5. Dynamik von Kristallelektronen

bisher: stationäre Elektronenzustände

jetzt: Bewegung von Ladungsträgern $\rightarrow$ Ströme

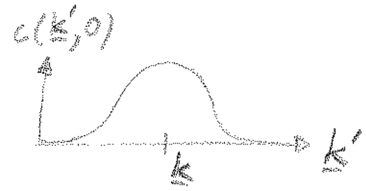
+ Streuung von Ladungsträgern $\rightarrow$ Transport (§6)
(Dämpfung $\hat{=}$ el. Widerstand)

Betrachte Wellenpakete aus Elektronen unter dem Einfluß elektrischer und magnetischer Felder

5.1 Freie Elektronen im elektr. u. magn. Feldern

AM §12 M §7, 8

Lokalisiertes Wellenpaket durch Überlagerung ebener Wellen $\varphi(\underline{k}',\underline{r}) \sim e^{i\underline{k}'\underline{r}}$:



$$\psi(\underline{r},t) = \sum_{\underline{k}'} c(\underline{k}',t)\,\varphi(\underline{k}',\underline{r})$$

a) zeitabhängige Schrödingergl. mit konst. elektr. Feld $\underline{\mathcal{E}} = -\nabla\phi$:

$$\left(H_0 - e\phi\right)\psi(\underline{r},t) = i\hbar\dot{\psi}(\underline{r},t), \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

$e > 0$

Ehrenfest-Theorem:

$$\frac{d}{dt}\langle \underline{r}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\underline{r},H]\rangle = \langle \nabla_p H\rangle = \frac{\langle \underline{p}\rangle}{m}$$

$$\frac{d}{dt}\langle \underline{p}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\underline{p},H]\rangle = -\langle \nabla_r H\rangle = e\langle \nabla_r \phi\rangle = -e\underline{\mathcal{E}}$$

$\langle \underline{r}\rangle$ Schwerpunkt des Wellenpakets

$\langle \underline{p}\rangle = m\underline{v}_g$, $\underline{v}_g = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E(\underline{k})$ Gruppengeschwindigkeit

Mit $E(\underline{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (einzelne ebene Welle, $c(\underline{k}',t) = \delta_{\underline{k}\underline{k}'} e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$) folgt

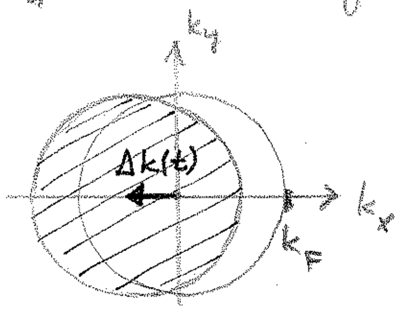
$$\langle \underline{p} \rangle = \hbar \underline{k} = m \underline{v}_g$$

$$\frac{d}{dt}\langle \underline{r} \rangle = \underline{v}_g = \frac{\hbar \underline{k}}{m}$$

$$\frac{d}{dt}\underline{k} = -\frac{e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar} \implies \boxed{\underline{k}(t) = \underline{k}(0) - \frac{e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar} t}$$ ≙ semiklass. Dynamik

„beschleunigte ebene Welle"

Elektronengas:



starre Verschiebung der Fermikugel: $\Delta \underline{k} = -\frac{e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar} t$

b) <u>konstantes Magnetfeld</u> ($\underline{B} = (0, 0, B)$) (räuml. + zeitl. konstant)

Vektorpotential $\underline{A} = (0, Bx, 0)$

Hamilton-op. $H = \frac{1}{2m}(\underline{p} + e\underline{A})^2 = \frac{1}{2m}\underline{P}_{kin}^2$ ($\underline{P}_{kin}$ kinet. Impuls)

Problem: $[P_x^{kin}, P_y^{kin}] \neq 0 \implies$ Komponenten von $\underline{P}_{kin}$ können nicht als Achsen eines klass. Raumes zur Beschreibung der Elektronenbewegung (≙ $\underline{k}$ für $\underline{B} = 0$) dienen.

