

## Theorie der Kondensierten Materie I WS 2018/2019

PROF. DR. A. SHNIRMAN

Blatt 3

PD DR. B. NAROZHNY, M.SC. T. LUDWIG

Lösungsvorschlag

**1. Bloch-Oszillationen:**

Betrachten Sie die semiklassische Dynamik von Elektronen in einem ein-dimensionalen Gitter in der tight-binding Näherung.

(a) Finden Sie das Energiespektrum  $\epsilon_k$ .

$$\epsilon_k = -2t \cos k.$$

(b) Betrachten Sie jetzt die Wirkung eines homogenen elektrischen Feldes  $E$ . Lösen Sie die Bloch'sche Bewegungsgleichungen und zeigen Sie, dass der Aufenthaltsort eines Elektrons oszilliert. Finden Sie die Periode und die Amplitude der Oszillationen.

In der Vorlesung wurde folgende quasi-klassische Bewegungsgleichung hergeleitet:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{k} = -\frac{e}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - e\mathbf{E}$$

1D, Ohne Magnetfeld:

$$\frac{d}{dt} k = -eE,$$

davon

$$k = -eEt.$$

Die Koordinate:

$$\frac{d}{dt} r \approx \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k},$$

davon

$$r = \frac{2t}{eE} \cos(eEt).$$

Dieses Verhalten ist allgemein bekannt als die Bloch-Oszillationen.

**2. Heisenberg-Bewegungsgleichungen im Graphen:**

Der effektive Hamilton-Operator eines Elektrons in der Nähe von einem der zwei Dirac-Punkte ( $\mathbf{K}$ -Punkt) im Graphen lautet

$$H = v(p_x \sigma_x + p_y \sigma_y).$$

Wir betrachten jetzt das Elektron im äußeren elektromagnetischen Feld  $(\phi(\mathbf{r}, t), \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$ . Verwenden Sie die minimale Kopplung

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}_{kin} = \mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A} \quad , \quad H \rightarrow H + e\phi \quad ,$$

und stellen Sie die Heisenberg-Bewegungsgleichungen für die Operatoren  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{p}_{kin}$ ,  $\mathbf{r}$ ,  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  her. Untersuchen Sie die Analogie mit den in der Vorlesung besprochenen quasi-klassischen Bewegungsgleichungen. Überlegen Sie qualitativ (ohne Rechnung) unter welcher Bedingung man könnte die quasi-klassischen Bewegungsgleichungen mit der Dispersionsrelation  $\epsilon_k = \hbar v|\mathbf{k}|$  und ohne  $\sigma$ -Operatoren benutzen.

Der Hamilton-Operator lautet

$$H = v ([p_x - (e/c)A_x] \sigma_x + [p_y - (e/c)A_y] \sigma_y) + e\phi.$$

Die Felder  $A_x(\mathbf{r}, t)$ ,  $A_y(\mathbf{r}, t)$  und  $\phi(\mathbf{r}, t)$  sind  $\mathbf{r}$ - und  $t$ -abhängig. Für die Koordinaten erhalten wir:

$$v_\alpha = \dot{r}_\alpha = (i/\hbar)[H, r_\alpha] = (i/\hbar)v\sigma_\alpha[p_\alpha, r_\alpha] = v\sigma_\alpha,$$

wobei  $\alpha = x, y$ .

Für die Impulse:

$$\begin{aligned} \dot{p}_\alpha &= (i/\hbar)[H, p_\alpha] = (-iev/c\hbar) \sum_\beta \sigma_\beta [A_\beta, p_\alpha] + (ie/\hbar)[\phi, p_\alpha] \\ &= (ev/c) \sum_\beta \sigma_\beta \partial_\alpha A_\beta - e\partial_\alpha \phi \\ &= (e/c) \sum_\beta v_\beta (\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha + \partial_\beta A_\alpha) - e\partial_\alpha \phi \\ &= (e/c) \sum_\beta v_\beta (\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha) + (e/c) \sum_\beta v_\beta \partial_\beta A_\alpha - e\partial_\alpha \phi . \end{aligned}$$

