

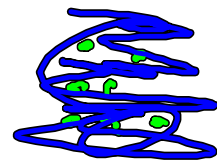
VII. Elektron - Elektron Wechselwirkung

VII.1 Jellium Modell

Einfaches Modell für Alkali-metalle

Jellium (Jelly ist Marmelade)

Idee: Ionen bilden positive Ladungshintergrund für Elektronen (Dabei ist das geeignet für schwach gebundene Elektronen)



Startpunkt: Klassische Hamilton operatoren der Coulomb Wechselwirkung

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \alpha'} \int d^3r \int d^3r' \underbrace{\rho_{\alpha}(r)}_{\text{Ladungsdichte}} \underbrace{\rho_{\alpha'}(r')}_{\text{Ladungsdichte}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r-r'|}$$

α kann Ionen oder Elektronen

$$\rho_{\alpha}(r) = (-e) \sum_{i=1}^N \delta(r-r_i) \quad \text{Ladungsdichte der Elektronen}$$

und konstante Hintergrund für die Ionen

$$\rho_i(r) = e \frac{N}{V} \quad (N \text{ Anzahl der Ionenkerne})$$

Wir führen eine Fourier transform durch (aus Felty in Ionen wird Produkt)

$$H_C = \frac{V^2}{2} \sum_{\alpha \alpha', q} W_q \rho_{\alpha, -q} \rho_{\alpha', q}$$

$$\text{mit } \rho_{\alpha, q} = -\frac{e}{V} \sum_{i=1}^N e^{-iq \cdot r_i}$$

und $f_{i,q} = \frac{eN}{V} \delta_{q,0}$ konstante Ladungsdichte

Das sehen wir also so:

$$H_c = \underbrace{H_c^{e-e}}_{\substack{\text{Elektron-Elektron} \\ \text{WW}}} + \underbrace{H_c^{e-i}}_{\substack{\text{Elektron-Ion} \\ \text{WW}}} + \underbrace{H_c^{i-i}}_{\substack{\text{Ion-Ion} \\ \text{WW}}}$$

$$H_c^{e-e} = \frac{e^2}{2} \sum_{i,j,q} W_q e^{iq(k_i - k_j)} = \frac{e^2}{2} \left(\sum_{i,j,q \neq 0} W_q e^{iq(k_i - k_j)} + \underbrace{W_{q=0} N^2}_{\text{Anzahl der Elektronen}} \right)$$

Durch statische Ersetzung
beim Ion

$$H_c^{e-i} = -\frac{e^2}{2} \sum_{i,j,q} W_q N \delta_{q,0} \left(\underbrace{e^{iq \cdot x_i}}_{\text{Elektron}} + \underbrace{e^{-iq \cdot x_j}}_{\text{Ion}} \right) = -e^2 W_{q=0} N^2$$

Die Wechselwirkungen
von Elektronen mit Ionen
kann hier gut

Logisch, egal wie die
Elektronen verhalten sind,
es sieht immer so aus
wie kontinuierlich

$$H_c^{i-i} = \frac{e^2}{2} W_{q=0} N^2$$

Wir addieren jetzt die Beiträge auf

$$\| H_C = \frac{e^2}{2} \sum_{\substack{j \neq i \\ q \neq 0}} W_q e^{iq \cdot (x_i - x_j)} \| \quad (*) \text{ Coulomb's Ham Op in Jellium Modell}$$

Schauen wir uns das genauer an

$$\sum_{\substack{j \neq i \\ q=0}} W_q e^{iq \cdot (x_i - x_j)} = \sum_{i \neq j} W_q e^{iq \cdot x_i} \sum_{j \neq i} e^{-iq \cdot x_j}$$

$$= \sum_{i \neq j} W_q e^{iq \cdot x_i} \left(\sum_j e^{-iq \cdot x_j} - e^{-iq \cdot x_i} \right)$$

$$= \sum_{i, j, q \neq 0} W_q e^{iq \cdot (x_i - x_j)} - N \sum_{q \neq 0} W_q$$

abzüglich der Selbst WW

$$\| H_C = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} W_q (V^2 \rho_{q,-q} \rho_q - e^2 N) \|$$

Coulomb's Hamilton Operator des Jellium Modells

Übergang zur Quasifeldtheoretisch Darstellung

ersetze Größen durch Operatoren:

$$\rho_{q,-q} \rightarrow \hat{\rho}_{q,-q}^\dagger$$

$$N \rightarrow \hat{N}$$

Elektronenzahloperator

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} W_q (V_{q,1}^\dagger V_{-q,1} - e^2 \beta)$$

$\rho_{e,q}$:

$$\rho_{e,q}(x) = -e \hat{n}(x) = -e \sum_s \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x)$$

Ortsabhängige Ladungsdichte \nearrow Teilchen dichte \nearrow durch Heisenberg operatoren

ψ_s^\dagger, ψ_s sind!

$$\rho_{e,-q} = \int dx e^{iq \cdot x} \rho_{e,q}(x) = -e \int dx e^{iq \cdot x} \sum_s \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x)$$

Wert ist

$$N = \int d^3r \hat{n}(r) = \int dx \sum_s \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x)$$

Wir nehmen plane Wellen: Eben Wellen!

