

Diskussion der dielektrischen Funktion $\epsilon_Q(\omega)$ des Elektronengases

$$\epsilon_Q = 1 - V_Q \sum_{k,s} \frac{f_{k-Q}^s - f_k^s}{\hbar(\omega - i\delta) (\epsilon_{k-Q}^s - \epsilon_k^s)}$$

a) Die dielektrische Funktion in der gemachten Näherung (Hartree-Fock f. das Fermion-Modell) heißt
Lindhard-Formel (Lindhard-Abschirmung)

b) $P_Q =$ „Polarisationsfunktion“ =

$$P_Q = \sum_{k,s} \frac{f_{k-Q}^s - f_k^s}{\hbar\omega + (\epsilon_{k-Q}^s - \epsilon_k^s)}$$

Warum Polarisationsfunktion:

$D = \epsilon \epsilon_0 E$ aus $\vec{E}D$ f. polarisierbarem Medium

$$D = \epsilon_0 \vec{E} + \underset{\uparrow}{P} = \epsilon_0 E + \epsilon_0 \underset{\uparrow}{\chi} E = \epsilon_0 \epsilon E$$

Polarisation
(Dipoldichte) Suszeptibilität

$$1 + \underline{\chi} = \epsilon$$

andere Begriffe

$$1 - \underline{V_Q} \underline{P_Q(\omega)} = \epsilon_Q(\omega)$$

zu makroskop. ED

c) $f_k^s =$ Fermifunktion (Statistik)

$$f_k^s = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k^s - \mu)} + 1} \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

Elektron gas



← Temperatur der Umgebung

μ -chemisch Potential

Die Ergänzung $\omega \rightarrow \omega - i\delta$ wird gemacht um Dämpfung der Plasmaoszillation zu berücksichtigen

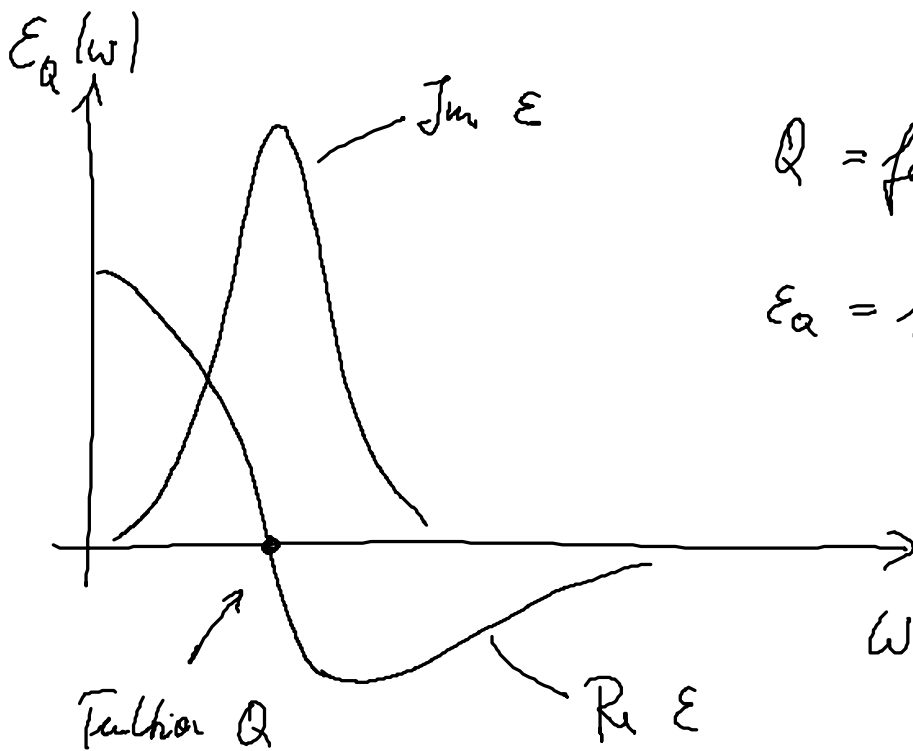
$$e^{-i\omega_p t} \rightarrow e^{-i(\omega_p - i\delta)t} \rightarrow e^{-i\omega_p t} e^{-\delta t}$$

gedämpfte Schwingg. ↗

Solche Dämpfung entsteht durch Kopplung an
 Lower (Ionenbeweg.) oder höher

El-El - WW, also Effekte jenseits von Hartree-
 Fock (Korrelations effekte)

