Dr. Ermin Malic
Dr. Marten Richter
Dipl. Phys. Eike Verdenhalven (i.V.)

8. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I+II

Abgabe: Mi. 12.06.2013 vor Beginn der Vorlesung im EW 203

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte Matrikelnummer auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 12 (15 Punkte): *Der quantenmechanische Strom*

Zur Berechnung des Stroms $\langle\vec{j}\rangle$ werden in der VL die Identitäten

$$\frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3r\; u^*_{\lambda_1\vec{k}}\left(\vec{r}\right)\frac{\vec{p}}{m_0}u_{\lambda_2\vec{k}}\left(\vec{r}\right) = \begin{cases} -\frac{\hbar\vec{k}}{m_0} + \nabla_{\vec{k}}\frac{\varepsilon_{\lambda\vec{k}}}{\hbar} & \text{für} \quad \lambda_1 = \lambda_2 \qquad (a) \\ \mathrm{i}\left(\omega_{\lambda_1} - \omega_{\lambda_2}\right)\vec{r}_{\lambda_1\lambda_2} & \text{für} \quad \lambda_1 \neq \lambda_2 \qquad (b) \end{cases}$$

verwendet, die im folgenden bewiesen werden sollen. Der Fall (a) beschreibt dabei Tansportphänomene, während (b) für die Optik in Halbleitern verwendet wird.
Dabei sind $\vec{r}_{\lambda_1\lambda_2} = \lim\limits_{\vec{k}\to 0}\frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}}\mathrm{d}^3r u^*_{\lambda_1\vec{k}}\left(\vec{r}\right)\vec{r}u_{\lambda_2\vec{k}}\left(\vec{r}\right)$ und $\omega_{\lambda_1\vec{k}} = \frac{\varepsilon_{\lambda\vec{k}}}{\hbar}\big|_{\vec{k}\to 0}$.

(a) Fall: $\lambda_1 = \lambda_2$

1. Starten Sie mit der Schrödingergleichung für Blochfunktionen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\varphi_{\lambda\vec{k}}\left(\vec{r}\right) + V_G\left(\vec{r}\right)\varphi_{\lambda\vec{k}}\left(\vec{r}\right) = \varepsilon_{\lambda\vec{k}}\varphi_{\lambda\vec{k}}\left(\vec{r}\right)$$

2. Einsetzen der Definition der Blochfunktionen $\varphi_{\lambda\vec{k}}\left(\vec{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{V}}u_{\lambda\vec{k}}\left(\vec{r}\right)e^{\mathrm{i}\vec{k}\vec{r}}$ führt zu einer Gleichung der Form $L_k u_{\lambda\vec{k}} = \varepsilon_{\lambda\vec{k}}u_{\lambda\vec{k}}$.
3. Diese Gleichung mit $\nabla_{\vec{k}}$ multiplizieren und Produktregel vollständig anwenden.
4. Substitution $\lambda \to \lambda_2$; von links mit $u^*_{\lambda_1\vec{k}}(\vec{r})$ multiplizieren; über Elementarzelle V_{EZ} integrieren ($\frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}}\mathrm{d}^3r\cdots$) und Integrale auswerten. Dabei kann $\frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}}\mathrm{d}^3r u^*_{\lambda_1\vec{k}}\left(\vec{r}\right)u_{\lambda_2\vec{k}}\left(\vec{r}\right) = \delta_{\lambda_1\lambda_2}$ verwendet werden (Es wird $\vec{k}\to 0$ angenommen (Bandkante).), nachdem $\vec{r}$-unabhängige Terme vorgezogen wurden. (TIPP: Verwenden Sie nochmals $L_k u_{\lambda\vec{k}} = \varepsilon_{\lambda\vec{k}}u_{\lambda\vec{k}}$)
5. Dies führt zu dem Ausdruck:

$$\frac{1}{V_{\mathsf{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}}\mathrm{d}^3r\; u^*_{\lambda_1\vec{k}}\frac{\hbar\vec{p}}{m_0}u_{\lambda_2\vec{k}} + \frac{\hbar^2}{m_0}\vec{k}\,\delta_{\lambda_1\lambda_2} + \frac{\varepsilon_{\lambda_1\vec{k}} - \varepsilon_{\lambda_2\vec{k}}}{V_{\mathrm{EZ}}}\int\limits_{\mathrm{EZ}}\mathrm{d}^3r\; u^*_{\lambda_1\vec{k}}\left(\nabla_{\vec{k}}u_{\lambda_2\vec{k}}\right) = \nabla_{\vec{k}}\varepsilon_{\lambda_2\vec{k}}\delta_{\lambda_1\lambda_2}$$

   und mit den obigen Definitionen und $\lambda_1 = \lambda_2$ (evt. auch schon vorher einsetzen) zur ersten Identität

6. Was ergibts sich für $\nabla\frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{\hbar}$ im Fall eines parabolischen Bandes ?

Bitte Rückseite beachten!$\longrightarrow$

(b) Fall: $\lambda_1 \neq \lambda_2$

1. Hier ist der Startpunkt die Gleichung $[H_0, \vec{r}] = -\frac{\hbar^2}{m_0}\nabla_{\vec{r}} = -\mathrm{i}\frac{\hbar\vec{p}}{m_0}$.
2. Beide Seiten in der Form $\int \mathrm{d}^3 r \varphi^*_{\lambda_1 \vec{k}_1}(\vec{r}) \ldots \varphi_{\lambda_2 \vec{k}_2}(\vec{r})$ integrieren.
3. Linke Seite: Den Hamiltonoperator wirken lassen; Definition der Blochfunktionen einsetzen und das Integral als Summe von Integralen über Elementarzellen mit $\vec{r} = \vec{R}_n + \vec{s}_n$ $\left(\sum_{\vec{R}_n} \cdots \frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}} \int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 s_n \cdots\right)$ schreiben, in denen $e^{\mathrm{i}\vec{k}\vec{s}_n}$ nicht variiert. Das Integral über eine Zelle läßt sich in die Form $\delta_{\lambda_1\lambda_2}\mathrm{const} + \delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\vec{r}_{\lambda_1\lambda_2}$ bringen
4. Rechte Seite: Summe über Elementarzelle betrachten; führt zu:

$$\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 s\, u^*_{\lambda_1\vec{k}}(\vec{s})\,\vec{p}\,u_{\lambda_2\vec{k}_2}(\vec{s})$$