4. Dynamika Blochových elektrónov

A) Wannierove funkcie: $$\boxed{a_n(\bar{r}-\bar{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{-i\bar{k}\cdot\bar{R}}\,\psi_{nk}(\bar{r})} \qquad (1)$$

Blochova funkcia

inverzná transformácia:

$$\psi_{nk}(\bar{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_R e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}}\,a_n(\bar{r}-\bar{R})$$

hrajú úlohu koncentrovaných vln. funkcií; v izolantoch sú dobre lokalizované

Naozaj:

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_R e^{ik\cdot R}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_p e^{-ip\cdot R}\psi_{np}(\bar{r}) = \sum_p\left(\frac{1}{N}\sum_R e^{i(k-p)\cdot R}\right)\psi_{np}(r) = \psi_{nk}(r)$$

Ľahko vidno

$$\boxed{\int d^3r\; a_n^*(r-R)\,a_m(r-R') = \delta_{nm}\,\delta_{RR'}}$$

(pouzi (1) a ortonormálnosť Blochových funkcií)

B) Časový vývoj vlnových balíkov

$$\boxed{\psi(\bar{r},t) = \sum_{nR} f_n(R,t)\,a_n(r-R)} \qquad (2)$$

hľadáme rovnicu pre tieto koeficienty

dosadíme do $\boxed{i\hbar\dot{\psi} = H\psi}$

kde $H = H_0 + U(\bar{r},t)$

H_0 – neporušený kryštál, $U(\bar{r},t)$ – porucha

Ukážme najprv $$\boxed{H_0\,a_n(r-R) = -\sum_{R'} t_n(R-R')\,a_n(r-R')}$$

kde $$\boxed{\begin{aligned} t_n(\rho) &= -\frac{1}{N}\sum_k e^{-ik\cdot\rho}\,\varepsilon_n(k) \\ \varepsilon_n(k) &= -\sum_\rho e^{ik\cdot\rho}\,t_n(\rho)\end{aligned}}$$

Naozaj: $H_0\, a_n(r-R) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{-ik\cdot R}\, \mathcal{E}_n(k)\, \psi_{nk}(r)$ vyjadrit cez Wanniera.

$$= \sum_{R'} \underbrace{\frac{1}{N}\sum_k e^{ik(R'-R)}\mathcal{E}_n(k)}_{-t_n(R-R')}\; a_n(r-R') \quad \text{qed}$$

Dosadíme do $i\hbar\dot{\psi} = H\psi$ rozvoj (2)

Projektujme $\int d^3r\, a_n^*(r-R)$ obe strany:

$$\boxed{i\hbar \dot{f}_n(R,t) = \sum_{R'}\Big[-t_n(R'-R)f_n(R') + \sum_{n'} U_{nn'}(R,R')f_{n'}(R')\Big]}$$

nemiešá pásový index n!

$$\boxed{U_{nn'}(R,R') = \int d^3r\, a_n^*(r-R)\,U(r)\,a_{n'}(r-R')} \quad (3)$$

Predpoklad: $U(\bar{r})$ sa mení pomaly

$$\longrightarrow \boxed{U_{nn'}(R,R') \approx U(R)\,\delta_{nn'}\,\delta_{RR'}}$$

Potom

$$\boxed{i\hbar \dot{f}_n(R,t) = -\sum_{R'} t_n(R'-R)f_n(R') + U(R)f_n(R)}$$ jednopásová rovnica!

$$\mathcal{E}_n(k) = -\sum_\rho t_n(\rho)e^{ik\cdot\rho} \longrightarrow \mathcal{E}_n(-i\bar{\nabla}) = -\sum_\rho t_n(\rho)\,e^{\bar{\rho}\cdot\bar{\nabla}}$$

Taylorov rozvoj: $e^{\bar{\rho}\cdot\bar{\nabla}} f(\bar{R}) = f(\bar{R}+\bar{\rho})$

Preto $\mathcal{E}_n(-i\bar{\nabla})f_n(R) = -\sum_\rho t_n(\rho)f_n(\bar{R}+\bar{\rho})$

dosadíme sem!