δ - ist zu nächst eine phänomenolog. Größe
 um solche Effekte zu berücksichtigen



$$Q = \text{fest}$$

$$\epsilon_Q = 1 - V_Q \sum_{kS} \frac{f_{k-Q}^S - f_k^S}{\hbar \omega + i\delta + (\epsilon_{k-Q}^S - \epsilon_k^S)}$$

hervorh. flit. wenn
 in Real, Imag. geteilt

d) $\epsilon_Q(\omega)$ ist Funktion von ω, Q :

$$D_Q = \epsilon_0 \epsilon_Q(\omega) \bar{E}_Q(\omega)$$

allgemeinste Ansatz f. das dielekt. Feld

$$\underline{D}(\underline{r}, t) \sim \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \epsilon(\underline{r}-\underline{r}', t-t') \underline{E}(\underline{r}', t')$$

naiv: $D(\underline{r}, t) = \epsilon_0 \epsilon \underline{E}(\underline{r}, t)$ nicht $\leftarrow \underline{t} > \underline{t}'$
immer richtig

Das D-Feld benötigt u. U. Zeit um sich nach
Einschleichen des E-Felds aufzubauen.

Man spricht von gedächtniseffekten.

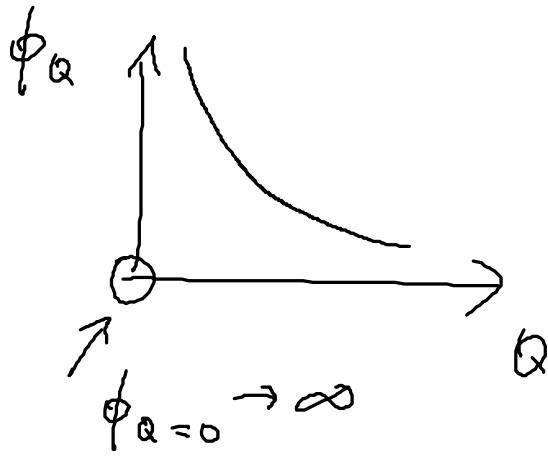
(D(t) hängt von $t' < t$ ab)

e) dynamische Abschirmung von Ladungen



Umordnung des EL-gas
wird durch ϵ beschrieben

im Vakuum: $\Delta\phi = -\frac{\rho^{\text{ext}}}{\epsilon_0} \rightarrow \phi_Q = \frac{\rho_Q^{\text{ext}}}{Q^2 \epsilon_0}$



Potential im Vakuum

Potential ϕ im homogenen EL-gas?

$$i\vec{Q} \cdot \vec{D}_Q = \rho_Q^{\text{ext}}, \quad (\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho^{\text{ext}}(r,t))$$

$$i\vec{Q} \cdot (\epsilon_0 \epsilon_Q \vec{E}_Q) = \rho_Q^{\text{ext}}$$

$$i\vec{Q} \cdot (\epsilon_0 \epsilon_Q [-i\vec{Q} \phi_Q]) = \rho_Q^{\text{ext}}$$

\uparrow
E-Feld als Gradient des Potentials im ELgas.

$$\phi_Q(\omega) = \frac{\rho_Q^{\text{ext}}(\omega)}{\epsilon_0 \epsilon_Q(\omega) Q^2}$$

Durch die Existenz von ϵ_Q (EL-gas) wird

das Potential abgeleitet (reduziert).

f) Abschirmung im Fall von $\omega, Q \rightarrow 0$ berechnen
und hoffen, daß Potential abgeleitet ist

$$\frac{1}{r} \rightarrow \frac{e^{-\lambda r}}{r}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_Q(\omega) &= 1 - V_Q \sum_k \frac{f_{k-a} - f_k}{\omega + (\varepsilon_{k-a} - \varepsilon_k)} \\ Q \rightarrow 0 \\ \omega \rightarrow 0 \end{aligned}$$

$$= 1 - V_Q \sum_k \frac{-\sum_{\alpha} Q^{\alpha} \nabla_k^{\alpha} f_k}{-\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2 k^{\alpha} Q^{\alpha}}{m}}$$

$$= 1 - V_Q \sum_k \frac{\sum_{\alpha} Q^{\alpha} \nabla_k^{\alpha} \varepsilon_k \partial_{\varepsilon_k} f_k}{\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2 k^{\alpha} Q^{\alpha}}{m}} \leftarrow \text{L'Hôpital}$$

$$= 1 - V_Q \sum_k (-\partial_{\mu} f_k) \quad \leftarrow \quad f_k = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1}$$

