Physik der Kondensierten Materie 2

Rudolf Gross

SS 2021

Teil 13

Vorlesungsstunde: 03.05.2021-1

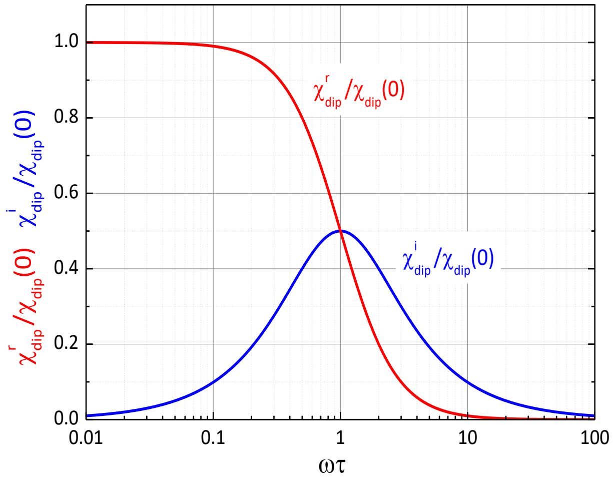
Zusammenfassung: Teil 12a, 27.04.2021/2

- ***Orientierungspolarisation***

partielle Ausrichtung von vorhandenen Dipolen durch $\mathbf{E}_{\text{ext}}$

(i) statisch: $\chi_{\text{dip}}(0) = \frac{C}{T} \quad \text{mit } C = n_v \frac{p_{\text{dip}}^2}{3\epsilon_0 k_B}$ ***Curie-Gesetz*** $(p_{\text{dip}} E \ll k_B T)$

(ii) dynamisch: $\chi_{\text{dip}}^r(\omega) = \chi_{\text{dip}}(0) \frac{1}{1+\omega^2\tau^2}$ $\quad \chi_{\text{dip}}^r(\omega) = \chi_{\text{dip}}(0) \frac{\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2}$ ***Debyesche Formeln***



- ***dielektrische Funktion von Metallen***

- freie Elektronen → keine Rückstellkraft
- Bewegungsgleichung:

$$m^\star \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{m^\star}{\tau}\frac{dx}{dt} = (-e)E_0 e^{-i\omega t} \Rightarrow$$

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_{\text{el}}(\omega)\left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\frac{\omega^2\tau^2}{1+\omega^2\tau^2}\right]$$

$$\epsilon_i(\omega) = \epsilon_{\text{el}}(\omega)\left[\frac{\omega_p^2}{\omega^2}\frac{\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2}\right]$$

Plasma-Frequenz:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0\epsilon_{\text{el}}(\omega)\, m^\star}} = \sqrt{\frac{\sigma(0)}{\epsilon_0\epsilon_{\text{el}}(\omega)\tau}}$$

$n \simeq 10^{22}\ \text{cm}^{-3} \Rightarrow \omega_p$ im UV-Bereich

(i) $\omega \ll 1/\tau, \omega_p$:

$$n \simeq \kappa \simeq \sqrt{\frac{\sigma(0)}{2\epsilon_0\omega}} \gg 1 \Rightarrow R \simeq 1 - 2/n \Rightarrow R \simeq 1 - 2\sqrt{\frac{2\epsilon_0\omega}{\sigma(0)}}$$

Hagen-Rubens-Relation

hohe Leitfähigkeit, $R \simeq 1$ → Totalreflexion, Metalle glänzen

Abfall der em-Welle in Metall auf 1/e-tel: $\delta = c/\omega\kappa \Rightarrow \delta \simeq (2/\sigma(0)\mu_0\omega)^{1/2}$ (Skin-Eindringtiefe)

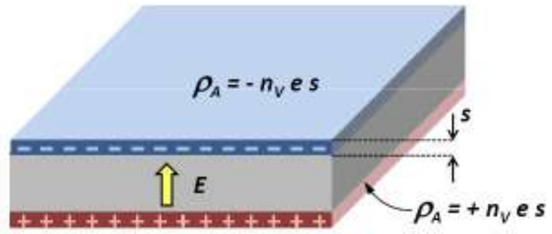
(ii) $1/\tau \ll \omega \ll \omega_p$:

$$\epsilon_r(\omega) \simeq \epsilon_{\text{el}}(\omega)\left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right] \simeq -\epsilon_{\text{el}}(\omega)\frac{\omega_p^2}{\omega^2} < 0 \qquad \epsilon_i(\omega) \simeq \epsilon_{\text{el}}(\omega)\frac{\omega_p^2}{\omega^3\tau}, \qquad |\epsilon_r| \gg \epsilon_i$$

(iii) $\omega \gg 1/\tau,\ \omega_p$:

$$\epsilon_r(\omega) \to \epsilon_{\text{el}}(\omega) \qquad \epsilon_i(\omega) \to 0 \qquad \text{Absorptionskoeffizient: } K = \frac{\epsilon_i\omega}{nc} \propto \frac{\omega_p^2}{\omega^2\tau c} \ll 1/\lambda$$

• ***longitudinale Plasmaschwingungen***



Beispiel: $q = 0$ ***Mode***

$\mathbf{E} = \frac{n_V e}{\epsilon\epsilon_0}\mathbf{s}$ → rücktreibende Kraft: $\mathbf{F} = -e\mathbf{E} = -\frac{n_V e^2}{\epsilon\epsilon_0}\mathbf{s}$

DGL bei Vernachlässigung von Reibung: $m\frac{d^2s}{dt^2} + \frac{n_V e^2}{\epsilon\epsilon_0}\, s = 0$

harmonischer Oszillator mit Eigenfrequenz: $\omega_p = \sqrt{\frac{n_V e^2}{\epsilon\epsilon_0 m}}$

