17 Dielektrizitätskonstante und Abschirmung

Wir wollen in diesem Abschnitt die Dielektrizitätskonstante und die Abschirmung betrachten. Dazu gehen wir aus von einer Störung

$$U(\mathbf{r},t) = u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+\mathrm{i}\omega t+\alpha t} + \mathrm{c.c.} \tag{17.1}$$

Dabei beschreibt ein kleines positives α das adiabatische Einschalten der Störung. In erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie in u geht der Zustand

$$\exp(-\frac{\mathrm{i}\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar})|\mathbf{k}\rangle, \quad |\mathbf{k}\rangle\hat{=}\frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{17.2}$$

über in

$$\psi_{\mathbf{k}}(t) = \exp(-\frac{\mathrm{i}\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar})\left(|\mathbf{k}\rangle + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)|\mathbf{k}-\mathbf{q}\rangle + ...\right). \tag{17.3}$$

Eingesetzt in die Bewegungsgleichung

$$\frac{\mathrm{i}\hbar\partial\psi_{\mathbf{k}}}{\partial t} = (H_0 + u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+\mathrm{i}\omega t+\alpha t} + \mathrm{c.c.})\psi_{\mathbf{k}} \tag{17.4}$$

ergibt das bei Weglassen des Faktors $\exp(-\frac{\mathrm{i}\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar})$

$$\begin{aligned} & \epsilon_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle + (\mathrm{i}\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\epsilon_{\mathbf{k}})|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle + (\mathrm{i}\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}\epsilon_{\mathbf{k}})|\mathbf{k}-\mathbf{q}\rangle \\ = \; & \epsilon_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t+\alpha t})|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + u^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\alpha t})|\mathbf{k}-\mathbf{q}\rangle + O(ub). \end{aligned} \tag{17.5}$$

Daraus folgt dann, wenn wir b von Ordnung u ansetzen,

$$\mathrm{i}\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t+\alpha t} \tag{17.6}$$

mit der Lösung

$$b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) = \frac{u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t+\alpha t}}{-\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \mathrm{i}\hbar\alpha}. \tag{17.7}$$

Ähnlich findet man

$$b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) = \frac{u^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\alpha t}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \mathrm{i}\hbar\alpha}. \tag{17.8}$$

Daraus ergibt sich in erster Ordnung in u folgende Änderung der Ladungsdichte

$$\begin{aligned} \delta\rho(\mathbf{r},t) &= e\sum_{\mathbf{k}s}\left(|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)|^2 - \frac{1}{V_{\mathrm{P}}}\right)f_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{2e}{V_{\mathrm{P}}}\sum_{\mathbf{k}}\left(|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}}|^2 - 1\right)f_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{2e}{V_{\mathrm{P}}}\sum_{\mathbf{k}}\left(b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + \mathrm{c.c.}\right)f_{\mathbf{k}} + O(b^2) \\ &= \frac{2e}{V_{\mathrm{P}}}\sum_{\mathbf{k}}\left(b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) + b^*_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}f_{\mathbf{k}} + \mathrm{c.c.} \\ &= \frac{2e}{V_{\mathrm{P}}}\sum_{\mathbf{k}}\left(\frac{f_{\mathbf{k}}}{-\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \mathrm{i}\hbar\alpha} + \frac{f_{\mathbf{k}}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \mathrm{i}\hbar\alpha}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+\mathrm{i}\omega t+\alpha t}u + \mathrm{c.c.} \\ &= \frac{2e}{V_{\mathrm{P}}}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega + \mathrm{i}\hbar\alpha}u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+\mathrm{i}\omega t+\alpha t} + \mathrm{c.c.} \end{aligned} \tag{17.9}$$

Beim Übergang auf die letzte Zeile haben wir im zweiten Term der vorletzten Zeile unter der Summe $\mathbf{k}$ durch $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ ersetzt.

