FI 105 - Prova 2 - 2015

Problema 1: Função resposta: propriedades ópticas de um meio material cristalino

Ref.: *Optical Properties of Solids,* Frederick Wooten e *Principles of Condensed Matter Physics*, Chaikin & Lubensky

Versão clássica Considere inicialmente o problema sob o ponto de vista clássico. O modelo discutido é o modelo de Lorentz. Para isso, considere que a transição entre dois níveis de energia (o de mais baixa energia ocupado por um elétron e o de mais alta energia desocupado) é caracterizado por uma energia $\hbar\omega_0$. Simule a dinâmica do sistema por um oscilador harmônico amortecido forçado:

$$m\frac{\partial^2\vec{r}}{\partial t^2} + m\Gamma\frac{\partial\vec{r}}{\partial t} + m\omega_0^2\vec{r} = -e\vec{E}_{loc}$$

Assuma que $\vec{E}_{loc}(t) = \vec{E}^0_{loc}e^{-i\omega t}$.

Resolva a dinâmica do sistema e encontre o momento de dipolo induzido, $\vec{p} = -e\vec{r}$.

Para campos suficientemente fracos, podemos escrever

$$\vec{p} = \chi(\omega)\vec{E}_{loc}$$

Se a densidade de elétrons por volume é n, podemos escrever

$$\vec{P} = n\langle\vec{p}\rangle = n\chi(\omega)\left\langle\vec{E}_{loc}\right\rangle = \chi_e\vec{E}$$

onde $\vec{P}$ e $\vec{E}$são a polarização e o campo elétrico macroscópicos. Novamente, assumindo a aproximação linear,

$$\vec{D} = \epsilon\vec{E} = \vec{E} + 4\pi\vec{P} = \vec{E}_{ext}$$

Considere agora que o sólido é representado por um certo número de transições possíveis com energia representada por ω_j, onde j indexa as transições e cada transição possui um número n_j de osciladores idênticos (ou estados com transição degenerada), onde $\sum_j n_j = n$.

(a) Encontre a expressão para $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$, escrevendo $f_j = n_j/n$.

(b) Faça o limite $\Gamma \to 0$.

(c) Encontre a expressão para o caso em que $\omega_j \to 0$.

(d) Encontre o limite de baixas frequências ω, isto é, $\lim_{\omega\to 0}\epsilon_1(\omega)=\epsilon_1(0)$.

(e) Faça um esquema de $\epsilon_1(\omega)$ e $\epsilon_2(\omega)$ para um sistema com dois valores de ω_j.

Versão quântica Considere um sistema físico caracterizado pelos estados de equilíbrio

$$\mathcal{H}_0\phi_n=\epsilon_n\phi_n$$

No instante $t=0$ aplicamos uma perturbação dependente do tempo,

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1(t)$$

Escrevemos a solução dependente do tempo na forma

$$\psi(\vec{r},t)=\sum_n a_n(t)\phi_n(\vec{r})e^{-i\epsilon_n t/\hbar}$$

(a) Encontre a equação para $a_m(t)$.

(b) Assuma que o elétron inicialmente encontra-se no estado inicial

$$a_n=\delta_{n0}\,,\ t=0$$

e reescreva a equação para $a_m(t)$.

(c) Considere que o hamiltoniano perturbativo descreve a interação do elétron com um campo eletromagnético na aproximação linar, ou seja,

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_1 &= -e\vec{E}_{loc}\cdot\vec{r}\\ \vec{E}_{loc} &= \vec{E}_0(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})\end{aligned}$$

calcule $a_n(t)$ e expresse em termo de $\vec{r}_{m0}$, onde $\vec{r}_m$ é

$$\vec{r}_{m0}=\int \mathrm{d}\vec{r}\phi_m^*\vec{r}\phi_0$$

(d) O momento de dipolo induzido é

$$\vec{p}=\langle -e\vec{r}\rangle=\int \mathrm{d}\vec{r}\psi^*(-e\vec{r})\psi$$

Calcule χ, onde

$$\vec{p} = \chi \vec{E}$$

Despreze os termos rapidamente oscilantes de fora de fse com o campo externo (estamos trabalhando na aproximação dipolar, válida para intensidades fracas do campo externo).

(e) Utilizando a relação

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + 4\pi\chi$$

encontre $\epsilon_1(\omega)$.

(f) Partindo de (e) e utilizando as relações de Kramers-Kronig, calcule $\epsilon_2(\omega)$.

(g) Introduza uma energia imaginária (qual o sentido dela)

$$\epsilon_m \to \epsilon_m + \frac{1}{2} i\hbar\Gamma_m$$

e calcule novamente ϵ_1 e ϵ_2, expressando em termos de f_{m0},

$$f_{m0} = \frac{2m\hbar\omega_{m0}}{\hbar^2} \left| r_{m0} \right|^2$$

*(h) Mostre que

$$\sum_m f_{mn} = 1$$

Mostre também que podemos escrever

$$f_{mn} = \frac{2}{m\hbar\omega_{mn}} \left| p_{mn} \right|^2$$

onde

$$p_{mn} = \int \mathrm{d}\vec{r} \phi_m^* (-i\hbar\vec{\nabla})_x \phi_n$$

onde consideramos a direção x a direção do campo elétrico externo.

*(f) Compare com o caso clássico, em particular compare os valores para f_i e f_{m0}. Calcule a potência dissipada (absorção) no caso quântico e, comparando com o valor do caso clássico, $P_{cl} = \pi e^2 \left| \vec{E} \right|^2 / 4m$, e mostre que

$$\frac{P_{quântico}}{P_{cl}} = f_{mn}$$

Interprete o resultado.

*(g) Mostre que o primeiro momento é

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\omega \omega \epsilon_2(\omega) = \frac{1}{2}\pi\omega_P^2$$

onde ω_P é a frequência de plasma,

$$\omega_P^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$$