Aber: Für kleine $\underline{B}$ kann das Elektron <u>näherungsweise</u> zur jeder Zeit t durch einen Punkt im $\underline{P}_{kin}$-Raum beschrieben werden $\implies$ semiklass. Dynamik

Semiklass. Dynamik (gilt nach Ehrenfest für Erwartungswerte):

$$\frac{d}{dt}\langle \underline{r}\rangle = \frac{1}{m}\langle \underline{P}_{kin}\rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle \underline{p}\rangle = -e\frac{d}{dt}\langle \underline{r}\rangle\times\underline{B} - e\frac{d}{dt}\langle \underline{A}\rangle$$

$$\langle \underline{P}_{kin}\rangle = m\underline{v} = \hbar\underline{k} + e\underline{A}$$ ($\underline{v}$ klass. Teilchengeschwindigkeit)

$$\frac{d}{dt}\langle \underline{P}_{kin}\rangle = -\frac{e}{m}\langle \underline{P}_{kin}\rangle \times \underline{B} \quad \Longleftrightarrow \quad \boxed{m\dot{\underline{v}} = -e\underline{v}\times\underline{B}}$$

beschreibt Kreisbewegung (in x-y Ebene):

$$\left.\begin{aligned} \dot{v}_x &= -\omega_c v_y \\ \dot{v}_y &= \omega_c v_x \\ \dot{v}_z &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \ddot{v}_x + \omega_c^2 v_x = 0$$

Zyklotronfrequenz $\omega_c := \frac{e}{m}B$

c) Semiklass. Bewegung eines freien El. im elektr. + magn. Feld:

$$\boxed{\hbar\dot{\underline{k}} = -e\underline{\mathcal{E}} - e\underline{v}\times\underline{B}}$$

Lorentz-Kraft

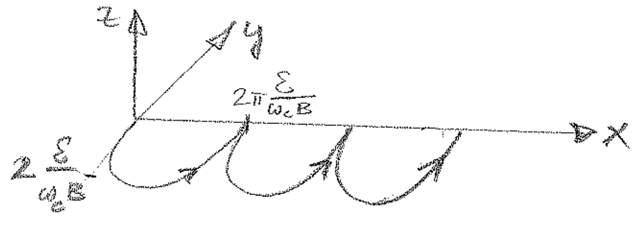
klass. Bahn (ohne Streuung) für $\underline{\mathcal{E}} \perp \underline{B}$: $\quad \underline{\mathcal{E}} = (0, \mathcal{E}, 0)$, $\quad \underline{B} = (0, 0, B)$

$$\left.\begin{aligned} \dot{v}_x &= -\omega_c v_y \\ \dot{v}_y &= \omega_c v_x - \omega_c \frac{\mathcal{E}}{B} \\ \dot{v}_z &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \ddot{v}_x + \omega_c^2 v_x = \omega_c^2 \frac{\mathcal{E}}{B}$$

Lösung zu Anfangsbed. $v_{x0} = v_{y0} = 0$: $\quad v_x = \frac{\mathcal{E}}{B}(1-\cos\omega_c t)$, $\quad v_y = -\frac{\mathcal{E}}{B}\sin\omega_c t$

$$\Rightarrow \quad x(t) = \frac{\mathcal{E}}{\omega_c B}(\omega_c t - \sin\omega_c t)$$
$$y(t) = -\frac{\mathcal{E}}{\omega_c B}(1-\cos\omega_c t)$$

Zykloide



Ü: $v_{x0}, v_{y0} \neq 0 \Rightarrow$ verlängerte / verkürzte Zykloide (komplexe Darstell. $z = v_x + iv_y$, $\mathcal{E} = \mathcal{E}_x + i\mathcal{E}_y$)

5.2 Semiklassische Bewegung von Kristallelektronen

AM §12, M §21

Betrachte Wellenpakete aus Blochfunktionen:

