Technische Universität Berlin – Institut für Theoretische Physik

25. Mai 2009

Prof. Dr. A. Knorr
Dr. Ermin Malic,
Dipl.-Phys. Frank Milde

www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss09/wpfv/tfp/

6. Übungsblatt zur Theoretische Festkörperphysik

Abgabe: bis Dienstag 02.06.2009 10:15 Uhr in der Vorlesung.

Aufgabe 10 (15 Punkte): *Der quantenmechanische Strom*

Zur Berechnung des Stroms $\langle \mathbf{j} \rangle_{ED,QM}$ werden in der VL die Identitäten

$$\frac{1}{\Omega_0} \int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 r u^*_{\lambda_1 \mathbf{k}} (\mathbf{r}) \frac{\mathbf{p}}{m_0} u_{\lambda_2 \mathbf{k}} (\mathbf{r}) = \begin{cases} -\frac{\hbar \mathbf{k}}{m_0} + \nabla_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon_{\lambda \mathbf{k}}}{\hbar} & \text{für} \quad \lambda_1 = \lambda_1 \quad (a) \\ \mathrm{i} \left(\omega_{\lambda_1} - \omega_{\lambda_2}\right) \mathbf{r}_{\lambda_1 \lambda_2} & \text{für} \quad \lambda_1 \neq \lambda_1 \quad (b) \end{cases}$$

verwendet, die im folgenden bewiesen werden sollen. Der Fall (a) beschreibt dabei Tansportphänomene, während (b) für die Optik in Halbleitern verwendet wird.
Dabei sind $\mathbf{r}_{\lambda_1 \lambda_2} = \lim\limits_{\mathbf{k} \to 0} \frac{1}{\Omega_0} \int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 r u^*_{\lambda_1 \mathbf{k}} (\mathbf{r}) \, \mathbf{r} u_{\lambda_2 \mathbf{k}} (\mathbf{r})$ und $\omega_{\lambda_1 \mathbf{k}} = \frac{\varepsilon_{\lambda \mathbf{k}}}{\hbar}\big|_{\mathbf{k} \to 0}$.

(a) Fall: $\lambda_1 = \lambda_2$

1. Starten Sie mit der Schrödingergleichung für Blochfunktionen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \varphi_{\lambda \mathbf{k}} (\mathbf{r}) + V_G (\mathbf{r}) \varphi_{\lambda \mathbf{k}} (\mathbf{r}) = \varepsilon_{\lambda \mathbf{k}} \varphi_{\lambda \mathbf{k}} (\mathbf{r})$$

2. Einsetzen der Definition der Blochfunktionen $\varphi_{\lambda \mathbf{k}} (\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{\lambda \mathbf{k}} (\mathbf{r}) \, e^{\mathrm{i} \mathbf{k} \mathbf{r}}$ führt zu einer Gleichung der Form $L_k u_{\lambda \mathbf{k}} = \varepsilon_{\lambda \mathbf{k}} u_{\lambda \mathbf{k}}$.

3. Diese Gleichung mit $\nabla_{\mathbf{k}}$ multiplizieren und Produktregel vollständig anwenden.

4. Substitution $\lambda \to \lambda_2$; von links mit $u^*_{\lambda_1 \mathbf{k}}(\mathbf{r})$ multiplizieren; über Elementarzelle V_{EZ} integrieren ($\frac{1}{\Omega_0} \int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 r \cdots$) und Integrale auswerten. Dabei kann $\frac{1}{\Omega_0} \int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 r u^*_{\lambda_1 \mathbf{k}} (\mathbf{r}) \, u_{\lambda_2 \mathbf{k}} (\mathbf{r}) = \delta_{\lambda_1 \lambda_2}$ verwendet werden, nachdem $\mathbf{r}$-unabhängige Terme vorgezogen wurden. (TIPP: Verwenden Sie nochmals $L_k u_{\lambda \mathbf{k}} = \varepsilon_{\lambda \mathbf{k}} u_{\lambda \mathbf{k}}$)