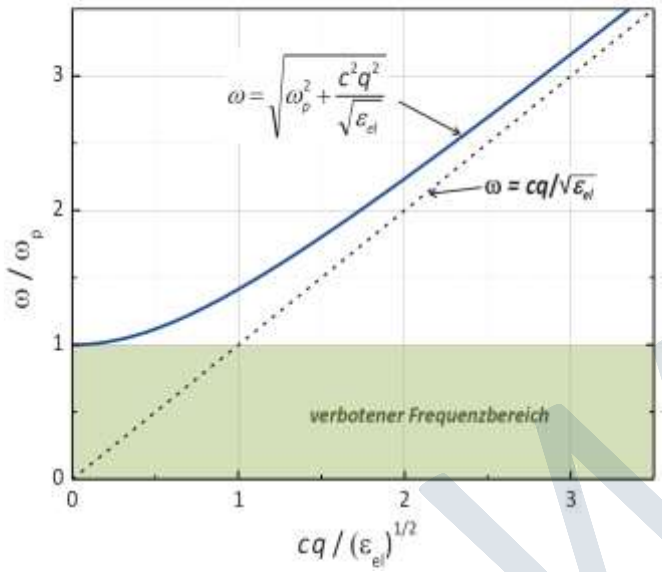
- Anregung durch Beschuss mit geladenen Teilchen
- ***Plasmonen***: Quanten der Plasmaschwingungen in Metallen

• ***transversale Plasmaschwingungen***

- Anregung durch elektromagnetische Wellen
- ***Plasmon-Polariton***: gekoppelte Plasma-Schwingung und elektromagnetische Welle

Dispersion von em-Welle: $q^2 = \frac{\epsilon_r(\omega)}{c^2}\,\omega^2$

mit $\epsilon_r(\omega) = \epsilon_{\mathrm{el}}(\omega)\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)$ ⇒ $\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{c^2}{\epsilon_r(\omega)}\, q^2$



• ***Interbandübergänge***

in Metallen und Halbleitern Überlagerung der Anregung von LT durch Intra- und Interbandübergänge
→ komplexes Verhalten (Beispiel: gebundene Elektron-Loch-Paare (Exzitonen) in Halbleitern)

Kapitel 11

Dielektrische Eigenschaften

11.7 Abschirmung

– **bisher**:

  - Diskussion der Frequenzabhängigkeit der dielektrischen Funktion: $\epsilon(\omega)$
  - Beschränkung auf den Fall großer Wellenlängen, $\lambda \gg a$ bzw. $q \ll \pi/a$ (Zentrum der Brillouin-Zone)

– **jetzt**:

  - Diskussion der q-Abhängigkeit der dielektrischen Funktion: $\epsilon(q)$ für statischen Fall $\omega \simeq 0$
  - Wichtig: $\epsilon(q) = const.$ in q-Raum $\Leftrightarrow$ $\epsilon(r) = \delta$-Funktion im Ortsraum → rein ***lokale Antwort,***
    $\epsilon(q) \neq const. \Leftrightarrow$ $\epsilon(r) \neq \delta$-Funktion → ***nichtlokale Antwort, WW werden wichtig***
  - wichtiger Fall: Abschirmung von Ladungen in Metallen und Halbleitern

(einfache Behandlung mit ***Thomas-Fermi-Modell*** und ***Lindhard-Theorie***)

- ***Theoretische Behandlung von wechselwirkendem Elektronensystem sehr schwierig***

  – Verwendung von einfachen Näherungen: ***„Mean-Field" Theorie***

  – Wechselwirkungen führen zu neuen Phänomenen (*kooperativer Magnetismus, Supraleitung*)

  → *Austausch-WW*: wird erst im Zusammenhang mit magnetischen Eigenschaften diskutiert, Berücksichtigung des Elektronenspins)

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Frage: Auf welcher Längenskala wird eine in ein Metall oder Halbleiter eingebrachte Testladung abgeschirmt?**

  – **Einbringen von positiver Testladung in Metall**:
    – Leitungselektronen werden von dieser Ladung angezogen und schirmen diese ab
    – auf welcher Längenskala passiert diese Abschrimung und von welchen FK-Eigenschaften hängt sie ab?

  – **Mathematische Beschreibung mit zwei elektrischen Potenzialen**:

    i. ***externes Potenzial*** durch externe Testladung

$$-\nabla^2 \phi^{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}) = \frac{\rho^{\mathrm{ext}}(\mathbf{r})}{\epsilon_0}$$

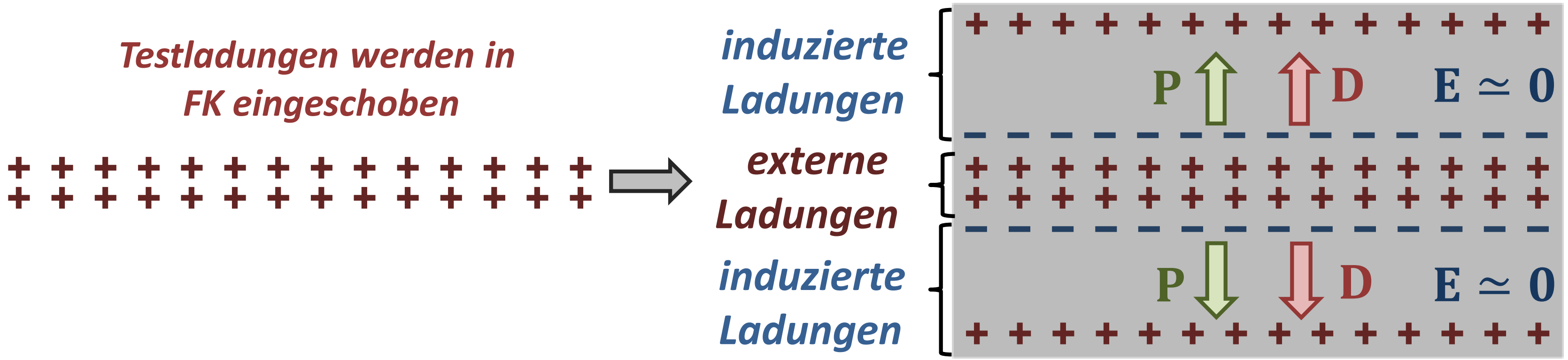
    ii. ***Gesamtpotenzial*** durch Summe aus externer Testladung und induzierten Ladungen

$$-\nabla^2 \phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r}) = \frac{\rho^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \qquad \text{mit } \rho^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r}) = \rho^{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}) + \rho^{\mathrm{ind}}(\mathbf{r})$$