Beim Hinzufügen einer Testladung (äußerer Ladung) ρ_a entsteht ein Potential U_a. Außerdem wird eine innere Ladung $\delta\rho$ induziert. $\rho_\mathrm{a} + \delta\rho$ erzeugen das Gesamtpotential U. Wir haben bereits $\delta\rho$ als Funktion von U bestimmt. Wir bestimmen noch $U = e\phi$ als Funktion von ρ

$$\begin{aligned} \triangle U(\mathbf{r},t) &= e\triangle\phi(\mathbf{r},t) = -4\pi e\rho(\mathbf{r},t), & (17.10)\\ q^2 U(\mathbf{r},t) &= 4\pi e\rho(\mathbf{r},t) \text{ für } U \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, & (17.11)\\ \mathrm{div}\mathbf{E} &= 4\pi\rho, & (17.12)\\ \epsilon_\mathrm{D}\mathrm{div}\mathbf{E} &= \mathrm{div}\mathbf{D} = 4\pi\rho_\mathrm{a}. & (17.13) \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\epsilon_\mathrm{D}(\mathbf{q},\omega) = \frac{\rho_\mathrm{a}}{\rho} = 1 - \frac{\delta\rho}{\rho} = 1 - \frac{4\pi e\delta\rho}{q^2 U} = 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2 V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} \frac{f_\mathbf{k} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_\mathbf{k} + \hbar\omega - \mathrm{i}\hbar\alpha}. \tag{17.14}$$

Dies ist die Lindhard-Gleichung für die Dielektrizitätskonstante des Elektronengases. Berücksichtigen wir den Limes

$$\lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\omega - \mathrm{i}\alpha} = \mathrm{P}\frac{1}{\omega} + \mathrm{i}\pi\delta(\omega), \tag{17.15}$$

so folgt

$$\begin{aligned} \Re\epsilon_\mathrm{D}(\mathbf{q},\omega) &= 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2 V_\mathrm{P}} \mathrm{P} \sum_\mathbf{k} \frac{f_\mathbf{k} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_\mathbf{k} + \hbar\omega}, & (17.16)\\ \Im\epsilon_\mathrm{D} &= \frac{8\pi e^2}{q^2 V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} (f_\mathbf{k} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\delta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_\mathbf{k} + \hbar\omega). & (17.17) \end{aligned}$$

Man sieht,dass $\Re\epsilon_\mathrm{D}(\mathbf{q},\omega) = 0$ für die Plasma-Frequenz $\omega = \omega_\mathrm{P}$. Der Imaginärteil beschreibt die Absorption durch Teilchen-Loch-Anregungen (Dämpfung der elektromagnetischen Welle).

17.a Statische Abschirmung: Metall

Wir betrachten die statische Abschirmung ($\omega = 0$) in einem Metall. Wir werten dazu die statische Dielektrizitätskonstante

$$\epsilon_\mathrm{D}(\mathbf{q},0) = 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2 V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} \frac{f_\mathbf{k} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_\mathbf{k}} \tag{17.18}$$

und zwar für $\hbar q v_\mathrm{F} = q|\nabla\epsilon_\mathbf{k}| \ll k_\mathrm{B}T$ aus. Wir können dann

$$f_\mathbf{k} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = -\frac{\partial f}{\partial\epsilon}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_\mathbf{k}) \tag{17.19}$$

setzen und erhalten

$$\epsilon_\mathrm{D}(q,0) = 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2 V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} (-\frac{\partial f}{\partial\epsilon}) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \int D(\epsilon)(-\frac{\partial f}{\partial\epsilon})\mathrm{d}\epsilon = 1 + \frac{\lambda^2}{q^2} \tag{17.20}$$

mit

$$\lambda^2 = 4\pi e^2 D(\epsilon_\mathrm{F}). \tag{17.21}$$

mit der Zustandsdichte (10.17) $D(\epsilon_\mathrm{F})$ an der Fermikante. Daher ergibt sich für die Fourier-Transformierte von Potential und Ladung

$$\begin{aligned} \epsilon_\mathrm{D}(q,0)\cdot(-q^2)\phi_\mathbf{q} &= -4\pi\rho_\mathrm{a}(\mathbf{q}), \\ (-q^2 - \lambda^2)\phi_\mathbf{q} &= -4\pi\rho_\mathrm{a}(\mathbf{q}), \\ (\triangle - \lambda^2)\phi(\mathbf{r}) &= -4\pi\rho_\mathrm{a}(\mathbf{r}), & (17.22) \end{aligned}$$

woraus sich dann für die Punktladung $\rho_\mathrm{a} = e\delta^3(\mathbf{r})$ das abgeschirmte Potential $\phi(r) = \frac{e}{r}\mathrm{e}^{-\lambda r}$ ergibt. Die Punktladung umgibt sich mit einer Abschirmungswolke. Ihre Ausdehnung ist von der Größenordnung $1/\lambda$. Man bezeichnet diese Größe als Abschirmlänge.

