# VIII. 2 Coulomb Hamiltonoperator

Die klassische Coulomb-Wechselwirkung hat die Hamiltonfunktion!

$$H_{Coul} = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \, \rho(\underline{r},t) \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\underline{r}-\underline{r}'|} \rho(\underline{r}',t)$$

H-Funktion

$$\rho(\underline{r},t) = \sum_i \varphi_i^*(\underline{r},t)\, \varphi_i(\underline{r},t)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} \int d^3r \int d^3r' \, \varphi_i^*(\underline{r},t)\, \varphi_i(\underline{r},t) \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\underline{r}-\underline{r}'|} \varphi_j^*(\underline{r}',t)\, \varphi_j(\underline{r}',t)$$

Übergang in 2. Quantisierung, Problem die Ordnung der Operatoren ist nicht ausgezeichnet!
Wir wählen die Ordnung der Operatoren so, dass es keine Energie beim Vakuum Zustand gibt.
Außerdem soll es keine Energie bei 1-Teilchen Zuständen

S. 4A.

$$H_{Coul} = \sum_{ss'} \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \, \psi_s^\dagger(\underline{r})\, \psi_{s'}^\dagger(\underline{r}') \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \psi_{s'}(\underline{r}')\, \psi_s(\underline{r})$$

Reihenfolge durch Vorzeichen der Schrödingerfeld gegeben.

Wichtig hier ist auch Spin s dabei, vorher haben wir den Spin vernachlässigt.

Ziel: Ausdruck für Coulomb Wechselwirkung durch Blochfunktionen

Erinnerung: Blochfunktion

$i\underline{k}\cdot\underline{r}$

$$\varphi_{\lambda,k}(x) = \frac{e}{\sqrt{V}} \; u_{\lambda,k}(x)$$

<u>Also gilt so</u>: $\psi_s^+(x) = \sum_{\lambda k} \varphi^*_{\lambda,k,s}(x)\, a^+_{\lambda,k,s}$

Einsetzen:

$$H_{Coul} = \sum_{\substack{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4 \\ k_1,k_2,k_3,k_4}} V^{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}_{k_1,k_2,k_3,k_4}\; a^+_{\lambda_1 k_1} a^+_{\lambda_2 k_2} a_{\lambda_3 k_3} a_{\lambda_4 k_4}$$

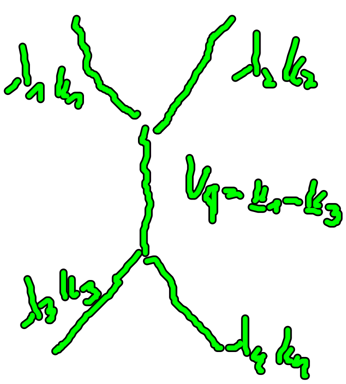
Abschirmung $\Leftarrow$ $-\varkappa|x_1-x_2|$

$$V^{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}_{k_1k_2k_3k_4} = \int dx_1 \int dx_2\; \varphi^*_{\lambda_1 k_1}(x_1)\varphi^*_{\lambda_2 k_2}(x_2) \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 |x_1-x_2|}\, e \;\varphi_{\lambda_3 k_3}(x_2)\, \varphi_{\lambda_4 k_4}(x_1)$$

$$= \underset{\text{ÜA}}{\ldots} = \frac{e^2}{V\varepsilon_0(|k_1-k_3|^2+\varkappa^2)}\; \underbrace{\delta_{\lambda_1\lambda_4}\,\delta_{\lambda_2\lambda_3}}_{\text{gilt für Spin}}\; \delta_{k_1+k_2,\,k_3+k_4}$$

Skizze f. Coulomb WW

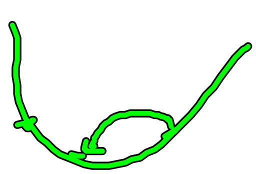
$a^+_{\lambda_1 k_1} a^+_{\lambda_2 k_2} a_{\lambda_3 k_3} a_{\lambda_4 k_4}$

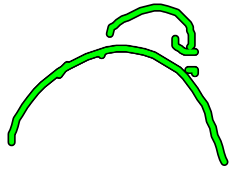



Wenn $\lambda_1=\lambda_3$
$\lambda_2=\lambda_4$

in der Näherung ändert die Coulomb Wechselwirkung nicht das Band des jeweiligen Elektrons.

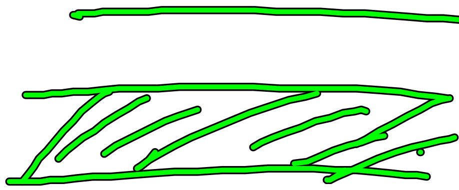
Quasiimpuls wird erhalten.