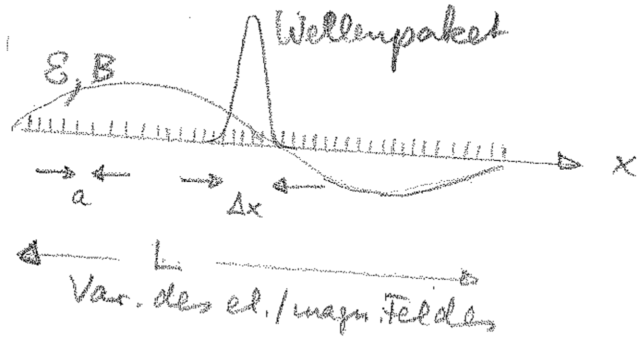
$$\psi_n(\underline{r},t) = \sum_{\underline{k}'} g(\underline{k}')\, \psi_{n\underline{k}'}(\underline{r})\, \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(\underline{k}')t\right) \quad \text{(Wannierfkt.)}$$

$$g(\underline{k}') \approx 0 \quad \text{für } |\underline{k}'-\underline{k}| > \Delta k \quad , \text{ geg. Band } n$$

$$\Delta k \ll 1/a \quad (a \text{ Gitterkonst.; Dim. der Brillouinzone}) \Rightarrow E_n(\underline{k}') \approx E_n(\underline{k})$$

Gruppengeschwind. $\underline{v}_g = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\underline{k}} E_n(\underline{k})$ = semiklass. Teilchengeschwind.

<u>Gültigkeitsbedingungen für das semiklass. Modell:</u>



$$a \ll \Delta x \ll L$$

a) <u>Wirkung des elektrischen Feldes auf Blochwelle</u>

homog. el. Feld $\underline{\mathcal{E}} = -\nabla\phi(\underline{r})$: $\phi = -\underline{\mathcal{E}}.\underline{r}$

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + V(\underline{r})}_{H_0} - e\phi(\underline{r}) = H_0 + e\underline{\mathcal{E}}.\underline{r}$$

Sei $\psi(\underline{r}, t=0) = \psi_{n\underline{k}_0}(\underline{r})$ Bloch-Eigenzustand mit $\underline{k}_0$

$$\left(T_{\underline{R}}\psi_{n\underline{k}_0} = e^{i\underline{k}_0\underline{R}}\psi_{n\underline{k}_0}\right)$$

$$\Rightarrow \psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_{n\underline{k}_0} \overset{t \text{ klein}}{\approx} \left(1-\frac{i}{\hbar}Ht\right)\psi_{n\underline{k}_0}$$

Prüfe, ob $\psi(t)$ Blochzustand ist:

$$T_{\underline{R}}\psi = T_{\underline{R}}\left(1-\frac{i}{\hbar}Ht\right)\psi_{n\underline{k}_0} = \left(1-\frac{i}{\hbar}Ht\right)T_{\underline{R}}\psi_{n\underline{k}_0} - \frac{i}{\hbar}t\left[T_{\underline{R}}, H\right]\psi_{n\underline{k}_0}$$

Berechnung des Kommutators:

$$[T_R, H] = \underbrace{[T_R, H_0]}_{0} + [T_R, e\underline{\mathcal{E}}\underline{r}] = e\underline{\mathcal{E}}.(\underline{r}+\underline{R})T_R - e\underline{\mathcal{E}}.\underline{r}\,T_R$$
$$= (e\underline{\mathcal{E}}.\underline{R})T_R$$

