

1 Guía 4: Plasmones

1.1 Ejercicio 5

A partir de la formula de Lindhard para la función dieléctrica longitudinal:

$$\epsilon(\mathbf{q}, w) = 1 - V_q \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\hbar(w + i\delta + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})} \quad (1)$$

Se pueden hacer diferentes análisis, en este caso se estudiará el límite de la formula (1) en longitudes de ondas largas $\lambda \rightarrow \infty$ y $q \propto 1/\lambda \rightarrow 0$, para un sistema de 2 dimensiones.

Vamos a iniciar haciendo expansiones de ciertos términos de la ecuación (1):

$$E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - 2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q} + q^2) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \simeq -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}{m} \quad (2)$$

$$f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}} - \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} + \dots - f_{\mathbf{k}} \simeq -\mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \quad (3)$$

Por otro lado, a partir de la expresión de la densidad vista en la teoría

$$\langle \rho_q \rangle = V_q \langle \rho_q \rangle \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\hbar(w + i\delta + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})}$$

llegamos a la siguiente relación:

$$V_q \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\hbar(w_q + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})} = 1 \quad (4)$$

reemplazando las expansiones (2) y (3) en (4):

$$1 \simeq -\frac{V_q}{\hbar w_0} \sum_{\mathbf{k}, i} q_i \frac{\partial f}{\partial k_i} \left(1 + \frac{\hbar \mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}{m w_0} \right) \quad (5)$$

desarrollando el primer termino de la ecuación anterior

$$\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_i q_i \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial k_i} \quad (6)$$

$$\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q}\cdot\nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(\Delta k)^3} \sum_{i=1}^3 q_i \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\partial f(k)}{\partial k_i} = 0 \quad (7)$$

con lo cual la ecuación (4) puede ser escrita como:

$$1 \simeq -\frac{V_q}{\hbar w_0} \sum_{\mathbf{k}, i} q_i \frac{\partial f}{\partial k_i} \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m w_0} \quad (8)$$

Volviendo a la Formula de Lindhard para una Función Dieléctrica Longitudinal, despejamos el termino trabajado anteriormente

$$\epsilon(\mathbf{q}, w) - 1 = -V_q \sum_{\mathbf{q}} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\hbar(w + i\delta + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})} \quad (9)$$

$$\simeq -\frac{V_q}{\hbar w_0} \sum_{\mathbf{k}, i} q_i \frac{\partial f}{\partial k_i} \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m w_0} \quad (10)$$

$$= \frac{V_q}{\hbar w_0} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_i q_i \frac{\partial f}{\partial k_i} \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m w_0} d^2 k \quad (11)$$

llegamos a :

$$\boxed{\epsilon(\mathbf{q}, w) - 1 = 2 \frac{V_q}{m w_0^2} \frac{L^2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i,j} q_i q_j k_j \frac{\partial f}{\partial k_i} d^2 k} \quad (12)$$

Resolvemos la integral:

$$2 \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} k_j \frac{\partial f_k}{\partial k_i} = 2 \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} k_j \frac{\partial f_k}{\partial k_j} \frac{\partial k_j}{\partial k_i} = 2 \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} f_k \frac{\partial k_j}{\partial k_i} \quad (13)$$

Recordando que:

$$\frac{\partial k_j}{\partial k_i} = \delta_{ij} \quad N = 2 \sum_k f_k$$

obtenemos:

$$2 \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} f_k \frac{\partial k_j}{\partial k_i} = -2 \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{(2\pi)^2}{L^2} \sum_k f_k \delta_{ij} = -\frac{N}{L^2} \delta_{ij} = -n \delta_{ij} \quad (14)$$

Reemplazando este resultado en la ecuación (12):

$$\epsilon(\mathbf{q}, w) - 1 = \frac{V_q}{m w_0^2} \frac{L^2}{(2\pi)^2} q_i q_j \left(-\frac{N}{L^2 \delta_{ij}} \right) \quad (15)$$

Si $i=j$, y sabiendo que $V_q = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2 L^3}$

$$\epsilon(\mathbf{q}, w) - 1 = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2 L^3} \frac{L^2}{m w_0^2} q^2 \frac{N}{L^2} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 m} \frac{n}{w^2} = -\frac{w_{pl}^2}{w^2} \quad (16)$$

y así llegamos al resultado esperado:

$$\boxed{\epsilon(q \rightarrow 0, w) = 1 - \frac{w_{pl}^2}{w^2}} \quad (17)$$

que es el conocido *resultado de Drude*. Este resultado es muy útil para el estudio de las propiedades ópticas de los metales, en distintos rangos de frecuencias.

En la ecuación anterior introducimos la **frecuencia de plasma**:

$$\boxed{w_{pl} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{\epsilon_0 m}}} \quad (18)$$

esta sería la frecuencia a la que ocurren las oscilaciones electrónicas longitudinales dentro del plasma.