17.b Statische Abschirmung: Halbleiter

In einem Halbleiter erhalten wir eine schwache statische Abschirmung zusätzlich zu der Dielektrizitätskonstante auf Grund von Übergängen zwischen den Bändern (siehe nächster Abschnitt). Liegt das chemische Potential weit von der unteren Bandkante des Leitungsbandes entfernt, so kann man in guter Näherung (Siehe Hunklinger-Enss: Gl.(9.8) S. 294) $f = \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)}$ setzen

$$\delta\epsilon_{\mathrm{D}} = \frac{8\pi e^2}{q^2 V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k},\mathrm{L}} (-\frac{\partial f}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}) = \frac{8\pi e^2}{q^2 V_{\mathrm{P}} k_{\mathrm{B}} T} \sum_{\mathbf{k}} f = \frac{4\pi e^2}{q^2 k_{\mathrm{B}} T} n_{\mathrm{e}}. \tag{17.23}$$

Ein entsprechender Beitrag kommt von den Löchern, so dass wir

$$\lambda^2 = \frac{4\pi e^2 (n_{\mathrm{e}} + n_{\mathrm{L}})}{k_{\mathrm{B}} T \epsilon_{\mathrm{iso}}} \tag{17.24}$$

finden. In der Regel erstreckt sich dann die Abschirmung über sehr viele Atomabstände.

17.c Dielektrizitätskonstante: Isolator

Bisher haben wir die Wellenfunktionen als ebene Wellen betrachtet. Im Isolator müssen wir aber explizit Blochfunktionen $|L, \mathbf{k}\rangle$ und $|V, \mathbf{k}\rangle$ betrachten. Dabei steht L für Leitungsbänder, V für Valenzbänder. Wir erhalten

$$\epsilon_{\mathrm{D}} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2 V_{\mathrm{P}}} \sum_{L,V,\mathbf{k},s} \frac{(f(\epsilon^L_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon^V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})) |\langle L, \mathbf{k} | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | V, \mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle|^2}{\epsilon^V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon^L_{\mathbf{k}} + \hbar\omega - \mathrm{i}\hbar\alpha} + (L \leftrightarrow V). \tag{17.25}$$

Mit $f(\epsilon^L_{\mathbf{k}}) = 0$, $f(\epsilon^V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) = 1$ und dem Überlapp aus (12.4)

$$\langle L, \mathbf{k} | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | V, \mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle = \frac{\hbar}{m} \frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}_{L,V}}{\epsilon^V - \epsilon^L}, \tag{17.26}$$

findet man für $\omega = 0$ und $q \to 0$

$$\epsilon_{\mathrm{D}} = 1 + \frac{16\pi e^2 \hbar^2}{m^2 V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k},L,V} \frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}_{L,V})^2/q^2}{(\epsilon^L_{\mathbf{k}} - \epsilon^V_{\mathbf{k}})^3} = \sum_{\alpha,\beta} \epsilon_{\alpha,\beta} \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2}. \tag{17.27}$$

Eingesetzt in die Maxwell-Gleichung (17.13) ergibt das

$$-\epsilon_{\mathrm{D}} q^2 \phi_{\mathbf{q}} = -4\pi\rho_{\mathrm{a},\mathbf{q}}, \tag{17.28}$$

$$-\sum_{\alpha,\beta} q_\alpha q_\beta \epsilon_{\alpha,\beta} \phi_{\mathbf{q}} = -4\pi\rho_{\mathrm{a},\mathbf{q}}, \tag{17.29}$$

daraus dann im Ortsraum

$$\partial_\alpha(\epsilon_{\alpha,\beta}\partial_\beta\phi(\mathbf{r})) = -4\pi\rho_{\mathrm{a}}(\mathbf{r}), \tag{17.30}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi, \quad \mathbf{D} = \epsilon_{\mathrm{D}}\mathbf{E}, \quad \mathrm{div}\mathbf{D} = 4\pi\rho_{\mathrm{a}}, \tag{17.31}$$

wobei ϵ_{D} ein Tensor ist, der für $q \to 0$ endlich bleibt, während man bei Anwesenheit von beweglichen Ladungsträgern in diesem Limes eine Divergenz erhält, wie oben hergeleitet.

