4.) Plasmonen als kollektive Anregungen des Elektronengases

Elektronengas ist ein WW System, entwickelt nach gekoppelte Impulszuständen $(\vec{k}, \vec{q}, \vec{p})$, suche nach kollektive Anregunge (Plasmonen) nach einer Anregung von außen

Welche Energien kann der Elektronensee absorbieren, d.h. Plasmon-anregg.

4.1) Klassische Theorie

Newtonsche Gleichg. f. Elektronen

$$\partial_t (m \vec{v}) = -e \vec{E}$$

El-Impuls — Lorentzkraft als Rücktreibend

Kraft und Auslenkg.
im Elektronensee.

Geschwindigkeitsfeld

Ladungsdichte

viele Elektronen: $\vec{j}(\vec{r},t) = \vec{v}(\vec{r},t)\,\rho_{el}(\vec{r},t)$

0 im Gleichgewicht

$= \vec{v}(\vec{r},t)\left(\rho^{0}_{el} + \delta\rho(\vec{r},t)\right)$

ohne Störung
homogene Dichte

für kleine Störungen: $\approx \vec{v}(r,t)\,\rho^{0}_{el}$

$$\rho^{0}_{el} = q n_0 \qquad (q = -e)$$

$$\delta\rho_{el} = q\,\delta\rho$$

$$\partial_t \vec{j} = \frac{e^2}{m} n_0 \vec{E} \qquad \Big|\ \vec{\nabla}\cdot$$

$$\partial_t \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = \frac{e^2}{m} n_0 \vec{\nabla}\cdot\vec{E}$$

$$\downarrow \qquad\qquad \downarrow$$

$\vec{\nabla}\cdot\vec{j} = -\partial_t\rho$ $\qquad$ $\vec{\nabla}\cdot\vec{E} = \frac{\delta\rho}{\varepsilon_0}$ $\qquad$ (Ionen und Elektronen $\rho^{0}_{el} + \rho^{0}_{ion}$ kompensieren sich)

(Kontinuitätsgl.) $\qquad$ (Quellgl. der ED)

$\vec{\nabla}\cdot\vec{j} = -\partial_t\delta\rho$ $\qquad$ $\vec{\nabla}\cdot\vec{E} = \frac{\delta\rho}{\varepsilon_0}$

$$\boxed{-\partial_t^2\, \delta\rho = \frac{e^2 n_0}{m\,\varepsilon_0}\, \delta\rho}$$

Schwingungsgl. mit der Plasmafrequenz:

$$\omega_{pl} = \left(\frac{e^2 n_0}{m\,\varepsilon_0} \right)^{1/2}$$

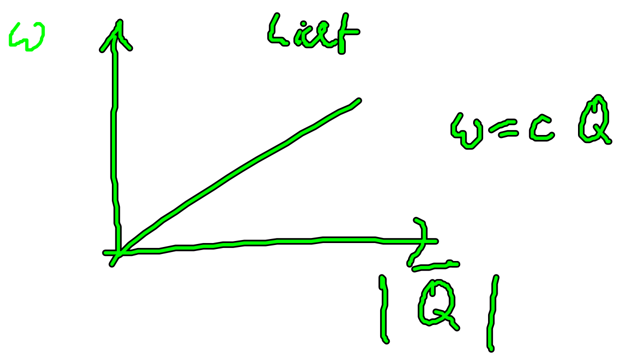
m_{eff} (später: mit Gitter)

Es existieren mgl. Ladungsdichteschwingg. mit der Plasmafrequenz.

4.2. Quantenmechanische Theorie

Suche nach wellenartige Anregungen mit einer quantenmech. bestimmten Dispersionsrelation $\omega = \omega(Q)$

$(|\vec{Q}|)$



Gibt es etwas analoges im Elektronengas?

Elektronenladungsdichte: $\rho = -e \sum_s \Psi_s^+(r,t)\, \Psi_s(r,t)$

aus den Heisenbergbewegungsgl. wird dann $\omega = \omega(Q)$

für $\rho(r,t)$ bedeutet:

$$\rho = -e \sum_s \sum_{k_1 k_2} \underline{\frac{e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}\, a^+_{k_1 s}}\ \frac{e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}\, a_{k_2 s}$$

$$Q = k_1 - k_2 \,, \qquad k = \frac{k_1 + k_2}{2}$$

$$\rho = -\frac{e}{V} \sum_S \sum_{Qk} a^+_{k+\frac{Q}{2} s}\, a_{k-\frac{Q}{2} s}\, e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}}$$

$$Q \to -Q \,, \qquad k \to k - \frac{Q}{2}$$

$$\langle \rho \rangle = -\frac{e}{V} \underbrace{\sum_Q \sum_{k,s} \langle \underbrace{a^+_{k-Q\, s}\, a_{k s}}_{\text{Funktion der Zeit} = G^{SS}_{k-Q\, k}(t)} \rangle}_{\text{Fouriertrafo der Ladungsdichte } \langle \rho_Q(t) \rangle} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}}$$