Um  $(d/dt)\mathbf{p}_{kin}$  zu berechnen, brauchen wir  $\dot{A}_\alpha$ :

$$\begin{aligned} \dot{A}_\alpha &= (i/\hbar)[H, A_\alpha] + \partial_t A_\alpha = (iv/\hbar) \sum_\beta \sigma_\beta [p_\beta, A_\alpha] + \partial_t A_\alpha \\ &= v \sum_\beta \sigma_\beta \partial_\beta A_\alpha + \partial_t A_\alpha = \sum_\beta v_\beta \partial_\beta A_\alpha + \partial_t A_\alpha . \end{aligned} \quad (1)$$

Wir erhalten

$$\dot{p}_{kin,\alpha} = (e/c) \sum_\beta v_\beta (\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha) - (e/c)\partial_t A_\alpha - e\partial_\alpha \phi .$$

In der Vektor-Form erhalten wir

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p}_{kin} = (e/c)\mathbf{v} \times \mathbf{B} + e\mathbf{E},$$

wobei  $\mathbf{B}$  nur die  $z$ -Komponente hat. Analogie mit den quasi-klassischen Bewegungsgleichungen ist offensichtlich.

Schließlich, für die Beschleunigung erhalten wir

$$\begin{aligned}\dot{v}_x = v\dot{\sigma}_x &= (iv/\hbar)[H, \sigma_x] = (iv^2/\hbar)[p_y - (e/c)A_y][\sigma_y, \sigma_x] \\ &= (2v^2/\hbar)p_{kin,y}\sigma_z.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{v}_y = v\dot{\sigma}_y &= (iv/\hbar)[H, \sigma_y] = (iv^2/\hbar)[p_x - (e/c)A_x][\sigma_x, \sigma_y] \\ &= -(2v^2/\hbar)p_{kin,x}\sigma_z.\end{aligned}$$

Und

$$\begin{aligned}\dot{\sigma}_z &= (i/\hbar)[H, \sigma_z] = (i/\hbar)[p_x - (e/c)A_x][\sigma_x, \sigma_z] + (i/\hbar)[p_y - (e/c)A_y][\sigma_y, \sigma_z] \\ &= (2/\hbar)(p_{kin,x}\sigma_y - p_{kin,y}\sigma_x).\end{aligned}$$

### 3. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode:

In der Vorlesung haben wir die folgende Schrödinger-Gleichung hergeleitet

$$\left( E_{\mathbf{k}} - \frac{(\mathbf{k} - i\nabla)^2}{2m} \right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Hier  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  ist der periodische Teil der Bloch-Wellenfunktion (es gilt  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ ),  $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  ist das periodische Kristall-Potential,  $m$  ist die Masse eines Elektrons, und  $\mathbf{k}$  ist der Quasi-Impuls (Wellenvektor) aus der 1. Brillouin-Zone. Nehmen Sie an, dass diese Gleichung für einen bestimmten Quasi-Impuls  $\mathbf{k}_0$  gelöst wurde, d.h., alle Eigenzustände  $u_{n,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  und alle Eigenenergien  $E_{n,\mathbf{k}_0}$  bekannt sind (damit ist  $n$  der Band-Index).

Wir wollen jetzt die Eigenenergien und die Eigenzustände für einen Quasi-Impuls  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \delta\mathbf{k}$  untersuchen, wobei  $\delta\mathbf{k}$  klein ist. Verwenden Sie die Störungstheorie und berechnen Sie damit

- die Gruppengeschwindigkeit im Band  $n$  bei dem Quasi-Impuls  $\mathbf{k}_0$ ;
  - den effektiven Massentensor im Band  $n$  bei dem Quasi-Impuls  $\mathbf{k}_0$ .
- Warum heißt die Methode " $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode"?