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Welcher Zusammenhang besteht zwischen externem Potenzial und Gesamtpotenzial?**
  - wir benutzen Analogie zu $\mathbf{D}$ und $\mathbf{E}$:
    - $\mathbf{D}$ resultiert aus **freien Ladungen** außerhalb von Medium ➔ Assoziation mit ϕ^{ext}
    - $\mathbf{E}$ resultiert aus **gesamter Ladungsverteilung** ➔ Assoziation mit ϕ^{ges}

Testladungen werden in FK eingeschoben



$\epsilon_0 \mathbf{E} = \mathbf{D} - \mathbf{P}$

$\epsilon_0 \mathbf{E} = \mathbf{D} - \mathbf{P}$

$$\epsilon(\mathbf{q}) = \int d^3r\, e^{-\imath \mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, \epsilon(\mathbf{r})$$

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, e^{+\imath \mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, \epsilon(\mathbf{q})$$

analog

$$D(q,\omega) = \epsilon(q,\omega)\, \epsilon_0 E(q,\omega)$$

$$\Updownarrow \qquad\qquad \Updownarrow$$

$$\phi^{\text{ext}}(q) = \epsilon(q)\ \phi^{\text{ges}}(q)$$

(wir diskutieren nur den Fall $\omega \to 0$ und nehmen ein isotropes Medium an
→ $\epsilon(q)$ ist eine skalare Funktion)

Jede räumliche Fourier-Komponente des Gesamtpotenzials entspricht der um den Faktor $1/\epsilon(q)$ abgeschwächten Fourier-Komponente des externen Potenzials

- **Berechnung der induzierten Ladungsverteilung**

  – **Annahme**:
    – induzierte Ladungsdichte $\rho^{\text{ind}}(\mathbf{q})$ soll linear mit Gesamtpotezial $\phi^{\text{ges}}(\mathbf{q})$ zusammenhängen

$$\boxed{\rho^{\text{ind}}(\mathbf{q}) = \alpha(\mathbf{q})\ \ \phi^{\text{ges}}(\mathbf{q})}$$

  – Herstellung des Zusammenhangs zwischen $\alpha(q)$ und $\epsilon(q)$ durch Verwendung von FT von Poisson-Gleichung $-\nabla^2\phi = \rho/\epsilon_0$

$$q^2\ \phi^{\text{ext}}(\mathbf{q}) = \frac{\rho^{\text{ext}}(\mathbf{q})}{\epsilon_0}\quad (1) \qquad\qquad q^2\ \phi^{\text{ges}}(\mathbf{q}) = \frac{\rho^{\text{ges}}(\mathbf{q})}{\epsilon_0}\quad (2)$$

  – (2) – (1) und verwenden von $\rho^{\text{ind}}(\mathbf{q}) = \rho^{\text{ges}}(\mathbf{q}) - \rho^{\text{ext}}(\mathbf{q})$ sowie $\rho^{\text{ind}}(\mathbf{q}) = \alpha(\mathbf{q})\ \ \phi^{\text{ges}}(\mathbf{q})$

$$\epsilon_0\ q^2[\phi^{\text{ges}}(\mathbf{q}) - \phi^{\text{ext}}(\mathbf{q})]\ = \rho^{\text{ind}}(\mathbf{q}) = \alpha(\mathbf{q})\ \ \phi^{\text{ges}}(\mathbf{q})$$

$$\Rightarrow\ \phi^{\text{ext}}(\mathbf{q}) = \underbrace{\left(1 - \frac{\alpha(\mathbf{q})}{\epsilon_0 q^2}\right)}_{\epsilon(\mathbf{q})}\phi^{\text{ges}}(\mathbf{q}) \qquad \Rightarrow\ \boxed{\epsilon(\mathbf{q}) = 1 - \frac{\alpha(\mathbf{q})}{\epsilon_0 q^2} = 1 - \frac{1}{\epsilon_0 q^2}\frac{\rho^{\text{ind}}(\mathbf{q})}{\phi^{\text{ges}}(\mathbf{q})}}$$

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Berechnung von $\alpha(\mathbf{q})$**

  I. Thomas-Fermi-Methode

  Annahme es räumlich langsam variierenden Störpotenzials → semiklassische Behandlung

  II. Lindhard-Methode (wird nicht diskutiert)

  Behandlung im Rahmen einer linearen Antworttheorie

- **Thomas-Fermi-Abschirmung**

  – Ausgangspunkt ist Schrödinger-Gleichung mit Zusatzpotenzial durch Gesamtladung

$$-\frac{\hbar^2}{2m^\star}\nabla^2\Psi_k(\mathbf{r}) - e\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})\Psi_k(\mathbf{r}) = E_k\Psi_k(\mathbf{r})$$

  – Lösung $\Psi_k(\mathbf{r})$ liefert Ladungsverteilung $\rho^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})$

$$\rho^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r}) = -\boldsymbol{e}\sum_{\boldsymbol{k}}|\Psi_k(\mathbf{r})|^2$$

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Thomas-Fermi-Abschirmung**

  – Lösung der Schrödinger-Gleichung in semiklassischer Näherung

  ➢ **Annahme**: langsame räumliche Variation von Potenzial, $\lambda \gg \lambda_\mathrm{F}$ bzw. $q \ll k_\mathrm{F}$

$$E_n(\mathbf{k},\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) - e\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})$$

Eigenenergien für $\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r}) = 0$

lokale Potenzialfluktuationen durch $\rho^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r}) = 0$

  – lokale Ladungsträgerdichte in Elektronengas:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi^3}\int f\big(E(\mathbf{k},\mathbf{r})\big)\, d^3k \quad \begin{cases} f(E) = \text{Fermi-Verteilung für Fermi-Gas (Metall)} \\ f(E) = \text{Maxwell-Boltzmann-Verteilung für klassisches Teilchengas (Halbleiter)} \end{cases}$$