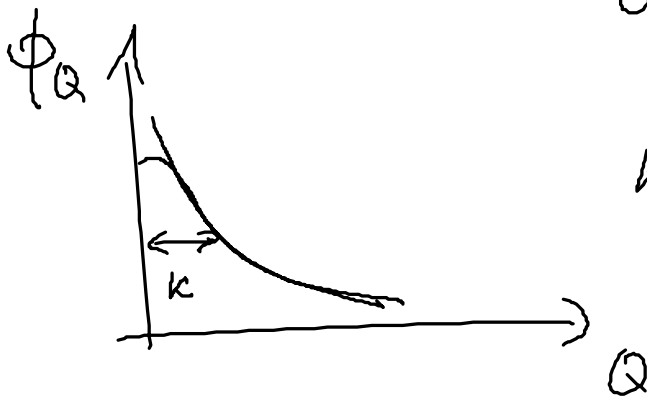
$$\epsilon_Q = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 Q^2 V} \partial_\mu N = 1 + \left(\frac{\kappa}{Q} \right)^2$$

$$\left(\kappa = \left(\frac{e^2}{\epsilon_0} \partial_\mu n_0 \right)^{1/2}, n_0 - \text{Teilchendichte} \right)$$

$$\phi_Q = \frac{\rho_Q^{\text{ext}}}{\epsilon_0 \epsilon_Q Q^2} = \frac{\rho_Q^{\text{ext}}}{\epsilon_0 Q^2 \left(1 + \left(\frac{\kappa}{Q} \right)^2 \right)}$$

$$= \frac{\rho_Q^{\text{ext}}}{\epsilon_0 (Q^2 + \kappa^2)}$$

↑
= 0 im Vakuum



κ : inverse Abschirmlänge

Man erhält für $\rho_Q^{\text{ext}} = \rho_{\text{Wahladung}}$, das Yukawa - Potential im Ortsraum:

$$\rho(r) = q \delta(\vec{r})$$

$$\rho_0^{\text{at}} = q$$

$$q = -e$$


$$V^s(\vec{r}) = \sum_Q \frac{e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}}{V} \underbrace{\phi_Q}_{\substack{\left(\frac{1}{V} - \text{Normierung}\right) \\ \text{aus} \\ \text{oben Will-} \\ \text{belgg.}}}$$

$$= \sum_Q \frac{e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}}{\epsilon_0 (\Omega^2 + k^2) V} (-e)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int dQ^3 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \frac{-e}{\epsilon_0 (\Omega^2 + k^2)}$$

$$V^s(\vec{r}) = \frac{-e}{\epsilon_0 (2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{\infty} dQ Q^2 \frac{e^{iQr \cos\vartheta}}{Q^2 + k^2}$$

z-Achse \vec{r}



\vec{r} als feststehend

Welcher gilt die z-Achse in Kugelkoordinaten an
($\cos\vartheta = x$)

$$= \frac{-e}{(2\pi)^2 \epsilon_0} \underbrace{\int_0^{\infty} dQ Q^2 \int_{-1}^1 dx e^{-iQrx}}_{\substack{\int_{-1}^1 dx e^{-iQrx} \\ \left(\cos\vartheta = x\right)}} \frac{1}{Q^2 + k^2}$$

$$= \frac{1}{iQr} (e^{iQr} - e^{-iQr})$$

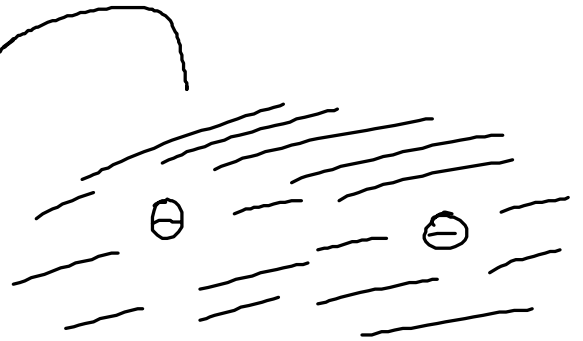
$$= \frac{2(e)}{(2\pi)^2 r \epsilon_0} \int_0^{\infty} dQ Q \frac{1}{Q^2 + k^2} \sin(Qr)$$

$$= \frac{-e}{4\pi \epsilon_0 r} e^{-kr}$$

zusätzliche

Daraus ergibt sich, daß $\sqrt{2}$ Elektron die in das Elektron gas eingebracht wurde die WW-Energie $-e \phi(r)$