5. Dies führt zu dem Ausdruck:

$$\frac{1}{\Omega_0} \int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 r u^*_{\lambda_1 \mathbf{k}} \frac{\hbar \mathbf{p}}{m_0} u_{\lambda_2 \mathbf{k}} + \frac{\hbar^2}{m_0} \mathbf{k} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{\varepsilon_{\lambda_1 \mathbf{k}} - \varepsilon_{\lambda_1 \mathbf{k}}}{\Omega_0} \int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 r u^*_{\lambda_1 \mathbf{k}} \left(\nabla_{\mathbf{k}} u_{\lambda_2 \mathbf{k}}\right) = \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\lambda_2 \mathbf{k}} \delta_{\lambda_1 \lambda_2}$$

   und mit den obigen Definitionen und $\lambda_1 = \lambda_2$ (evt. auch schon vorher einsetzen) zur ersten Identität

6. Was ergibts sich für $\nabla \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar}$ im Fall eines parabolischen Bandes ?

Bitte Rückseite beachten!⟶

(b) Fall: $\lambda_1 \neq \lambda_2$

1. Hier ist der Startpunkt die Gleichung $[H_0, \mathbf{r}] = -\frac{\hbar^2}{m_0}\nabla_{\mathbf{r}} = -\mathrm{i}\frac{\hbar\mathbf{p}}{m_0}$.
2. Beide Seiten in der Form $\int \mathrm{d}^3 r \varphi^*_{\lambda_1 \mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) \ldots \varphi_{\lambda_2 \mathbf{k}_2}(\mathbf{r})$ integrieren.
3. Linke Seite: Den Hamiltonoperator wirken lassen; Definition der Blochfunktionen einsetzen und das Integral als Summe von Integralen über Elementarzellen mit $\mathbf{r} = \mathbf{R}_n + \mathbf{s}_n$ $\left(\sum_{\mathbf{R}_n} \cdots \frac{1}{\Omega_0}\int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 s_n \cdots\right)$ schreiben, in denen $e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{s}_n}$ nicht variiert. Das Integral über eine Zelle läßt sich in die Form $\delta_{\lambda_1\lambda_2}$const $+\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}\mathbf{r}_{\lambda_1\lambda_2}$ bringen (Für den ersten Term wird $\mathbf{k} \to 0$ angenommen (Bandkante).).
4. Rechte Seite: Summe über Elementarzelle betrachten; führt zu:

$$\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}\frac{1}{V_{\mathrm{EZ}}}\int_{\mathrm{EZ}} \mathrm{d}^3 s u^*_{\lambda_1 \mathbf{k}}(\mathbf{s})\,\mathbf{p} u_{\lambda_2 \mathbf{k}_2}(\mathbf{s})$$

Aufgabe 11 (5 Punkte): *Das Independent Boson Model (IBM) – Teil 3*
Nachdem Sie in Zettel 5 bereits die Lösung des IBM im Zeitbereich geplottet haben

$$p(t) = p_0 e^{\mathrm{i}\left[\sum_{\mathbf{q}} \frac{|g^{vv}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}} - g^{cc}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}}|^2}{\hbar^2\omega_{\mathrm{LO}}} + \omega_{cv}\right]t} \exp\left[\sum_{\mathbf{q}} \frac{|g^{vv}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}} - g^{cc}_{\mathrm{LO},\mathbf{q}}|^2}{\hbar^2\omega^2_{\mathrm{LO}}}\{(n_{\mathbf{q}}+1)(e^{-\mathrm{i}\omega_{\mathrm{LO}}t} - 1) + n_{\mathbf{q}}(e^{\mathrm{i}\omega_{\mathrm{LO}}t} - 1)\right],$$

sollen nun die Beiträge der Phononemission und -absorption bei endlichen Temperaturen ($T \neq 0$) untersucht und eine Abschätzung zur Intensität der einzelnen Peaks vorgenommmen werden. Für die folgenden Betrachtungen ist daher der Polaronshift nicht weiter zu beachten und kann in den Vorfaktor p_0 integriert werden.
Entwickeln Sie die Exponenten bis zur ersten Ordnung im Quadrat des Kopplungselements und führen sie eine Fouriertransformation durch. Wie ist das Verhältnis der Peakhöhen von Phononemission und -absorption?