Zustandsdichte im k-Raum

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Thomas-Fermi-Abschirmung in Metallen (Fermi-Gas, Fermi-Statistik)**

  – lokale Ladungsträgerdichte in **Fermi-Gas**:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{1}{\mathrm{e}^{[E(\mathbf{k})-\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})-\mu]/k_\mathrm{B}T} + 1}\, d^3k = n_0[\mu + e\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})]$$

Ladungsträgerdichte des homogenen, ungestörten Systems

  – lokal induzierte Ladungsdichte

$$\rho^{\mathrm{ind}}(\mathbf{r}) = -e\{n(\mathbf{r}) - n_0\} = -e\,\{n_0[\mu + e\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})] - n_0(\mu)\}$$

→ *dieser Zusammenhang ist **nichtlinear**, für $e\phi^{ges}(r) \ll \mu$ kann Linearisierung vorgenommen werden*

  – Linearisierung für $e\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r}) \ll \mu$:

$$n_0[\mu + e\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})] - n_0(\mu) \simeq \underbrace{\left.\frac{\partial n_0}{\partial \mu}\right|_{\mu=E_\mathrm{F}}}_{D(E_\mathrm{F})/V} \cdot e\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \rho^{\mathrm{ind}}(\mathbf{r}) = \underbrace{-e^2\frac{D(E_\mathrm{F})}{V}}_{\alpha}\,\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{r})$$

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Thomas-Fermi-Abschirmung in Metallen (Fermi-Gas, Fermi-Statistik)**
  - aus $\rho^{\text{ind}}(q) = \alpha(q)\ \phi^{\text{ges}}(q)$ folgt dann

$$\alpha(q) = -e^2 \frac{D(E_\text{F})}{V} \qquad \text{und damit} \qquad \epsilon(q) = 1 - \frac{\alpha(q)}{\epsilon_0 q^2} = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{D(E_\text{F})}{V}$$

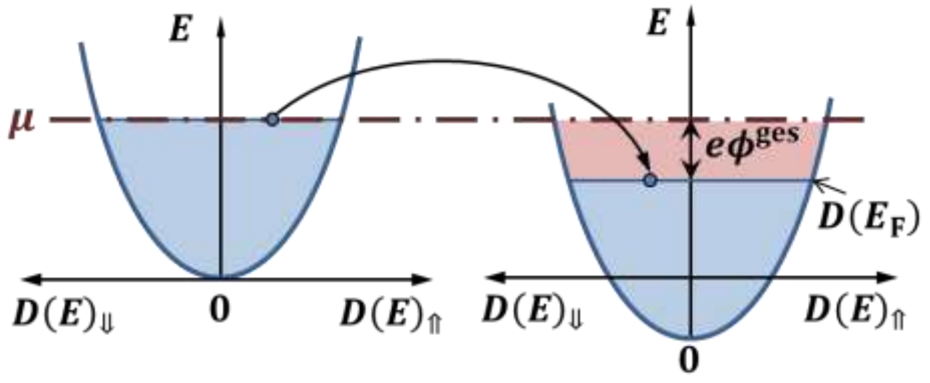
$$\Rightarrow \boxed{\epsilon(q) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2}} \qquad \text{mit} \qquad \boxed{k_s = \sqrt{\frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{D(E_\text{F})}{V}}}$$

Thomas-Fermi-Wellenvektor

Beispiel Cu:
$\frac{D(E_\text{F})}{V} = 1{,}2 \times 10^{22}\text{cm}^{-3}\text{eV}^{-1}$
$2\pi/k_s \ = 3{,}45\ \text{Å}$

  - für $q \to 0$ folgt $\epsilon(q) \to \infty$: für externes Potenzial $\phi^{\text{ext}} \neq 0$ erhalten wir dann $\phi^{\text{ges}} = \phi^{\text{ext}}/\epsilon \to 0$ (vollkommene Abschirmung)

  - **Veranschaulichung**:



lokales Anheben/Absenken von Potenzial führt zu Ladungsdichteänderung

$$\delta n(\mathbf{r}) = \frac{D(E_\text{F})}{V}\ e\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r}) \qquad \text{rote Fläche}$$

$$\Rightarrow -\nabla^2 \phi^{\text{ind}}(\mathbf{r}) = \frac{\rho^{\text{ind}}(\mathbf{r})}{\epsilon_0} = \frac{-e\delta n(\mathbf{r})}{\epsilon_0} = -\frac{e^2 D(E_\text{F})}{\epsilon_0 V}\ \phi^{\text{ges}}(\mathbf{r}) = -k_s^2 \phi^{\text{ges}}(\mathbf{r})$$

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Debye-Hückel-Abschirmung in Halbleitern (klassisches Teilchengas, Maxwell-Boltzmann-Statistik)**

  – lokale Ladungsträgerdichte in **klassischem Teilchengas**:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi^3}\int \frac{A(E,T)}{\mathrm{e}^{[E-e\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r})]/k_\mathrm{B}T}}\,\mathrm{d}^3k = n_0[E - e\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r})] \simeq n_0\mathrm{e}^{e\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r})/k_\mathrm{B}T}$$

LT-Dichte des homogenen, ungestörten Systems ($\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r}) = 0$)

  – lokale induzierte Ladungsträgerdichte

$$\delta n(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) - n_0 = n_0\left\{\exp\left(\frac{e\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r})}{k_\mathrm{B}T}\right) - 1\right\} \simeq n_0\left\{\left[1 + \frac{e\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r})}{k_\mathrm{B}T}\right] - 1\right\} = n_0\frac{e\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r})}{k_\mathrm{B}T}$$

$e\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r}) \ll k_\mathrm{B}T$ (Linearisierung)

  – lokale induzierte Ladungsdichte

$$\rho^{\text{ind}}(\mathbf{r}) = -e\delta n(\mathbf{r}) = -\frac{n_0e^2}{k_\mathrm{B}T}\phi^{\text{ges}}(\mathbf{r})$$

