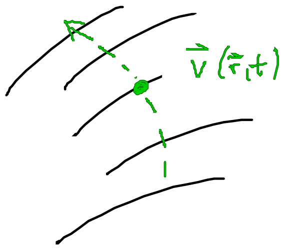
4.1. Klassischer Zugang



betrachten homogenes Elektronengas
und Dichte n_{el}^0 im Gleichgewicht $\left(n_{el}^0 = \frac{N}{V}\right)$

↳ Ladungsdichte $\rho_{el}^0 = -e\, n_{el}^0$

Stromdichte $\vec{j}_{el}^{\,0} = 0$

diskutieren kleine Störung $\delta\rho_{el}(\vec{r},t)$: $\rho_{el}(\vec{r},t) = \rho_{el}^0 + \delta\rho_{el}(\vec{r},t)$

Indices "el" weglassen

$$\vec{j}_{el}(\vec{r},t) = \underbrace{\vec{j}_{el}^{\,0}}_{=0} + \delta\vec{j}_e(\vec{r},t)$$

Stromdefinition:

Geschwindigkeitsfeld $\vec{v}(\vec{r},t)$ durch Bewegg. Teilchendichte

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t)\,\vec{v}(\vec{r},t) \;\hat{=}\; \text{Ladung} \cdot \text{Geschwindigkeit}$$

$$\Rightarrow \delta\vec{j} = \left(-e n^0 + \delta\rho\right)\left(\underbrace{\vec{v}^{\,0}}_{0} + \delta\vec{v}\right) \approx -e n_0\, \delta\vec{v} + \text{Korrekturen}$$

Newtongleichung: $\partial_t (m\,\delta\vec{v}) = -e\vec{E}$ (Lorentzkraft) $\;\big|\cdot -e n_0/m$

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

$$\partial_t \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = \frac{e^2}{m} n^0\, \vec{\nabla}\cdot\vec{E} = \frac{e^2}{m} n^0\, \frac{\cancel{\rho_{el}^0} + \cancel{\rho_{ion}^0} + \delta\rho}{\varepsilon_0} \quad \Big|\; \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = -\partial_t\delta\rho \;\text{(Kontinuität)}$$

Quellgl. d. $\vec{E}$-Felds

$$\partial_t^2 \delta\rho = -\frac{e^2}{m\varepsilon_0} n_0 \delta\rho \quad \longrightarrow \quad \boxed{\partial_t^2 \delta\rho = -\Omega_{pl}^2 \delta\rho}$$

⇒ Kleine Änderung d. Ladungsdichte führt zu Schwingungen des gesamten Elektronengases mit der Plasmafrequenz $\Omega_{pl} = \sqrt{\frac{e^2}{m\varepsilon_0} n_0}$, die kollektive Anregung wird Plasmon genannt.

4.2. Quantenmechanische Zugang

Elektronendichtewellen bestimmt durch Dispersionsrelation: $\omega = \omega(\vec{Q})$ ← Wellenzahl

$$\rho_{el}(\vec{r},t) = -e \sum_{s,k_1,k_2} \varphi_{k_1}^*(\vec{r})\, \varphi_{k_2}(\vec{r})\, a_{k_1 s}^+(t)\, a_{k_2 s}(t)$$

(siehe VL. 2. Quantisierung)

$$= -e \sum_{s,k_1,k_2} \underbrace{\frac{e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}}_{\frac{1}{V} e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1)\cdot\vec{r}}} a_{k_1 s}^+(t)\, a_{k_2 s}(t)$$

wähle: $\vec{Q} = \vec{k}_2 - \vec{k}_1$, $\vec{k} = \frac{\vec{k}_1 + \vec{k}_2}{2}$

$$\langle \rho_{el}(\vec{r},t)\rangle = -\frac{e}{V} \sum_Q \sum_{ks} \langle a^+_{k-\frac{Q}{2} s}(t)\, a_{k+\frac{Q}{2} s}(t)\rangle e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \qquad \vec{k} \to \vec{k} - \frac{Q}{2}$$

$$= -\frac{e}{V} \sum_Q e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \underbrace{\sum_{ks} \langle a^+_{k-Qs}(t)\, a_{ks}(t)\rangle}$$

$$= -e \frac{1}{V} \sum_Q e^{i\vec{Q}\vec{r}} \underbrace{\langle \rho_Q(t)\rangle}$$

Fourierkomponente der Ladungsdichte:

$$\langle \rho_Q(\omega) \rangle \Rightarrow \omega = \omega(\vec{Q})$$

suche jetzt Bewegungsgleichung f. Fourierkomponenten:

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

Heisenbergbewegungsgleichungen f. ρ_Q = ?

$$-i\hbar \partial_t \underline{A} = [H, \underline{A}], \quad \text{d.h. } \underline{A} \text{ wähle als } a^+_{k-Q\,s} a_{k\,s}$$

