Hierbei treten – sobald die Modulationsfrequenz mit der Schwingungsfrequenz vergleichbar wird – im FOURIER-Spektrum der modulierten Schwingung auch Frequenzen auf, welche außerhalb des Modulationsbereichs liegen. Insbesondere liefert die Frequenzmodulation eines Matrixelementes der Zustände ψ_v des Valenz- und ψ_l des Leitungsbandes den Phasenfaktor

$$\exp \left(i \int^t [E_l(\mathbf{f}) - E_v(\mathbf{f})] d\tau/\hbar \right),$$

welcher zur Kreisfrequenz ω den FOURIER-Koeffizienten

$$a(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp \left(i \int^t [E_l(\mathbf{f}) - E_v(\mathbf{f}) - \hbar \omega] d\tau/\hbar \right) \quad (11)$$

hat. Der Integrand besitzt für $\hbar \omega > I$ einen Punkt stationärer Phase für $\mathbf{f} = \mathbf{f}_s$, wo

$$E_l(\mathbf{f}_s) - E_v(\mathbf{f}_s) = \hbar \omega. \quad (12)$$

Für $\hbar \omega < I$ besitzt diese Gleichung keine reelle Lösung, sie liefert vielmehr einen im Komplexen ge-

¹ W. V. HOUSTON, Phys. Rev. **57**, 184 [1940]; vgl. meine Darstellung in Handb. d. Physik **17**, 209 ff., Springer-Verlag, Berlin 1956, sowie in Z. Naturforschg. **11 a**, 522 [1956].

legen den Sattelpunkt des Integranden von (11). In jedem Falle wird der Betrag von $a(\omega)$ näherungsweise durch den Wert des Integranden am Sattelpunkt bestimmt, man hat somit

$$a(\omega) \sim \exp \left(i \int_{t_1}^{t_2} [E_1(\mathbf{f}) - E_v(\mathbf{f}) - \hbar \omega] dt / \hbar \right). \quad (13)$$

Zieht man Gl. (10) heran, so erkennt man die Übereinstimmung mit Gl. (3). Wir erhalten somit genau dasselbe Ergebnis bezüglich der Veränderung des Absorptions-Spektrums durch das elektrische Feld, wenn wir einerseits von „gedämpften“ Zuständen des verbotenen Bandes ausgehen, andererseits nur Übergänge zwischen Zuständen der erlaubten Bänder heranziehen, jedoch die Frequenz-Modulation infolge des periodischen Vorgangs der Beschleunigung und BRAGGSchen Reflexion der Bänderlektronen in Rechnung setzen. Nur der letzte Weg führt allerdings zu einer quantitativen Theorie.

3. Ideale Bandkante

Die Verhältnisse in der Umgebung der Bandkante sollen nun dadurch idealisiert werden, daß einerseits

die Abhängigkeit des Matrix-Elements von \mathbf{f} unterdrückt, andererseits für die beteiligten Elektronenzustände ein rein quadratischer Zusammenhang zwischen Energie und Wellenzahl angesetzt wird:

$$E_1(\mathbf{f}) = \hbar^2 \mathbf{f}^2 / 2 m_1; \quad E_v(\mathbf{f}) = -I - \hbar^2 \mathbf{f}^2 / 2 m_v. \quad (14)$$

Die reziproken effektiven Massen der Elektronen des Leitungsbandes und der Löcher des Valenzbandes sollen dabei Tensoren sein.

Wir betrachten einen einzelnen optischen Übergang, bei welchem mit der Absorption der Energie $\hbar \omega$ des Lichtquants eine Aufnahme des Impulses $\hbar \mathbf{f}_1$ und der Energie E_1 aus einem dritten System (Phononen) verbunden ist. Das bedeutet für die Ausstrahlungsfrequenz

$$\hbar \omega_{v1} = E_1 - E_v - E_1; \quad (15)$$

$$\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}_v + \mathbf{f}_1. \quad (16)$$

Das gesamte Absorptions-Spektrum erhalten wir, indem wir $|a(\omega)|^2$ nach (11) über eine Ebene des \mathbf{f} -Raums $d^2 \mathbf{f}_\perp$ senkrecht zur Feldrichtung integrieren, nachdem wir im Exponenten den verallgemeinerten Ausdruck

$$E_1(\mathbf{f}_1) - E_v(\mathbf{f}_v) - E_1 - \hbar \omega$$

eingesetzt haben. Das Frequenzspektrum der Absorption ist dann gegeben durch

$$A(\omega) \sim \int d^2 \mathbf{f}_\perp \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \exp \left(i \int_{t_1}^{t_2} [E_1(\mathbf{f}_1) - E_v(\mathbf{f}_v) - E_1 - \hbar \omega] dt / \hbar \right). \quad (17)$$