Dann ist

$$\psi_s(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k a_{k,s} e^{ik \cdot x}$$

$$\rho_{e,-q} = -e \sum_{k,s} \frac{1}{V} \int dx e^{iq \cdot x} a_{k,s}^\dagger a_{k,s} e^{i(k-k') \cdot x}$$

$$\rho_{e,-q} = -\frac{e}{V} \sum_{k,s} a_{k+q,s}^\dagger a_{k,s}$$

Einsetzen in H_C :

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} \sum_{s,s'} V_q a_{k+q,s}^\dagger a_{k,s} a_{k'-q,s'}^\dagger a_{k',s'} - \frac{1}{2} \sum_{s,s'} a_{k,s}^\dagger a_{k,s} V_q$$

$$V_q = e^2 W_q \quad || \text{Vorgang } V_q = \frac{e^2}{2V} \frac{1}{q^2} ||$$

Hamilton Operator in Normalorder bringen!

$$a_{k+s, s}^+ a_{k, s} a_{k'-s, s}^+ a_{k', s} = \delta_{ss'} \delta_{kk'} a_{k+s, s}^+ a_{k', s} a_{k, s} - a_{k+s, s}^+ a_{k', s} a_{k, s} a_{k', s}$$

$$H_c = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k', s, s' \\ q \neq 0}} V_q a_{k+s, s}^+ a_{k'-s, s'}^+ a_{k', s} a_{k, s}$$

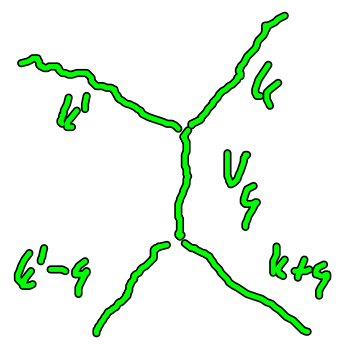
$$H_0 = \sum_{k, s} \epsilon_{k, s} a_{k, s}^+ a_{k, s}$$

$$H = H_0 + H_c$$

Elektronen Gas
Hamilton Oper

Und nun zu Metallischen Bindung in 3D Elektronen Gas

Interpretation



Vorteile

↳ Inpob wird ausgetauscht

↳ Erzeugt.

Führt das WW zwisch den Elektronen zu einer Energieabsenkung, kann eine Bindung erklärt werden?

Dazu müssen wir die Energien des Grundzustandes berechnen für freie Elektronen (Alkaliatome velle Schale der Ionen)

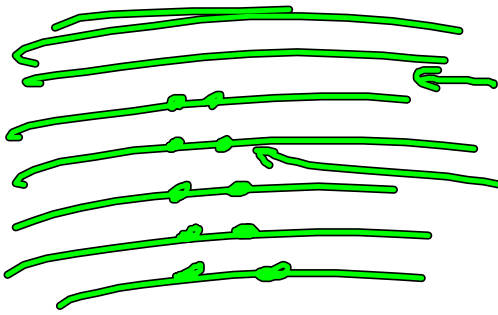
Im Prinzip: $H = H_0 + H_c$

$\underbrace{H_0}_{\text{Eg. Ionen}}$
 $+$
 $\underbrace{H_c}_{\text{Störung}}$
 (khi bei ganzen Elektronendicht)

Wir suchen ein Eigenzustat zu H_0 und dann die Grundzustat!

Pauli Prinzip, jeder Zustand kann nur einmal

besetzt werden!



Zustände

bis Fermi-Energie besetzt ($T=0$)

Zustände werden von unten nach oben aufgefüllt!

Also Grundzustand

$$|0\rangle_g = \prod_{\substack{k, s \\ s}} a_{k,s}^\dagger |0\rangle_{\text{Vakuum}}$$

Energie oben berechnen (kinetische Energie)

$$\begin{aligned} \langle 0 | \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} |0\rangle_g &= \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} \langle 0 | a_{k,s}^\dagger a_{k,s} |0\rangle_g \\ &= \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} n_{k,s} = \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} \Theta(\epsilon_F - \epsilon_{k,s}) \\ &= \frac{2}{\pi} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|k| < k_F} d^3k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 4\pi \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk k^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ &= \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^5}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \end{aligned}$$

k_F mit Teilchenzahl bestimmt

$$\begin{aligned} N = 2 \sum_{k \leq k_F} 1 &= \frac{8\pi}{(2\pi)^3} V \frac{1}{3} k_F^3 \\ \Rightarrow k_F &= \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \end{aligned}$$

$$\langle 0 | \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} |0\rangle_g = \frac{\hbar^2 V}{10\pi^2} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{5}{3}}$$

