4. Übung zur Festkörpertheorie II – SS 2013 **Prof. Krüger**

Ausgabedatum: 13.06.2013 Abgabedatum: 20.06.2013

Aufgabe 10: Lorentzoszillator und optische Eigenschaften (4 Punkte)

In einem klassischen Modell für die Abschirmung in einem Festkörper nehmen wir an, dass ein äußeres Feld

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \cdot e^{-i\omega t}$$

die Elektronen im Festkörper um $\vec{r}(t)$ verschiebt. Dabei wirken neben dem Feld $\vec{E}$ auch die „Rückstellkraft" $-m\,\omega_0^2\,\vec{r}(t)$ und die Reibungskraft $-2\,m\,\gamma\,\dot{\vec{r}}(t)$ auf das Elektron. Die Verschiebung bewirkt ein Dipolmoment, das zu einer Polarisation $\vec{P} = -e \cdot n\,\vec{r}(t)$ führt. Dabei ist n die Dichte der Elektronen.

a) Stellen Sie die Newton'sche Bewegungsgleichung auf und lösen Sie diese.

b) Berechnen Sie aus $\varepsilon_0\,\varepsilon(\omega)\,\vec{E}(\omega) = \varepsilon_0\,\vec{E}(\omega) + \vec{P}(\omega)$ die dielektrische Funktion.

c) Berechnen Sie den Real- und Imaginärteil des Berechnungsindex sowie die Reflexion.

d) Skizzieren Sie $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$, $n_1(\omega)$, $n_2(\omega)$ und $R(\omega)$. In welchen Frequenzbereichen tritt eine hohe Reflektivität auf? Bei welchen Frequenzen ist die optische Absorption besonders groß?

Aufgabe 11: Grenzfall $\vec{q} \to 0$ (3 Punkte)

Bei der Berechnung der longitudinalen dielektrischen Funktion eines periodischen Festkörpers treten Matrixelemente der Form

$$I(\vec{q}) = \int \psi^*_{n',\vec{k}+\vec{q}}(\vec{r})\, e^{i\,\vec{q}\,r}\, \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})\, d^3 r$$

auf. Diese beschreiben Übergänge zwischen den Bändern n' und n. In dieser Aufgabe soll der Fall kleiner Wellenvektoren $\vec{q}$ betrachtet werden.

Die Blochfunktionen haben die Form

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\,\vec{k}\,\vec{r}}\, u_{n,k}(\vec{r}) \qquad \text{und} \qquad \psi_{n',\vec{k}+\vec{q}}(\vec{r}) = e^{i\,(\vec{k}+\vec{q})\,r}\, u_{n',k+q}(\vec{r})\ .$$

a) Stellen Sie $I(\vec{q})$ durch die gitterperiodischen Funktionen $u_{n,\vec{k}}$ und $u_{n',k+q}$ dar.

b) Die gitterperiodischen Funktionen erfüllen folgende Schrödingergleichungen

$$\hat{H}(\vec{k})\, u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}}\, u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\hat{H}(\vec{k}+\vec{q})\, u_{n',k+\vec{q}}(r) = E_{n',\vec{k}+\vec{q}}\, u_{n',\vec{k}+q}(\vec{r})$$

Geben Sie $\hat{H}(\vec{k})$ und $\hat{H}(\vec{k}+\vec{q})$ an.

c) Für kleine $\vec{q}$ ist $\hat{U} := \hat{H}(\vec{k}+\vec{q}) - \hat{H}(\vec{k})$ eine kleine Störung. Verwenden Sie die erste Ordnung der Störungstheorie, um $u_{n',\vec{k}+\vec{q}}(\vec{r})$ durch $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ darzustellen. Benutzen Sie dieses Ergebnis, um $I(\vec{q})$ zu berechnen. Nutzen Sie dabei die Orthonormalität der Funktionen aus.

Hinweis: Stellen Sie Ihr Ergebnis mit Hilfe des Impulsmatrixelementes

$$\vec{p}_{n',n}(\vec{k}) = \int u^*_{n',\vec{k}}(\vec{r})\, \hat{\vec{p}}\, u_{n,\vec{k}}(\vec{r})\, d^3 r$$

dar.

Aufgabe 12: Stromdichteoperator **(3 Punkte)**

a) Der Operator der Stromdichte eines Teilchens mit Ladung Q hat die Form

$$\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}\,) \;=\; \frac{Q}{2\,m}\,\frac{\hbar}{i}\,\left(\vec{\nabla}_{\vec{r}\,'}\,\delta\,(\vec{r}\,-\,\vec{r}\,')\,+\,\delta\,(\vec{r}\,-\,\vec{r}\,')\,\vec{\nabla}_{\vec{r}\,'}\right)\;.$$

Berechnen Sie für die Wellenfunktion $\psi\,(\vec{r}\,',\,t)$ den Erwartungswert

$$\vec{\jmath}(\vec{r},\,t)\;=\;\langle\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}\,)\rangle_t\;.$$

b) Bei Anwesenheit eines elektromagnetischen Feldes, das durch das Vektorpotential $\vec{A}\,(\vec{r},\,t)$ beschrieben wird, hat der Stromoperator für N Teilchen die Form

$$\hat{\vec{J}}\,(\vec{r},\,t)\;=\;\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}\,)\,+\,\hat{\vec{\jmath}}_{\mathrm{dia}}\,(\vec{r},\,t)$$

mit

$$\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}\,)\;=\;\frac{1}{2}\,\frac{Q}{m}\,\frac{\hbar}{i}\,\sum_{l\,=\,1}^{N}\left(\vec{\nabla}_{\vec{r}_l}\,\delta\,(\vec{r}\,-\,\vec{r}_l)\,+\,\delta\,(\vec{r}\,-\,\vec{r}_l)\,\vec{\nabla}_{r_l}\right)\;,$$

$$\hat{\vec{\jmath}}_{\mathrm{dia}}\,(\vec{r},\,t)\;=\;-\frac{Q^2}{m}\,\sum_{l\,=\,1}^{N}\delta\,(\vec{r}\,-\,\vec{r}_l)\,\vec{A}\,(\vec{r}_l,\,t)\;.$$

$\hat{\vec{\jmath}}_{\mathrm{dia}}$ beschreibt den diamagnetischen Anteil des Stroms.

Transformieren Sie $\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}\,)$ und $\hat{\vec{\jmath}}_{\mathrm{dia}}\,(\vec{r},\,t)$ in die Besetzungsdarstellung. Verwenden Sie als Einteilchenbasis ebene Wellen der Form

$$\psi_{\vec{k},\,\sigma}\,(\vec{r}\,)\;=\;\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\,\mathrm{e}^{i\,\vec{k}\,\cdot\,\vec{r}}\,\cdot\,\chi_\sigma\;.$$

Berechnen Sie die Fouriertransformierte von $\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}\,)$ in der Besetzungszahldarstellung.