Also ist $T_R\psi(t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}Ht - \frac{i}{\hbar}e\underline{\mathcal{E}}.\underline{R}t\right)T_R\psi_{nk_0}(\underline{r})$

$$\overset{O(t)}{\approx}\left(1 - \frac{i}{\hbar}Ht\right)\left(1 - i\frac{e\underline{\mathcal{E}}.\underline{R}}{\hbar}t\right)e^{i\underline{k}_0\underline{R}}\psi_{nk_0}(\underline{r})$$

$$\approx e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\, e^{-i\frac{e\underline{\mathcal{E}}.\underline{R}}{\hbar}t}\, e^{i\underline{k}_0\underline{R}}\psi_{nk_0}(\underline{r})$$

$$= e^{i\left(\underline{k}_0 - \frac{e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar}t\right)\underline{R}}\,\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_{nk_0}(\underline{r})}_{\psi(t)}$$

d.h. für infinitesimale t ist $\psi(t)$ Eigenzustand zu T_R zum Eigenwert $\underline{k} = \underline{k}_0 - \frac{e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar}t$

(„beschleunigte" Blochwelle mit $\hbar\underline{k} = \hbar\underline{k}_0 - e\underline{\mathcal{E}}t$)

Die Dynamik wird also beschrieben durch

$$\boxed{\hbar\dot{\underline{k}} = -e\underline{\mathcal{E}}}$$

(Interbandübergänge vernachlässigbar für kleine Felder)

NB: Für bel. Fkt. $\psi(\underline{r})$ gilt nach Taylor

$$T_R\psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r}+\underline{R}) = \psi(\underline{r}) + (\underline{R}.\underline{\nabla})\psi(\underline{r}) + \tfrac{1}{2}(\underline{R}.\underline{\nabla})^2\psi(\underline{r}) + \ldots = e^{\underline{R}.\underline{\nabla}}\psi(\underline{r})$$

Also: $\boxed{T_R = e^{\underline{R}.\underline{\nabla}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\underline{R}.\underline{p}\right)}$

Es gilt $[e^A, B] = \left([A,B] + \frac{1}{2}[A,[A,B]] + \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \ldots\right)e^A$ Fick S.124

Mit $[\underline{p}, \phi(\underline{r})] = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\phi = -\frac{\hbar}{i}\underline{\mathcal{E}}$, $[\underline{p}, \mathcal{E}_j(\underline{r})] = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\mathcal{E}_j$ folgt:

$$[T_R, -\phi(\underline{r})] = \left(\underline{\mathcal{E}}.\underline{R} + \tfrac{1}{2}(\underline{R}.\underline{\nabla})\,\underline{\mathcal{E}}.\underline{R} + \ldots\right)T_R$$

Korrektur für inhom. Felder!

(folgt auch aus Fourier-Entw.
$T_R O(\underline{r}) = T_R\int d^3k\, e^{ikr}\hat{O}(\underline{k}) = \int d^3k\, e^{ikr}\underbrace{e^{ikR}\hat{O}(\underline{k})}\,T_R = \left(e^{\underline{R}.\underline{\nabla}}O(\underline{r})\right)T_R$)

b) Wirkung des Magnetfeldes auf Blochwelle

$$H = \frac{1}{2m}(\underline{p} + e\underline{A})^2 + V(\underline{r}) = \frac{1}{2m} P_{kin}^2 + V(\underline{r})$$

Forderung: Eichinvarianz der Translationen bei Umeichung

$$\left.\begin{array}{l} \underline{A}' = \underline{A} + \underline{\nabla} f(\underline{r}) \\ \psi'(\underline{r}) = \psi(\underline{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} e f(\underline{r})\right) \end{array}\right\} \Rightarrow (T_{\underline{R}}\psi)' \overset{!}{=} T_{\underline{R}}(\psi')$$

↯ Nicht erfüllt für $T_{\underline{R}} = e^{\frac{i}{\hbar}\underline{R}.\underline{p}}$: $(T_{\underline{R}}\psi)' = \underbrace{\psi(\underline{r}+\underline{R})}_{T_R\psi = \tilde\psi(\underline{r})} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} e f(\underline{r})\right)$

$$T_{\underline{R}}(\psi') = \psi(\underline{r}+\underline{R}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} e f(\underline{r}+\underline{R})\right)$$

Definiere: $\boxed{T_{\underline{R}}^A := \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\underline{R}.\underline{P}_{kin}\right\} = \exp\left\{\underline{R}.(\underline{\nabla} + \frac{i}{\hbar} e\underline{A})\right\}}$

