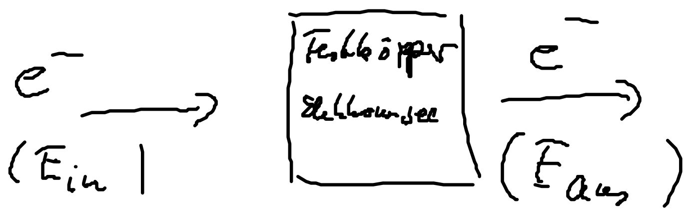
4.) Plasmonen als kollektive Anregungen des Elektronengases

Elektronengas ist ein WW System, entwickelt nach gekoppelten Impulszuständen ($\bar{k}, \bar{q}, \bar{p}$), suche nach kollektiven Anregungen (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 Elektronengas.

Geschwindigkeitsfeld

Ladungsdichte

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

$\quad 0 \; /\!/$ im Gleichgewicht $\quad = \vec{v}(\vec{r},t)\left(\rho_{el}^{0} + \delta\rho(r,t)\right)$

ohne Störung
homogene Dichte

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

$$\rho_{el}^{0} = q\,n_0 \qquad (q = -e)$$

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

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

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

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

$\vec{\nabla}\cdot\vec{j} = -\partial_t \rho$ (Kontinuitätsgl.) $\qquad \vec{\nabla}\cdot\vec{E} = \frac{\delta\rho}{\varepsilon_0}$ (Quellgl. der ED) $\qquad$ (Ionen und Elektron $\rho_{el}^{0} + \rho_{ion}^{0}$ kompensieren sich)

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

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

Schwingungsgl. mit der Plasmafrequenz:

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

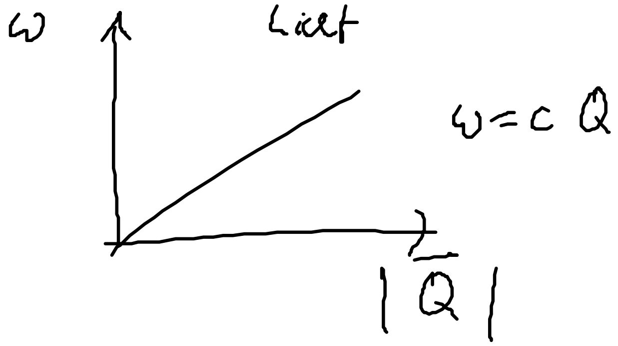
$\uparrow m_{eff}$ (später: mit Gitter)

Es existieren mgl. Ladungsdichteschwingg. mit der Plasmafrequenz.

4.2. Quantenmechanische Theorie

Suche nach wellenartige Anregungen mit einer quantenmech. bestimmte Dispersionsrelation $\omega = \omega(\underline{Q})$

$(|\vec{Q}|)$



Gibt es etwas analoges im Elektronengas?

Elektron Ladungsdichte: $\rho = -e \sum_s \underline{\Psi}_s^+(r,t)\, \underline{\Psi}_s(r,t)$

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

für $\rho(r,t)$ bedeutet:

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

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

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

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

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

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 Ausbreitg. mgl. ist $\omega = \omega(Q)$

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

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

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

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

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

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

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

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

übrig bleibt

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

" – "   " – "

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

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

im El-El-Anteil macht man Näherungen:

0) Hartree-Fock

1) Spinkohärenzen weglassen

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

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

andere $\to 0$

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

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

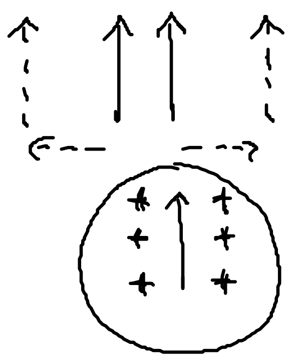
kinetische Energie

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

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

Energie renormierg.

Beweggl. 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

→ führt zu E-Absenkg. durch eine scheinbare positive Ladungswolke „Austauschloch“

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

→ 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

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

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

$\rho(r,t)$

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

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

zeitlich konstant

(„echte Dichten, räumlich homogen)

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

$$\sum_{sk}$$

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

stellt die Dispersionsrelation von Plasmon dar

Bemerkungen:

a) Bestimmungsgleichung für $\omega = \omega(Q)$
die Parameter ω, Q müssen durchgefahren werden

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

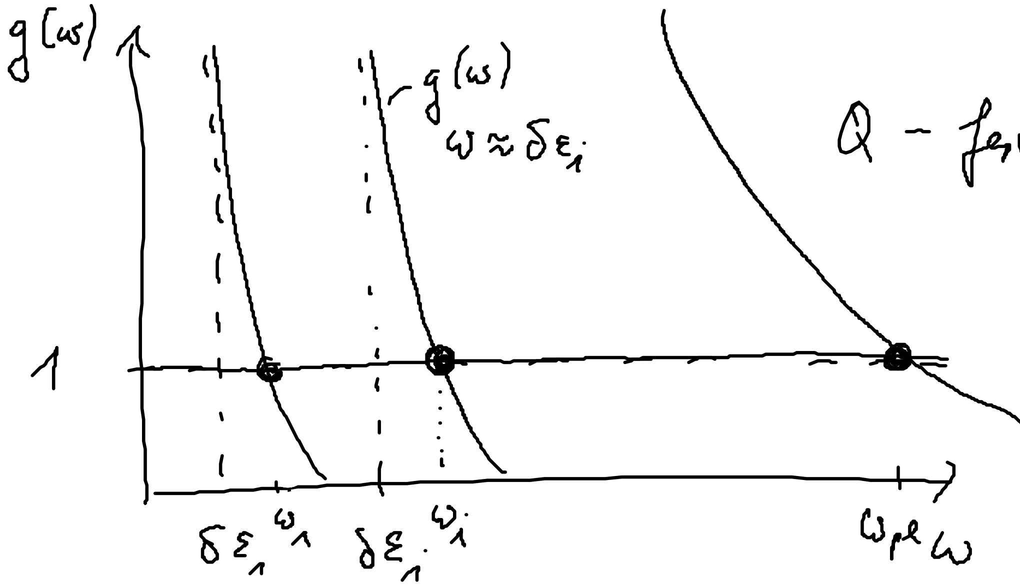
$e^{-i\omega(Q)t - i\vec{Q}\cdot\vec{r}}$ bestimmt Ausbreitung

jede Anfangsbedingung und weitere Dynamik
kann nach diesen Moden entwickelt werden

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

d) Dispersion ist von den elektronischen Besetzungs-
wahrscheinlichkeiten abhängig
($\sigma_{kk}^{ss} \hat{=}$ 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 gibt aufgrund der Resonanzstruktur $g(\omega)$ viele dichtliegende Moden ω und eine weitere isolierte Mode ($\hat{=}$ klass. Plasmafrequenz)

① isolierte Mode

kollektive Schwing. des El-gas

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

verschlaufte Bewegg. aller El. die

② dichtliegende Moden

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

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

u identisch ` Schwingen
durch die Coulombwechsel