  – aus $\rho^{\text{ind}}(q) = \alpha(q)\ \phi^{\text{ges}}(q)$ folgt dann

$$\alpha(q) = -\frac{n_0e^2}{k_\mathrm{B}T} \quad \text{und damit} \quad \epsilon(q) = 1 - \frac{\alpha(q)}{\epsilon_0q^2} = 1 + \frac{n_0e^2}{\epsilon_0k_\mathrm{B}T}\frac{1}{q^2}$$

$$\boxed{\epsilon(q) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2}} \quad \text{mit} \quad \boxed{k_s = \sqrt{\frac{n_0e^2}{\epsilon_0k_\mathrm{B}T}}}$$

Debye-Hückel-Wellenvektor

freies Elektronengas: $\frac{D(E_\mathrm{F})}{V} = \frac{3}{2}\frac{n_0}{k_BT_F}$
⇒ gleicher Ausdruck wie für klassisches und Fermi-Gas, wenn wir T durch T_F ersetzen

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Beispiel: Abgeschirmtes Coulomb-Potenzial**

  – Einbringen von Störatom mit einer anderen Elektronenzahl in Halbleiter oder Metall

  – Potenzial von Punktladung in Vakuum: $\phi^{\text{ext}}(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r} \overset{\text{FT}}{\Longleftrightarrow} \phi^{\text{ext}}(q) = \frac{Q}{\epsilon_0 q^2}$

    ➢ mit $\phi^{\text{ext}}(q) = \epsilon(q)\ \phi^{\text{ges}}(q)$ und $\epsilon(q) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2}$ folgt:

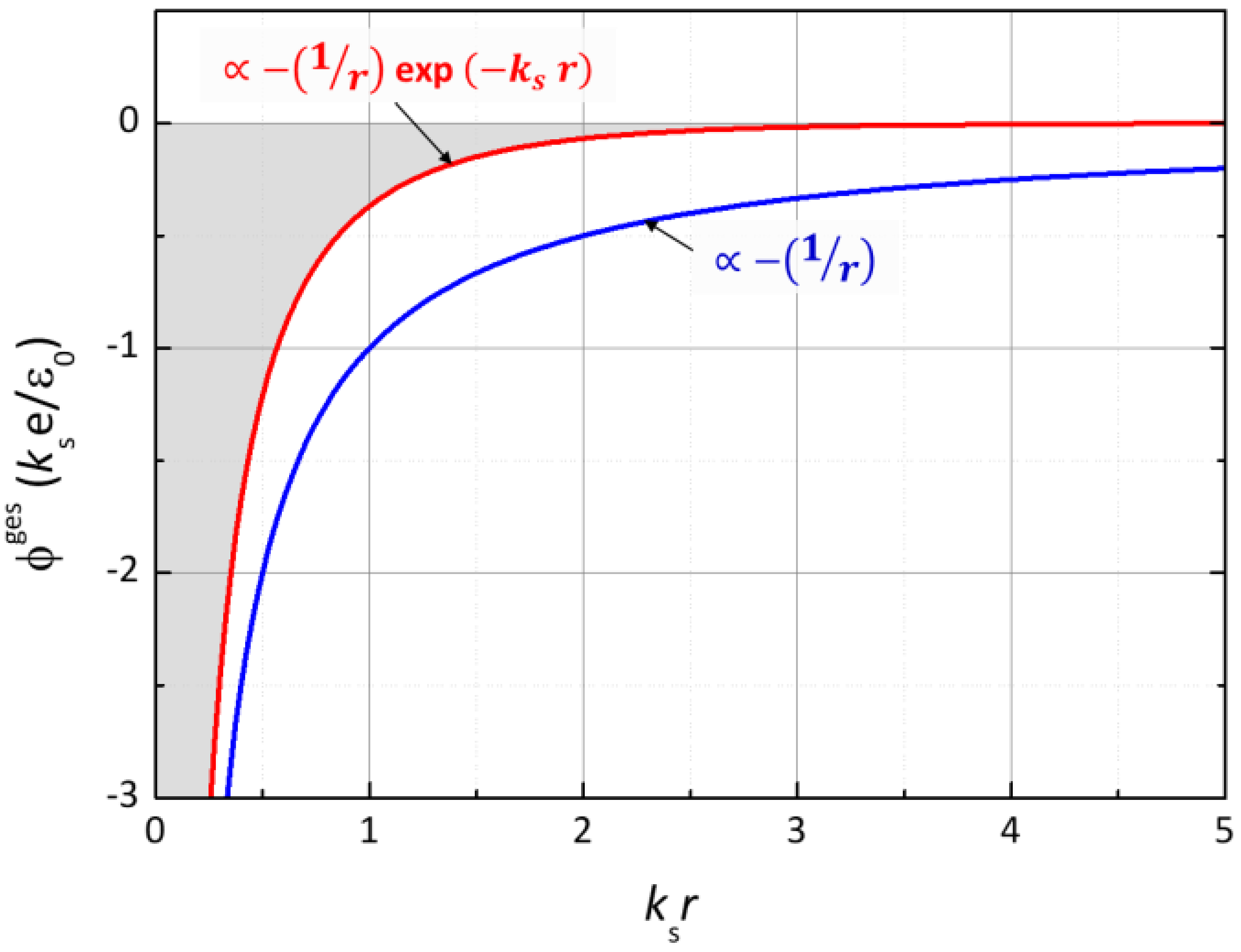
$$\phi^{\text{ges}}(q) = \frac{\phi^{\text{ext}}(q)}{\epsilon(q)} = \frac{Q}{\epsilon_0(q^2 + k_s^2)}$$

  – Fourier-Transformation → ***abgeschirmtes Coulomb-Potenzial oder Yukawa-Potenzial***

$$\phi^{\text{ges}}(r) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{Q}{\epsilon_0(q^2 + k_s^2)} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-k_s r}$$

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Beispiel: Abgeschirmtes Coulomb-Potenzial**



abgeschirmtes Coulomb-Potenzial klingt wegen $\exp(-k_s r)$-Term für große r wesentlich schneller ab als $1/r$-Potenzial

