# VII. 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 Vakuumzustand gibt.
Außerdem soll es keine Energie bei 1-Teilchenzuständen gibt.

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

Reihenfolge durch Vorzeichen der Schrödingergl. gegeben.

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

Ziel: Ausdruck für Coulomb Wechselwirkung durch Blochfunktionen

Erinnerung: Blochfunktion

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

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

Also gilt es: $\psi_s^+(x) = \sum_{\lambda k} \varphi^*_{\lambda,k,s}(x)\, a^+_{\lambda,k,s}$

Einsetzen:

$$H_{Coul} = \sum_{\substack{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4 \\ k_1,k_2,k_3,k_4}} V^{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}_{k_1,k_2,k_3,k_4} \; a^+_{\lambda_1k_1}\, a^+_{\lambda_2k_2}\, a_{\lambda_3k_3}\, a_{\lambda_4k_4}$$

Abschirmung

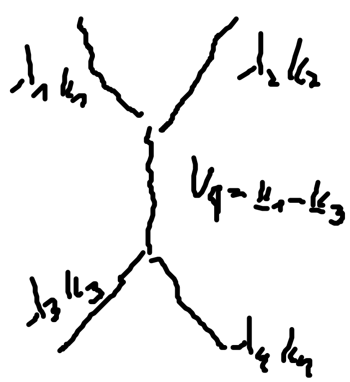
$-\varkappa|x_1-x_2|$

$$V^{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}_{k_1k_2k_3k_4} = \int dx_1 \int dx_2\, \varphi^*_{\lambda_1k_1}(x_1)\,\varphi^*_{\lambda_2k_2}(x_2)\, \frac{1}{4\pi\varepsilon_0|x_1-x_2|}\, e^{-\varkappa|x_1-x_2|}\, \varphi_{\lambda_3k_3}(x_2)\, \varphi_{\lambda_4k_4}(x_1)$$

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

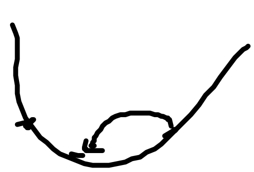
Skizze f. Coulomb WW

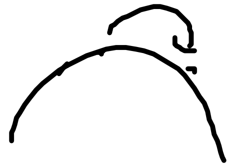
$a^+_{\lambda_1k_1}\, a^+_{\lambda_2k_2}\, a_{\lambda_3k_3}\, a_{\lambda_4k_4}$




Wegen $\lambda_1=\lambda_3$, $\lambda_2=\lambda_4$ in der Näherung ändert die Coulomb Wechselwirkung nicht das Band des jeweiligen Elektrons.

Quasiimpuls wird erhalten.





# VII.3 Plasmonen

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

$\Leftarrow$ Band halbgefüllt in Metalle

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

## (i) klassische Theorie (Motivation)

Wir sehen uns die Dynamik der Elektronen an:

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

Bei vielen Elektronen gibt es die Stromdichte $j$:

$$j(\underline{r},t) = e \underbrace{\frac{1}{\Delta V}}_{\text{Mittelungsvolumen}} \sum_i v_i$$

$\sum_i v_i$ $\leftarrow$ Summe über Geschwindigkeiten der Elektronen im Mittelungsvolumen.

Das ergibt:

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

Die Kontinuitätsgl ist:

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

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

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

Im Band durch effektive Masse ersetzen.

Plasma schwingt mit der Plasmafrequenz!

(ii) Quantenmechanische Theorie

Wir berechnen die Dichteschwankung in Fourierraum

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

(Darstellung für freie Elektronen)

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

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

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

$$\langle\rho_q\rangle = \sum_{\underline{k}} \underbrace{\langle a^+_{\underline{k}+q}\, a_{\underline{k}}\rangle}$$

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

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

$$H_0 = \sum_{k}\varepsilon_k\, a^+_k a_k$$

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

Heisenbergbewegungsgl. für $a^\dagger_{k+q} a_k$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

<u>Möglichkeit d. Lsg.</u>: Approximation von Zweiteilchenobservable durch Produkt zweier Einteilchenobservable!

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

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

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

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

Random Phase Approximation:

Wir nehmen jetzt nur Terme mit

$\langle a^+_{k+q} a_k \rangle$ und $\langle a^+_k a_k \rangle$ ist!

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

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

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

$$(b) = \sum_{\tilde{k}} V_q \Big( \langle a^+_k a_k \rangle \langle a^+_{\tilde{k}+q} a_{\tilde{k}} \rangle - \cancel{\langle a^+_k a_{k+q} \rangle \langle a^+_k a_k \rangle \delta_{k\tilde{k}}}$$

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

$$= V_q \sum_{\tilde{k}} \big[ \langle a^+_k a_k \rangle - \langle a^+_{k+q} a_{k+q} \rangle \big] \langle a^+_{\tilde{k}+q} a_{\tilde{k}} \rangle$$

Gesamtgleichung:

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

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

Jetzt versuchen wir die Eigenfrequenz der Plasmaschwingungen zu finden.

Ansatz

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

kollektive Schwing.

$\eta > 0$ stellt die Kausalität sicher!

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

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

Besetzungszahl (als konstant angenommen)

$$\Downarrow$$

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

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

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

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

Bestimmungsgl. für Plasmaresonanzen.