Wir stellen die Schrödinger-Gleichung wie folgt vor:

$$\begin{aligned}Hu_{\mathbf{k}} &= E_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}, \\ H &= H_0 + V_1 + V_2, \\ H_0 &= \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{k}_0)^2}{2m} + U(\mathbf{r}),\end{aligned}$$

wobei  $\mathbf{p} \equiv -i\hbar\nabla$ . Für die Störung bekommen wir

$$\begin{aligned}V_1 &= \frac{\delta\mathbf{k} \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{k}_0)}{m}, \\ V_2 &= \frac{(\delta\mathbf{k})^2}{2m},\end{aligned}$$

und  $\delta\mathbf{k} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ . Denn  $V_2$  ist nur eine Zahl (proportional zu Einheitsoperator), diese Störung kann genau berücksichtigt werden. Wir kümmern uns um  $V_1$ . Für  $\mathbf{k}_0$  alle Eigenfunktionen und Eigenenergien sind bekannt. D.h.,

$$H_0 u_{n,k_0} = E_{n,k_0} u_{n,k_0}.$$

Wir müssen die Normierung besprechen. In der Vorlesung haben wir die Blochfunktionen wie folgt normiert

$$\int d^3r \psi_{n_1,k_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{n_2,k_2}(\mathbf{r}) = V \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \delta_{n_1,n_2},$$

wobei  $V$  das Volumen des gesamten Kristall ist. Das bedeutet für die  $u$ -Funktionen

$$\int d^3r u_{n_1,k_1}^*(\mathbf{r}) u_{n_2,k_2}(\mathbf{r}) = V \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \delta_{n_1,n_2},$$

oder

$$\int_{E.Z.} d^3r u_{n_1,k_1}^*(\mathbf{r}) u_{n_2,k_2}(\mathbf{r}) = v \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \delta_{n_1,n_2},$$

wobei  $v$  das Volumen einer Elementarzelle (E.Z.) ist. Jetzt müssen wir neu normieren, sodass

$$\int_{E.Z.} d^3r u_{n_1,k_1}^*(\mathbf{r}) u_{n_2,k_2}(\mathbf{r}) = \langle u_{n_1,k_1} | u_{n_2,k_2} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \delta_{n_1,n_2},$$

Die Energiekorrektur erster Ordnung lautet

$$\delta E_n^{(1)} = \langle u_{n,k_0} | V_1 | u_{n,k_0} \rangle = \frac{\delta\mathbf{k}}{m} \cdot \langle u_{n,k_0} | \mathbf{p} + \mathbf{k}_0 | u_{n,k_0} \rangle.$$

Also, die für die Gruppengeschwindigkeit erhalten wir

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{m} [\langle u_{n,k_0} | \mathbf{p} | u_{n,k_0} \rangle + \mathbf{k}_0].$$

Das ist interessant, dass der Erwartungswert des  $\mathbf{p}$ -Operators die Gruppengeschwindigkeit ergibt.

Die gesamte Energiekorrektur zweiter Ordnung lautet

$$\delta E_n^{(2)} = \frac{1}{m^2} \sum_{n_1 \neq n} \frac{\delta k^\alpha \delta k^\beta \langle u_{n,k_0} | p^\alpha + k_0^\alpha | u_{n_1,k_0} \rangle \langle u_{n_1,k_0} | p^\beta + k_0^\beta | u_{n,k_0} \rangle}{E_{n,k_0} - E_{n_1,k_0}} + \frac{(\delta\mathbf{k})^2}{2m}.$$

Für den Massentensor erhalten wir

$$(m^{*-1})_{\alpha,\beta} = \frac{1}{m^2} \sum_{n_1 \neq n} \frac{\langle u_{n,k_0} | p^\alpha + k_0^\alpha | u_{n_1,k_0} \rangle \langle u_{n_1,k_0} | p^\beta + k_0^\beta | u_{n,k_0} \rangle}{E_{n,k_0} - E_{n_1,k_0}} + \frac{1}{m} \delta_{\alpha,\beta}.$$

Das war der Fall ohne Entartung. Ein interessanter und häufig relevanter Fall ist wenn für  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  einige Bänder entartet sind. Dann, in der ersten Ordnung, bekommen wir den folgenden effektiven Hamilton-Operator (Matrix)

$$H_{n_1,n_2}^{(eff)} = \frac{1}{m} \delta\mathbf{k} \cdot \langle u_{n_1,k_0} | \mathbf{p} + \mathbf{k}_0 | u_{n_2,k_0} \rangle.$$