Für E_1 und E_v sind die Ausdrücke (14) einzusetzen; die eckige Klammer ist quadratisch in den Variablen \mathbf{f}_\perp , t und kann durch Nullpunktverschiebung *rein* quadratisch gemacht werden. Gl. (17) lautet dann:

$$A(\omega) \sim \int d^2 \mathbf{f}_\perp \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \exp \left(i \int_{t_1}^{t_2} [I - E_1 + \hbar^2 \mathbf{f}_1 \cdot (\Phi_1 - \Phi_1 \cdot \Phi^{-1} \cdot \Phi_1) \cdot \mathbf{f}_1 + \hbar^2 \mathbf{f}_\perp \cdot (\Phi - \Phi \cdot \mathcal{F} \cdot \mathcal{F} \cdot \Phi / \mathcal{F} \cdot \Phi \cdot \mathcal{F}) \cdot \mathbf{f}_\perp + e^2 \mathcal{F} \cdot \Phi \cdot \mathcal{F} t^2 - \hbar \omega] dt / \hbar \right). \quad (18)$$

Φ_1 und Φ sind die Dyaden

$$\Phi_1 = 1/2 m_1; \quad \Phi = 1/2 m_1 + 1/2 m_v = 1/m^*. \quad (19)$$

Führt man für $d^2 \mathbf{f}$ die Größe

$$\tau \equiv \mathbf{f}_\perp \cdot (\Phi - \Phi \cdot \mathcal{F} \cdot \mathcal{F} \cdot \Phi / \mathcal{F} \cdot \Phi \cdot \mathcal{F}) \cdot \mathbf{f}_\perp$$

sowie einen Polarwinkel als neue Variable ein, dann folgt

$$A(\omega) \sim (m^*)^{-1/2} \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \exp \left(i \int_{t_1}^{t_2} [I_1 + \tau + e^2 F^2 t^2 / m^* - \hbar \omega] dt / \hbar \right). \quad (20)$$

Dabei ist abgekürzt

$$I_1 \equiv I - E_1 + \mathbf{f}_1 \cdot (\Phi_1 - \Phi_1 \cdot \Phi^{-1} \cdot \Phi_1) \cdot \mathbf{f}_1, \quad (21)$$

und m^* bedeutet die effektive Masse für die Feldrichtung. Um von den drei Integrationen in (20) zwei explizit ausführen zu können, führen wir die neuen Variablen u und v nach

$$u = t_2 - t_1; \quad 2v = t_1 + t_2$$

ein:
$$A(\omega) \sim (m^*)^{-1/2} \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} du \int_{-\infty}^{+\infty} dv \exp(iu[I_1 + \tau - \hbar\omega]/\hbar + iu[v^2 + u^2/12] e^2 F^2/\hbar m^*) . \quad (22)$$

Verschiebt man den Integrationsweg der Variablen u um ein endliches Stück in die positiv imaginäre Halbebene, so kann man die Integrale über $d\tau$ und dv ausführen und erhält als endgültige Integral-Darstellung des Absorptions-Spektrums

$$A(\omega) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} dt t^{-3/2} \exp(\omega_F^3 t^3 + [\omega - \omega_1] t) \quad (23) \quad \text{mit} \quad \omega_1 = I_1/\hbar; \quad \omega_F = \left(\frac{e^2 F^2}{12 \hbar m^*} \right)^{1/3}. \quad (24)$$

Über die Normierung wurde in (23) willkürlich verfügt. Der Integrationsweg ist auf der positiven Seite am Nullpunkt vorbeizuführen.

Für $\omega_F \neq 0$ erhält man durch Entwicklung des Integranden nach Potenzen von $\omega - \omega_1$ die konvergente Reihe

$$A(\omega) = \sqrt{\omega_F} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(3/2)}{3n! \Gamma(7/6 - n/3)} \left(\frac{\omega - \omega_1}{\omega_F} \right)^n. \quad (25)$$

Für $\omega - \omega_1 \gg \omega_F$ verwendet man besser die semikonvergente alternierende Reihe (Fehler R_N kleiner als letzter Summenterm):

$$A(\omega) \sim \sqrt{\omega - \omega_1} \sum_{n=0}^N \frac{\Gamma(3/2)}{n! \Gamma(3/2 - 3n)} \left(\frac{\omega_F}{\omega - \omega_1} \right)^{3n} + R_N. \quad (26)$$

Man erhält sie, indem man den Integranden von (23) bis zur N -ten Potenz nach ω_F^3 entwickelt und den Integrationsweg über $-\infty$ schließt.

