Tarea 12

1.
En clase derivamos el hamitoniano k dot p

$$\left[-\frac{\hbar^2\boldsymbol{\nabla}^2}{2m}+\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}+V\left(\boldsymbol{r}\right)\right]u_{n\boldsymbol{k}}\left(\boldsymbol{r}\right)=\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}u_{n\boldsymbol{k}}\left(\boldsymbol{r}\right)$$

para la parte periódica de las funciones de Bloch. Supongamos ahora que agregamos un potencial vector $\boldsymbol{A}$. Esto hace que debamos reemplazar

$$\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{\pi}=\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}$$

en el hamiltoniano original.
(a) Derivar nuevamente el hamiltoniano k dot p en presencia de este potencial vector, y mostrar que se obtiene la misma expresión pero con un "wave vector" $\boldsymbol{k'}$ definido como

$$\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\frac{e}{c\hbar}\boldsymbol{A} \ ,$$

(b) Suponer el potential vector está dado por

$$\boldsymbol{A}=-\boldsymbol{\nabla}\left(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\right)ct \ ,$$

Mostrar que este potencial corresponde a un campo eléctrico constante y que en ese caso

$$\frac{d\boldsymbol{k}'}{dt}=\frac{-e\boldsymbol{E}}{\hbar} \ ,$$

2.
El operador que corresponde a la derivada temporal de un observable O está dado por

$$\frac{dO}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left[H,O\right]+\frac{\partial O}{\partial t}$$

donde el paréntesis rectangular signfica commutador, y H es el hamiltoniano del sistema.
(a) En el espacio $\boldsymbol{k}$, el hamiltoniano de la banda n de un sólido es simplemente

$$\boldsymbol{H}_n\left(\boldsymbol{k}\right)=\varepsilon_n\left(\boldsymbol{k}\right) \ ,$$

donde ε_n es la energía de la banda. Hemos mostrado en clase que el operador de posición en la representación $\boldsymbol{k}$ está dado por

$$\boldsymbol{r}_n=i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}+\mathcal{A}_n\left(\boldsymbol{k}\right)$$

donde $\mathcal{A}$ es la conexión de Berry. Mostrar que esto significa que la velocidad de un electrón en el estado $\boldsymbol{k}$ es, simplemente,

$$\boldsymbol{v}_n=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_n\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial\boldsymbol{k}} \ .$$

Este es el resultado que aparece, por ejemplo, en la ecuación 8.51 de Ashcroft Mermin. (Hints: Recordar que una función de $\boldsymbol{k}$ conmuta con otra función de $\boldsymbol{k}$, y que $\left[f\left(\boldsymbol{k}\right),\partial/\partial\boldsymbol{k}\right]=-\partial f\left(\boldsymbol{k}\right)/\partial\boldsymbol{k}$).
(b) Suponer ahora que aplicamos un campo eléctrico constante $\boldsymbol{E}$. Podríamos entonces escribir el hamiltoniano, en la así llamada aproximación de masa efectiva, como

$$\boldsymbol{H}\left(\boldsymbol{k}\right)=\varepsilon\left(\boldsymbol{k}\right)+e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}=\varepsilon\left(\boldsymbol{k}\right)+e\boldsymbol{E}\cdot\left(i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}+\mathcal{A}_{n}\left(\boldsymbol{k}\right)\right),$$

Recalcular ahora la velocidad y demostrar que se obtiene el resultado

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial\boldsymbol{k}}+\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{E}\times\left(\boldsymbol{\nabla}\times\mathcal{A}\right)=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial\boldsymbol{k}}+\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{E}\times\Omega\left(\boldsymbol{k}\right)$$

donde Ω es la curvature de Berry. Combinar con el resultado del problema 1 para obtener exactamente la misma expresión que mostramos en clase.

(Hint: las notas de clase donde deducimos la forma del hamiltoniano para un electrón en un campo electromagnético pueden servir para expresar el resultado en términos de un producto vectorial.)