# VII.3 Plasmonen

Plasmonen: kollektive Anregungen des Elektronengases
(z.B. in den Bändern von Metallen)



$\Longleftarrow$ Band halbgefüllt in Metallen

In Halbleitern, Elektronenplasma durch Anregung (z.B. Laser) oder Dotierung erzeugen.

## (i) klassische Theorie (Motivation)

Wir sehen uns die Dynamik der Elektronen an:

$$\partial_t \underbrace{(m\underline{v})}_{\text{Impuls Elektron}} = \underbrace{-e\,\underline{E}(t)}_{\text{Lorentzkraft}}$$

Bei vielen Elektronen gilt es die Stromdichte $j$:

$$j(x,t) = e\,\frac{1}{\underbrace{\Delta V}_{\text{Mittelungsvolumen}}}\,\underbrace{\sum_i v_i}_{\text{Summe über Geschwindigkeiten der Elektronen im Mittelungsvolumen.}}$$

Das ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial t}\, j(x,t) = \frac{e^2}{m}\,\underbrace{\frac{\overset{\text{Anzahl der Elektronen}}{\Delta N}}{\Delta V}}_{\text{also Ladungsdichte}}\,\underbrace{\underline{E}(x,t)}_{\text{mittlere Feldstärke}}$$

## Die Kontinuitätsgl. ist: ''

$\nabla\cdot j = -\frac{\partial\rho}{\partial t}$ außerdem $\nabla\cdot E = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla\cdot\frac{\partial}{\partial t} j = -\frac{e^2 n}{m}\,\nabla\cdot E(x,t) = -\frac{e^2 n}{m\varepsilon_0}\rho$$

$$\Rightarrow \quad \left\| \; \frac{\partial^2}{\partial t^2}\rho = -\frac{e^2 n}{m\varepsilon_0}\rho \; \right\| \qquad \omega_{pl} = \left(\frac{e^2 n}{m\varepsilon_0}\right)^{\frac{1}{2}}$$

↑ im Band durch effektive Masse ersetzen.

Plasma schwingt mit der Plasmafrequenz!

## (ii) Quantenmechanische Theorie

Wir berechnen die Dichteschwankung im Fourierraum

$$\rho_q(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int \underbrace{\psi^+(x,t)\,\psi(x,t)}_{\rho(x,t)} e^{iq\cdot x}\, d^3x$$

(Darstellung für freie Elektronen)

$$\rho_q = \frac{1}{\sqrt{V}\,V} \sum_{k k'} \underbrace{\int e^{-ik\cdot x + ik'\cdot x + iq\cdot x}\, d^3x}_{V\,\delta_{k-k'-q,0}} \; a^+_{k}\, a_{k'}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k a^+_{k+q}\, a_k$$

Für den Erwartungswert $\langle \dots \rangle = tr(\dots \rho)$

$$\langle \rho_q \rangle = \sum_k \underbrace{\langle a^+_{k+q}\, a_k \rangle}$$

Wir brauchen die Dynamik von $\langle a^+ a\rangle$: Wir brauchen einen Hamiltonoperator für die Berechnung.

$$\underline{H} = \underbrace{H_0}_{\text{kinetischer Anteil}} + \underbrace{H_C}_{\text{Elektron-Elektron Wechselwirkung}}$$

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k\, a^+_k a_k$$

$$H_C = \frac{1}{2}\sum_{q k' k} V_q\, a^+_k a^+_{k'} a_{k'+q} a_{k-q}$$

Heisenberg bewegungsgl. für $a^+_{k+q}\, a_k$

$$\frac{d}{dt} A = \frac{i}{\hbar} [H, A]_-$$

$$\frac{d}{dt} a^+_{k+q}\, a_k = \frac{i}{\hbar} [H, a^+_{k+q}\, a_k]_- \quad | \text{ Erwartungswerte}$$

$$\frac{d}{dt} \langle a^+_{k+q}\, a_k \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, a^+_{k+q}\, a_k]_- \rangle$$

$$= \underbrace{\frac{i}{\hbar} \langle [H_0, a^+_{k+q}\, a_k]_- \rangle}_{(a)} + \underbrace{\frac{i}{\hbar} \langle [H_c, a^+_{k+q}\, a_k]_- \rangle}_{(b)}$$

$$(a) = \sum_{k'} \varepsilon_{k'} \langle [a^+_{k'} a_{k'}, a^+_{k+q}\, a_k]_- \rangle =$$

$$= \sum_{k'} \varepsilon_{k'} \Big( \langle a^+_{k'} \underbrace{a_{k'} a^+_{k+q}}_{\delta_{k',k+q}} a_k \rangle - \langle a^+_{k+q} \underbrace{a_k a^+_{k'}}_{\delta_{k k'}} a_{k'} \rangle \Big)$$

