

Jelliummodell: gesucht ist effektives Potential der Ionen-Ionen WW

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ion-ion}} + F_{\text{el}} \rightarrow \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{Graph} \\ \rightarrow \end{array}$$

$$|\vec{R}_i - \vec{R}_n| \hat{=} (\text{effektiver Abstand})^{-3} \text{ im Jellium}$$

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ion-ion}} + F_{\text{el}} = V_{\text{ion-ion}} + \langle T_{\text{el}} + V_{\text{el}} + V_{\text{Coul}} \rangle$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{über Schrödinger-Gleichg. der Elektronen (i)}}$

Erwartungswert im Fundzustand

Problem im Coulombform: $q \rightarrow 0 \Rightarrow \text{Divergenz}$

$$V_{\text{Coul}} = V_{\text{Coul}}^{q=0} + V_{\text{Coul}}^{q \neq 0}$$

(e)

$e / V_{\text{Coul}}^{q=0}$

$$V_{\text{Coul}}^{q=0} = \frac{1}{2} \sum_{S_1 S_2} \sum_{PK} \frac{e^2}{\epsilon_0 V_{\text{K}}} a_{KS_1}^+ a_{PS_2}^+ a_{PS_2} a_{KS_1}$$

$\uparrow \qquad \qquad \qquad \uparrow \qquad \qquad \qquad \uparrow \qquad \qquad \qquad \uparrow$
 vertausche S_1, S_2 - "
 vertausche nach
 Kommutatorregel

$$= - \frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon_0 V_{\text{K}}} \sum_{S_1 S_2} \sum_{PK} a_{KS_1}^+ (\delta_{PK} \delta_{S_1 S_2} - a_{KS_1}^+ a_{PS_2}) a_{PS_2}$$

$$= \underbrace{\sum_{KS_1}^+ a_{KS_1}^+ a_{KS_1}}_{\hat{N}_{\text{el}}} - \sum_{S_1 S_2} \sum_{KP} a_{KS_1}^+ a_{KS_1}^+ a_{PS_2}^+ a_{PS_2}$$

$$= \underbrace{\sum_{S_1 K}^+ a_{KS_1}^+ a_{KS_1}}_1 \cdot \underbrace{\sum_{S_2 P}^+ a_{PS_2}^+ a_{PS_2}}_1$$

Oper der El-Zahl: N_{el} N_{el}

$$V_{\text{Coul}}^{q=0} = \underbrace{-\frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon_0 \alpha^2} \frac{N_{el}^2}{V}}_{(1)} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon_0 \alpha^2} \frac{N_{el}^2}{V}}_{(2)}$$

thermodynamisch Limes:

$\frac{E}{V}$ = konstant f. $\frac{E \rightarrow \infty}{V \rightarrow \infty}$ intensionsfreie!

(1) $\sim \frac{N_{el}}{V} \Rightarrow \frac{E}{V} = \frac{N_{el}}{V^2} = \underbrace{\frac{N_{el}}{V}}_{\text{konst}} \frac{1}{V} \rightarrow 0$

(2) überlebt die tel. Limes denn $\frac{E}{V} \sim \frac{N_{el}^2}{V^2} = \text{konstant}$

V_{eff} zusammen fassen:

$$V_{\text{eff}} = \left\langle \frac{T_{el}}{m} + \underbrace{V_{\text{Coul}}^{q=0}} + \underbrace{V_{\text{Coul}}^{q \neq 0}} + \underbrace{V_{G_2}} \right\rangle + \underbrace{V_{\text{ion-ion}}}$$

$$\underbrace{V_{\text{Coul}}^{q=0}} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{\alpha^2 \epsilon_0} \frac{N_{el}^2}{V}, \quad \underbrace{V_{G_2}} = -\frac{e^2 N_{el}^2}{\alpha^2 \epsilon_0 V}, \quad \underbrace{V_{\text{ion-ion}}} = \frac{1}{2} \frac{e^2 N^2}{\alpha^2 \epsilon_0 V}$$

letzte VL, N-Ionenzahl

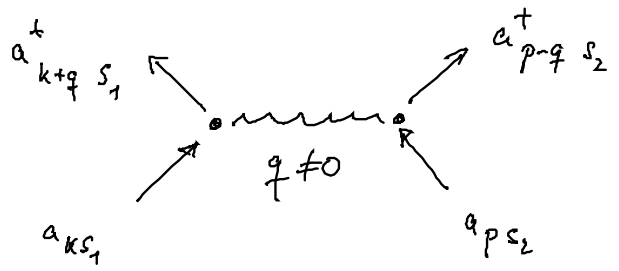
diese Terme heben sich exakt gegeneinander weg wenn Später Erwartungswert in Bethezahlzustände genommen wird
 als fällt uns noch mit „mum“ weiterreden

$$H = \sum_{ks} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{ks}^\dagger a_{ks} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ p, k, q \neq 0}} V_q a_{k+q, s_1}^\dagger a_{p+q, s_2}^\dagger a_{ps_2} a_{ks_1}$$

