Prof. Dr. Andreas Knorr
Dr. Alexander Carmele
Dr. Florian Wendler

8. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 27.06.2016 bis 10:00 Uhr in der Übung

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Zweiergruppen erfolgen.

Aufgabe 8 (15 Punkte): *Der quantenmechanische Strom*

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

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

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

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

2. Einsetzen der Definition der Blochfunktionen $\varphi_{\lambda\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}u_{\lambda\vec{k}}(\vec{r})\,e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$ 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 $\frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}}\mathrm{d}^3r u^*_{\lambda_1\vec{k}}(\vec{r})\,u_{\lambda_2\vec{k}}(\vec{r}) = \delta_{\lambda_1\lambda_2}$ verwendet werden, 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:

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

   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!⟶

(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 $\vec{r} = \vec{R}_n + \vec{s}$ $\left(\sum_{\vec{R}_n} \cdots \frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}} \int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 s \cdots\right)$ schreiben, in denen $e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{s}}$ nicht variiert. Das Integral über eine Zelle läßt sich in die Form $\delta_{\lambda_1\lambda_2}$const $+\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\vec{r}_{\lambda_1\lambda_2}$ bringen

4. Rechte Seite: Summe über Elementarzelle betrachten; führt zu:

$$\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 s \; u^*_{\lambda_1\vec{k}_1}(\vec{s})\,(\vec{p}/m_0)\; u_{\lambda_2\vec{k}_2}(\vec{s})$$