

3. Jellium-Modell des homogenen Elektronengases

Einfaches Modell zur Beschreibung der metall. Bindung.

- Annahmen:
 - Ionen bilden homogen verschmierten positiven Hintergrund (genügend klass. Behandlung)



- Ladungsneutralität
- konst. Gitterpotential

e^- in 2. Q'isierung - 1 Bandmodell
Bloch fkt. en

$$H = H_e + H_{e-e} + \underbrace{H_{ion}}_{\text{statisch}} + \underbrace{H_{e-ion}}_{\text{WW}}$$

wichtige Beiträge

$$H_{ion} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{nn'} \frac{1}{|\underline{r}_n - \underline{r}_{n'}|}$$

Jelly \downarrow
 $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r \int d^3r' \frac{u(r) u(r')}{|\underline{r} - \underline{r}'|} e^{-\lambda |\underline{r} - \underline{r}'|}$

Abschirmung
konvergenz erz. Faktor

$$u(r) = \text{const} = \frac{N}{V} = \frac{\text{Anzahl der Ionen}}{\text{Volumen}}$$

$$= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{N^2}{V^2} V \cdot \int d^3\vec{r} \frac{e^{-\alpha|\vec{r}|}}{|\vec{r}|}$$

$$= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{e^2 N^2}{2\epsilon_0 V \alpha^2}$$

divergiert, wird aber kompensiert durch andere Beiträge aus H

$$H_{e-ion} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_u \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_u|}$$

$$= - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N}{V} \sum_u \int d^3\vec{r} \frac{e^{-\alpha|\vec{r} - \vec{r}_u|}}{|\vec{r} - \vec{r}_u|}$$

$$= - \frac{e^2 N^2}{\epsilon_0 V \alpha^2}$$

$$\Rightarrow H = \underbrace{H_e - H_{ee}}_{2. \text{ Q'isierung}} - \frac{1}{2} \frac{e^2 N^2}{\epsilon_0 V \alpha^2}$$

$$H_e = \sum_{\vec{k}_s} \epsilon_{\vec{k}_s} a_{\vec{k}_s}^\dagger a_{\vec{k}_s} \quad \text{mit} \quad \epsilon_{\vec{k}_s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{1234} V_{34}^{12} a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \quad \text{mit} \quad 1 \neq \vec{k}_1, \vec{s}_1$$

$$V_{34}^{12} = \frac{e^2}{V \epsilon_0 (|\underline{k}_1 - \underline{k}_3|^2 \alpha d^2)} \delta_{\underline{k}_1 + \underline{k}_2, \underline{k}_3 + \underline{k}_4} \delta_{s_1, s_3} \delta_{s_2, s_4}$$

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{kpq} \sum_{ss'} V_q a_{k+q, s}^\dagger a_{p-q, s'}^\dagger a_{p, s'} a_{k, s}$$

$$\begin{aligned} k_1 &= k+q \\ k_2 &= p-q \\ k_3 &= k_1 + k_2 - k_4 = p \\ k_4 &= k \end{aligned}$$

• wichtig: $q=0$ Beitrag von H_{ee}

$$H_{ee} |_{q=0} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{V \epsilon_0 \alpha^2} \sum_{kp} \sum_{ss'} a_{k, s}^\dagger a_{p, s'}^\dagger a_{p, s'} a_{k, s}$$

$$\delta_{pk} \delta_{s', s} - a_{k, s} a_{p, s'}^\dagger$$

$$= \dots \left(- \underbrace{a_{k, s}^\dagger a_{p, s'}^\dagger \delta_{pk} \delta_{s', s}}_{\hat{N}\text{-Teilchenzahloperator}} + a_{k, s}^\dagger a_{k, s} a_{p, s'}^\dagger a_{p, s'} \right)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2} \frac{e^2}{V \epsilon_0 \alpha^2} (N^2 - N)}_{\text{eliminiert (Hion + Hel-ion)}} \quad \hookrightarrow \text{thermodyn. Limes (V, N} \rightarrow \infty)$$

• Jellium-Modell:

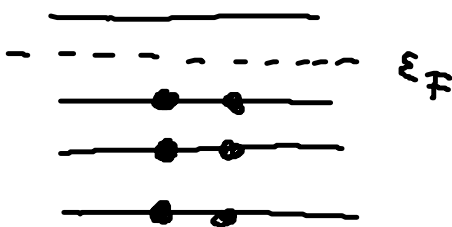
$$H = \underbrace{\sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}\omega}^\dagger a_{\vec{k}\omega}}_{\text{kin. Energie}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} \sum_{s, s'} V_{\vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q}, s}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}, s'}^\dagger a_{\vec{p}, s'} a_{\vec{k}, s}}_{\text{pot. Energie}}$$

- Grundzustandsenergie im Jellium-Modell:

Störungstheorie: H_{kin} - lösbar
 H_{ee} - Störung $\rightarrow E = E_0 + E^{(1)}$

(1) kin. Energie

Besetzung nach Pauliprinzip für N e^- bis Fermienergie ϵ_F



$$N = 2 \sum_{\vec{k}} 1 = 2 \cdot 4\pi \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^3}{3}$$

$$\Rightarrow k_F = \sqrt[3]{\frac{3\pi^2 N}{V}}$$

Elektronendichte $n = \frac{N}{V}$

Eigenzustände von H_{kin} : $|\mathcal{M}_0\rangle = |n_0, n_1, \dots, n_F\rangle$ Besetzungszahl-zustände

$$E_0 = \langle \mathcal{M}_0 | H_{\text{kin}} | \mathcal{M}_0 \rangle = \sum_{\vec{k}, s} \langle \mathcal{M}_0 | \epsilon_{\vec{k}s} a_{\vec{k}s}^\dagger a_{\vec{k}s} | \mathcal{M}_0 \rangle$$

$$= \sum_{k_s} \vec{\epsilon}_{k_s} u_{k_s} = \sum_{k_s} \vec{\epsilon}_{k_s} \Theta(\epsilon_F - \epsilon_{k_s})$$

$$= \sum_{\text{Spin}} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|k| \leq |k_F|} d^3k \frac{t^2 k^2}{2m_e} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{t^2}{m_e} \int_0^{k_F} 4\pi dk k^4$$

$$= \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^5}{5} \frac{k_F^2}{2m_e} \quad k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n} \quad \text{einsetzen} \quad \text{Bohr-radius} \quad a_0 = \frac{t^2 \epsilon_0}{m_e e^2}$$

$$= V \frac{t^2}{\pi^2} \frac{(3\pi^2 n)^{5/3}}{10 m_e} = \frac{N}{n} \frac{t^2}{\pi^2} \frac{(3\pi^2 n)^{5/3}}{10 m_e} \cdot \frac{a_0^2}{a_0^2}$$

$$= N \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{5} (3\pi^2)^{5/3} \underbrace{(n a_0^3)^{2/3}}_{\text{mittlere } e^- \text{ Zahl die in einem Bohr-radius passt}} \cdot \underbrace{E_{\text{ryd}}}_{\text{E-einheit des C-Problems}} \quad E_{\text{ryd}} = \frac{t^2}{2m_e a_0^2}$$

• Wigner-Seitz-Radius : $r_s^{-3} = \frac{4\pi}{3} n a_0^3$

Radius der Kugel, die dem Volumen pro Teilchen entspricht
 „mittlerer Teilchenabstand“

$$E_0 = N \frac{(3\pi^2)^{5/3}}{\pi^2 5} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} E_{\text{ryd}}$$

$$= N \cdot E_{\text{part}} \cdot \frac{2,21}{r_s^2}$$

↑
eigentl.
 $\frac{E_0}{N}$ Energie
Teilchen

← Normierung
auf C-Problem

leb. Energie r_s^{-1} als Maß
für d. Raum, den ein
Teilchen zur Verfügung hat

(2) Störungstheorie Hec

$$E^{(1)} = \langle \mathcal{H}_0 | H_{ec} | \mathcal{H}_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \sum_{l \neq 0} \sum_{s, s'} V_q \langle \mathcal{H}_0 | a_{k+q, s}^\dagger a_{k, s} a_{p-q, s'}^\dagger a_{p, s'} | \mathcal{H}_0 \rangle$$

$$\stackrel{H-F}{=} \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \sum_{s, s'} V_q \left(\underbrace{\langle \mathcal{H}_0 | a_{k+q, s}^\dagger a_{k, s} | \mathcal{H}_0 \rangle}_{\textcircled{1}} \underbrace{\langle \mathcal{H}_0 | a_{p-q, s'}^\dagger a_{p, s'} | \mathcal{H}_0 \rangle}_{\textcircled{2}} \right)$$

$\delta_{k, k+q}$
 $\delta_{p, p}$
 $q=0$

$$- \langle \mathcal{H}_0 | a_{k+q, s}^\dagger a_{p, s'} | \mathcal{H}_0 \rangle \langle \mathcal{H}_0 | a_{p-q, s'}^\dagger a_{k, s} | \mathcal{H}_0 \rangle$$

$$\times \delta_{k+q, p} \delta_{s, s'} \delta_{p-q, k}$$

① Direkter Term (Hartree-Term)

verschwindet, da $q=0$ (kann kompensiert)

② Austausch-Term (Fock-Term)

gleicher Spin $s=s'$; qm - Beitrag aus Antisym.-prinzip

$$E^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{kq}^{\neq 0} \sum_s V_q \langle \Psi_0 | \hat{U}_{k+q,s} \hat{U}_{k,s} | \Psi_0 \rangle \quad \boxed{p=h+s}$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{kq}^{\neq 0} \sum_s V_q U_{k+q,s} U_{k,s} < 0 \quad \begin{array}{l} \text{Energieabsenkung} \\ \text{(gebundener} \\ \text{Zustand)} \end{array}$$

$$= \dots \dots \dots \Theta(k_F - |k+q|) \Theta(k_F - k) \quad \sum_s \rightarrow \int$$

$$= -\frac{1}{2} \left[\frac{V}{(2\pi)^3} \right]^2 \sum_{\text{spin}} \underbrace{\frac{e^2}{\epsilon_0}}_{V_q} \int d^3k \int d^3q \frac{1}{q^2} \Theta(k_F - |k+q|) \Theta(k_F - k)$$

$$\vdots$$

$$= -N \cdot E_{\text{Fermi}} \cdot \frac{0,916}{r_s}$$

→ insgesamt: $E = E_0 + E^{(2)}$

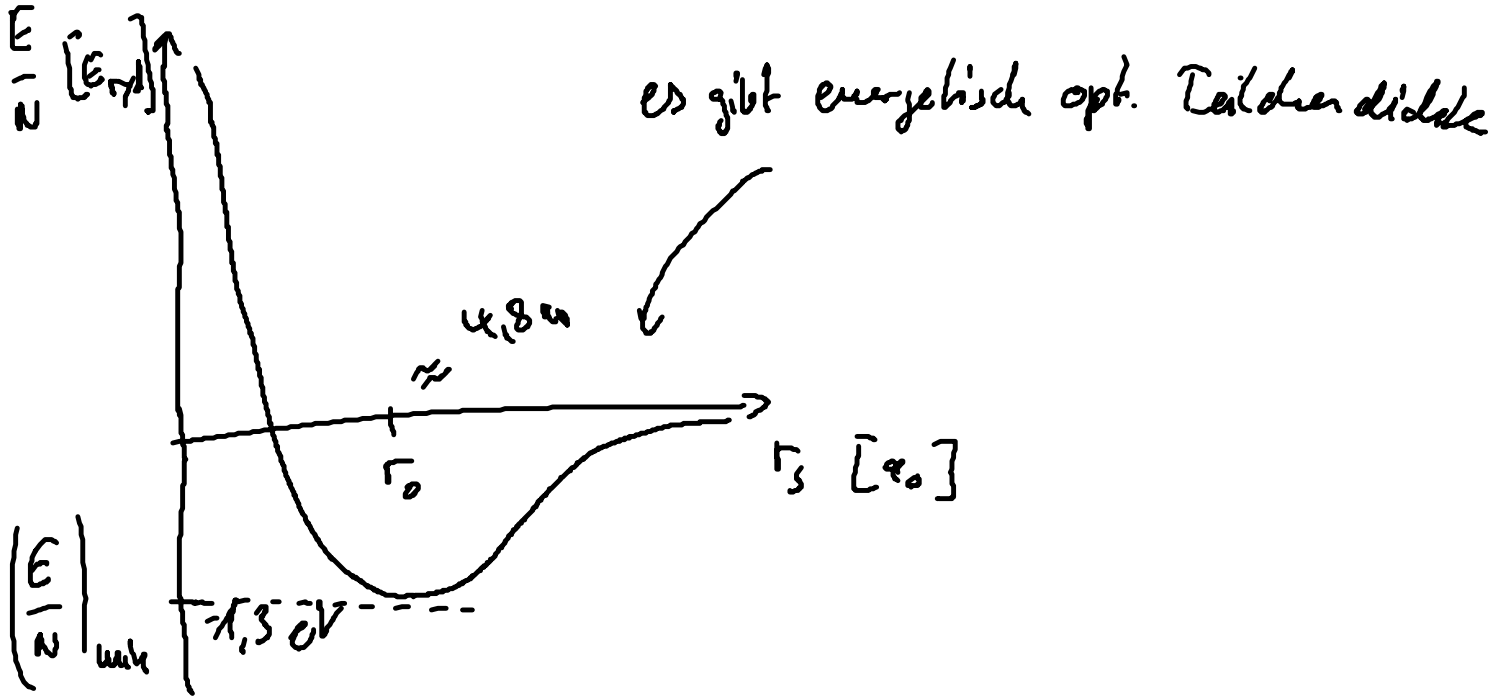
$$= N \left[\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right] E_{\text{Fermi}} + E_{\text{corr}}$$

kin E

Austausch E

(e⁻ mit gleichem Spin
stoßen sich ab)

$\sim N^{4/3}$



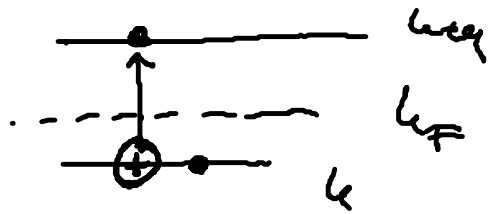
→ Jellium-Modell erklärt metall. Bindung

4. Plasmonen

- Vorbetrachtung:

Ohne WW im Grundzustand alle Einteilchenzustände $|k| \leq |k_F|$ besetzt

→ Elementaranzregung: Teilchen-Loch-Anregung



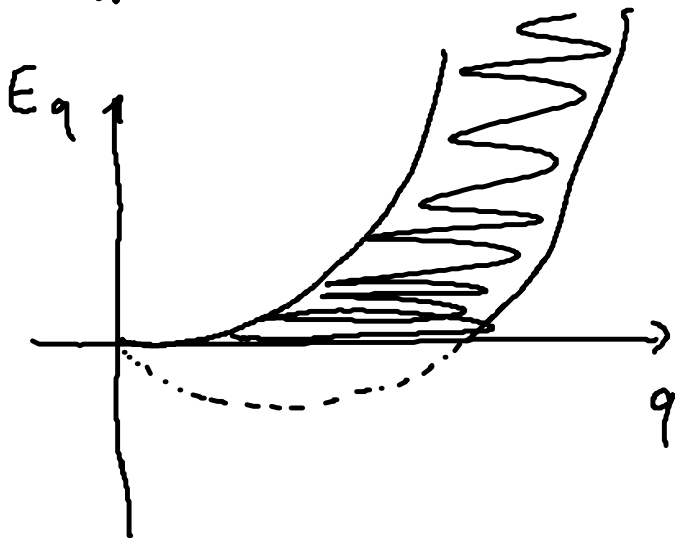
Energie:
$$E(q) = \frac{\hbar^2 (k+q)^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{mit} \quad |k| \leq k_F$$

 $|k+q| \geq k_F$

$$\Rightarrow E(q) = \frac{\hbar^2}{m} \left(kq \cos\vartheta + \frac{q^2}{2} \right) \geq 0 \quad \forall k, q$$

$\cos\vartheta \in [-1, 1]$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{m} \left(-k_F q + \frac{q^2}{2} \right) \leq E(q) \leq \frac{\hbar^2}{m} \left(+k_F q + \frac{q^2}{2} \right)$$



Zu einem Impuls q sind mehrere Teilchen-Loch-Anregungen möglich

- kollektive Anregung des homogenen e^- -Gases:

Plesmon (neues Quantenteilchen)

4.1 Klassische Theorie

- Annahme: Jellium-Modell (e^- bewegen sich frei vor stat. Ionenhintergrund)
- Newton: $m \underline{\dot{v}} = q \cdot \underline{E}$ (e^- im E -Feld)
- mittlere Stromdichte: $\underline{j} = n q \underline{v}$

$$\partial_t \underline{j} = n q \underline{\dot{v}} = \frac{n q^2}{m} \underline{E}$$

Divergenz nehmen ∇ .

$$\Rightarrow \underbrace{\partial_t (\nabla \cdot \underline{j})}_{-\partial_t \rho} = \frac{n q^2}{m} \underbrace{\nabla \cdot \underline{E}}_{\frac{\rho}{\epsilon_0} \text{ Poisson}}$$

$$\Rightarrow \partial_t^2 \rho + \underbrace{\frac{n q^2}{m \epsilon_0}}_{\Omega_{pl}^2 \text{ Plasmafrequenz}} \rho = 0 \quad \text{Schwingungsgl.}$$

Das e^- -Gas führt $\sqrt{N} \Omega_{pl}$ Plasmaschwingungen aus
 \rightarrow kollektive Schwingung, denn alle e^- bewegen

sich mit gleicher Frequenz Ω_{pl}

4.2 QM-Theorie

Was ist d. Dispersionsrelation für Plasmonen (Lichtschwankung des \bar{n} Gases)?

• Teilchendichte?

Blockflut.
relativ + Schwerpt.
koord. einführen

$$S_D(\underline{r}, t) = -e \langle \Psi^\dagger(\underline{r}, t) \Psi(\underline{r}, t) \rangle =$$

Spin in \underline{a}_B

$$= -\frac{e}{V} \sum_{\underline{q}} \sum_{\underline{k}, \underline{s}} \langle a_{\underline{k}+\underline{q}, \underline{s}}^\dagger a_{\underline{k}, \underline{s}} \rangle e^{i\underline{q} \cdot \underline{r}}$$

$S_D(\underline{q})$ im Fourerraum

$$S_D = -\frac{e}{V} \sum_{\underline{q}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \underbrace{S_D(\underline{q}, \omega)} e^{i(\omega t + \underline{q} \cdot \underline{r})}$$

legt Disp.-rel fest

• Heisenberg - Bewegungsgl.:

$$i\hbar \partial_t \langle a_{\underline{k}+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}} \rangle = [a_{\underline{k}+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}}, H_e + H_{ee}]$$

$$= -(\epsilon_{\underline{k}+\underline{q}} - \epsilon_{\underline{k}}) a_{\underline{k}+\underline{q}}^\dagger a_{\underline{k}} \leftarrow H_e$$

$$- \sum_{\underline{k}', \underline{q}'} V_{\underline{q}'} \left[a_{\underline{k}'+\underline{q}'}^\dagger a_{\underline{k}'} a_{\underline{k}+\underline{q}-\underline{q}'}^\dagger a_{\underline{k}} - a_{\underline{k}+\underline{q}-\underline{q}'}^\dagger a_{\underline{k}'} a_{\underline{k}'+\underline{q}'}^\dagger a_{\underline{k}+\underline{q}'} \right] \leftarrow H_{ee}$$

-> Hierarchie - Problem -> H-F Faktorisierung

$$\Rightarrow i \hbar \partial_t \langle a_{k+q}^\dagger q_k \rangle = (E_k - E_{k+q}) \langle a_{k+q}^\dagger q_k \rangle$$

(AB mit Spru)

$$S_k = \langle a_{k0}^\dagger q_k \rangle$$

$$+ V_q (S_{k+q} - S_k) \sum_{k'} \langle a_{k'+q}^\dagger q_{k'} \rangle \quad (b)$$

$$- \sum_{q'} V_q (S_{k-q'} - S_{k+q+q'}) \langle a_{k+q}^\dagger q_k \rangle \quad (a)$$

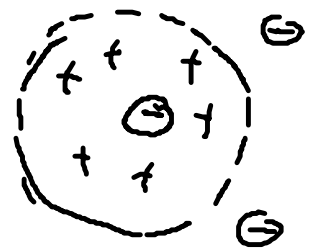
~~~~ homogener Hintergrund  $\hat{=}$  qm Besetzung

----- inhomogene Dichte (wellenartige Ausbreitung)

$\hat{=}$  qm Übergang

(a) ist E-Resonanz; Coulombloch

-> E-Absenkung



(b) "effektives" Feld

ist  $\sum$  über alle qm Übergänge

Jetzt Fourier-Transform:  $S_D(q, t) = \sum_k \langle a_{k+q}^\dagger q_k \rangle = \int d\omega S_D(q, \omega) e^{i\omega t}$

$$\rightarrow -\hbar\omega \rho_D(q) = \left( \tilde{\epsilon}_L - \tilde{\epsilon}_{L(q)} \right) \rho_D(q) + \sum_k (\rho_{L(q)} - \rho_k) V_q \rho_D(q)$$

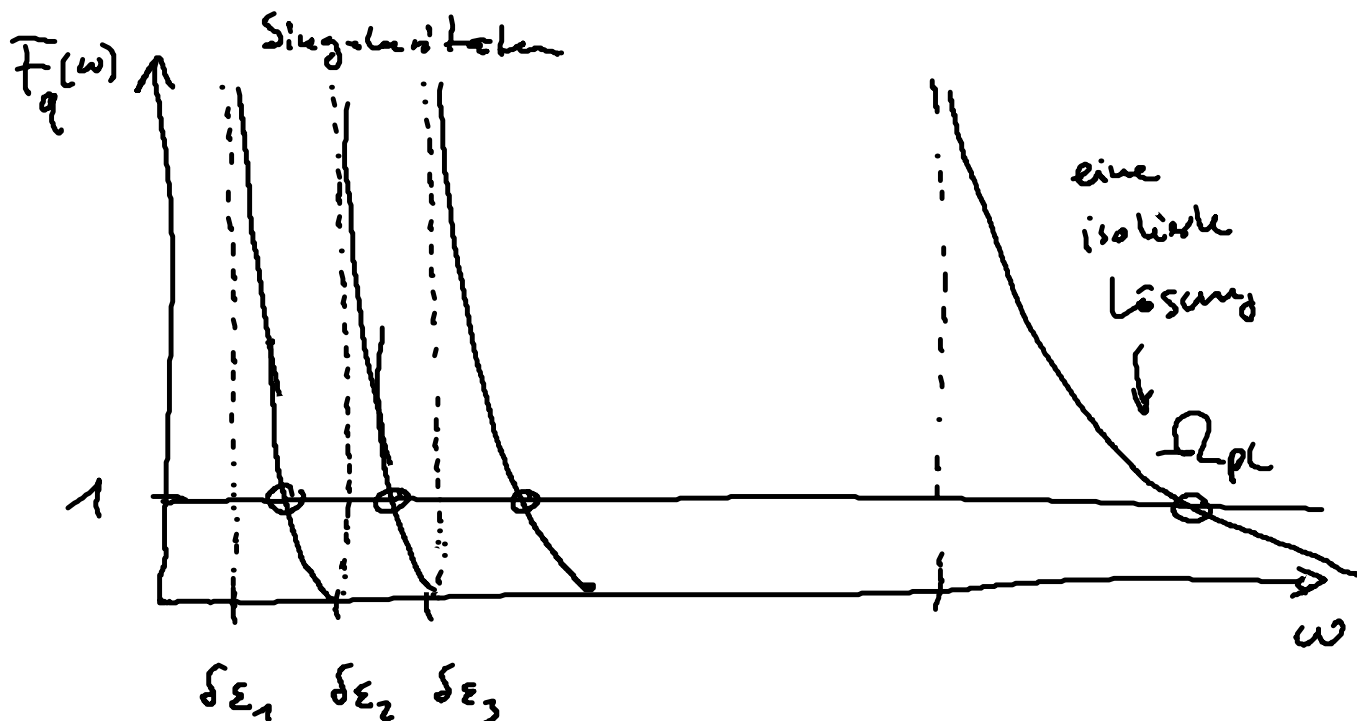
$\nearrow$   
 Renormulisierten  
 Energien

$$\Rightarrow \rho_D(q) = \underbrace{\sum_k V_q \frac{(\rho_{L(q)} - \rho_k)}{\tilde{\epsilon}_{L(q)} \tilde{\epsilon}_L - \hbar\omega(q)}}_{\stackrel{!}{=} 1} \rho_D(q)$$

- implizite Dispersionsrelation für Plasmonen  $\omega(q)$ :

$$1 = V_q \sum_k \frac{f_{k(q)} - f_k}{\tilde{\epsilon}_{k(q)} \tilde{\epsilon}_L - \hbar\omega(q)} = \tilde{F}_q(\omega)$$

$\rho_k$ -Fermifkt.  
 $\tilde{\epsilon}$ -bekannt



Mehrere Frequenzen zu einem best.  $q$

Hyperblen liegen dicht  $\sum_i \frac{1}{\omega - \delta \epsilon_i}$   $\delta \epsilon_i = \epsilon_{u+q} - \epsilon_u \approx 0$

→ sind Ein-Teilchenanregungen

• Lösung für  $q \rightarrow 0$  : Taylor

$$(1) f_{u+q} - f_u = \cancel{f_u} + q \cdot \nabla_u f_u - \cancel{f_u}$$

$$(2) \epsilon_{u+q} - \epsilon_u = \frac{t^2}{2m} (v^2 + 2k \cdot q + q^2 - \cancel{v^2})$$

$\approx t^2 \frac{k \cdot q}{m}$  in Disp. rel. einsetzen

$$1 = V_q \sum_k \sum_{\alpha}^{\text{karth. Koord.}} \frac{q^\alpha \partial_u^\alpha f_k}{-t\omega + \frac{t^2}{m} q \cdot k} \quad \boxed{\frac{1}{\alpha + \beta q} \approx -\frac{1}{\alpha} \left(1 + \frac{\beta q}{\alpha}\right)}$$

Neuer  
Taylor

$$\approx -V_q \sum_k \sum_{\alpha} \frac{q^\alpha \partial_u^\alpha f_k}{t\omega} \left(1 + \frac{t^2 q \cdot k}{t\omega m}\right)$$

— Integral über antisym. Flut. : verschwindet

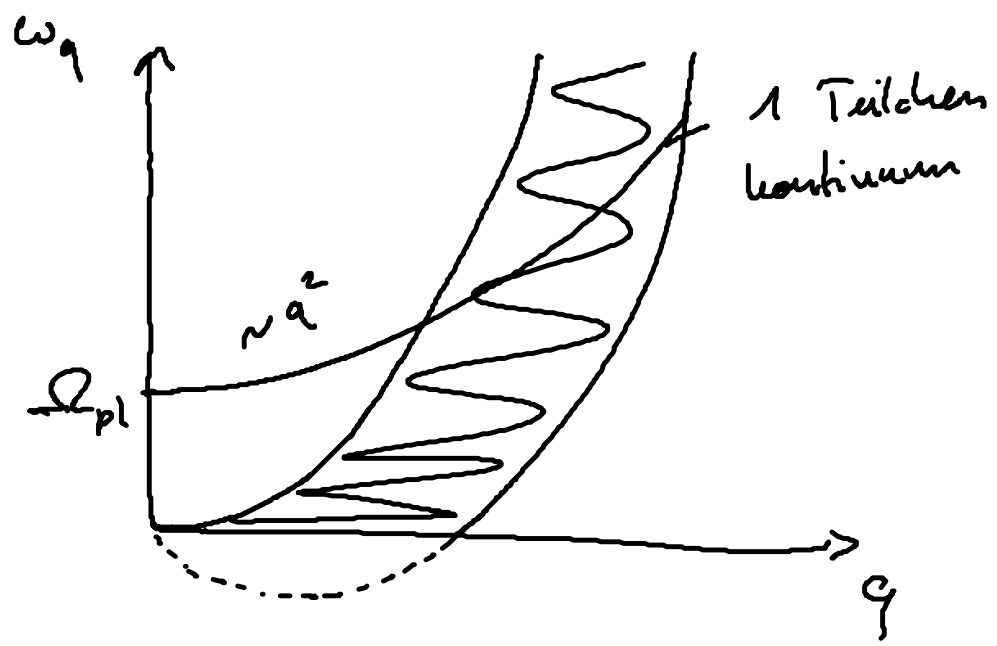
$$1 = -\frac{V_q}{m\omega^2} \sum_k \sum_{\alpha} q^\alpha \overbrace{(\partial_u^\alpha f_k) q \cdot k}^{\text{part. Int.}}$$

$$= \frac{V_q}{m\omega^2} \sum_k \sum_\alpha q^\alpha f_k q^\alpha = \frac{V_q}{m\omega^2} q^2 \underbrace{\sum_k f_k}_N$$

mit  $V_q = \frac{e^2}{\epsilon_0 V} \frac{1}{q^2}$

$$\Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{e^2 n}{\epsilon_0 m}} \hat{=} \Omega_{pl}$$

Taylor 2. Ordnung zeigt:  $\underline{\Omega_{pl}(q)} = \Omega_{pl} (1 + \alpha q^2)$



→ für große  $q$  zerfällt d. kollektive Plasmaschwingung  
in Ein-Teilchen-Anregungen. (Landau-Dämpfung)  
(Überlagerung vieler Ein-Teilchen-Moden)