↑ Erwartungswert

$$= -\frac{e}{V} \sum_Q \int d\omega \, \langle \rho_Q(\omega) \rangle \, e^{-i\omega t + i\vec{Q}\cdot\vec{r}}$$

↑ entscheidet ob wellenartige Ausbreitung. Lsg. ist $\omega = \omega(Q)$

Stelle die Heisenbergl. auf für $\rho_Q(\omega)$ über $a^+_{k-Q s}\, a_{k s}(t)$

und hoffen auf das Auffinden von $\omega = \omega(Q)$.

$$-i\hbar\,\partial_t \left(a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks} \right) = \left[\underline{H},\ a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks} \right]$$

$$\underline{H} = \underset{\text{kinet. Energie}}{\underline{H}_0} + \underset{\text{potentielle Energie}}{\underline{H}_{el-el}}$$

$$\underline{H}_0 = \sum_{k,s} \varepsilon_{ks}\, a^+_{ks}\, a_{ks}\,, \quad \varepsilon_{ks} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$\underline{H}_{el-el} \to$ selbst (ÜA)

$$\left[\underline{H}_0,\ a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks} \right]_- = \left[\sum_{k's'} \varepsilon_{k'}\, a^+_{k's'}\, a_{k's'},\ a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks} \right]$$

$$= \sum_{k's'} \varepsilon_{k'} \Big(\underbrace{a^+_{k's'}\, a_{k's'}\, a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks}}_{\text{vertauschen, bis}} - \underline{a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks}\, a^+_{k's'}}\, a_{k's'} \Big)$$

übrig bleibt

$$= \sum_{k's'} \varepsilon_{k'} \Big(a^+_{k's'} \big(\delta_{k',k-Q}\, \delta_{ss'} - a^+_{k-Q\,s}\, a_{k's'} \big) a_{ks} - \underline{\quad} \Big)$$

" – "   " – "

$$= \varepsilon_{k-Q\,s}\, a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks} - \sum_{k's'} \varepsilon_{k'}\, a^+_{k-Q\,s} \big(\delta_{kk'}\delta_{ss'} - a_{ks}\, a^+_{k's'} \big) a_{k's'}$$

$$= \left(\varepsilon_{k-Q\,s} - \varepsilon_{ks} \right) a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks}$$

im El-El-Anteil macht man Näherungen:

0/ Hartree-Fock

1/ Spinkohärenz vernachlässigen

$\sigma^{ss'} \longrightarrow \delta_{ss'}\, \sigma^{ss}$

2/ nur $\sigma_{k_1 k_2}$ mit $\sigma_{k_1 k_1}$, $\sigma_{k_1-q\, k_1}$ mitnehmen

andere $\rightarrow 0$

diese Terme können u. U. durch den externen Störprozeß angeregt werden, muß dann neu diskutiert werden

$$-i\hbar\, \partial_t\, \sigma^{ss}_{k-Q\,k} = \left(\varepsilon_{k-Q\,s} - \varepsilon_{ks} \right) \underline{\sigma^{ss}_{k-Q\,k}}$$

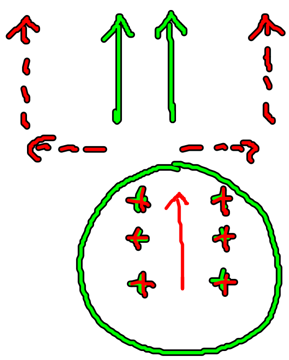
kinetische Energie

$$+ V_Q \left(\sigma^{ss}_{kk} - \sigma^{ss}_{k-Q\,k-Q} \right) \sum_{s'p} \sigma^{s's'}_{p-Q\,p}$$

Energie renormierung.

$$+ \sum_{qs'} V_q \left(\sigma^{s's'}_{k-q\,k-q} - \sigma^{s's'}_{k-Q+q\,k-Q+q} \right) \underline{\sigma^{ss}_{k-Q\,k}}$$

Bewggl. für die Fouriertrafo (Ort) der Ladungsdichte $\rho_Q(t)$, $\exists$ Energierenormierung (Hartree-Fock Energie) mit der bereits besprochenen Energieabsenkung (3. Zeile)



gleiche Spins stoßen sich ab

$\longrightarrow$ führt zu E-Absenkg. durch eine scheinbare positive Ladungswolke „Austauschloch"

2. Zeile: Kopplg von $\sigma^{ss}_{k-Q\,k}$ an $\sum_{ps'} \sigma^{s's'}_{p-Q\,p}$

$\longrightarrow$ diese <u>Kopplg.</u> erinnert an gekoppelte Pendel (naiv)

wenn man diese „irgendwie" entkoppelt so findet man die „echten" kollektiven Anregungen

<u>dazu</u>:

Fouriertrafo in Zeit

renormiert

$$\left(\hbar\omega + \tilde{\varepsilon}_{k-Q\,s} - \tilde{\varepsilon}_{k\,s}\right) G^{ss}_{k-Q\,k}(\omega)$$

$$= -V_Q \Big(\underbrace{\underline{G^{ss}_{kk}} - \underline{G^{ss}_{k-Q\,k-Q}}}_{\text{zeitlich konstant}} \Big) \sum_{s'p} G^{s's'}_{p-Q\,p}(\omega)$$