$$\boxed{i\hbar \dot{f}_n(R,t) = \mathcal{E}_n(-i\bar{\nabla})f_n(R) + U(R)f_n(R)}$$

$$\boxed{i\hbar \dot{f}(\bar{r},t) = H_{eff}\, f(\bar{r},t)} \quad \text{kde} \quad \boxed{H_{eff} = \mathcal{E}_n\Big(\frac{\bar{p}}{\hbar}\Big) + U(\bar{r})}$$

f: obálková vlnová funkcia
mení sa pomaly na škále medzir. vzdialenosti

pomocné výpočty: $[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$

$[r_i, f(p)] = i\hbar \dfrac{\partial f}{\partial p_i}$ ... plynie z $[r_i, p_i^n] = n i\hbar p_i^{n-1}$
(dôkaz indukciou)

Pohybové rovnice:

$$\dot{\vec p} = \frac{1}{i\hbar}[\vec p, H_{eff}] = \frac{1}{i\hbar}[\vec p, U(\vec r)] = -\vec\nabla U = \vec F$$

$$\dot{\vec r} = \frac{1}{i\hbar}[\vec r, H_{eff}] = \frac{1}{i\hbar}[\vec r, \varepsilon_n(\tfrac{\vec p}{\hbar})] = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_n(\vec k)}{\partial \vec k}$$

Teda

$$\boxed{\begin{aligned} \vec v_k &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_n(\vec k)}{\partial \vec k} \\ \dot{\vec p} &= \vec F = e(\vec E + \vec v_k \times \vec B) \end{aligned}}$$

túto časť sme neukázali

kváziklasická dynamika elektrónov; platí pre pomaly premenlivé vonkajšie polia $\rightarrow$ slabé polia

C) Tenzor efektívnej hmotnosti

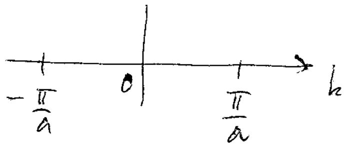
$$\dot v_i = \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}\frac{dk_j}{dt} \longrightarrow \boxed{\dot v_i = (m^{-1})_{ij} F_j}$$

$$F_j = \hbar \dot k_j \qquad \boxed{(m^{-1})_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}}$$

v blízkosti maxima pásu: $m < 0$!

D) Blochove oscilácie: uvažujme pre jednoduchosť 1D kryštál mriežkovej konštanty a; elektrické pole E

$\hbar \dot k = eE$



periodický pohyb v k-priestore s periódou τ_E

$$\frac{2\pi/a}{\tau_E} = \frac{eE}{\hbar} \longrightarrow \boxed{\tau_E = \frac{h}{eEa}}$$

Periodickému pohybu v k-priestore zodpovedá periodický pohyb v r-priestore:

$$x(t+\tau_E) = x(t) + \underbrace{\frac{1}{\hbar}\int_0^{\tau} dt \frac{d\varepsilon}{dk}}$$

$$= \frac{1}{\hbar}\int_{k_0}^{k_0+2\pi/a} \frac{dt}{dk}\frac{d\varepsilon}{dk}\, dk = \frac{1}{eE}\int_{k_0}^{k_0+\frac{2\pi}{a}} \frac{d\varepsilon}{dk}\, dk = 0 \quad \text{qed}$$

Bohr-Sommerfeldova podmienka kvantovania

$$\oint p\,dx = (n+\gamma)\, 2\pi\hbar$$

celé číslo — fázová korekcia (konšt.)

$$(n+\gamma)2\pi\hbar = \int_0^{\tau} p\dot{x}\, dt = \underbrace{[p\,x]_0^{\tau_E}}_{0} - \int_0^{\tau_E}\dot{p}\, x\, dt = -eE\tau_E\langle x\rangle_n$$

↳ stredná hodnota $\langle x\rangle$ cez 1 periódu

Teda rozdiel medzi susednými $\langle x\rangle_n$:

$$\boxed{\Delta x = \frac{2\pi\hbar}{eE\tau_E}} \longrightarrow \boxed{\Delta x = a}$$

