BLOCHOVE OSCILACIJE
Mitja Eržen
18.1.12008

1.Naloga:
Imamo elektrone v periodičnem 1D kristalu. Kristal postavimo v električno polje, kateri je vzporeden z našim kristalom.
Zanima nas, kako se te elektroni gibljejo(x(t)), dispercija(ε) in polarizacijo(P). Omeniti moramo, da elektrone obravnavamo v kvaziklasičnem približku.

2.Račun:
Za elektron v električnem polju velja:

$$\frac{h}{2\pi}\dot{\vec{k}} = e\vec{E} \rightarrow \int_0^t \rightarrow k(t) = k(0) - \frac{2\pi e}{h}Et$$

Ker imamo 1D mrežo, nam ni več potrebno pisati vektorskih znakov.
Disperzijo pa izračunamo tako, da vzamemo približek tesne vezi:

$$\varepsilon(k) = E_s - \beta - \sum_{n.n.} \gamma(R)\cos(kR)$$

To je vsota do najbližjih sosedov(n.n.= nearest neighbours) in kjer je $\gamma(R)$ prekrivalni integral, R pa oddaljenost do soseda, ki je v našem primeru a.Razlika prvih dveh členov E_s-β je enaka 0, ker je odvisno kako vzamemo izhodišče naše energije.Pravzaprav ta del nas tako ali tako ne zanima, ker v naslednjem delu odvajamo funkcijo in se tega dela znebimo.
Potem dobimo:

$$\varepsilon(k) = -2\gamma\cos(ka)$$

kjer je a mrežna razdalja oziroma razdalja med atomi v kristalu.2 pa dobimo od tega, ker upoštevamo 2 soseda(levo,desno).
Zdaj lahko dobimo x in sicer iz:

$$\dot{x} = \frac{d\varepsilon}{dk}\frac{2\pi}{h} = \frac{2\gamma a 2\pi}{h}\sin[k(t)a]$$

Če integriramo potem dobimo:

$$x(t) = x(0) + \frac{2\gamma}{eE}(\cos[k(0)a - \frac{eEa2\pi}{h}t] - 1)$$

Če izbreremo x(0)=0 in k(0)=0, dobimo:

$$x(t) = \frac{2\gamma}{eE}(\cos[-\frac{eEa2\pi}{h}t] - 1)$$

$$\omega_b = \frac{eEa2\pi}{h}$$

kjer je ω_b Blochova frekvenca. Vidimo, da je gibanje elektrona v električnem polju v 1D kristalu harmonično, medtem ko pa se prost elektron v E giblje enakomerno pospešeno.

Zdaj pa izračunajmo še polarizacijo.Seštejemo vse elektrone v pasu. Se pravi od $-k_f$ pa do k_f. To je fermijev valovni vektor, kateri je meja do kje je pas še zapolnjen.
Velja:

$$P(t) = \sum_k -ex_k(t) = konst - \sum_k \frac{2\gamma}{E}\cos(ka - \omega_b t)$$

Zdaj vsoto prevedemo na integral in dobimo:

$$P(t) = konst - \frac{L}{2\pi}\int_{-kf}^{kf}\frac{2\gamma}{E}\cos(ka - \omega_b t)dk$$

$$P(t) = konst - \frac{2L}{\pi}\frac{\gamma}{E}\sin(ka)\cos(\omega_b t)$$

Dobimo zdaj P(t). Zdaj pa pa odštejemo med sabo P(t) in P(0), tako se bomo znebili tudi konstante, ki nas ne zanima. Tako dobimo rezultat:

$$\frac{P(t)}{L} = \frac{P(0)}{L} - \frac{2\gamma}{\pi E a}\sin(k_f a)[\cos(\omega_b t) - 1]$$

Če pogledamo kako Blochove oscilacije odvisne od zasedenosti pasu vidimo, da je amplituda največja, kadar je pas samo pol zaseden in najmanjša, kadar je prazen ali pa čisto zaseden. Na spodnjem gradu se to vidi: