

Diskussion der dielektrischen Funktion  $\epsilon_Q(\omega)$  der Erbsenrangwe

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

a) Die dielektrische Funktion in der gewählten Näherung (Haken-Feld f. das Fokker-Modell) heißt  
Lindhard-Formel (Lindhard-Abkürzung)

b)  $P_Q =$  „Polarisationsfunktion“ =

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

Warum Polarisation, Funktion:

$D = \epsilon \epsilon_0 E$  aus  $\vec{E}D$  f. polarisierbare Medien

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

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

$\mu$ -chemisch Potential

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

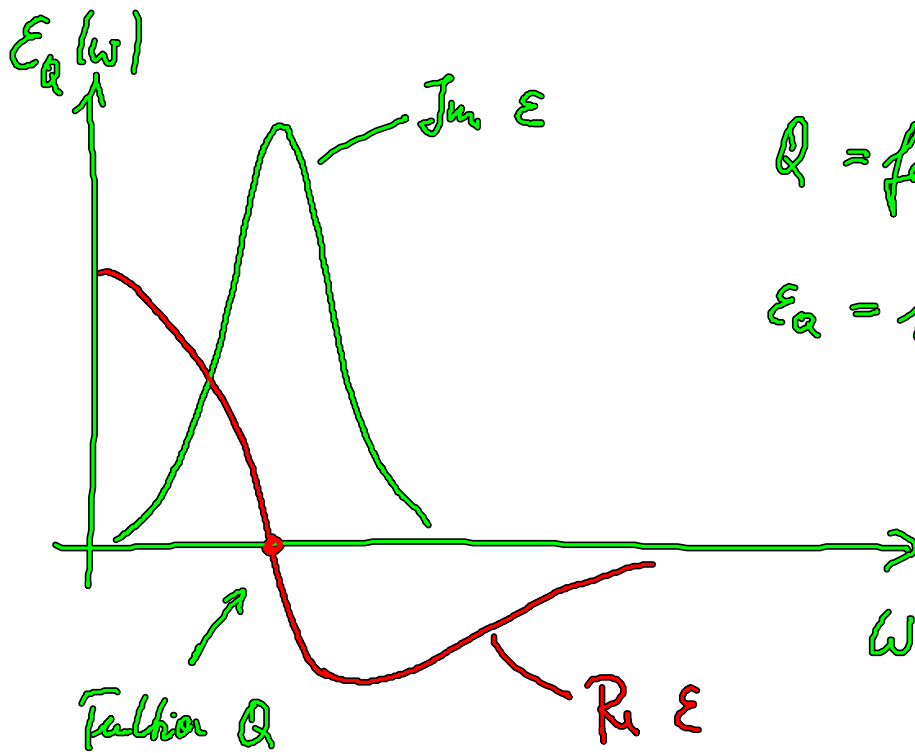
$$e^{-i\omega_p t} \rightarrow e^{-i(\omega_p - i\delta)t} \rightarrow e^{-i\omega_p t} e^{-\delta t}$$

gedämpfte Schwingung  $\nearrow$

Solche Dämpfung entsteht durch Kopplung an  
 lower (low freq.) oder higher

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

$\delta$  - ist zunächst ein phänomenolog. Größe  
 um solche Effekte zu berücksichtigen



$Q = \text{fest}$

$$\epsilon_a = 1 - V_Q \sum \frac{f_{k-Q}^S - f_k^S}{kS \underbrace{\frac{1}{\omega + i\delta} + (\epsilon_{k-Q}^S - \epsilon_k^S)}}_{}$$

hochf. oder  
 in Real, Imag. geteilt

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

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

allgemeinste Ansatz f. das dielektr. Feld

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

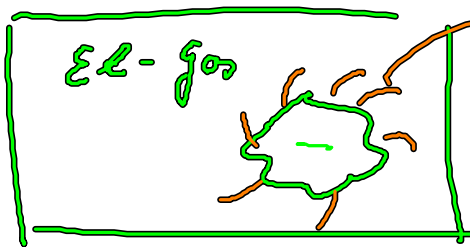
klass.:  $D(\underline{r}, t) = \epsilon_0 \epsilon E(\underline{r}, t)$  mit  $t > t'$   
immer richtig

Da D-Feld benötigt u. U. Zeit um sich und  
Einschleichen des E-Felds aufzubauen.

Man spricht von Verzögerungseffekten.

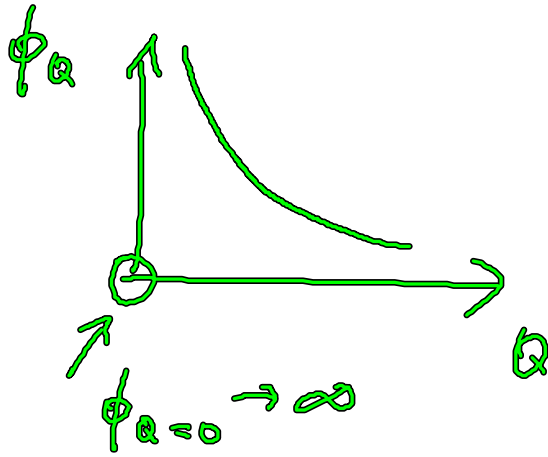
(D(t) hängt von  $t' < t$  ab)

e) dynamische Abschirmung von Ladungen



Umordnung des EL-gas  
wird durch  $\epsilon$  beschrieben

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



Potential in Vakuum

Potential  $\phi$  im homogenen EL-gas?

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

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

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

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

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

Durch die Existenz von  $\epsilon_Q$  (EL-gas) wird

das Potential abgezeichnet (reduziert).

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

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

$$\epsilon_Q(\omega) = 1 - V_Q \sum_k \frac{f_{k-a} - f_k}{\omega + (\epsilon_{k-a} - \epsilon_k)}$$

$Q \rightarrow 0$   
 $\omega \rightarrow 0$

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

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

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

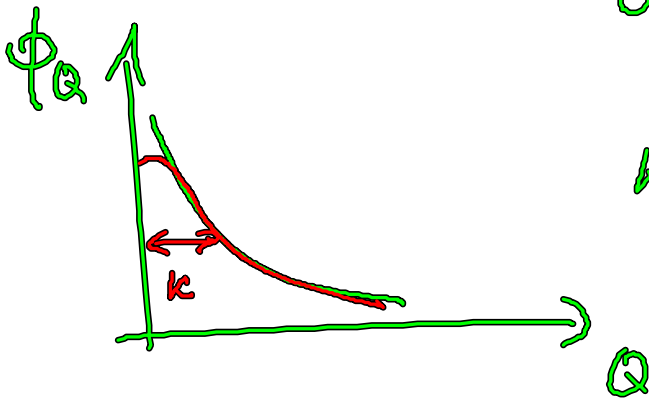
$$\epsilon_Q = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 Q^2} \partial_\mu N = 1 + \left( \frac{\kappa}{Q} \right)^2$$

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

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

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

$\nearrow = 0$  im Vakuum



$\kappa$ : inverse Abschirmlänge

Man erhält für  $\rho_a^{\text{ext}} = \rho_a \delta(\vec{r})$ , das Yukawa-Potential im Ortsraum:

$$\phi(r) = \frac{q}{r} \delta(\vec{r})$$

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

$$q = -e$$

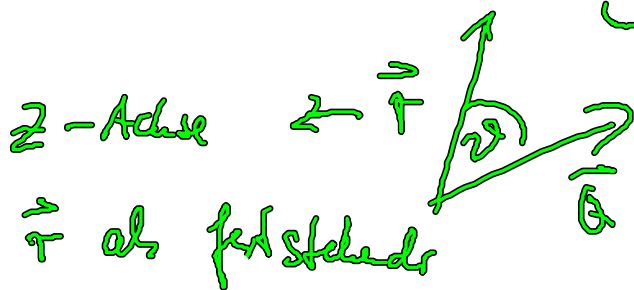
$$V^s(\vec{r}) = \sum_Q \frac{e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}}{V} \underbrace{\phi_Q}_{\left(\frac{1}{V} - \text{Normierung.}\right)} \quad \left(\frac{1}{V} - \text{Normierung.}\right)$$

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

oben Wellen-  
länge.

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

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



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

$$= \frac{-e}{(2\pi)^2 \epsilon_0} \int_0^{\infty} dQ Q^2 \int_{-1}^1 dx e^{-iQrx} \frac{1}{Q^2 + k^2}$$



$$= \frac{1}{i\alpha r} (e^{i\alpha r} - e^{-i\alpha r})$$

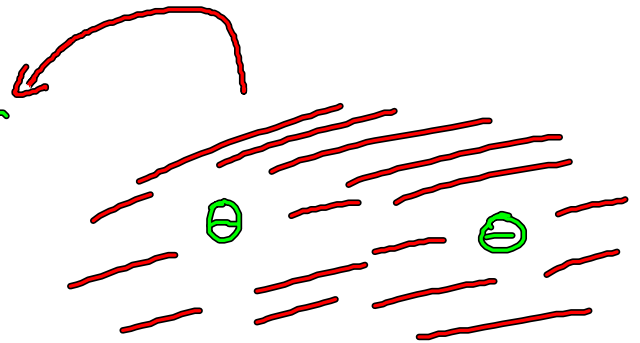
$$= \frac{2(e)}{(2\pi)^2 r \epsilon_0} \int_0^\infty dQ Q \frac{1}{Q^2 + k^2} \sin(Qr)$$

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

Zusätzlich

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

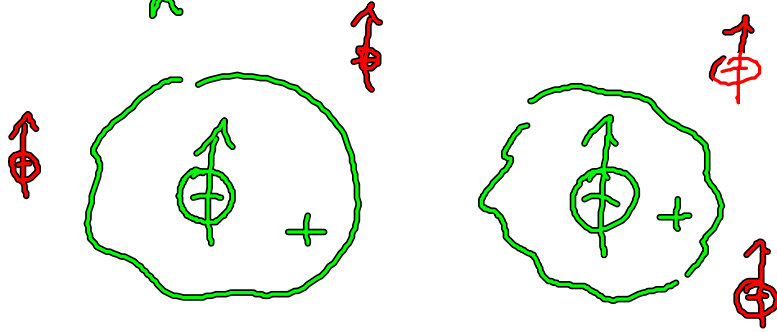
$$W = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \frac{e^{-kr}}{r}$$



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

bestimmt einen typischen WW-Abstand

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

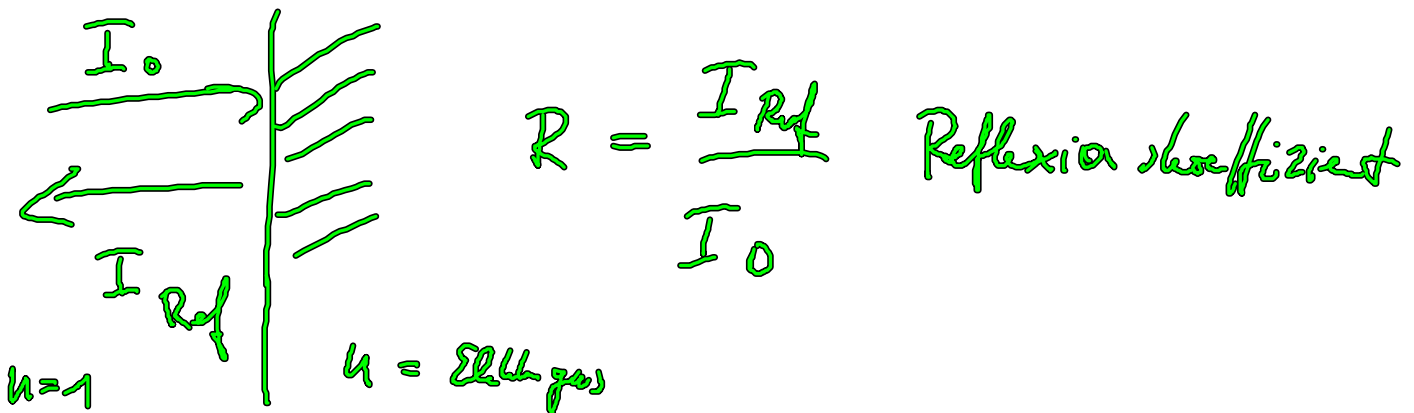


Durch das „Verdrängen“ der spingl. Elektronen in HF entsteht ein positives Austauschloch.

