

5. Dielektrische Eigenschaften des Elektronengases

5.1. Dielektrische Funktionen

Übergang mikroskopisch \rightarrow makroskopische Elektrodynamik

Felder: $\vec{E} \rightarrow \vec{D}$

$$\vec{D}_Q(\omega) = \epsilon_0 \epsilon_Q(\omega) \vec{E}_Q(\omega) \quad \text{als allgemeiner linearer Ansatz}$$

($\epsilon_Q(\omega)$ hat i.a. Tensorcharakter)

$\epsilon_Q(\omega)$: dielektrische Funktion und bestimmt Materialantwort

Einwegung: $\vec{E}(\vec{r}, t) = \underbrace{-\vec{\nabla} \phi(\vec{r}, t)}_{\text{longitudinal L}} - \underbrace{\partial_t \vec{A}(\vec{r}, t)}_{\text{transversal T}}$

in Coulombbedingung

longitudinal L $(\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \phi = 0)$ $\vec{E}_Q \rightarrow \vec{Q}$

transversal T $(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0)$ $\vec{E}_Q \uparrow \vec{Q}$

man kann 2 dielektrische Funktionen definieren, $\vec{Q} \rightarrow 0$: $\epsilon_Q^L = \epsilon_Q^T$

ϵ_Q^L und ϵ_Q^T als Antwortfunktionen zu L/T-Feldern

$$\vec{E}_Q = \frac{1}{Q^2} \vec{Q} \vec{Q} \cdot \vec{E}_Q - \frac{1}{Q^2} \vec{Q} \times \vec{Q} \times \vec{E}_Q \equiv \vec{E}_Q^L + \vec{E}_Q^T$$

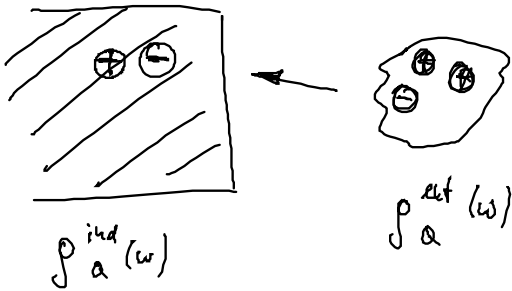
jedes Feld kann in L/T aufgeteilt

Stelle ab jetzt longitudinaler ϵ : $\epsilon_Q^L(\omega)$

longitudinale Felder werden am einfachsten über Ladungsdichten dargestellt:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{E}^T + \vec{E}^L) = \vec{\nabla} \cdot \vec{E}^L = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\vec{r}, t)$$

Elektronen gas + externe Testladungen \Rightarrow Maxwellgleichg.



$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho^{\text{ind}}(\vec{r}, t) + \rho^{\text{ext}}(\vec{r}, t))$$

$$\parallel \vec{\nabla} \cdot \vec{E}_Q = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho_Q^{\text{ind}}(\omega) + \rho_Q^{\text{ext}}(\omega))$$

bzw.:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho^{\text{ext}}(\vec{r}, t)$$

$$\parallel \vec{\nabla} \cdot \vec{D}_Q(\omega) = \rho_Q^{\text{ext}}(\omega)$$

5.2. Bedeutung der longitudinalen Dielektrizitätsfunktion

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_Q = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho_Q^{\text{ind}}(\omega) + \rho_Q^{\text{ext}}(\omega))$$

lineare Antwort: $\rho_Q^{\text{ind}}(\omega) = \underbrace{\chi_Q(\omega)}_{\text{„Polarisierbarkeit“}} \rho_Q^{\text{ext}}(\omega)$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho_Q^{\text{ext}}(\omega) + \chi_Q(\omega) \rho_Q^{\text{ext}}(\omega)) = \frac{1}{\epsilon_0} (1 + \chi_Q) \rho_Q^{\text{ext}}$$

oder $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_Q = \vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{D}_Q}{\epsilon_0 \epsilon_Q} = \frac{\rho_Q^{\text{ext}}}{\epsilon_0 \epsilon_Q}$ $\rightarrow \boxed{\epsilon_Q^{-1} = 1 + \chi_Q}$

Def. $\epsilon_Q(\omega)$ \uparrow $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho^{\text{ext}}$

Problem of ρ_Q unklar, ρ_Q wird als $\rho^{ind} = \rho^{ind}(\rho^{ext})$ bestimmt

$$\rho_Q^{ind} \equiv -\frac{e}{V} \sum_k \langle a_{k-Q}^+ a_k \rangle, \text{ d.h. } -i\hbar \partial_t (a_{k-Q}^+ a_k) = \underbrace{\left[H_{el} + H_{ext} a^+ a \right]}_{\text{benutzt}}$$

über Heitbergbeziehung bestimmt als Pkt. v. ρ^{ext}

$$H_{ext} = \sum_{1,2} \langle k_1 s_1 | -e \phi_{ext}(\vec{r}) | k_2 s_2 \rangle a_{k_1 s_1}^+ a_{k_2 s_2}$$

wird ρ^{ext} hervorgehoben

$$= \sum_{k_1, k_2, s} -e \phi_{k_1 - k_2}^{ext} a_{k_1 s}^+ a_{k_2 s}, \quad \phi_{k_1 - k_2}^{ext} = \frac{1}{V} \int d\vec{r} e^{-i(k_1 - k_2)\vec{r}} \phi(\vec{r})$$

$$= \sum_{k, \alpha, s} -e \phi_Q^{ext} a_{k-Qs}^+ a_{ks}$$

unpolar. als Pkt. v. ρ^{ext} geschrieben, denn $\rho_Q = \frac{\rho^{ind}}{\rho^{ext}}$

in Form von d. ersten Ladung:

$$\Delta \phi^{ext} = -\frac{\rho^{ext}}{\epsilon_0} \rightarrow -Q \phi_Q^{ext} = -\frac{\rho_Q^{ext}}{\epsilon_0}$$

$$-e \phi_Q^{ext} = -\frac{e \rho_Q^{ext}}{Q^2 \epsilon_0}$$

$$\text{gilt } \langle a_{k-Qs}^+ a_{ks} \rangle \text{ berechnen, } \sum_k \sigma_{k-Qk}^{ss} = \sigma_Q, \rho_Q = -\frac{e}{V} \sigma_Q \\ \equiv \sigma_{k-Qk}^{ss}$$

im Vgl. zur Plasmonrechnung ändert sich nur der Term um ϕ^{ext}

$$\downarrow -i\hbar \partial_t a_{k-QS}^+ a_{kS} \Big|_{ext} = [H_{ext}, a_{k-QS}^+ a_{kS}]$$

ohne Rechnung. $= -e \sum_{q'} \phi_{q'}^{ext} \left(a_{k-Q-Q'S}^+ a_{kS} - a_{k-QS}^+ a_{k+Q'S} \right)$

RPA random phase approximation
 $\underbrace{Q=-q'} \quad \underbrace{Q=-q'}$

wie oft es bestimmte Indexkombinationen auf:

Beispiele: $a_{kS}^+ a_{kS}$, Kohärenz $a_{k_1S}^+ a_{k_2S} \rightarrow$ Kopplung

$$= -e \phi_{-Q}^{ext} \left(a_{kS}^+ a_{kS} - a_{k-QS}^+ a_{k-QS} \right)$$

aufsummieren aller Beiträge. (+ Elektronenanteil)

$$-i\hbar \partial_t \sigma_{k-Q, k}^{SS} = (\tilde{\epsilon}_{k-QS} - \tilde{\epsilon}_{kS}) \sigma_{k-Q, k}^{SS} \quad H_0\text{-Anteil}$$

$$\underline{V_Q} \left(\sigma_{kk}^{SS} - \sigma_{k-Q, k-Q}^{SS} \right) \left(\sum_{j,k} \sigma_{k-Q, k}^{SS} + \underline{\underline{\sigma_Q^{ext}}} \right)$$

Elektronen

externer Anteil

$$\underline{\underline{-e \phi^{ext}}} = \frac{-e \rho_Q^{ext}}{Q^2 \epsilon_0} = \frac{e^2 \frac{1}{V} \sigma_Q^{ext}}{Q^2 \epsilon_0} = \underline{\underline{V_Q \sigma_Q^{ext}}}$$

offensichtlich sind $\sigma_{k-Q,k}^{ss}$ (induzierte Ladungsdichte) und die externe Ladungsdichte σ_Q^{ext} angegeben, die Abregung sind plasmoeartig, fernerhin: zeitl. konstante Fortpflanzung

$$\sigma_{k-Q,k}^{ss}(\omega) = \frac{V_Q (\sigma_Q(\omega) + \sigma_Q^{ext}(\omega)) (\sigma_{kk}^{ss} - \sigma_{k-Q,k-Q}^{ss})}{-\hbar\omega - \tilde{\epsilon}_{k-Q,Q} + \tilde{\epsilon}_{k,Q}}$$

$\sum_{k,Q}$ anführen

$$\sigma_Q(\omega) = V_Q (\sigma_Q + \sigma_Q^{ext}) P_Q, \quad P_Q \equiv \text{Polarisationsfunktion}$$

$$P_Q \equiv \sum_{k,Q} \frac{\sigma_{kk}^{ss} - \sigma_{k-Q,k-Q}^{ss}}{-\hbar\omega - (\tilde{\epsilon}_{k-Q,Q} - \tilde{\epsilon}_{k,Q})} \quad \text{Def. } P_Q$$

$$\left. \begin{aligned} \} \sigma_Q &= \frac{V_Q P_Q}{1 - V_Q P_Q} \sigma_Q^{ext} \end{aligned} \right\}$$

• Bestimmungsgl. der Fourierkomponente v. $\rho_Q^{ind} = -\frac{e}{V} \sigma_Q$
über $\rho_Q^{ext}(\omega) = -\frac{e}{V} \sigma_Q^{ext}$

$$\Rightarrow \rho_Q = \frac{V_Q P_Q}{1 - V_Q P_Q}$$

• bestimmt ρ_Q und damit ϵ_Q

$$\epsilon_Q = \frac{1}{1 + \rho_Q} = \frac{1}{1 + \frac{V_Q P_Q}{1 - V_Q P_Q}} = \frac{1 - V_Q P_Q}{1 - V_Q P_Q + V_Q P_Q} = 1 - V_Q P_Q$$

dielektrische Funktion d. Elektronengas

$$\epsilon_Q(\omega) = 1 - V_Q P_Q = 1 - V_Q \sum_{k,s} \frac{f_{k-Q}^s - f_k^s}{\hbar(\omega + i\gamma_Q(\omega)) + (\epsilon_{k-Q}^s - \epsilon_k^s)}$$

phänomenologisch
eingefügt

5.3. Interpretation der dielektrischen Funktion

a) unter der geg. Näherung wird $\epsilon_Q(\omega)$ Lindhard formel genannt

b) P_Q heißt Polarisationsfkt. aus Analogie mit Optik:

$$\vec{D}_Q = \epsilon_0 \epsilon_Q^T \vec{E}_Q^T = \epsilon_0 \vec{E}_Q^T + \vec{P}_Q^T = \epsilon_0 \vec{E}_Q^T + \epsilon_0 \chi_Q^T \vec{E}_Q^T$$

↑
optische Dipoldichte

↑
Suszeptibilität

$$\epsilon_Q^T = n^2 = 1 + \chi_Q^T \quad \hat{=} \quad \epsilon_Q^L = 1 - V_Q P_Q$$

⇔ Analogie

c) die Elektronendynamik freier Elektronen in Metalle wird durch

$$\vec{D}_Q = \epsilon_0 \epsilon_Q(\omega) \vec{E}_Q(\omega) \text{ bestimmt}$$

↳ unvollständig bekannt

insbesondere $\text{Re } \epsilon_Q(\omega) \stackrel{!}{=} 0$ Plasmonendispersion

wenn also Q und ω so gewählt werden, so wird
direkt Plasmon angeregt → exp. festbar

d) zur Interpretation des Plasmasausgangs:

$$\vec{D} \cdot \vec{D} = \rho \text{ ext} \quad \text{bzw.} \quad \vec{D} \cdot \vec{D} = \vec{D} \cdot \vec{E} \text{ ext}, \quad \vec{Q} \cdot \vec{D} = \vec{Q} \cdot \vec{E} \text{ ext}$$

$$\left(\frac{\vec{E}_Q}{\epsilon_Q \epsilon_0} \right) \text{ ext} \rightarrow \epsilon_0 \epsilon_Q \vec{E}_Q = \vec{F}_Q \text{ ext}$$

wenn Q, ω der Plasmafrequenz entspricht,
dann: wird diese effektiv angeregt $\text{Re}(\epsilon_Q) = 0$!

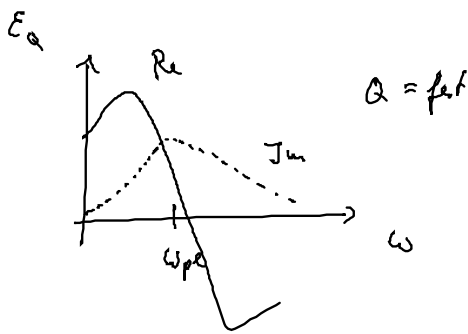
e) $\chi_Q(\omega)$: bis hin zum Hartree-Fock Approx. f. Elektronen

$$\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4 \rangle = \langle a_1^\dagger a_4 \rangle \langle a_2^\dagger a_3 \rangle - \langle a_1^\dagger a_3 \rangle \langle a_2^\dagger a_4 \rangle + \text{Korrekturen}$$

die Korrektur beschreibt Dämpfung des Plasmons

Konzept v. kollektiver Anregung + Quantisierung

"alle Elektronen" \Rightarrow "Plasmon"
 V_Q ver koppelt \Rightarrow neue Eigenfrequenz + "leichte Dämpfung"



5.4. Folgerungen an Lindhard formel

(i) $\epsilon_Q(\omega) \rightarrow \vec{D}_Q(\omega) = \epsilon_0 \underline{\epsilon_Q(\omega)} \vec{E}_Q(\omega)$

$\vec{D}(\vec{r}, t) \sim \epsilon_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int d^3r' \underbrace{\epsilon(\vec{r}-\vec{r}', t-t')}_{\text{„dielektrische Funktion“ „retardiert“}} \vec{E}(\vec{r}', t')$

$D(t)$ bestimmt durch $E(t')$ zu allen Zeiten $t' < t$

(ii) Bewegung im Festkörper



Festkörper \rightarrow Umordnung der Ladungen d. El. Ionen

$$i\vec{Q} \cdot \vec{D} = \int_Q^{ext} \rightarrow i\vec{Q} \cdot (\epsilon_0 \underline{\epsilon_Q} \vec{E}_Q) = \rho_Q^{ext}$$

$$i\vec{Q} \cdot (\epsilon_0 \epsilon_Q \underline{-i\vec{Q} \phi_Q}) = \rho_Q^{ext}$$

$$\phi_Q = \frac{\rho_Q^{ext}}{\epsilon_0 \epsilon_Q Q^2}$$

ϵ_Q modifiziert das Coulombpotential $\frac{-e}{\epsilon_0 V Q^2} \rightarrow \frac{-e}{\epsilon_0 V Q^2 \epsilon_Q}$

deut. Abschirmung wenn $\epsilon_Q > 1$ ist, gilt z.B. f. viele Ausfälle des Mechanismus $\vec{E}D$: Linsen und Schwach strukturiert

(iii) Abschätzung f. $Q \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow 0$

klass. Grenzfall $Q \rightarrow 0$ (Lay wellig), $\omega \rightarrow 0$ (Langsam)

$$\epsilon_Q = 1 - V_Q \sum_{kS} \frac{f_{k-Q}^S - f_k^S}{\hbar\omega + \epsilon_{k-Q} - \epsilon_k} \quad \text{f. } \omega, Q \rightarrow 0$$

$$\approx 1 - V_Q \sum_{kS} \frac{-\sum_{\alpha} Q_{\alpha} \partial_{\alpha}^k f_k^S}{-\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2 k_{\alpha}^2 Q_{\alpha}}{m}} \quad \text{Taylorreihe}$$

$$= 1 - V_Q \sum_{kS} \frac{\sum_{\alpha} Q_{\alpha} \partial_{\alpha}^k \epsilon_k \partial_{\alpha}^k f_k^S}{\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2 k_{\alpha}^2 Q_{\alpha}}{m}} \quad \begin{array}{l} f_k^S \text{ ist Fermi fkt!} \\ f_k^S(\epsilon_k) \end{array}$$

$$= 1 + V_Q \partial_{\mu} \sum_{kS} f_k^S$$

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$= 1 + V_Q \partial_{\mu} N \quad \leftarrow \text{Teilzahl d. Elektronen}$$

$$f_k = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}$$

$$\epsilon_Q = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 V Q^2} \partial_{\mu} N \equiv 1 + \left(\frac{\kappa}{Q} \right)^2$$

$$\kappa = (e^2 \epsilon_0^{-1} \partial_{\mu} n_{cl})$$

$$\frac{N}{V} = n_{cl} \quad \text{EL-Dichte}$$

$$\boxed{\epsilon_Q = 1 + (\kappa/Q)^2 \quad \text{Langevin's f-z full d. Lindhard formel}}$$

bedeut. Wirly. v. Probeladg im lay wellig form fall:

$$H_{\text{kin}} = \frac{1}{V} \sum_Q \phi_Q \rho_Q^{\text{ext}} = \sum_Q \frac{V_Q}{\epsilon_Q} \sigma_Q^{\text{ext}} =$$

$$\phi_Q = \frac{\rho_Q^{\text{ext}}}{\epsilon_0 Q^2 \epsilon_Q} \quad , \quad \rho_Q^{\text{ext}} = \frac{e}{V} \sigma_Q^{\text{ext}}$$

$$= \sum_Q \frac{e^2}{V Q^2 \epsilon_0} \frac{1}{1 + \frac{k^2}{Q^2}} \sigma_Q^{\text{ext}} = \sum_Q \frac{e^2}{V \epsilon_0} \frac{\sigma_Q^{\text{ext}}}{Q^2 + k^2} = \sum_Q V_Q^S \sigma_Q^{\text{ext}}$$

ϵ_Q

f. $k \rightarrow 0$ würde man Coulombpotential erwarten, nach Coulombpotential " $\frac{1}{Q^2}$ "

im Nenner aber $\frac{1}{k^2 + Q^2} \rightarrow$ Abschirm v. kleinen Q -Werten

\rightarrow in Ortsraum würde das große \vec{r} -Werte abgeschirmt

\Rightarrow Coulombpotential wird abgeschirmt

$$V_Q^S \rightarrow \text{Ortsraum} \quad V^S(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-kr} \quad \text{Yukawa Potential}$$