Eichinvarianz der Beziehung $\tilde\psi = T_R^A \psi \iff \tilde\psi' = T_R^{A'}\psi'$:

also: $\boxed{(T_R^A\psi)' = T_R^{A'}\psi'}$

Beweis: $e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}$ falls $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$

$$\frac{i}{\hbar}[\underline{P}_{kin}, f] = \underline{\nabla} f \quad ; \quad [f, \underline{\nabla} f] = [\underline{P}_{kin}, \underline{\nabla} f] = 0$$

• Beschränkung auf konst. $\underline{B}$, d.h. lineare $A(\underline{r})$ und $f(\underline{r})$

$$T_R^{A'}\psi' = e^{\underline{R}.(\underline{\nabla} + \tilde{\underline{A}} + \underline{\nabla}\tilde f)} e^{-\tilde f}\psi = e^{\underline{R}.(\nabla + \tilde{\underline{A}} + \nabla\tilde f) - \tilde f - \frac{1}{2}\underbrace{[\underline{R}(\underline{\nabla} + \tilde{\underline{A}} + \underline{\nabla}\tilde f), \tilde f]}_{\underline{R}.\underline{\nabla}\tilde f}}\psi$$

$$= e^{\underline{R}.(\underline{\nabla} + \tilde{\underline{A}}) - \tilde f + \frac{1}{2}\underline{R}.\underline{\nabla}\tilde f}\psi$$

$$(T_R^A\psi)' = e^{-\tilde f} e^{\underline{R}.(\underline{\nabla} + \tilde{\underline{A}})}\psi = e^{-\tilde f + \underline{R}.(\underline{\nabla} + \tilde{\underline{A}}) - \frac{1}{2}\underbrace{[\tilde f, \underline{R}(\underline{\nabla} + \tilde{A})]}_{-\underline{R}.\underline{\nabla}\tilde f}}\psi$$

$$= e^{-\tilde f + \underline{R}(\underline{\nabla} + \tilde{\underline{A}}) + \frac{1}{2}\underline{R}.\underline{\nabla}\tilde f} \qquad \square \qquad \left(\begin{array}{l}\tilde A := \frac{i}{\hbar} e A \\ \tilde f := \frac{i}{\hbar} e f\end{array}\right)$$

Weiter gilt: $[T_R^A, V] = 0$ Translat. invarianz des period. Pot.

Beweis: $V(\underline{r}) = \sum_{\underline{G}} e^{i\underline{G}\underline{r}} V_G$, $\underline{G}\underline{R} = 2\pi m$, $m \in \mathbb{Z}$

$$\frac{i}{\hbar}[\underline{R}.\underline{P}_{kin}, i\underline{G}\underline{r}] = i\underline{G}.\underline{R} = 2\pi i m$$

$$\Rightarrow [T_R^A, e^{i\underline{G}\underline{r}}] = e^{\frac{i}{\hbar}\underline{R}.\underline{P}_{kin}} e^{i\underline{G}\underline{r}} - e^{i\underline{G}\underline{r}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{R}.\underline{P}_{kin}} = e^{\frac{i}{\hbar}\underline{R}.\underline{P}_{kin} + i\underline{G}\underline{r}}\Big(\underbrace{e^{+\frac{i}{2}2\pi m}}_{\pm 1} - \underbrace{e^{-\frac{i}{2}2\pi m}}_{\pm 1}\Big)$$

$$= 0 \qquad \square$$

<u>Aber</u>: $[T_R^A, P_{kin}^2] \neq 0$, d.h. es existiert für $B \neq 0$ kein gemeinsames System von Eigenfkt. für alle T_R^A und H, es gilt sogar i.a. nicht einmal $[T_{R_1}^A, T_{R_2}^A] = 0$