Hamiltonian d. Jellium Modells

Bemerkungen:

- a) H enthält: kinetische Energie der Elektronen sowie deren Coulomb-WW mit $q \neq 0$
- b) $q \neq 0$: Kompensation v. $V_{\text{Coul}}^{q=0}$ mit $V_G, V_{\text{ion-ion}}$
- c) $\kappa \rightarrow 0, V_q = \frac{e^2}{\epsilon_0 V q^2}$ ist Coulomb-WW im 3d System
- d) Interpretation als Zweiteilchen-WW



- e) Gültigkeit d. Modells:
 - abgerollte Schale + 1 Außenelektron / Ion
 - Bsp. Alkali-Metalle Na
 - wird viel breiter verwendet: Halbleiter, komplizierte Metalle

3.3. Grundzustand / Endzustandsenergie d. Elektronengases

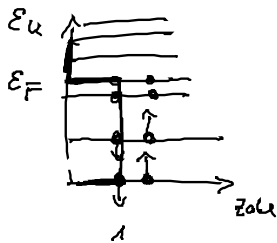
$$V_{\text{eff}} = \langle T_{\text{kin}} + V_{\text{core}}^{q \neq 0} \rangle \hat{=} \langle H_{\text{elektron gas}} \rangle = E_{\text{el}}$$

$\langle \rangle$ mit tiefster Zustand, da Vielteilchenproblem \rightarrow Ansatz

T_{el} ist exakt behandelbar, $V_{\text{core}}^{q \neq 0}$ in Störperturbation

$$\downarrow E = E_{\text{kin}} + \delta E_V$$

Vollfunktion: $|\psi_0\rangle$ sei Grundzustand des kinetischen Energie



den Elektronen wird auf die Zustände
von unten begonnen verteilt

$$\downarrow |\psi_0\rangle = |u_1, u_2, u_3, \dots, u_{k_F}, 0, 0, \dots\rangle$$

\uparrow
 $u_{k,s}$

$$F_{\text{kin}}^0 = \langle \psi_0 | T_{\text{el}} | \psi_0 \rangle = \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} \langle \psi_0 | a_{k,s}^\dagger a_{k,s} | \psi_0 \rangle$$

$$= \sum_{k,s} \epsilon_{k,s} u_{k,s} = \sum_{k,s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \theta(\epsilon_F - \epsilon_k)$$

\uparrow
Teilchenzahl im Zustand k,s

$$= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|k| < k_F} d^3k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int_0^{k_F} dk k^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 V k_F^5}{\pi^2 5 2m}$$

\uparrow \uparrow
Spin Fermikugel

Schöner schreiben: El. Dichte $n = \frac{N}{V}$ mit

$$N = \sum_{k_s} 1 = \frac{8\pi V}{(2\pi)^3} \frac{1}{3} k_F^3 \rightarrow k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

$$E_{Ryd} = \frac{e^2}{2ma_0}, \quad a_0 \text{ Rydberg radius}$$

$$r_s^{-3} = \frac{4\pi}{3} n a_0^3 : \text{dimensionlos, Radius des Kugel die ein Teilchen im Mittel einnimmt "Teilchenabstand"}$$

$$\boxed{E_{kin}^0 = N \cdot E_{Ryd} \cdot \frac{2,21}{r_s^2}}$$

kinetische Energie f. Zustand $|\psi_0\rangle$, dh. $T=0$

Bemerkungen:

a) Homodgen Limit $\frac{E_{kin}^0}{N} = \text{konstant}$ stimmt

b) E_{Ryd} , r_s nur f. Bequemlichkeit eingesetzt um gut mit δE_U zu vergleichen

c) r_s : Maß f. Raum d. Teilchen einnehmen können

$r_s \downarrow \rightarrow E_{kin}^0 \uparrow$ aufgrund Ausdrückrelation
(kleiner) (größer)

Störung bzgl. Coulomb-WW

$$\delta E_U = \langle \psi_0 | H_{el-el} | \psi_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, p, q \\ s_1, s_2}} V_q \langle \psi_0 | \underbrace{a_{k+q, s_1}^+ a_{p-q, s_2}^+ a_{p, s_2} a_{k, s_1}}_{\dots} | \psi_0 \rangle$$

$\neq 0$, wenn $|\psi_0\rangle$ so nach
links versetzt, dass $\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$
sonst = 0, weil orthogonal

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{p, q, k \\ s_1, s_2}} V_q \langle \psi_0 | a_{k+q, s_1}^+ (\delta_{p-q, p} \delta_{s_2, s_2} - a_{p, s_2} a_{p-q, s_2}^+) a_{k, s_1} | \psi_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{p, q, k \\ s_1, s_2}} V_q \langle \psi_0 | \underbrace{a_{k+q, s_1}^+ a_{k, s_1}}_{\dots} \delta_{p-q, p} | \psi_0 \rangle$$

Term ist $\neq 0$, wenn $\delta_{k+q, k}$
aber das ist $q=0 \Rightarrow$ ist also insgesamt verboten!

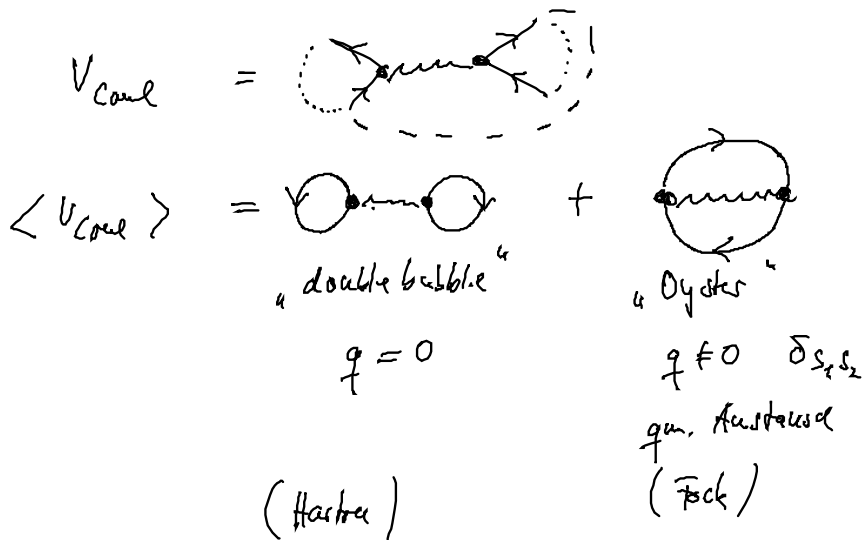
$$= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{p, q, k \\ s_1, s_2}} V_q \langle \psi_0 | \underbrace{a_{k+q, s_1}^+ a_{p, s_2} a_{p-q, s_2}^+ a_{k, s_1}}_{\dots} | \psi_0 \rangle$$

Term $\neq 0$ für $s_1 = s_2, p-q = k$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{k, q, s} V_q \langle \psi_0 | \hat{u}_{k+q, s} \underbrace{\hat{u}_{k, s}^+}_{\dots} | \psi_0 \rangle$$

$$\equiv a_{k, s}^+ a_{k, s}$$

entspricht folgender Diagrammregel:



$\hat{=}$ Hartree - Fock Näherg.

$$\delta E_V = -\frac{1}{2} \left[\frac{V}{(2a)^3} \right]^2 \int d^3k \int d^3q \frac{e^2}{\epsilon_0 V q^2} \theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|) \cdot \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

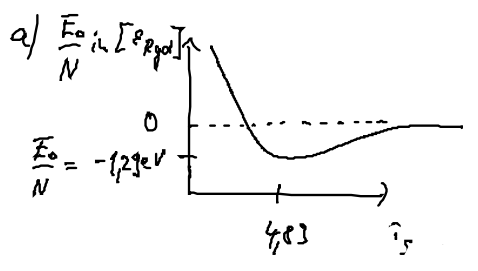
\uparrow \uparrow
 Folge Spin

D.B. = $-\epsilon_{Ryd} N \frac{0,916}{r_s}$

Grundzustandsenergie d. Fermionenmodells in H-F-Näherg

$$\frac{E_0}{N} = \epsilon_{Ryd} \left(\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right)$$

Bemerkung:



wenn $E_0 < 0$, so gab es Zustand
 optimale Elektronendichte $r_s = 3,98$
 Nahezu: $-1,31 \text{ eV}$, $r_s = 3,98$ (exp)

b) Phänom d. metallisch Bindung aus Wechselspiel
v. kinetischer E. und Austausch-WW

c) Probleme:

- Störperturbationen problematisch, aber HF-Ansatz stellt immer
ein obere Schranke f. Energie dar

- weitere Korrekturen: $\bar{E} = \bar{E}_0 + \underbrace{\bar{E}^{\text{corr}}}_{\text{Korrelationsenergie}}$

$$\frac{\bar{E}^{\text{corr}}}{N} = E_{\text{Ryd}} \frac{Z}{\pi^2} \left(1 - \ln 2 \right) \ln \frac{r_s}{5} + \dots$$

4. Plasmonen als kollektive Anregungen d. Elektronengas

- Elektronengas ist wie Spins mit viele Zustände
- reagieren als kollektiv \rightarrow „kollektive Anregung“ $\hat{=}$ Plasmonanregung

z.B.



Frage: welche Elektronenenergie von e^-
wird gut absorbiert, reagiert also
mit kollektiven Oszillationen an?