11.7.1 Statische Abschirmung

- **Weitere Beispiele für die Bedeutung der Abschirmung**

  – ***Abschirmung von Phononen in Metallen***

    → attraktive Elektron-Elektron-Wechselwirkung → Supraleitung

  – ***Metall-Isolator-Übergang***

    → Übergang vom metallischen Zustand in den isolierenden Zustand bei abnehmender Ladungsträgerdichte aufgrund der abnehmenden Abschirmung des Coulomb-Potenzials

  – ***Elektron-Elektron-Wechselwirkung***

    → Übergang von nichtwechselwirkendem Elektronensystem (Fermi-Gas) zu wechselwirkendem System (Fermi-Flüssigkeit)

11.7.2 Lindhard Theorie

- **Vertiefung: Erweiterungen des Thomas-Fermi-Modells**
  - Thomas-Fermi-Modell gilt nur für den Grenzfall $\frac{2\pi}{q} \gg \lambda_{\mathrm{F}}$
  - Erweiterung auf den Fall kürzerer Wellenlängen durch Lindhardt-Theorie

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2} \underbrace{\left[\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right]}_{\text{Korrektur zum Thomas-Fermi-Ergebnis für } T=0} \qquad \text{mit } x = \frac{q}{2k_{\mathrm{F}}}$$

Korrekturterm ist für $q = 2k_F$ nicht analytisch
➔ abgeschirmtes Coulomb-Potenzial von Punktladung besitzt oszillierende Ortsabhängigkeit

$$\phi^{\text{ges}}(r) \propto \frac{1}{r^3} \cos 2k_{\mathrm{F}} r$$

Friedel-Oszillationen

Jacques Friedel

* 11. 02. 1921
† 27. 08. 2014

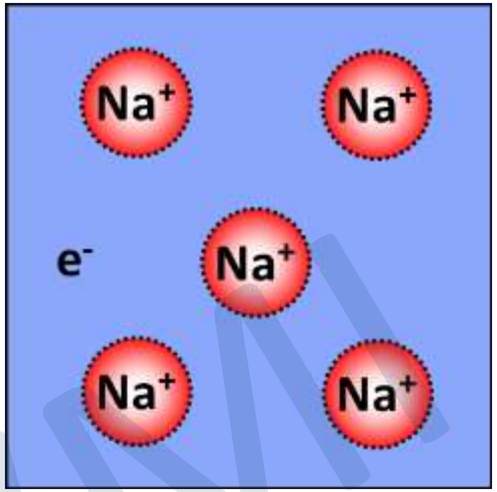
11.7.3 Abschirmung von Phononen in Metallen

- **Vertiefung: Abschirmung von Phononen in Metallen**

  – in isolierenden Ionenkristallen haben wir modifizierte Frequenzen für die transversal- und longitudinal-optischen Phononen erhalten

  ➔ Ursache sind lokale elektrische Felder die zur Verstärkung/Abschwächung der Rückstellkraft führen

  – in Metallen schirmen die Leitungselektronen die Ladungen der Ionen teilweise ab und umgekehrt ➔ **modifizierte dielektrische Funktion**



$$\frac{1}{\epsilon(q,\omega)} = \underbrace{\left(\frac{1}{1+k_s^2/q^2}\right)}\underbrace{\left(\frac{\omega^2}{\omega^2-\widetilde{\Omega}^2(q)}\right)}$$

Beitrag der Elektronen $\epsilon_{\mathrm{el}}(q,0)$:
kann statisch behandelt werden bis fast
in sichtbaren Bereich

Beitrag der abgeschirmten Ionen $\epsilon_{\mathrm{ion}}(q,\omega)$:
$\widetilde{\Omega}^2(q)$ = Plasmafrequenz der abgeschirmten Ionen,
wird für $\omega < \widetilde{\Omega}$ negativ ➔ "*Overscreening*"

$\phi^{\mathrm{ges}}(q,\omega) \propto 1/\epsilon(q,\omega)$ kann negativ werden
➔ attraktive El.-El.-Wechselwirkung ➔ Supraleitung

11.7.4 Polaronen

- **Bewegung von Elektronen in stark polaren Medien: Polaronen**

  – **kovalent gebundene Festkörper**:

  ➢ Elektronen und Löcher bewegen sich durch Kristall, dessen neutrale Atome an festem Ort eingefroren sind
  → Wechselwirkung mit Gitter wird durch Elektron-Phonon-Streuung beschrieben

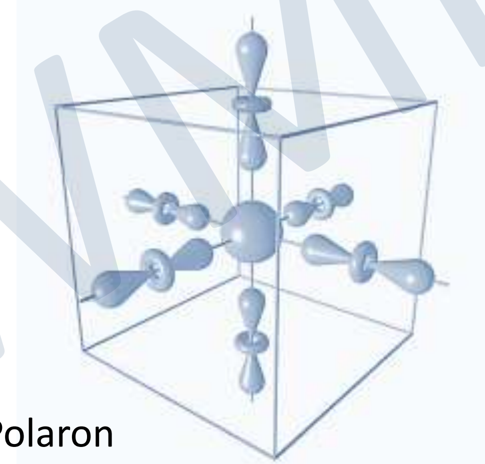
  – **stark polare Festkörper**:

  ➢ starke Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen und geladenen Gitterionen
  → Elektronen sind immer von einer ***lokalen Gitterverzerrung*** umgeben