$\rho(r,t)$

$e^{i\vec{Q}\vec{r}} \cdot \rho_Q$

$\langle a^\dagger_{k-Q}\, a_k \rangle$

(„echte Dichte", räumlich homogen)

$$\underline{G^{ss}_{k-Q\,k}} = -V_Q \frac{G^{ss}_{kk} - G^{ss}_{k-Q\,k-Q}}{\hbar\omega + \tilde{\varepsilon}_{k-Q\,s} - \tilde{\varepsilon}_{k\,s}} \underline{\sum_{s'p} G^{s's'}_{p-Q\,p}}$$

$$\sum_{sk}$$

$$\boxed{\Rightarrow \quad 1 = -V_Q \sum_{sk} \frac{G^{ss}_{kk} - G^{ss}_{k-Q\,k-Q}}{\hbar\omega - \tilde{\varepsilon}_{k-Q\,s} - \tilde{\varepsilon}_{k\,s}}}$$

stellt die Dispersionsrelation von Plasmonen dar

Bemerkungen:

a) Bestimmungsgleichung für $\omega = \omega(Q)$

die Parameter ω, Q müssen durchgefahren werden

b) $\omega = \omega(Q)$ legt die Moden fest mit denen sich $\delta\rho(r,t)$ ausbreiten kann:

$$e^{-i\omega(Q)t - i\vec{Q}\cdot\vec{r}}$$ bestimmt Ausbreitung

jede Anfangsbedingung und weitere Dynamik kann nach diesen Moden entwickelt werden

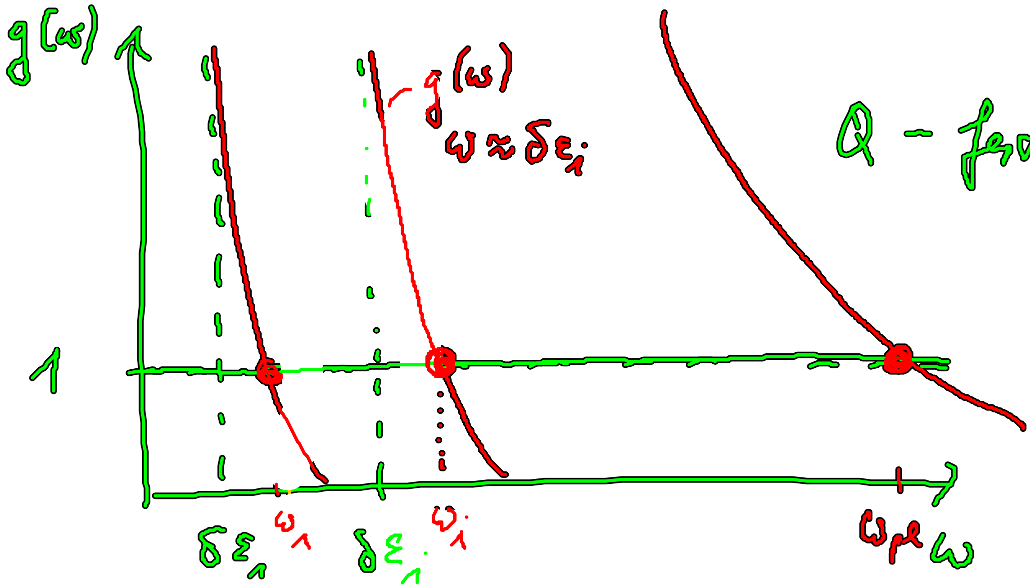
c) $\omega = \omega(Q)$ f. festes Q ist eine Plasmonenanregung

d) Dispersion ist von den elektronischen Besetzungswahrscheinlichkeiten abhängig

($\sigma^{ss}_{kk} \mathrel{\hat{=}}$ Wahrscheinlichkeit ein Elektron in Zustand k,s zu finden)

(T)

e) graphische Lösung: $1 = g(\omega)$, f. feste Q



Q – fest $\quad g(\omega) \sim \sum_i \frac{1}{\hbar\omega - \delta\varepsilon_i}$

Es gilt aufgrund der Resonanzstruktur $g(\omega)$ viele dichtliegende Moden ω und eine weitere isolierte Mode ($\hat{=}$ klass. Plasmafrequenz)

① isolierte Mode

$\underbrace{\hphantom{isolierte\ Mode}}$

kollektive Schwing. des El-gas

$\omega \to \omega_{pl} + \alpha Q^2$

verkoppelte Bewegg. aller El. die

② dichtliegende Moden

$\underbrace{\hphantom{dichtliegende\ Moden}}$

Einteil der Übergänge $k \to k-q$ durch Coulomb WW

$\omega_Q \approx \left(\tilde{\varepsilon}_k - \tilde{\varepsilon}_{k-Q} \right)$

u identisch Schwingungen
durch die Coulombwelle