4.3. Bewegungsgleichungen f. Ladungsdichte und Hierarchieproblem

$H = H_0 + V_{Coul}$ f. Elektronengas

jetzt nur als Bsp. f. H_0, V_{Coul} → selbst

$$-i\hbar \partial_t \underline{A} \Big|_{H_0} = [H_0, \underline{A}] \qquad \underline{A} = a^+_{k-Q\,s} a_{k\,s}$$

$$\Big[\sum_{k's'} \varepsilon_{k's'} a^+_{k's'} a_{k's'} , \; a^+_{k-Q\,s} a_{k\,s} \Big] =$$

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

Idee: 1. Term so lange vertauschen bis der 2. Term entsteht

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

$$\varepsilon_{k-Q\,s}\, a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks} - \sum_{k's'} \varepsilon_{k's'}\, a^+_{k-Q\,s} \big(\delta_{kk'}\, \delta_{ss'} - \underbrace{a_{ks}\, a^+_{k's'} \big) a_{k's'}}_{=0} -\text{''}-$$

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

Übergangsamplitude f. $k \to k-Q$ und Übergangsenergie $\varepsilon_{k-Q s} - \varepsilon_{ks}$

analoge Rechnung f. Coulomb-WW

$-i\hbar\, \partial_t \underline{A} = \left[V_{Coul}, \underline{A} \right]$ mit $\underline{A} = a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks}$, ohne Rechnung (ÜA)

$$\left[V_{Coul}, a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks} \right] = \sum_{qp\lambda} V_q \Big(a^+_{k-Q+q\,s}\, a^+_{p-q\,\lambda}\, a_{p\lambda}\, a_{ks}$$
$$+ a^+_{k-Q\,s}\, a^+_{p-q\,\lambda}\, a_{k-q\,s}\, a_{p\lambda} \Big)$$

Problem: die Größe $a^+_{k-Q\,s}\, a_{ks}$ koppelt an 4-Operatorterme

$$\langle \dot{2} \rangle \sim \{ \langle 2 \rangle, \langle 4 \rangle \}$$

offensichtlich existiert ein Hierarchieproblem:
Kopplung an höhere Erwartungswerte!

einfachste Lösung ist eine Faktorisierung der EWe
in der Hartree-Fock Näherung mit Regel (ÜA):

$$\boxed{\langle a^+_1\, a^+_2\, a_3\, a_4 \rangle = \langle a^+_1 a_4 \rangle \langle a^+_2 a_3 \rangle - \langle a^+_1 a_3 \rangle \langle a^+_2 a_4 \rangle}$$

(k_1, s_1)

nicht exakt, sondern Effektivtheorie f. 1 Teilchen in Feld aller anderen

4.4. Hartree-Fock Näherung f. die Elektronengasanregungen

a) Zerschlage die 4-er Erwartungswerte von $[a^+_{k-Q\,s} a_{ks}, V_{coul}]$ (erlaubt ist)

b) reduziere die Anzahl der ⟨2⟩er Größe zusätzlich, indem nur unterscheidbare Dichten $\langle a^+_{ks} a_{ks}\rangle$ und Übergänge $\langle a^+_{k-Q\,s} a_{ks}\rangle$

d.h. alle and. Indexkombination weglassen durch Bildg. v. Kroneckersymbolen

z.B. $\langle a^+_{ks} a_{ks'}\rangle = \langle a^+_{ks} a_{ks}\rangle \delta_{ss'}$ (Spinkohärenzen $\to 0$)

(a+b) $\Downarrow$ mit $\sigma^{s_1 s_2}_{k_1 k_2} \equiv \langle a^+_{k_1 s_1} a_{k_2 s_2}\rangle$

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

freie Bewegg. aufgrund kinet. Energie

$$+ \sum_{qs'} V_q \Big(\underbrace{\sigma^{s's'}_{k-q\,k-q}}_{\delta\varepsilon_{ks}} - \underbrace{\sigma^{s's'}_{k-Q+q\,k-Q+q}}_{\delta\varepsilon_{k-Q\,s}}\Big)\, \sigma^{ss}_{k-Q\,k}$$

Wechselwirkungsterm: Energierenormierg. der kinetischen Energie

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

Wechselwirkungsterm: baut internes Feld aller Übergänge auf

Coulomb-WW führt zu Energieabsenkung über parallele Spin und zu internem Feld Correlation: alle Übergänge beeinflussen sich wechselseitig.

4.5. Dispersionsrelation f. Elektronengas

Fouriertrafo der Bewegungsgleichungen

$-i\hbar\partial_t \rightarrow -i\hbar(-i\omega) = -\hbar\omega$ in Heisenberggl. ersetzen

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

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

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

gesucht $\omega = \omega(\vec{Q})$

führt: $\sum_{sk}$, dann kürzen von $\sum_{sp}\sigma^{ss}_{p-Q\,p}$ und $\sum_{s'p}\sigma^{s's'}_{p-Q\,p}$

man erhält

$$\boxed{1 = V_Q\sum_{k,s}\frac{\sigma^{s}_{k-Q} - \sigma^{s}_{k}}{\hbar\omega(\vec{Q}) + \left(\tilde{\varepsilon}_{k-Q\,s} - \tilde{\varepsilon}_{ks}\right)}}$$