Für $\omega - \omega_1 \ll -\omega_F$ erhält man eine asymptotische Darstellung durch Entwicklung des Exponenten in (23) um den auf der positiven Halbachse gelegenen Sattelpunkt

$$t_s = \left(\frac{\omega_1 - \omega}{3 \omega_F^3} \right)^{1/2}$$

(nach Einführung der Variablen $t^{-1/2}$):

$$A(\omega) \sim \sqrt{3 \omega_F} \frac{\omega_F}{4(\omega - \omega_1)} \left(1 - \left[\frac{3 \omega_F}{\omega_1 - \omega} \right]^{3/2} \dots \right) \exp \left(-2 \left[\frac{\omega_1 - \omega}{3 \omega_F} \right]^{3/2} \right). \quad (27)$$

Der Exponentialfaktor in (27) ist erneut in Einklang mit Gl. (8). Den Verlauf der Funktion $A(\omega)$ zeigt

Abb. 2. Der Einfluß des Feldes macht sich in einer Verbreiterung des Fußes der Absorptionslinie bemerkbar, welche von der Größenordnung ω_F ist. Wir kommen hierauf in Abschn. 5 zurück.

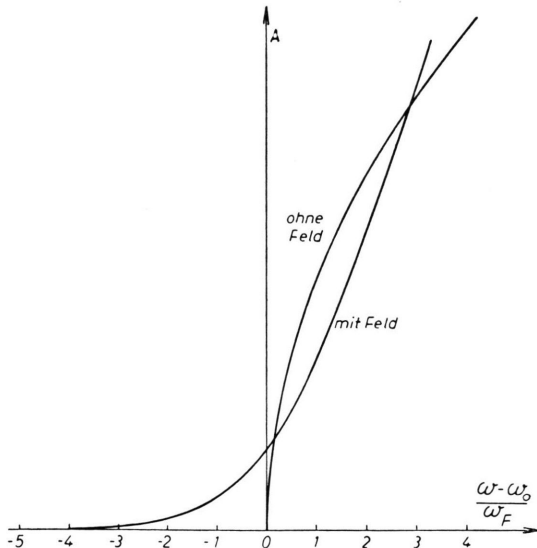


Abb. 2. Ideale Kante.

4. Exponentielle Bandkante

Im allgemeinen unterscheidet sich der Verlauf einer Bandkante erheblich von der Gestalt $(\omega - \omega_1)^{1/2}$,

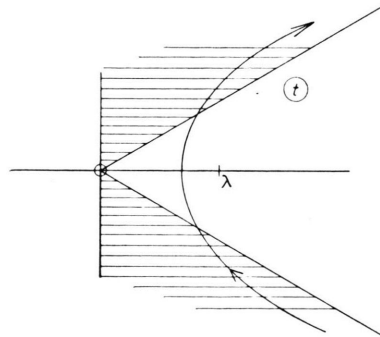


Abb. 3. Integrationsweg für Gl. (28).

wie sie sich aus (26) für $F=0$ ergibt. Einem realen Kantenverlauf kommt man nahe, wenn man Prozesse mit verschiedenem ω_1 (welche also dem absorbierenden Elektron verschiedenerlei Energiebeträge begeben) mit einer mit fallendem ω_1 exponentiell abnehmenden Häufigkeit überlagert. Setzt man $I = \hbar/\omega_0$, so erhält man dafür aus (23)

$$A(\omega) = \frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}i} \int_{-\infty}^{\omega_0} d\omega_1 \int_{-i\infty}^{i\infty} dt \cdot t^{-3/2} \cdot \exp(\omega_F^3 t^3 + [\omega - \omega_1] t + [\omega_1 - \omega_0] \lambda).$$

Unter der Voraussetzung $\lambda \omega_0 \gg 1$ wurde dabei die untere Grenze für ω_1 von 0 nach $-\infty$ verlegt. — Läßt man den Weg in der t -Ebene links vom Punkte $t=\lambda$ verlaufen, so kann man die Integration über $d\omega_1$ am Integranden von dt ausführen mit dem Ergebnis

$$A(\omega) = \frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{dt}{\lambda-t} t^{-3/2} \exp(\omega_F^3 t^3 + [\omega - \omega_0] t). \quad (28)$$

Der Weg ist aus Abb. 3 zu ersehen; er überschreitet die positive Achse zwischen 0 und λ , und muß in den schraffierten Sektoren oder wenigstens auf deren Rand nach dem Unendlichen gehen.