17.d Plasmaschwingung mit Dämpfung

Wir betrachten jetzt noch die Plasmaschwingung mit Dämpfung. Zunächst sehen wir uns die Symmetrien der Dielektrizitätskonstante an. Wir erhalten

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega - \mathrm{i}\hbar\alpha} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega - \mathrm{i}\hbar\alpha} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega + \mathrm{i}\hbar\alpha}, \tag{17.32}$$

wobei wir beim Übergang von der ersten zur zweiten Summe k durch $-k-q$ ersetzt haben und dann verwenden, dass $\epsilon_{-\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$. Daraus finden wir

$$\epsilon_{\mathrm{D}}(\mathbf{q}, \omega - \mathrm{i}\alpha) = \epsilon_{\mathrm{D}}(\mathbf{q}, -\omega + \mathrm{i}\alpha) = \epsilon_{\mathrm{D}}^{*}(\mathbf{q}, -\omega - \mathrm{i}\alpha) \tag{17.33}$$

und damit

$$\Re\epsilon_{\mathrm{D}}(\mathbf{q}, \omega) = \Re\epsilon_{\mathrm{D}}(\mathbf{q}, -\omega), \quad \Im\epsilon_{\mathrm{D}}(\mathbf{q}, \omega) = -\Im\epsilon_{\mathrm{D}}(\mathbf{q}, -\omega). \tag{17.34}$$

Aus

$$\rho_{\mathrm{a}}(\omega) = \epsilon_{\mathrm{D}}(\omega)\rho(\omega) \tag{17.35}$$

folgt mit

$$\rho_{\mathrm{a}}(t) = c\delta(t) = \int \mathrm{d}\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\rho_{\mathrm{a}}(\omega), \quad \rho_{\mathrm{a}}(\omega) = \frac{c}{2\pi} \tag{17.36}$$

schließlich

$$\rho(t) = \frac{c}{2\pi}\int \mathrm{d}\omega \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\epsilon_{\mathrm{D}}(\omega)} \tag{17.37}$$

Die Hauptbeiträge rühren von $\omega \approx \pm\omega_{\mathrm{p}}$ her. Dort findet man mit

$$\epsilon_{\mathrm{D}} = \begin{cases} a(\omega - \omega_{\mathrm{p}} - \mathrm{i}\Gamma) & \omega \approx \omega_{\mathrm{p}}, \\ a(-\omega - \omega_{\mathrm{p}} + \mathrm{i}\Gamma) & \omega \approx -\omega_{\mathrm{p}}. \end{cases} \quad a = \left.\frac{\partial\Re\epsilon_{\mathrm{D}}(\omega)}{\partial\omega}\right|_{\omega=\omega_{\mathrm{p}}}, \quad a\Gamma = -\Im\epsilon(\omega_{\mathrm{p}}). \tag{17.38}$$

Damit findet man

$$\rho(t) = \frac{c}{2\pi a}\int \frac{\mathrm{d}\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\omega - \omega_{\mathrm{p}} - \mathrm{i}\Gamma} - \frac{c}{2\pi a}\int \frac{\mathrm{d}\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\omega + \omega_{\mathrm{p}} - \mathrm{i}\Gamma}. \tag{17.39}$$

Der Integrand hat Pole bei $\omega = \pm\omega_{\mathrm{p}} + \mathrm{i}\Gamma$. Für $t < 0$ verschiebt man den Integrationsweg nach $\Im\omega \to -\infty$, für positives dagegen nach $\Im\omega \to +\infty$. Dann verschwinden die Integrale. Für $t < 0$ kann man das durchführen, ohne über einen Pol verschieben zu müssen. Daher ergibt sich dann $\rho(t) = 0$. Für positives t dagegen erhält man zwei Polbeiträge, so dass man

$$\rho(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \frac{\mathrm{i}c}{a}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}\omega_{\mathrm{p}}-\Gamma)t} - \frac{\mathrm{i}c}{a}\mathrm{e}^{(-\mathrm{i}\omega_{\mathrm{p}}-\Gamma)t} = -\frac{2c}{a}\sin(\omega_{\mathrm{p}}t)\mathrm{e}^{-\Gamma t} & t > 0 \end{cases} \tag{17.40}$$

erhält. Der Imaginärteil Γ beschreibt also die Dämpfung.