# Theorie der Kondensierten Materie I

Notiztitel 20.01.2011

## 4.3 $\vec{k}\vec{p}$-Störungsrechnung, effektiver Massentensor und Gruppengeschwindigkeit

Wir wollen nun die $\vec{k}$-Abhängigkeit der Bandstruktur insbesondere in der Umgebung von lokalen Maxima und Minima untersuchen. Dazu schreiben wir die DGL für die Bloch-Faktoren

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\vec{\nabla}+\vec{k}\right)^2+V(\vec{r})\right]u_{n\vec{k}}(\vec{r})=\varepsilon_n u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

um:
$$\left[\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\hbar}{m}(\vec{k}\cdot\vec{p})\right]u_{n\vec{k}}(\vec{r})=\left[\varepsilon_n(\vec{k})-\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\right]u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

und betrachten den Term $\vec{k}\cdot\vec{p}$ als Störung (was zunächst für $|\vec{k}|\ll|\vec{G}|$ gerechtfertigt ist).

In 0. Ordnung in $\vec{k}$ hat man eine übliche SG:

$$\left[\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+V(\vec{r})\right]u_{n\vec{0}}(\vec{r})=\varepsilon_n(\vec{0})u_{n\vec{0}}(\vec{r})$$

Für den Fall, dass keine Entartung vorliegt, kann man nun mit Rayleigh-Schrödinger-Störungsrechnung 2. Ordnung finden (siehe Aufgabe 14), mit $\langle\vec{r}|n\vec{k}\rangle\equiv u_{n\vec{k}}(\vec{r})$

$$\varepsilon_n(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \varepsilon_n(\vec{0}) + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n\vec{0}|\vec{k}\cdot\vec{p}|n'\vec{0}\rangle\langle n'\vec{0}|\vec{k}\cdot\vec{p}|n\vec{0}\rangle}{\varepsilon_n(\vec{0}) - \varepsilon_{n'}(\vec{0})}$$

$$= \varepsilon_n(\vec{0}) + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\alpha\alpha'} k_\alpha k_{\alpha'} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n\vec{0}|p_\alpha|n'\vec{0}\rangle\langle n'\vec{0}|p_{\alpha'}|n\vec{0}\rangle}{\varepsilon_n(\vec{0}) - \varepsilon_{n'}(\vec{0})}$$

Damit gilt für den Tensor der (inversen) effektiven Masse:

$$\left(\frac{1}{m^*(n)}\right)_{\alpha\alpha'} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_{\alpha'}}\bigg|_{\vec{k}=0}$$

$$= \frac{1}{m}\delta_{\alpha\alpha'} + \frac{2}{m^2} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n\vec{0}|p_\alpha|n'\vec{0}\rangle\langle n'\vec{0}|p_{\alpha'}|n\vec{0}\rangle}{\varepsilon_n(\vec{0}) - \varepsilon_{n'}(\vec{0})}$$

In 2. Ordnung gilt somit $\varepsilon_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(\vec{0}) + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\alpha'} \left(\frac{1}{m_n^*}\right)_{\alpha\alpha'} \hbar^2 k_\alpha k_{\alpha'}$

was den Ausdruck für freie Elektronen verallgemeinert.

Achtung: $\left(\frac{1}{m_n^*}\right)$ ist i. A. anisotrop und kann negative Eigenwerte haben.

Problem: für höhere Bänder entstehen die Extrema am $\Gamma$-Punkt ($\vec{k}=0$) durch Entartung, die obige Ableitung ist dann eigentlich nicht gültig!

Eine analoge Störungsrechnung kann für $\vec{k} \neq 0$ durchgeführt werden (siehe Aufgabe 14).

20.1.11

Bemerkung: die von freien Elektronen bekannte Beziehung $\vec{p}\,|\vec{k}\rangle = \hbar\vec{k}\,|\vec{k}\rangle$ findet in der schwächeren Form $\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}\langle\vec{k}|\vec{k}\rangle = \langle\vec{k}|\vec{p}|\vec{k}\rangle$ eine Entsprechung bei Elektronen im Gitter:

$$\nabla_{\vec{k}}\,\varepsilon_n(\vec{k}) = \frac{\hbar}{m}\langle\psi_{n\vec{k}}|\vec{p}\,|\psi_{n\vec{k}}\rangle$$

Die Blochfunktionen sind aber i. A. gerade keine Eigenzustände des Impulsoperators $\vec{p}$.

Trotzdem können wir $\frac{1}{\hbar}\nabla_{\vec{k}}\,\varepsilon_n(\vec{k})$ als Gruppengeschwindigkeit interpretieren. Dazu beschreiben wir ein Wellenpaket als Überlagerung von Blochfunktionen in der Umgebung eines festen $\vec{k}$:

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r},t) &= \sum_{\vec{\kappa}} a_\kappa\, \psi_{n(\vec{k}+\vec{\kappa})}(\vec{r})\, e^{-i\varepsilon_n(\vec{k}+\vec{\kappa})t/\hbar} \\ &= \sum_{\vec{\kappa}} a_\kappa\, u_{n(\vec{k}+\vec{\kappa})}(\vec{r})\, e^{i[(\vec{k}+\vec{\kappa})\vec{r} - \underbrace{\varepsilon_n(\vec{k}+\vec{\kappa})}_{\approx \varepsilon_n(\vec{k}) + \vec{\kappa}\nabla_{\vec{k}}\varepsilon_n(\vec{k})} t/\hbar]} \\ &\approx e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \varepsilon_n(\vec{k})t/\hbar)}\, u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \sum_{\kappa} a_\kappa\, e^{i\vec{\kappa}(\vec{r} - \nabla_{\vec{k}}\varepsilon_n(\vec{k})t/\hbar)}\end{aligned}$$

Der letzte Faktor entspricht einer Modulation, die sich mit der Geschwindigkeit $\frac{1}{\hbar}\nabla_{\vec{k}}\,\varepsilon_n(\vec{k})$ bewegt.