Als Spezialfall ist in (28) die *exponentielle Kante ohne Feld* enthalten ($\omega_F=0$). Für $\omega < \omega_0$ läßt sich dabei der Weg im positiv Unendlichen um den Pol $t=\lambda$ schließen, und man hat

$$A(\omega) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \exp(\lambda[\omega - \omega_0]) \quad \text{für } \omega_F=0, \quad \omega < \omega_0. \quad (29)$$

Indem man den Weg erst nach rechts über $t=\lambda$ wegzieht und dann $(\lambda-t)^{-1}$ nach fallenden Potenzen von t entwickelt, erhält man die gut konvergente Reihendarstellung

$$A(\omega) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \exp[\lambda(\omega - \omega_0)] - \lambda(\omega - \omega_0)^{3/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(n+5/2)} [\lambda(\omega - \omega_0)]^n \quad (30)$$

für $\omega_F=0, \quad \omega > \omega_0$.

Man sieht aus dem Vergleich von (29) und (30), daß bei $\omega = \omega_0$ die zweite und die höheren Ableitungen stetig sind.

Für $\omega_F \neq 0$ ist (28) im Punkte $\omega = \omega_0$ regulär. Man erhält eine konvergente Entwicklung, indem man wieder den Weg über $t=\lambda$ wegzieht, und sodann den Nenner nach fallenden Potenzen von t entwickelt:

$$A(\omega) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \exp[\lambda^3 \omega_F^3 + \lambda(\omega - \omega_0)] - \lambda \omega_F^{3/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{3^n n!} \left(\frac{\omega - \omega_0}{\omega_F} \right)^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(3/2 + [l-n]/3)} (\lambda \omega_F)^l. \quad (31)$$

Das asymptotische Verhalten für sehr kleine Frequenzen wird durch das Residuum von (28) bei $t=\lambda$ gegeben:

$$A(\omega) \sim \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \exp[\lambda^3 \omega_F^3 + \lambda(\omega - \omega_0)] \quad \text{für } \left(\frac{\omega_0 - \omega}{\omega_F} \right)^{3/4} \left[\sqrt{\frac{\omega_0 - \omega}{3 \omega_F}} - \lambda \omega_F \right] \gg 1. \quad (32)$$

Um die Asymptotik für sehr große Frequenzen zu erhalten, entwickelt man im Integranden von (28) nach steigenden Potenzen von t :

$$A(\omega) \sim \sqrt{\omega - \omega_0} \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} \left(\frac{\omega_F}{\omega - \omega_0} \right)^{3n} \sum_{l=0}^L \frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(3/2 - 3n - l)} \frac{\lambda^l (\omega - \omega_0)^l}{\lambda^l (\omega - \omega_0)^l} \quad (33)$$

für $\omega - \omega_0 \gg \omega_F; \quad \lambda(\omega - \omega_0) \gg 1$.

Während hiernach für hohe Frequenzen der Einfluß des Feldes (wie auch für $\lambda(\omega - \omega_0) \gg 1$ die Abweichung von der idealen Kante) nur eine kleine Korrektur darstellt, bringt das Feld bei kleinen Frequenzen nach (32) eine Verschiebung der exponentiell

abfallenden Flanke um

$$\delta\omega = \lambda^2 \omega_F^3 \quad (34)$$

bzw. eine Erhöhung der Intensität um einen Faktor

$$\delta A/A = \exp(\lambda^3 \omega_F^3). \quad (35)$$

Ebenso ist das Feld in einem Gebiet der Größenordnung ω_F beiderseits von ω_0 von wesentlichem Einfluß; dies zeigt Abb. 4, in welcher der Verlauf

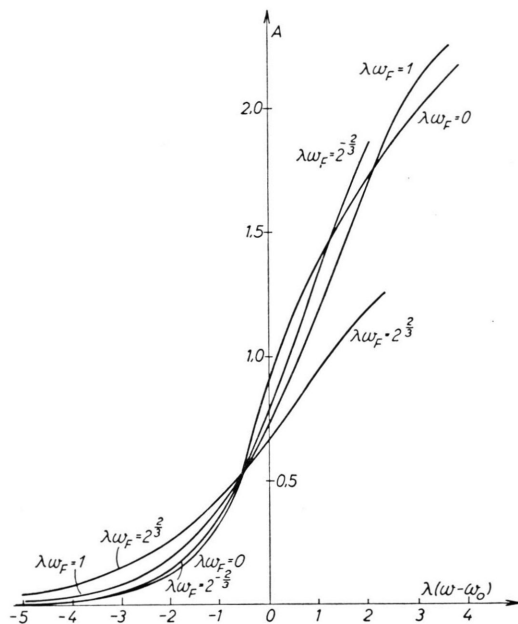


Abb. 4. Exponentielle Kante.

