Abgabe: bis zum *11.Jan.2010, 10:00 Uhr* im Postfach von Prof. Rieger

1 Fluktuations-Dissipations Theorem (FDT)

1) Zeigen Sie mit $\chi''_{AB}(\omega) := \frac{1}{2\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt \langle [A(t), B] \rangle e^{i\omega t}$ das FDT :

$$\chi''_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\hbar}(1 - e^{-\beta\hbar\omega})C_{AB}(\omega), \tag{11.1}$$

wobei $C_{AB}(t) = \langle A(t)B \rangle$. Führen Sie hierzu explizit eine Fouriertransformation von $\langle BA(t) \rangle$ durch.

2) Zeigen Sie die Gültigkeit folgender äquivalenter Formen der FDT:

$$C_{AB}(\omega) = 2\hbar\,[n(\omega) + 1]\,\chi''_{AB}(\omega) \tag{11.2}$$

$$C_{BA}(-\omega) = 2\hbar n(\omega)\chi''_{AB}(\omega) \tag{11.3}$$

$$\frac{1}{2}\,[C_{AB}(\omega) + C_{BA}(-\omega)] = \hbar\ \coth\left[\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right]\ \chi''_{AB}(\omega) \tag{11.4}$$

mit $n(\omega) = (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}$.

3) Berechnen Sie die FDTs aus 2) im klassischen Grenzfall $\beta\hbar\omega \ll 1$ für $T \to 0$.

4) Skizzieren Sie das Suszeptibilitätsspektrum

$$\chi''_{AA} \sim \mathrm{Im}\left[\frac{-1}{\omega^2 - \Omega^2 + i\gamma\omega}\right]; \quad \gamma/\Omega \ll 1 \tag{11.5}$$

und C_{AA} im klassischen Limit für $T \to 0$.

2 Ladungsdichte-Response, longitudinale dielektrische Funktion und longitudinale Leitfähigkeit

Ein homogenes isotropes Material wird einer äußeren Ladungsdichte $\rho_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}, t)$ ausgesetzt, so dass gilt:

$$\hat{H}'(t) = -\int d\mathbf{r}\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)\ f_{ext}(\mathbf{r}, t) \tag{11.6}$$

mit

$$f_{ext}(\mathbf{r}, t) = -\int d\mathbf{r}' v(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\rho_{ext}(\mathbf{r}', t). \tag{11.7}$$

$\hat{\rho}(\mathbf{r})$ ist dabei der Ladungsdichteoperator des Materials im Schrödingerbild. Ein spezielles Beispiel einer solchen äußeren Ladungsdichte ist eine Menge von Punktladungen, die sich im Raum entlang von Pfaden $\mathbf{R}_n(t)$ bewegen:

$$\rho_{ext}(\mathbf{r}, t) = \sum_n q_n \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n(t)\right) \tag{11.8}$$

1) Interpretieren Sie den Hamiltonoperator.

2) Berechnen Sie die durch folgenden Term definierte Response:

$$\rho_{ind}(\mathbf{r}, t) := \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle_t - \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle_0. \tag{11.9}$$

3) Zeigen Sie, dass die Fouriertransformierte von (11.9) gegeben ist durch

$$\rho_{ind}(\mathbf{k},\omega) = -\chi(\mathbf{k},\omega+i0)v(\mathbf{k})\rho_{ext}(\mathbf{k},\omega) \tag{11.10}$$

mit

$$\chi(\mathbf{k},\omega+i\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{i\Theta(t)}{\hbar V}\langle[\rho(\mathbf{k},t),\rho(-\mathbf{k},t)]\rangle e^{i(\omega+i\eta)t}. \tag{11.11}$$

4) Nutzen Sie die linearisierten Maxwellgleichungen

$$\nabla\cdot\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = 4\pi\rho_{ext}(\mathbf{r},t) \tag{11.12}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = 4\pi[\rho_{ext}(\mathbf{r},t)+\rho_{ind}(\mathbf{r},t)] \tag{11.13}$$

$$D_\alpha(\mathbf{r},t) = \sum_\beta \int d\mathbf{r}' \int dt' \epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t')E_\beta(\mathbf{r}',t') \tag{11.14}$$

und

$$\epsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega) = \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}\epsilon_L(\mathbf{k},\omega) + [\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}]\epsilon_T(\mathbf{k},\omega) \tag{11.15}$$

um die longitudinale dielektrische Funktion $\epsilon_L(\mathbf{k},\omega)$ als Funktion der Ladungsdichte auszudrücken und zeigen Sie, dass

$$\frac{1}{\epsilon_L(\mathbf{k},\omega)} = 1 - v(\mathbf{k})\chi(\mathbf{k},\omega+i0). \tag{11.16}$$

5) Nutzen Sie $v(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{k^2}$ und die Relation $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi}\omega\chi''(\mathbf{k},\omega) = q^2\sum_i e_i^2\frac{N_i}{m_i V}$ für Punktladungen um folgendes zu zeigen:

$$-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi}\mathrm{Im}\frac{1}{\epsilon_L(\mathbf{k},\omega)} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi}\frac{4\pi\sigma_L'(\mathbf{k},\omega)}{|\epsilon_L(\mathbf{k},\omega)|^2} = \omega_p^2. \tag{11.17}$$

Hier bezeichnet $\omega_p^2 = 4\pi\sum_i\frac{e_i^2 N_i/V}{m_i}$ das Quadrat der Plasmafrquenz. Die longitudinale Leitfähigkeit ist gegeben durch

$$\epsilon_L(\mathbf{k},\omega) = 1 + 4\pi i\frac{\sigma_L(\mathbf{k},\omega)}{\omega}. \tag{11.18}$$