$$k^2 \sim \partial_\mu \mu_0$$

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

g) Metallische Reflexion des Elektronengases



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

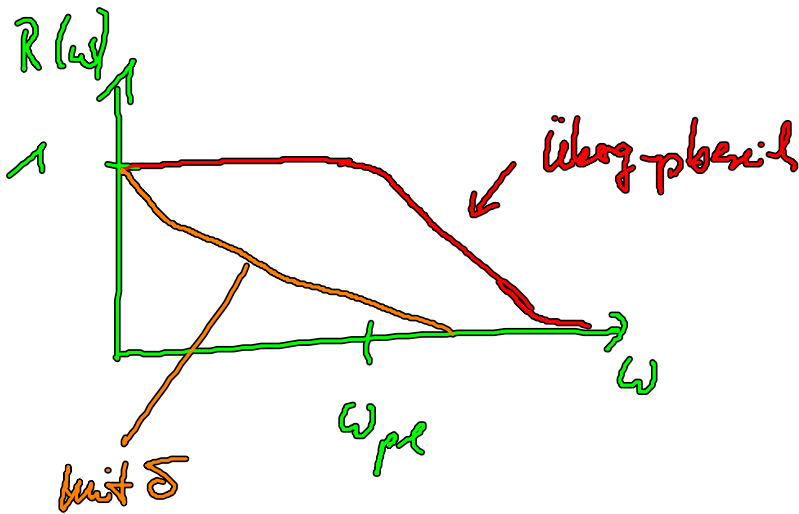
↑  
Brechzahl

$$u^2 = \epsilon = 1 - N_0 P_Q \xrightarrow{Q \rightarrow 0} = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2}$$

1. Kollektive Mode

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

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



— „schlechte Metall“<sup>9</sup>

Trennung von starker Reflexion und schwacher  
durch die Plasmasfrequenz

$\omega < \omega_{pe}$  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  $\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , weil Jellium-Ionen

gleich verteilte Ionen als periodische Anordnung betrachtet,

dieses Potential soll mitgenommen werden.

#### 1. Effektives Hamiltonian f. Elektronen im Feld (Elektronen)

Elektronen im Feld periodisch angeordneter starrer Ionen

führen 1 El.-Felds ein:  $\psi_s^\dagger(\vec{r}, t), \psi_s(\vec{r}, t)$

Spin / Ort als gleichbedeutende Variable

$$H_{el} = \sum_s \int d^3r \psi_s^\dagger(\vec{r}, t) \left( -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + \underline{V_G(\vec{r})} \right) \psi_s(\vec{r}, t)$$

*Gitterpotential der Ionen*

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

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

$\uparrow$  Ort       $\uparrow$  Spin ( $\uparrow \downarrow$ )       $\Psi_S(r, t)$  analog

$$H_{el} = \sum_{\substack{n, n' \\ s_n, s_{n'}}} \int d^3r \varphi_{n'}^*(r) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_n(r) \right) \varphi_n(r) \delta_{s_n, s_{n'}} a_{n, s_n}^+ a_{n', s_{n'}}^+$$

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

$$\int d^3r \varphi_{n'}^*(r) \varphi_n(r) = \delta_{nn'}$$

$\varphi_n$  soll effektiv bestimmt werden für  $H_{el}$

$$+ \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3, n_4 \\ s_1, s_2, s_3, s_4}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \int d^3r \frac{\varphi_{n_1}^*(r) \varphi_{n_2}^*(r') \varphi_{n_3}(r) \varphi_{n_4}(r')}{|r-r'|} \delta_{s_1, s_3} \delta_{s_2, s_4} a_{n_1, s_1}^+ a_{n_2, s_2}^+ a_{n_3, s_3} a_{n_4, s_4}$$

Die  $\varphi_n$  soll später als Eigenfunktionen von

$H_{el}$  gefunden werden, dazu:

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