... lokalizované vlnové funkcie s rozdielom susedných energií

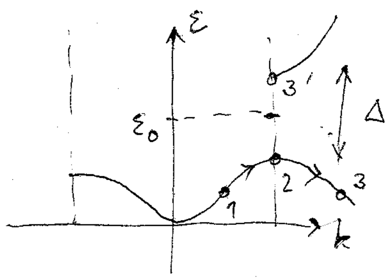
$$\boxed{\Delta\varepsilon = eEa}$$

realizuje sa pre $\boxed{\tau_E < \tau}$ ← Wannier-Starkov rebrík

τ — rozptylový čas

E) Zenerovo tunelovanie:

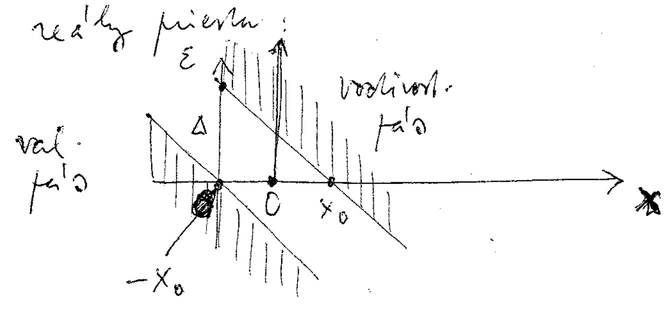
do akých veľkých polí platí jednopásové priblíženie?



vo vonk. poli pohyb $1 \to 2 \to 3$

nenulová amplitúda pre $1 \to 2 \to 3'$

reálny priestor:



$$eEx_0 = \frac{\Delta}{2} = V$$

elektrón musí tunelovať cez klasicky zakázanú oblasť $\langle -x_0, x_0\rangle$

pravdepodobnosť: P

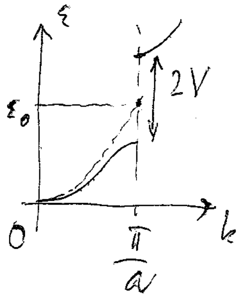
WKB priblíženie : $\boxed{P \approx e^{-2\int_{-x_0}^{x_0} dx\, \varkappa(x)}}$

do prefaktora

klasicky dov. oblasť : $\psi \sim e^{ikx}$

klasicky zak. oblasť : $\psi \sim e^{-\varkappa x}$; $\varkappa$ sa môže (pomaly) meniť s x

<u>Výpočet $\varkappa$</u> :



pre $k = \frac{\pi}{a}$ a $\boxed{\varepsilon_0 - V < \varepsilon < \varepsilon_0 + V}$

uvažujme riešenie

$$\psi(x) = c_+ e^{i\frac{\pi}{a}x - \varkappa x} + c_- e^{-i\frac{\pi}{a}x - \varkappa x}$$

Viď priblíženie takmer voľných elektrónov, prednáška 2 :

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \qquad \begin{pmatrix} \varepsilon_+ & V \\ V & \varepsilon_- \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon_\pm = \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m} \pm \frac{\hbar^2}{2m} i\varkappa \frac{\pi}{a}$$

vl. čísla : $(\varepsilon_+ - \varepsilon)(\varepsilon_- - \varepsilon) = V^2 \longrightarrow \frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m} = \sqrt{(\varepsilon+\varepsilon_0)^2 + V^2 - (\varepsilon-\varepsilon_0)^2} - (\varepsilon+\varepsilon_0)$

$$\boxed{\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m} \approx \frac{V^2 - (\varepsilon-\varepsilon_0)^2}{4\varepsilon_0}}$$

v bode $x = -x_0$: $\varepsilon = \varepsilon_0 - V$

$x = +x_0$: $\varepsilon = \varepsilon_0 + V$

$\longrightarrow \varepsilon(x) = \varepsilon_0 + eEx$

Potom

$$P \approx \exp\left[-2\int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2\varepsilon_0}\left(V^2 - e^2E^2x^2\right)}\right] = \boxed{e^{-\frac{\pi^2}{8}\frac{\Delta^2}{eEa\cdot\varepsilon_0}}}$$

pravdepodobnosť Zenerovho tunelovania

Jednopásové priblíženie funguje, ak

$$\boxed{eEa \ll \frac{\Delta^2}{\varepsilon_0}}$$

Teda podmienka pozorovateľnosti Wannier-Starkovho rebríka je

$$\boxed{\frac{\hbar}{\tau} \ll eEa \ll \frac{\Delta^2}{\varepsilon_0}}$$