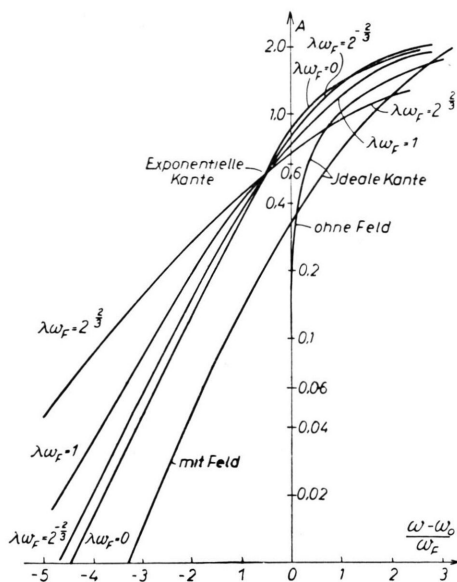


Abb. 5. Kantenverlauf logarithmischer Darstellung.

von $A(\omega)$ für verschiedene Werte von ω_F eingezeichnet ist. Abb. 5 zeigt dasselbe in logarithmischer Darstellung. Damit der Effekt beobachtbar ist, muß das Feld so stark sein, daß einerseits ω_F ein auf-

lösbares Frequenzintervall ist, und daß andererseits $\lambda \omega_F$ von der Größenordnung 1 wird; das letzte bedeutet, daß der Einfluß des Feldes auf die Kante um so schwerer zu beobachten ist, je langsamer die Kante abfällt.

5. Diskussion der Ergebnisse

Für die Kantenverschiebung ist die Größe ω_F maßgebend, für welche sich aus (24) die folgende numerische Formel ergibt:

$$\hbar \omega_F = 0,040 \left(\frac{m}{m^*} \right)^{1/3} \left(\frac{F}{10^6 \text{ V/cm}} \right)^{2/3} \text{ eV}. \quad (36)$$

Demnach erhält man Veränderungen der Kante in einem Gebiet beobachtbarer Größe, wenn das Feld von der Größenordnung 10^5 bis 10^6 V/cm wird. Interessant ist die Abhängigkeit von der effektiven Masse; da die Flankenverschiebung nach (34) mit der dritten Potenz von ω_F , also umgekehrt proportional zur effektiven Masse geht, ergibt sich eine Möglichkeit zur Bestimmung von effektiven Massen; zu beachten ist, daß es sich bei m^* um die reziprok gemittelten Massen der Elektronen und Löcher handelt. Jedenfalls könnte man durch Messung dieser Massen für verschiedene kristallographische Richtungen des Feldes wertvolle Aufschlüsse über die Struktur von Valenz- und Leitungsband gewinnen.

Damit die Verschiebung der Flanke bzw. die mit ihr verbundene Intensitäts-Änderung gut beobachtbar ist, muß nach (34) und (35) ω_F so groß sein wie das Frequenzintervall $1/\lambda$, auf welchem die Intensität der Kante (ohne Feld) um eine e -Potenz abfällt; man muß deshalb bei tiefer Temperatur beobachten.

Eine quantitative Beobachtung der Flankenverschiebung ist nur möglich, wenn andere Effekte ausgeschaltet werden, welche zu einer Verschiebung führen können. Hier hat man in erster Linie an eine Veränderung der Bandlücke $\hbar \omega_0$ infolge des Feldes sowie indirekt infolge der durch die Stromwärme hervorgerufenen Temperaturerhöhung zu denken. Es dürfte wohl nötig sein, die Temperaturerhöhung völlig zu vermeiden, notfalls durch kurzzeitige oder intermittierende Beobachtung. Der direkte Einfluß des Feldes auf die Bandlücke andererseits ist zu klein, um bemerkt zu werden; denn bei 10^5 V/cm variiert das Potential des Feldes in der Elementarzelle nur um einige Tausendstel Volt; die hierdurch hervorgerufenen Verschiebungen der Bandkanten sind noch wesentlich kleiner, da sie quadratisch mit dem Feld gehen.