Polaron = Elektron + Gitterverzerrung

  – **Hinweis**:
  es gibt auch andere Typen von Polaronen

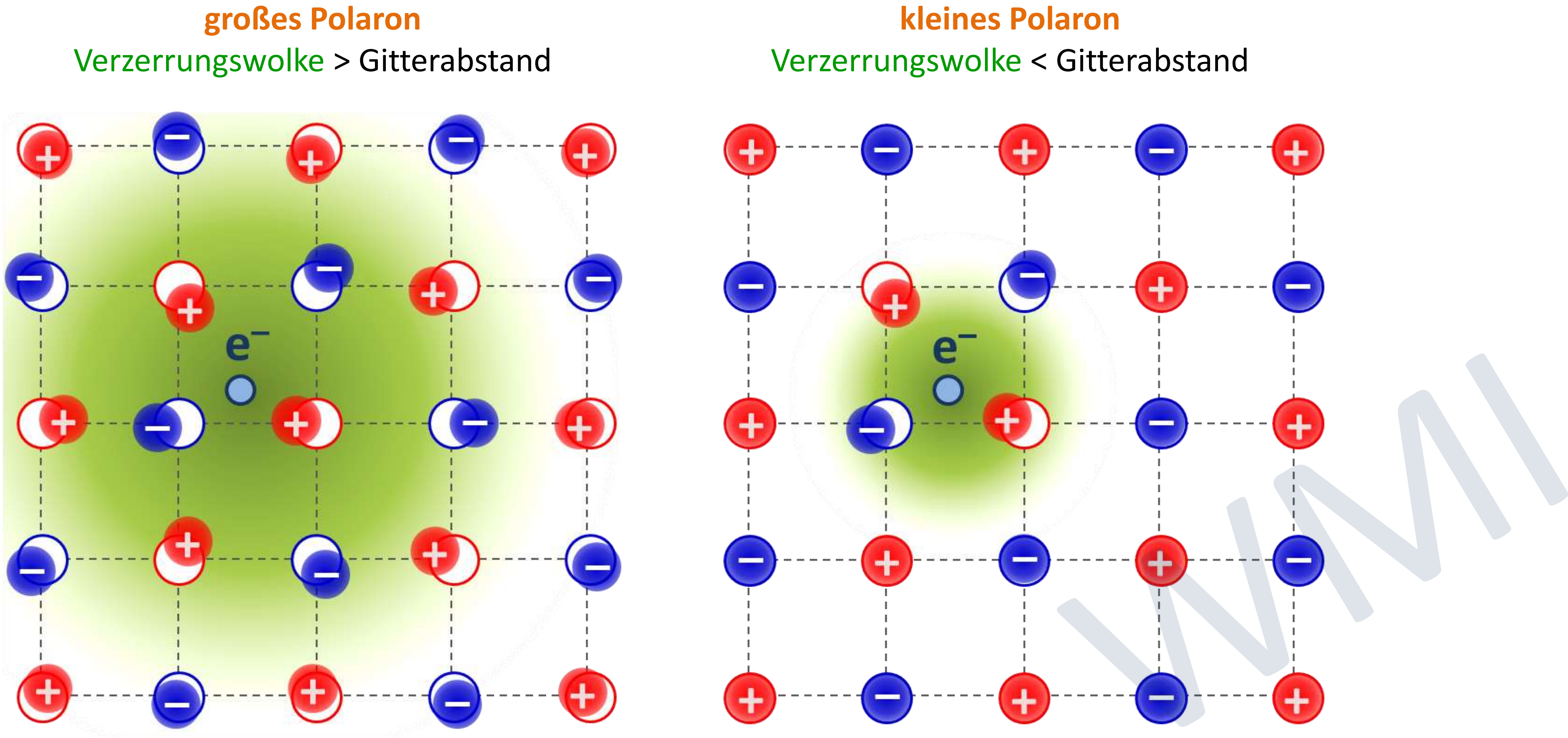
  i. **orbitale Polaronen**: Elektron + ausgerichtete Orbitale
  ii. **Spin-Polaronen**: Elektron + ausgerichtete Spins



orbitales Polaron

11.7.4 Polaronen

- **Große und kleine Polaronen**



- **Effektive Masse von Polaronen**
  - Elektron muss eine Verzerrungswolke mitschleppen

    → kann durch erhöhte effektive Masse berücksichtigt werden

    → Berechnung der effektiven Massen von großen Polaronen durch ***Richard Feynman***

$$m^\star \simeq m_b\left(1+\frac{\alpha}{6}+0{,}025\,\alpha^2\right) \quad \text{für } \alpha \ll 1$$

$$m^\star \simeq m_b(1+0{,}02\,\alpha^4) \quad \text{für } \alpha \gg 1$$

(m_b = Bandmasse)

(α = El-Ph- Kopplungskonstante)

Zusammenfassung: Teil 13a, 03.05.2021/1

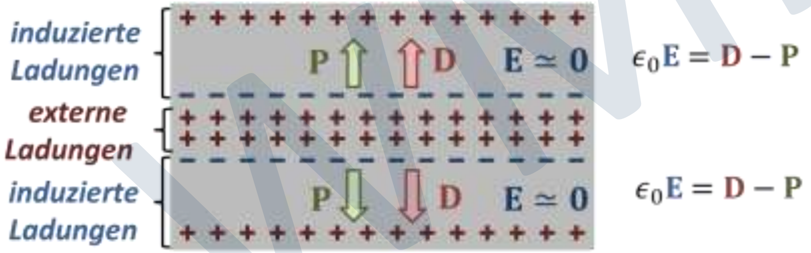
- ***Elektron-Elektron-WW und statische Abschirmung in Metallen***
  - bisher wurde nur ω-Abhängigkeit der dielektrischen Funktion $\epsilon(q,\omega)$ diskutiert
  - $\epsilon(q) = const.$ in q-Raum $\Leftrightarrow$ $\epsilon(r) = \delta$-Funktion im Ortsraum → rein ***lokale Antwort***
    $\epsilon(q) \neq const.$ in q-Raum $\Leftrightarrow$ $\epsilon(r) \neq \delta$-Funktion im Ortsraum → ***nichtlokale Antwort***
  - wechselwirkendes Elektronensystem führt zu nichtlokaler Response in Metallen
    ➔ q-Abhängigkeit der dielektrischen Funktion: $\epsilon(q) \neq const$

- ***Theoretische Behandlung von wechselwirkendem Elektronensystem sehr schwierig***
  - Verwendung von einfachen Näherungen: ``***Mean-Field" Theorie***
  - Wechselwirkungen führen zu neuen Phänomenen
    ➔ ***Abschirmung*** (einfache Behandlung mit ***Thomas-Fermi-Modell*** und ***Lindhard-Theorie***)
    ➔ ***Austausch*** (Diskussion der Austausch-WW im Zusammenhang mit magn. Eigenschaften, Berücksichtigung des Spins)

