Aufgabenblatt 08, Abgabe: 25. 01. 2011

Aufgabe 13. Fast freie Elektronen (10 Punkte)

Betrachten Sie fast freie Elektronen im eindimensionalen Raum ($d = 1$) in einem *schwachen* Gitterpotential der Form $V(x) = v_0 \cos(\frac{2\pi}{a}x)$.

(a) Quantifizieren Sie in diesem Kontext *schwach*.

(b) Berechnen Sie für dieses Gitterpotential die Energiedispersionen $E_n(k)$ der verschiedenen Bänder in nicht-entarteter Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung. Für welche k-Werte ist diese Störungstheorie aufgrund von Bandentartung nicht anwendbar?

(c) Berechnen Sie die Dispersionsrelationen $E_n(k)$ der *unteren beiden* Bänder nahe der Entartungspunkte in entarteter Störungstheorie bis zur ersten Ordnung. Skizzieren Sie diese unteren beiden Bänder.

Aufgabe 14. Der Tensor der effektiven Masse (10 Punkte)

Die Schrödinger-Gleichung für die Bloch-Faktoren $u_{\mathbf{k}n}$ lautet bekanntlich $\hat{\mathrm{H}}^{(\mathbf{k})} u_{\mathbf{k}n} = E_n(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}n}$ mit dem Einteilchen-Hamilton-Operator $\hat{\mathrm{H}}^{(\mathbf{k})} = \frac{(\hat{\mathbf{p}}+\hbar\mathbf{k})^2}{2m_0} + U(\mathbf{x})$ und dem gitterperiodischen Potential $U(\mathbf{x})$. Folglich gilt $\hat{\mathrm{H}}^{(\mathbf{k}+\mathbf{q})} = \hat{\mathrm{H}}^{(\mathbf{k})} + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{q}\cdot(\hat{\mathbf{p}}+\hbar\mathbf{k}) + \frac{(\hbar\mathbf{q})^2}{2m_0}$, wobei man den ersten Term im rechten Glied für $\mathbf{q} \to \mathbf{0}$ als ungestörten Hamilton-Operator und die letzten beiden Terme als Störung ansehen kann. Zeigen Sie nun in der (üblichen) Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie zweiter Ordnung für den Tensor der effektiven Masse $M_n(\mathbf{k})$:

$$M_n(\mathbf{k})^{-1} \equiv \frac{\partial^2 E_n}{\partial(\hbar\mathbf{k})^2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{m_0}\mathbb{1}_d + \sum_{n' \neq n} \frac{\langle\hat{\mathbf{v}}\rangle_{nn'}^{(\mathbf{k})}\langle\hat{\mathbf{v}}\rangle_{n'n}^{(\mathbf{k})\mathrm{T}} + \langle\hat{\mathbf{v}}\rangle_{n'n}^{(\mathbf{k})}\langle\hat{\mathbf{v}}\rangle_{nn'}^{(\mathbf{k})\mathrm{T}}}{E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k})} \quad ,$$

wobei $\hat{\mathbf{v}} \equiv \hat{\mathbf{p}}/m_0$ und $\langle\mathcal{O}\rangle_{nn'}^{(\mathbf{k})} \equiv \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{x}\, \phi_{\mathbf{k}n}^* \mathcal{O} \phi_{\mathbf{k}n'}$ mit $\phi_{\mathbf{k}n} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u_{\mathbf{k}n}$ definiert wurden.