Neigung und Krümmung der Richtungs- und
Energiefokussierungskurven bei doppel-
fokussierenden Massenspektrographen

Von H. LIEBL

Physikalisches Institut der Technischen Hochschule München
(Z. Naturforschg. 13 a, 490—491 [1958] ; eingeg. am 14. April 1958)

Bei einem doppel fokussierenden Massenspektrogra-
phen schneiden sich die Richtungs- und die Energie-
fokussierungskurve am Ort der Doppelfokussierung im
allgemeinen unter einem bestimmten Winkel und haben
dort bestimmte Krümmungen (Abb. 1).

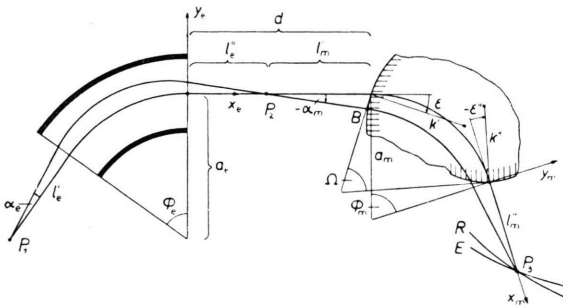


Abb. 1. Strahlengang bei doppel fokussierenden Massenspek-
trographen. (R=Richtungsfokussierungskurve, E=Energie-
fokussierungskurve.)

Am Doppelfokussierungspunkt mögen geladene Teil-
chen der Masse m_0 fokussiert werden. Teilchen etwas
anderer Masse $m_0(1+\gamma)$, $\gamma \ll 1$, erfahren in der Nach-
barschaft des Doppelfokussierungspunktes um so besse-
rere Fokussierung, je kleiner der Schnittwinkel zwi-
schen beiden Kurven ist und je weniger sich ihre
Krümmungsradien an der Überschneidungsstelle von-
einander unterscheiden. Es wurden die Gleichungen
der beiden Fokussierungskurven im x_m, y_m -Koordin-
atensystem hinter dem magnetischen Feld (Abb. 1) in
Parameterdarstellung $x_R(\gamma)$, $y_R(\gamma)$ und $x_E(\gamma)$, $y_E(\gamma)$
in zweiter Näherung in bezug auf den Parameter γ
für die Umgebung des Doppelfokussierungspunktes er-
rechnet^{1, 2}. Daraus erhält man die Neigungen¹ n_R bzw.
 n_E und die Krümmungsradien² r_R bzw. r_E der Kurven
am Doppelfokussierungsort:

$$n_R = \frac{dy_R}{dx_R} = \frac{\dot{y}_R}{\dot{x}_R}, \quad r_R = \frac{(\dot{x}_R^2 + \dot{y}_R^2)^{3/2}}{x_R \ddot{y}_R - x_R \ddot{y}_R}, \quad (1)$$

$$n_E = \frac{dy_E}{dx_E} = \frac{\dot{y}_E}{\dot{x}_E}, \quad r_E = \frac{(\dot{x}_E^2 + \dot{y}_E^2)^{3/2}}{x_E \ddot{y}_E - x_E \ddot{y}_E}, \quad (2)$$

wobei die Punkte die Ableitungen nach γ am Doppel-
fokussierungsort ($\gamma=0$) bedeuten. Diese Ableitungen

¹ H. LIEBL, Optik, im Druck.

² H. LIEBL, Optik, im Druck.