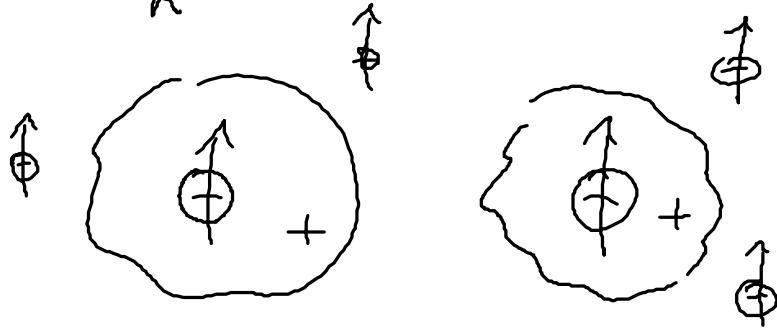
$$W = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \frac{e^{-kr}}{r}$$



Die Elektronen wo nicht so stark wie im freien Raum k ist die inverse Abschirmlänge und

bestimmt einen typischen WW-Abstand

$$r \gg \frac{1}{k} \rightarrow \text{kein WW}$$

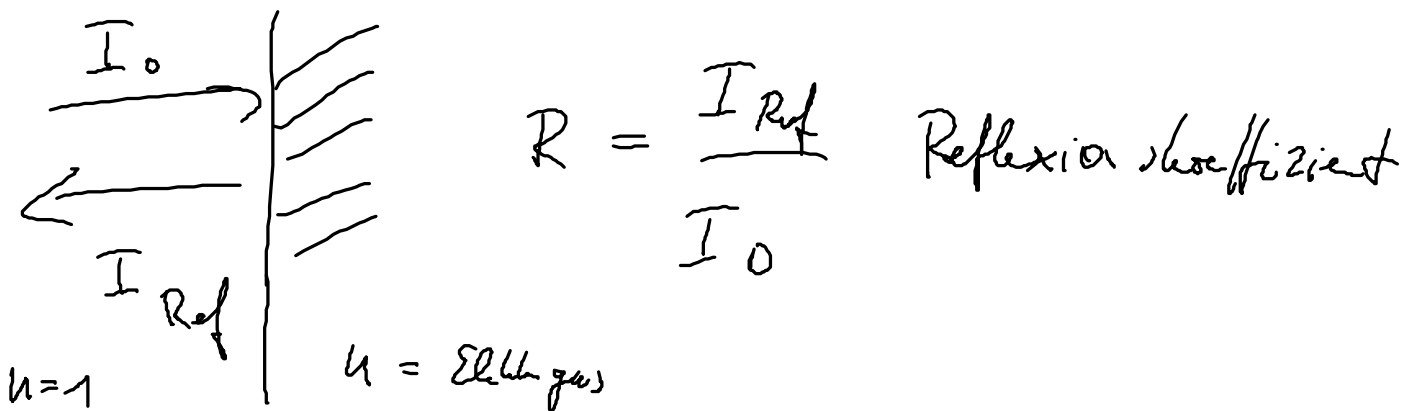


Durch das „Verdrängen“ der spingl. Elektronen in HF entsteht ein positives Austauschloch.

$$k^2 \sim \partial_{\mu}^2 \psi_0$$

Je höher die El-Dichte im Elgas,
desto stärker ist die Abschirmung.

g) Metallische Reflexion des Elektronengases



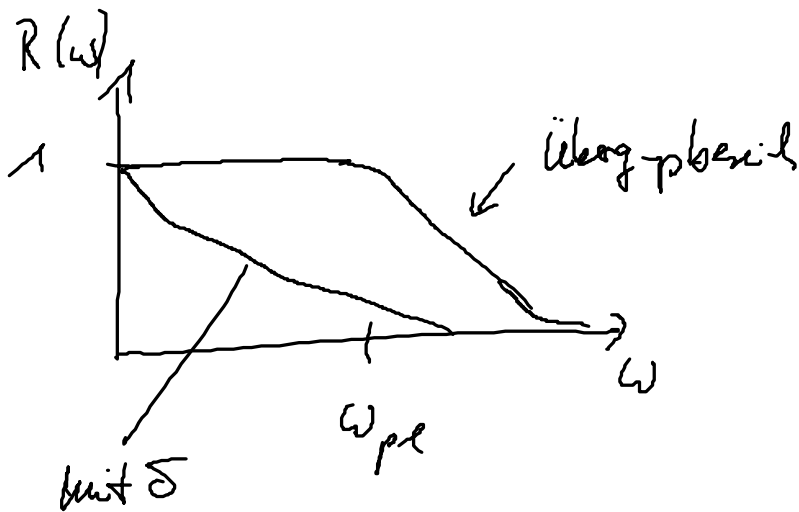
$$u^2 = \epsilon_Q(\omega) \quad R = \left| \frac{1-u}{1+u} \right|^2 \quad \text{aus Fresnel-Formeln}$$

↑
Brechzahl

$$u^2 = \epsilon = 1 - V_Q P_Q \xrightarrow{Q \rightarrow 0} = 1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}$$

1. kollektive Mode

$$R = \left| \frac{\omega - \sqrt{\omega^2 - \omega_{pl}^2}}{\omega + \sqrt{\omega^2 - \omega_{pl}^2}} \right|^2 = \begin{cases} \omega < \omega_{pl} \\ \omega \gg \omega_{pl} \end{cases} \left| \frac{\omega - i\omega'}{\omega + i\omega'} \right|^2 = \begin{cases} 1 \\ \rightarrow 0 \end{cases}$$



$$\omega' = \sqrt{\omega_{pl}^2 - \omega^2}$$

— „schlechte Metall“

Trennung von starker Reflexion und schwacher
durch die Plasmasfrequenz

$\omega < \omega_{pl}$ werden Plasmon erzeugt und dadurch
wird Lichtenergie in Schwingg. des Plasmons transferiert
(im Metall kein Licht!)

reflektiertes Licht durch Plasmonen emittiert.

III Elektronenzustände im starren Gitter

bisher $\varphi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, weil Jellium-Ionen

jetzt werden Ionen als periodische Anordnung betrachtet,

dieses Potential soll ernstgenommen werden.

1. Effektives Hamiltonian f. Elektronen im starren Gitter (Elektronen)

Elektron in Feld periodisch angeordneter starrer Ionen

führen 1 El.-Felds ein: $\varphi_{-s}^+(r, t), \varphi_{-s}(r, t)$

Spin / Ort als gleichberechtigte Variable

$$H_{el} = \sum_s \int d^3r \varphi_{-s}^+(r, t) \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + \underbrace{V_G(\vec{r})}_{\text{Gitterpotential der Ionen}} \right) \varphi_{-s}(r, t)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{s, s'} \int d^3r \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\varphi_s^+(r, t) \varphi_{s'}^+(r', t) \varphi_{s'}(r', t) \varphi_s(r, t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Entwickl. von $\psi_S^+(r, t) = \sum_{n, s_n}^+ a_{n, s_n}^+(t) \varphi_n^*(r) \chi_{s_n}^*(s)$

\uparrow Ort \uparrow Spin ($\uparrow \downarrow$)

$\psi_S(r, t)$ analog

$$H_{el} = \sum_{\substack{u, u' \\ s_u, s_{u'}}} \int d^3r \varphi_{u'}^*(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_G(r) \right) \varphi_u(r) \sum_{s_u, s_{u'}}^+ a_{u, s_u}^+ a_{u', s_{u'}}^+$$

$$\sum_s \chi_{s_{u'}}^*(s) \chi_{s_u}(s) = \delta_{s_u, s_{u'}}$$

$$\int d^3r \varphi_{u'}^*(r) \varphi_u(r) = \delta_{uu'}$$

φ_u soll effektiv bestimmt werden für H_{el}

$$+ \sum_{\substack{u_1, u_2, u_3, u_4 \\ s_1, s_2, s_3, s_4}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \int d^3r \frac{\varphi_{u_1}^*(r) \varphi_{u_2}^*(r') \varphi_{u_3}(r) \varphi_{u_4}(r')}{|r-r'|} \sum_{s_1, s_3}^+ \sum_{s_2, s_4}^+ a_{u_1, s_1}^+ a_{u_2, s_2}^+ a_{u_4, s_4} a_{u_3, s_3}$$

Die φ_u soll später als Eigenfunktionen von

H_{el} gefunden werden, dazu:

HF-Näher. im Hamiltonian (Aufgabe 7: 1-3)