$$= \sum_{k'} \varepsilon_{k'} \Big( \delta_{k',k+q} \langle a^+_{k'} a_k \rangle - \cancel{\langle a^+_{k'} a^+_{k+q} a_{k'} a_k \rangle}$$

$$- \delta_{kk'} \langle a^+_{k+q} a_{k'} \rangle + \cancel{\langle a^+_{k+q} a^+_{k'} a_k a_{k'} \rangle} \Big)$$

$$= (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \langle a^+_{k+q}\, a_k \rangle$$

$$(b) = \frac{1}{2} \sum_{\tilde q \tilde k' \tilde k} V_{\tilde q} \langle [a^+_{\tilde k} a^+_{\tilde k'} a_{\tilde k'+\tilde q}\, a_{\tilde k-\tilde q}, a^+_{k+q}\, a_k]_- \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\tilde q \tilde k' \tilde k} V_{\tilde q} \Big( \langle a^+_{\tilde k} a^+_{\tilde k'} a_{\tilde k'+\tilde q}\, a_{\tilde k-\tilde q}\, a^+_{k+q}\, a_k \rangle$$

$$- \langle a^\dagger_{k+q} a_k a^\dagger_{\tilde k} a^\dagger_{\tilde k'} a_{\tilde k'+\tilde q} a_{\tilde k-\tilde q}\rangle \Big)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\tilde q \tilde k' \tilde k} V_{\tilde q} \Big( \delta_{\tilde k-\tilde q, k+q} \langle a^\dagger_{\tilde k} a^\dagger_{\tilde k'} a_{\tilde k'+\tilde q} a_k\rangle$$
$$- \delta_{k+q, \tilde k'+\tilde q} \langle a^\dagger_{\tilde k} a^\dagger_{\tilde k'} a_{\tilde k-\tilde q} a_k\rangle$$
$$+ \langle a^\dagger_{\tilde k} a^\dagger_{\tilde k'} \cancel{a^\dagger_{k+q} a_{\tilde k'+\tilde q}} a_{\tilde k-\tilde q} a_k\rangle$$
$$- \delta_{k\tilde k} \langle a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{\tilde k'} a_{\tilde k'+\tilde q} a_{\tilde k-\tilde q}\rangle$$
$$+ \delta_{k\tilde k'} \langle a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{\tilde k} a_{\tilde k'+\tilde q} a_{\tilde k-\tilde q}\rangle$$
$$- \langle a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{\tilde k} \cancel{a^\dagger_{\tilde k'} a_k} a_{\tilde k'+\tilde q} a_{\tilde k-\tilde q}\rangle \Big)$$

$$= \frac{1}{2} \Big( \sum_{\tilde q \tilde k} V_{\tilde q} \big[ \langle a^\dagger_{k+q+\tilde q} a^\dagger_{\tilde k} a_{\tilde k+\tilde q} a_k\rangle - \langle a^\dagger_{\tilde k} a^\dagger_{k+q+\tilde q} a_{\tilde k-\tilde q} a_k\rangle$$
$$- \langle a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{\tilde k} a_{\tilde k+\tilde q} a_{k-\tilde q}\rangle + \langle a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{\tilde k} a_{k+\tilde q} a_{\tilde k-\tilde q}\rangle \big] \Big)$$

$$= \sum_{\tilde q \tilde k} V_{\tilde q} \Big( \underbrace{\langle a^\dagger_{k+q+\tilde q} a^\dagger_{\tilde k} a_{\tilde k+\tilde q} a_k\rangle} - \langle a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{\tilde k} a_{\tilde k+\tilde q} a_{k-\tilde q}\rangle \Big)$$

Problem: Einteilchenobservable $\langle a^\dagger a\rangle$ koppelt an $\langle a^\dagger a^\dagger a a\rangle$ Zweiteilchenobservable

Warum: Zweiteilchenwechselwirkung bringt nur ein weiteres Teilchen hinzu! Führt zu unendlicher Hierarchie!

<u>Möglichkeit der Lsg:</u> Approximation von Zweiteilchenobservable durch Produkt von Einteilchenobservable!