Nächster Schritt: Coulomb-Anzahl in System an: Störungs-Theorie 1. Ordnung (Hartree-Fock-Land)

$$\langle 0 | \int H_c | 0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\substack{q \neq 0 \\ k, k', s, s'}} V_q \langle 0 | a_{k+q, s}^\dagger a_{k', s'}^\dagger a_{k, s} a_{k', s'} | 0 \rangle \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \theta(\epsilon_F - \epsilon_{k'})$$

$$\rightarrow \langle 0 | a_{k+q, s}^\dagger a_{k', s'}^\dagger a_{k, s} a_{k', s'} | 0 \rangle$$

$$= - \langle 0 | a_{k+q, s}^\dagger a_{k', s'}^\dagger (-a_{k, s} a_{k', s'}^\dagger + \delta_{k, k'-q} \delta_{s, s'}) | 0 \rangle$$

Bruch $\langle 0 | a_{k', s'}^\dagger | 0 \rangle = 0 \quad \neq |k'-q| \leq k_F!$
 Das sieht schlecht!

$$= - \langle 0 | a_{k+q, s}^\dagger a_{k+q, s} | 0 \rangle \delta_{k, k'-q} \delta_{s, s'} \leftarrow \text{ganz ganz!}$$

\uparrow für $k+q \leq k_F$

|| Anstreifen der Q(k)

$$\langle 0 | \int H_c | 0 \rangle = - \frac{1}{2} \sum_{\substack{q \neq 0 \\ k, k', s}} V_q \delta_{k+q, k'} \theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \theta(\epsilon_F - \epsilon_{k'})$$

⋮
 Dieses Integral wird dir gelöst
 (siehe Haus Koch für Reduz)

$$= - \frac{e^2 V}{4\pi (4\pi^2 \epsilon_0)} (3\pi^2 n)^{\frac{4}{3}}$$

Insgesamt: 5.4 a)

$$\langle 0 | \int H | 0 \rangle = \frac{\hbar^2 V}{16\pi \pi^2} (3\pi^2 n)^{\frac{5}{2}} - \frac{e^2 V}{(4\pi) (4\pi^2 \epsilon_0)} (3\pi^2 n)^{\frac{4}{3}}$$

Das kann umformuliert werden mit Wigner-Seitz-Radius $r_s!$

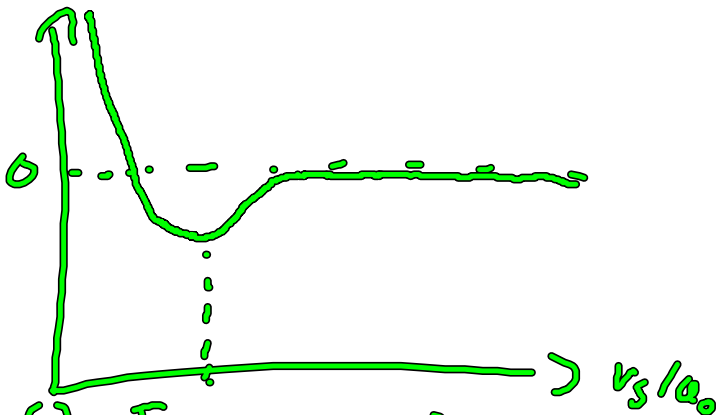
Radius ein Kugel die genau ein Teilchen einschließt

$\| r_s^{-3} = \frac{4\pi}{3} n a_0^3 \|$ in Einheiten des Bohr's Radius
 Die Form kann angestreicht werden (s. Plus, Elementary Excitations in Solids)

Rydberg $\Sigma_{Ryd} = \frac{1}{2m a_0^2}$

$E_{\text{Fermi}} = \frac{2.21}{r_s^2} \text{ rydbergs} - \frac{0.916}{r_s} \text{ rydbergs}$

E in Rydbergs kritische Anzahl
Ausgleichswert, führt zur Energieabsorption \Rightarrow Bindung



- (i) $E_{\text{Fermi}} < 0 \Rightarrow$ bindende Zustand
- (ii) Es existiert optimale Elektronendichte (Abstand der Sithe) \Rightarrow Phänomen der metallischen Bindung!
 qualitativ durch Abschirmen der Anziehung \Rightarrow $U \sim 1/r$ verschleht!

Die Bindung in der 1. Ordnung (Störungsrechnung) entspricht bei Kontaktvermittlung. Hückel-Fock Level!

Achtung hier können sich Teilchen auf der Spin Ebene nicht nahe! (fehlt Coulomb Abstoßungs feld)
 Nächste Stufe Kontaktenergie!