Dispersionsrelation d. Elektronengases „Plasmondispersion"

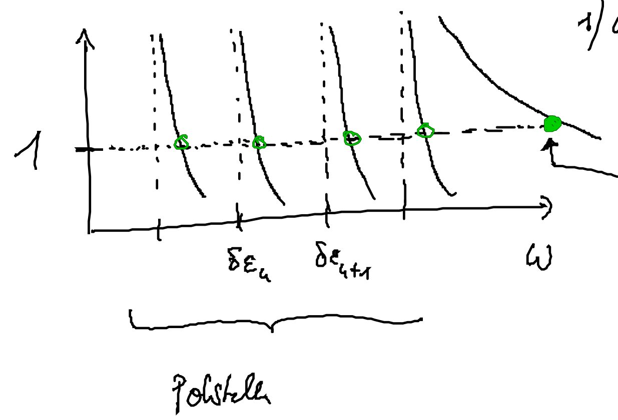
Bemerkungen:

a) $\omega = \omega(Q)$ ist Dispersion und beschreibt wellenartige Bewegg. d. Elektronengases $e^{-i\omega(Q)+i\vec{Q}\cdot\vec{r}}$

b) mögl. Anregungen sind von Besetzungszahlen abhängig $(\sigma^{s}_{k}, \sigma^{s}_{k-Q})$, $\omega(Q)$ ist implizit $\Rightarrow$ Arbeit

c) graphische Diskussion ist möglich

$1 = g(\omega)$, $\vec{Q}$ = fest



1) alle Schnittpunkte von 1 mit $g(\omega)$ bilden erlaubte ω Werte

2.) es gibt eine weitere Lsg. die man nicht durch naives Hinsehen findet

$\downarrow$ $\exists$ verschied. Lösungen:

a) „Einteilchenresonanzen" verbunden mit Einteilchenübergängen

$\tilde{\varepsilon}_{k-q} \leftrightarrow \tilde{\varepsilon}_{k}$

„Einteilchenkontinuum"

b) „kollektive Resonanz" ein relativ isolierter Zweig:

$\omega_{pl}(\vec{Q}) = \Omega_{pl} + \alpha Q^2$

„kollektive Plasmaschwingg."

(α – Konstante)

4.6. Kollektive Plasmaschwingg.

$$1 = \sum_{sk} \frac{V_Q\left(\sigma^s_{k-Q} - \sigma^s_k\right)}{\hbar\omega(Q) + \tilde{\varepsilon}_{k-Q\,s} - \tilde{\varepsilon}_{ks}}$$

betrachte $\vec{Q} \to 0$ $\quad (\lambda \to \infty)$, „klass. Grenzfall"

$$\tilde{\varepsilon}_{k-Q} - \tilde{\varepsilon}_k \approx \hbar^2 \left(\frac{(\vec{k}-\vec{Q})^2}{2m} - \frac{\vec{k}^2}{2m} \right) = \left(- \frac{2\vec{k}\cdot\vec{Q}}{2m} + \underbrace{\frac{\vec{Q}^2}{2m}}_{\text{klein}} \right)$$

ohne Renormierg.

$$\sigma^s_{k-Q} - \sigma^s_k \approx f^s_{k-Q} - f^s_k \approx f^s_k - \vec{Q}\cdot\vec{\nabla}_k f^s_k - f^s_k$$

Fermi funktion in Gg. $\qquad$ Taylorentw. in Q

Lindhard:

Taylor in $\vec{Q}$

$$1 = V_Q \sum_{sk\alpha} \frac{- Q^\alpha \partial^\alpha_k f^s_k}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 \vec{Q}\cdot\vec{k}}{m}} \approx - \frac{V_Q}{\hbar\omega} \sum_{sk\alpha} Q^\alpha \partial^\alpha_k f^s_k \left(1 + \underbrace{\frac{\vec{Q}\cdot\vec{k}\,\hbar}{m\omega\hbar}} \right)$$

kartesisch Komponente von $\vec{k}, \vec{Q}$ etc

erster Term, denn $\sum_k \to \int d^3k$ ist ein Integral über ungerade Funktion (Ableitg. der geraden Fermifkt)

$$1 = - \frac{V_Q}{\omega} \sum_{sk\alpha} Q^\alpha \partial^\alpha_k f^s_k \frac{\vec{Q}\cdot\vec{k}}{m\omega}$$

partielle Integration $\quad \sum_k \to \int d^3k$

$$= \frac{V_Q}{m\omega} \sum_{sk\alpha} Q^\alpha f^s_k Q^\alpha = \frac{V_Q}{m\omega^2} Q^2 \underbrace{\sum_{ks} f^s_k}_{N}$$

$$1 = \frac{e^2}{Q^2 V \varepsilon_0} \frac{Q^2}{m\omega^2} N = \frac{e^2 n_0}{m\omega^2 \varepsilon_0}$$

$$\boxed{\omega = \Omega_{pe}} \quad Q \to 0$$

eine etwas genauere Rechnung bis Q^2 zeigt die volle Dispersion

$$\boxed{\omega = \Omega_{pe} + \alpha Q^2}$$