<u>Hartree-Fock-Faktorisierung (HF) um Hierarchie zu schließen:</u>

$$\langle a^\dagger_1 a^\dagger_2 a_3 a_4\rangle = \langle a^\dagger_1 a_4\rangle\langle a^\dagger_2 a_3\rangle - \langle a^\dagger_1 a_3\rangle\langle a^\dagger_2 a_4\rangle$$

$$(3) = \sum_{\tilde{k}\,k} V_{\tilde{q}} \Big( \langle a^\dagger_{k+q+\tilde{q}} a_k \rangle \langle a^\dagger_{\tilde{k}} a_{\tilde{k}+q} \rangle - \langle a^\dagger_{k+q+\tilde{q}} a_{\tilde{k}+\tilde{q}} \rangle \langle a^\dagger_{\tilde{k}} a_k \rangle$$

$$- \langle a^\dagger_{k+q} a_{k-\tilde{q}} \rangle \langle a^\dagger_{\tilde{k}} a_{\tilde{k}+q} \rangle + \langle a^\dagger_{k+q} a_{\tilde{k}+q} \rangle \langle a^\dagger_{\tilde{k}} a_{k-\tilde{q}} \rangle \Big)$$

**Random Phase Approximation:**

Wir nehmen jetzt nur Terme mit $\langle a^\dagger_{k+q} a_k \rangle$ und $\langle a^\dagger_k a_k \rangle$ ist!

Begründung: $\langle a^\dagger_{k_1} a_{k_2} \rangle$ schwingt wie $e^{i(\omega_{k_1}-\omega_{k_2})t}$.

Wir nehmen nur Terme mit die genauso wie die Dichtefluktuationen $\langle a^\dagger_{k+q} a_k \rangle$ oder gar nicht schwingen

Hintergrund: Wir betrachten nur leichte Fluktuationen von der Gleichverteilung der Elektronen, d.h. $\langle a^\dagger_{k+q} a_k \rangle$ als Störung, andere Terme wären starke Abweichung.

$$(3) = \sum_{\tilde{k}} V_q \Big( \langle a^\dagger_k a_k \rangle \langle a^\dagger_{\tilde{k}+q} a_{\tilde{k}} \rangle - \cancel{\langle a^\dagger_k a_{k+q} \rangle \langle a^\dagger_k a_k \rangle \delta_{q0}}$$

$$- \langle a^\dagger_{k+q} a_{k+q} \rangle \langle a^\dagger_{\tilde{k}+q} a_{\tilde{k}} \rangle + \cancel{\langle a^\dagger_{k+q} a_{k+q} \rangle \langle a^\dagger_k a_{k-q} \rangle} \Big)$$

$$= V_q \sum_{\tilde{k}} \left( \langle a^\dagger_k a_k \rangle - \langle a^\dagger_{k+q} a_{k+q} \rangle \right) \langle a^\dagger_{\tilde{k}+q} a_{\tilde{k}} \rangle$$

**Gesamtgleichung:**

$$\frac{d}{dt} \langle a^\dagger_{k+q} a_k \rangle = \frac{i}{\hbar} \left( \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k \right) \langle a^\dagger_{k+q} a_k \rangle$$

$$+\frac{\bar{i}}{\hbar} V_q \left(\langle a_k^+ a_k\rangle - \langle a_{k+q}^+ a_{k+q}\rangle\right) \sum_{\bar{k}} \langle a_{\bar{k}+q}^+ a_{\bar{k}}\rangle$$

Jetzt versuchen wir die Eigenfrequenz der Plasmaschwingung zu finden.

Ansatz

$$\langle a_{k+q}^+ a_k\rangle(t) = e^{-i(\omega+i\eta)t} \langle a_{k+q}^+ a_k\rangle(0)$$

kollektive Schwingung

$\eta$ sorgt dafür die Kausalität sicher!

$$\Rightarrow (-i(\omega+i\eta)) \langle a_{k+q}^+ a_k\rangle(0) = \frac{\bar{i}}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)\langle a_{k+q}^+ a_k\rangle(0)$$

$$+\frac{\bar{i}}{\hbar} V_q \left(\underbrace{\langle a_k^+ a_k\rangle}_{f_k} - \underbrace{\langle a_{k+q}^+ a_{k+q}\rangle}_{f_{k+q}}\right) \sum_{\bar{k}} \langle a_{\bar{k}+q}^+ a_{\bar{k}}\rangle$$

Besetzungszahl (als konstant angenommen)

$$\Downarrow$$

$$\langle a_{k+q}^+ a_k\rangle = \frac{\frac{\bar{i}}{\hbar} V_q (f_k - f_{k+q})}{\left(-i(\omega+i\eta) - \frac{\bar{i}}{\hbar}(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)\right)} \sum_{\bar{k}} \langle a_{\bar{k}+q}^+ a_{\bar{k}}\rangle$$

Jetzt über $\sum_k$ summieren. Beachte $\sum_k \langle a_{k+q}^+ a_k\rangle = \rho_q$

$$\rho_q = \sum_k \frac{V_q (f_{k+q} - f_k)}{\hbar(\omega+i\eta) + (\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)} \rho_q$$

$$\Rightarrow \boxed{1 = V_q \sum_q \frac{(f_{k+q} - f_k)}{\hbar(\omega+i\eta) + (\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)}}$$

Bestimmungsgleichung für Plasmaresonanzen.