- ***statische Abschirmung in Metallen und Halbleitern***

$$D(q,\omega) = \epsilon(q,\omega)\, \epsilon_0 E(q,\omega)$$
$$\Updownarrow \qquad\qquad \Updownarrow$$
$$\phi^{\mathrm{ext}}(q) = \epsilon(q)\; \phi^{\mathrm{ges}}(q)$$

Testladungen werden in FK eingeschoben



$$\rho^{\mathrm{ind}}(\mathbf{q}) = \alpha(\mathbf{q})\;\; \phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{q})$$

$$\epsilon(\mathbf{q}) = 1 - \frac{\alpha(\mathbf{q})}{\epsilon_0 q^2} = 1 - \frac{1}{\epsilon_0 q^2}\frac{\rho^{\mathrm{ind}}(\mathbf{q})}{\phi^{\mathrm{ges}}(\mathbf{q})}$$

(i) Thomas-Fermi-Methode → semiklassische Behandlung
(ii) Lindhard-Methode → lineare Antwort-Theorie

Zusammenfassung: Teil 13b, 03.05.2021/1

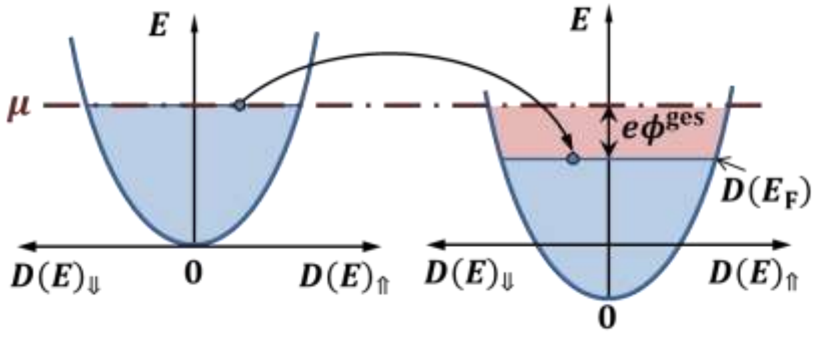
- ***Thomas-Fermi Abschirmung***

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2}$$

$$k_s = \sqrt{\frac{e^2}{\epsilon_0}\frac{D(E_\mathrm{F})}{V}}$$

Thomas-Fermi-Wellenzahl

Kupfer: $D(E_\mathrm{F})/V = 1.2 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}\mathrm{eV}^{-1}$ ➡ $2\pi/k_s = 3{,}45\ \text{Å}$



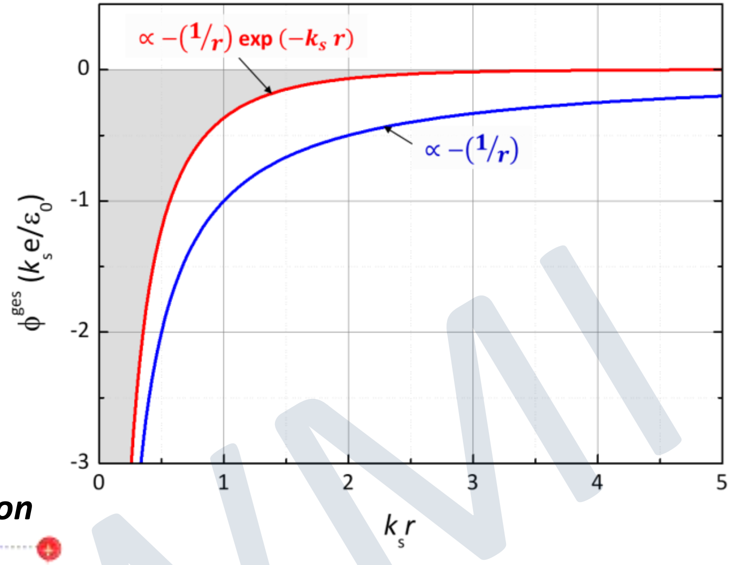
- ***abgeschirmtes Coulomb-Potenzial (Punktladung)***

$$\phi^\mathrm{ext}(\boldsymbol{r}) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r} \xrightarrow{\mathrm{FT}} \phi^\mathrm{ext}(\boldsymbol{q}) = \frac{Q}{\epsilon_0 q^2}$$

$$\boxed{\phi^\mathrm{ext}(q) = \epsilon(q)\ \ \phi^\mathrm{ges}(q)}$$

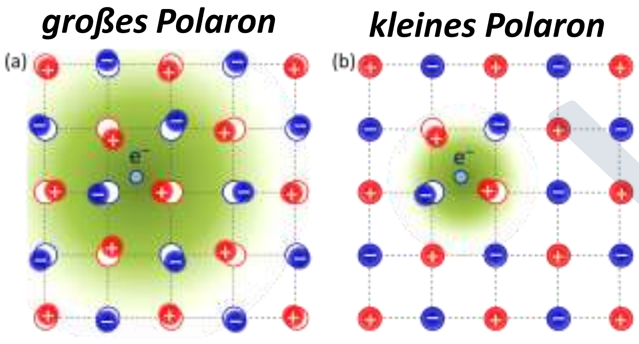
$$\phi^\mathrm{ges}(\boldsymbol{r}) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r}e^{-k_s r} \xleftarrow{\mathrm{FT}} \phi^\mathrm{ges}(\boldsymbol{q}) = \frac{Q}{\epsilon_0(q^2+k_s^2)}$$

Yukawa-Potenzial



- ***Polaronen***

  - starke Coulomb-WW zwischen Elektronen und Gitterionen in polaren Festkörpern
    → Elektronen sind von einer lokalen Gitterverzerrung umgeben
  - effektive Masse von Polaronen
    → Erhöhung der effektiven Bandmasse
    → Elektron schleppt Verzerrungswolke mit sich



Polaron = Elektron + Gitterverzerrung