Feld- kombination	$\frac{a_e}{a_m}$	$\frac{l'_e}{a_e}$	$\frac{l'_m}{a_m}$	$\frac{l''_m}{a_m}$	Φ_e	Φ_m	ϵ'	ϵ''	$\frac{k''}{a_m}$	$\text{arc } n_R$	$\text{arc } n_E$	$\text{arc } n_R$ - $\text{arc } n_E$	$\frac{r_R}{a_m}$	$\frac{r_E}{a_m}$
MATTAUCH- HERZOG	0,2—1,0	0,7	∞	0	31,8°	90°	0	45°	∞	45°	45°	0	∞	∞
DEMSTER	0,85	0,118	0	0	90°	180°	0	0	∞	90°	48,4°	+ 41,6°	∞	∞
BAINBRIDGE- JORDAN	1	0	1,73	1,73	127,3°	60°	0	0	∞	24,8°	32,2°	- 7,4°	7,95	3,77
NIER u. a. ⁸	1,24	0,35	2,29	1,36	90°	60°	0	0	∞	27,15°	29,3°	- 2,15°	5,43	4,55
OGATA u.	0,91	1,23	1	3,73	84,8°	60°	0	0	∞	17,2°	21,2°	- 4,0	29,5	18,8
MATSUDA ⁹	1,28	0,374	2,76	1,42	81,5°	55°	0	0	∞	26,4°	28,4°	- 2,0°	4,33	5,45
HINTENBERGER- KÖNIG ⁴	2,67	1,572	3,15	0,91	50,5°	70°	15°	15°	∞	36,9°	37,9°	- 1,0°	2,38	2,32
Neue Beispiele ^{1, 2}	3,62	6,11	3,18	0,91	99,5°	70°	15°	15°	∞	36,9°	38,1°	- 1,2°	2,37	2,30
	1	0,707	1	1	63,6°	90°	0	0	∞	33,7°	33,7°	0	4,25	3,95
	1	0,707	1	1	63,6°	90°	0	0	1	45°	45°	0	1,41	1,41

Tab. 1.

lauten:

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_R &= -\frac{1}{V_1} (a_m U_{16} + l_m'' V_{16}), \\ \ddot{x}_R &= -\frac{2}{V_1} (a_m U_{166} + l_m'' V_{166} + \dot{x}_R V_{16}), \\ \dot{y}_R &= \dot{y}_E = a_m U_6 + l_m'' V_6, \end{aligned} \right\} \quad (3) \quad \left. \begin{aligned} \ddot{y}_R &= 2(a_m U_{66} + l_m'' V_{66} + \dot{x}_R V_6), \\ \dot{x}_E &= -\frac{1}{V_2} (a_m U_{26} + l_m'' V_{26}), \\ \ddot{x}_E &= -\frac{2}{V_2} (a_m U_{266} + l_m'' V_{266} + \dot{x}_E V_{26}), \\ \ddot{y}_E &= 2(a_m U_{66} + l_m'' V_{66} + \dot{x}_E V_6). \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Die Koeffizienten V ergeben sich zu:

$$\left. \begin{aligned} V_1 &= v_{1a} L_1 + v_{1b} T_1, \\ V_6 &= \frac{1}{2} v_{2a}, \\ V_{16} &= \frac{1}{2} (v_{12a} L_1 + v_{12b} T_1), \\ V_{166} &= \frac{1}{8} [(2 v_{122a} - v_{12a}) L_1 + (2 v_{122b} - v_{12b}) T_1], \\ V_{266} &= \frac{1}{16} [(2 v_{122a} - v_{12a}) L_2 + (2 v_{122b} - v_{12b}) T_2 + 6 v_{222a} + 2 v_{22a} - v_{2a}]. \end{aligned} \right\} \quad (4) \quad \left. \begin{aligned} V_2 &= \frac{1}{2} (v_{1a} L_2 + v_{1b} T_2 + v_{2a}), \\ V_{66} &= \frac{1}{8} (2 v_{22a} - v_{2a}), \\ V_{26} &= \frac{1}{4} (v_{12a} L_2 + v_{12b} T_2 + 2 v_{22a} + v_{2a}), \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Diese Ausdrücke gelten für gleichsinnige Ablenkung in beiden Feldern. Bei gegensinniger Ablenkung sind die Faktoren L und T (deren Bedeutung siehe Anm. ^{3, 4}) mit umgekehrten Vorzeichen einzusetzen.

Analog lauten die Koeffizienten U , wobei an die Stelle der v_i die entsprechenden μ_i treten. Die μ_i und v_i mit zwei und drei unteren Indizes sind schon aus früheren Arbeiten bekannt ^{4, 5, 6, 7}, diejenigen mit vier Indizes sind neu berechnet worden ²:

$$\left. \begin{aligned} \mu_{122a} &= -v_{2a} \operatorname{tg}^2 \varepsilon'' \left(\mu_{2a} v_{1a} - \frac{1}{2} \mu_{1a} v_{2a} \right) + \frac{3}{2} \frac{a_m}{k''} \frac{\operatorname{tg} \varepsilon''}{\cos^3 \varepsilon''} \mu_{2a}^2 \mu_{1a}, \\ \mu_{122b} &= -v_{1b} (\mu_{2a} v_{2a} \operatorname{tg}^2 \varepsilon'' - \mu_{1a}) - \mu_{1b} v_{2a} \operatorname{tg} \varepsilon'' \left(1 + \frac{1}{2} v_{2a} \operatorname{tg} \varepsilon'' \right) + \frac{3}{2} \frac{a_m}{k''} \frac{\operatorname{tg} \varepsilon''}{\cos^3 \varepsilon''} \mu_{2a}^2 \mu_{1b}, \\ \mu_{222a} &= \frac{1}{2} v_{2a}^2 (1 - \mu_{2a} \operatorname{tg}^2 \varepsilon'') - \mu_{2a} v_{2a} \operatorname{tg} \varepsilon'' + \frac{1}{2} \frac{a_m}{k''} \frac{\operatorname{tg} \varepsilon''}{\cos^3 \varepsilon''} \mu_{2a}^3, \\ v_{122a} &= v_{1a} v_{2a} \left(\operatorname{tg} \varepsilon'' + \frac{3}{2} \frac{v_{2a}}{\cos^2 \varepsilon''} \right) + \frac{a_m}{k''} \frac{1}{\cos^3 \varepsilon''} \left[\mu_{1a} (\mu_{22a} - \mu_{2a}) + \mu_{12a} \mu_{2a} \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} \mu_{2a} \operatorname{tg} \varepsilon'' \left(\frac{a_m}{k''} \frac{\mu_{1a} \mu_{2a}}{\cos \varepsilon''} - v_{1a} \mu_{2a} - 2 \mu_{1a} v_{2a} \right) \right], \\ v_{122b} &= v_{1b} \left(1 + 2 v_{2a} \operatorname{tg} \varepsilon'' + \frac{3}{2} \frac{v_{2a}^2}{\cos^2 \varepsilon''} \right) + \frac{a_m}{k''} \frac{1}{\cos^3 \varepsilon''} \left[\mu_{1b} (\mu_{22a} - \mu_{2a}) + \mu_{12b} \mu_{2a} \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} \mu_{2a} \operatorname{tg} \varepsilon'' \left(\frac{a_m}{k''} \frac{\mu_{1b} \mu_{2a}}{\cos \varepsilon''} - v_{1b} \mu_{2a} - 2 \mu_{1b} v_{2a} \right) \right], \\ v_{222a} &= v_{2a} \left(1 + v_{2a} \operatorname{tg} \varepsilon'' + \frac{1}{2} \frac{v_{2a}^2}{\cos^2 \varepsilon''} \right) + \frac{1}{2} \frac{a_m}{k''} \frac{\mu_{2a}}{\cos^3 \varepsilon''} \left[-v_{2a}^2 - \mu_{2a} + \mu_{2a} \operatorname{tg} \varepsilon'' \left(\frac{a_m}{k''} \frac{\mu_{2a}}{\cos \varepsilon''} - v_{2a} \right) \right]. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Für den besonders interessierenden Fall, daß sich beide Kurven im Überschneidungspunkt berühren ($n_R = n_E$), gilt die Bedingung:

$$\mu_{2a} v_{1a} L_1 + \mu_{1b} v_{2a} T_1 = 0. \quad (6)$$

Die Gln. (1) und (2) wurden auf verschiedene be-

stehende und vorgeschlagene Apparate angewandt; die Resultate sind in Tab. 1 zusammengestellt. Beim vorletzten Beispiel werden die beiden Neigungen, beim letzten auch noch die beiden Krümmungen gleich.

Herrn Privatdozent Dr. H. EWALD danke ich für zahlreiche anregende Diskussionen.

³ H. EWALD u. H. LIEBL, Z. Naturforschg. **12 a**, 28 [1957].

⁴ H. HINTENBERGER u. L. A. KÖNIG, Z. Naturforschg. **12 a**, 140 [1957].

⁵ L. A. KÖNIG u. H. HINTENBERGER, Z. Naturforschg. **12 a**, 377 [1957].

⁶ H. HINTENBERGER u. L. A. KÖNIG, Z. Naturforschg. **12 a**, 773 [1957].

⁷ H. LIEBL u. H. EWALD, Z. Naturforschg. **12 a**, 538 [1957].

⁸ A. O. NIER u. T. R. ROBERTS, Phys. Rev. **81**, 507 [1951]. — K. S. QUISENBERRY, T. T. SCOLMAN u. A. O. NIER, Phys. Rev. **102**, 1071 [1956].

⁹ K. OGATA u. H. MATSUDA, Z. Naturforschg. **10 a**, 843 [1955].