Es gilt: $$[(\nabla+\tilde{A})_i, (\nabla+\hat{A})_j] = [\nabla_i, \hat{A}_j] + [\tilde{A}_i, \nabla_j] = \nabla_i \tilde{A}_j - \nabla_j \tilde{A}_i = (\nabla \times \tilde{A})_k = \tilde{B}_k$$

$$\Rightarrow \quad [P_{kin}^i, P_{kin}^j] = \frac{e\hbar}{i} \sum_k \epsilon_{ijk} B_k$$

$$[P_{kin}^i, \underline{P}_{kin}^2] = \sum_{j=1}^{3} \Big(\underbrace{P_{kin}^i P_{kin}^j P_{kin}^j - P_{kin}^j P_{kin}^i P_{kin}^j}_{[P_{kin}^i, P_{kin}^j] P_{kin}^j = \frac{e\hbar}{i} \sum_k \epsilon_{ijk} B_k P_{kin}^j} + \underbrace{P_{kin}^j P_{kin}^i P_{kin}^j - P_{kin}^j P_{kin}^j P_{kin}^i}_{P_{kin}^j [P_{kin}^i, P_{kin}^j] = \frac{e\hbar}{i} \sum_k \epsilon_{ijk} P_{kin}^j B_k} \Big)$$

$$= \frac{2e\hbar}{i} \sum_{jk}^{3} \epsilon_{ijk} P_{kin}^j B_k \qquad (\text{für konst. } B \text{ !})$$

$$[\underline{P}_{kin}, P_{kin}^2] = \frac{2e\hbar}{i} \underline{P}_{kin} \times \underline{B}$$

Beitrag des gitterperiod. Pot. V

$$\Rightarrow [\underline{P}_{kin}, H] = \frac{\hbar}{i} \frac{e}{m} \underline{P}_{kin} \times \underline{B} + [\underline{P}_{kin}, V]$$

Heisenberg-Bild: $$\boxed{\frac{d}{dt} \underline{P}_{kin} = -\frac{i}{\hbar} [\underline{P}_{kin}, H] = -\frac{e}{m} \underline{P}_{kin} \times \underline{B}} - \underline{\nabla} V$$ Gitterkraft

Erwartungswerte: $$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \underline{P}_{kin} \rangle = -\frac{e}{m} \langle \underline{P}_{kin} \rangle \times \underline{B} - \langle \underline{\nabla} V \rangle} \qquad \langle \underline{P}_{kin} \rangle = m \underline{v}_g$$

(Lorentzkraft)

Wie im Falle des elektrischen Feldes kann man zwar berechnen:

$$[T_R^A, H] = [e^{\frac{i}{\hbar} \underline{R} \cdot \underline{P}_{kin}}, H] = \frac{1}{2m} [e^{\overbrace{\frac{i}{\hbar} \underline{R} \cdot \underline{P}_{kin}}^{}}, \underbrace{P_{kin}^2}_{\hat{B}}] = \frac{1}{2m} \Big(\underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{} + \frac{1}{2} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] \Big) e^{\hat{A}}$$

with $\hat{A} = \frac{i}{\hbar} \underline{R} \cdot \underline{P}_{kin}$; $\quad 2e\underline{R} \cdot (\underline{P}_{kin} \times \underline{B}) = 2e \underline{P}_{kin} \cdot (\underline{B} \times \underline{R})$

$$= \Big(\frac{e}{m} \underline{R} \cdot (\underline{P}_{kin} \times \underline{B}) + \frac{e^2}{2m} R_\perp^2 B^2 \Big) T_R^A$$

(vgl. Madelung Bd. I, (21.4))

Da aber $\psi(t)$ keine Eigenfkt. von $\underline{P}_{kin}$ ist, ist ψ auch keine Eigenfkt. von T_R^A (außer wenn $\underline{R} \parallel \underline{B}$)! Das Argument von S. 105a geht also nicht (wie bei Madelung angenommen!)

<u>Grund</u>: qm. Unschärfe des Mittelpktes der Zyklotronbahn $\perp \underline{B}$ (analog freies Elektron $[P_{kin}^x, P_{kin}^y] \neq 0$ S. 103)