1.2 Ejercicio 6

El número de onda de apantallamiento en 3D tiene la siguiente expresión:

$$\kappa = \sqrt{\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} \frac{\partial n}{\partial \mu}} \quad (19)$$

Por lo que vamos a necesitar conocer en cada caso la relación de la densidad con el potencial químico.

a) Gas de electrones degenerado ($T = 0$) (*Distribución de Fermi-Dirac*)

$$n = \frac{1}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{2}{3} E_f^{3/2} \quad (20)$$

en donde se considera $E_F \equiv \mu(T = 0) = \hbar^2 k_F^2 / 2m$

Derivando la ecuación (20) con respecto a E_F

$$\frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{\partial n}{\partial E_F} = \frac{3}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{2}{3} E_f^{1/2} = \frac{3}{2} \frac{n}{E_F} \quad (21)$$

reemplazando este valor en (19)

$$\kappa = \sqrt{\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0} \frac{3}{2} \frac{n}{E_F}} = \sqrt{\frac{6\pi e^2 n}{\epsilon_0 E_F}} \quad (22)$$

Obtuvimos el **Número de Onda de Apantallamiento de Thomas-Fermi 3D**

b) Gas de electrones no degenerado (*Distribución de Boltzman*)

La Distribución de Boltzman tiene la forma:

$$f_k = \frac{e^{\beta(\mu - E_k)}}{1 + e^{\beta(\mu - E_k)}} \simeq e^{\beta\mu} e^{-\beta E_k} \quad (23)$$

Buscamos la densidad para este caso:

$$n = \frac{e^{\beta\mu}}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2\beta} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx \sqrt{x} e^{-x} \quad \text{con} \quad x = \beta E_k \quad (24)$$

La integral se puede obtener fácilmente de tablas:

$$\int_0^\infty dx \sqrt{x} e^{-x} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Reemplazando el resultado en la ecuación (25):

$$n = \frac{e^{\beta\mu}}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2\beta} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (25)$$

$$n = \frac{e^{\beta\mu}}{4} \pi^{-3/2} \left(\frac{2m}{\hbar^2\beta} \right)^{3/2} \quad (26)$$

$$n = \frac{e^{\beta\mu}}{4} \left(\frac{2m}{\hbar^2\beta\pi} \right)^{3/2} \quad (27)$$

$$n = n_0 e^{\beta\mu} \quad (28)$$

Calculamos la derivada

$$\frac{\partial n}{\partial \mu} = n_0 \beta e^{\beta\mu} \quad (29)$$

$$\frac{\partial n}{\partial \mu} = n \beta \quad (30)$$

Sustituyendo el resultado anterior en la formula (19)

$$\kappa = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n \beta}{\epsilon_0}} \quad (31)$$

lo que se denomina **Número de Onda de Apantallamiento Debye Hückel en 3D**

Vamos a determinar el número de onda de apantallamiento para el cobre (Cu), como ejemplo de la aplicación a un metal:

- **T=0** \Rightarrow Número de Onda de Apantallamiento de Thomas-Fermi 3D

Según la ecuación (22) necesitamos los siguientes datos: densidad del gas de electrones n y la energía de Fermi E_{Fcu} correspondientes al cobre, el resto de datos son constantes conocidas.

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{C}$$

$\epsilon_0 = 10 \times 10^{-12} \text{C}^2 \cdot \text{J}^{-1}$ (elegimos redondear el valor en clases y nos quedamos con la unidad conveniente, según las unidades de las otras cantidades)

$n = 8.45 \times 10^{28} \text{m}^{-3}$ (valor tabulado, pero también puede ser calculado a través de la expresión conocida de la densidad para el gas de electrones)

$$E_{Fcu} = 7eV = 1.1215 \times 10^{-18} \text{J}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{6\pi e^2 n}{\epsilon_0 E_F}} = \sqrt{\frac{6\pi (1.6 \times 10^{-19})^2 \text{C}^2 \cdot 8.45 \times 10^{28} \text{m}^{-3}}{10 \times 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{Jm}} \cdot 1.1215 \times 10^{-18} \text{J}}} = \sqrt{3.63 \times 10^{21} \text{m}^{-2}}$$

$$\boxed{\kappa = 6.03 \times 10^{10} \text{m}^{-1}} \quad (32)$$

- Para **T=300 K** \Rightarrow Número de Onda de Apantallamiento Debye Hückel en 3D

Para este caso, según la ecuación (31) necesitamos encontrar el valor de beta β para la temperatura propuesta, el resto de datos son constantes conocidas que ya explicitamos en el ítem anterior incluida la densidad del cobre (la cual vamos a considerar que no varía).

Para encontrar β necesitamos la temperatura (que es dato, porque vamos a considerar temperatura ambiente) y la constante de Boltzmann.

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

Tenemos que: $T = 300K$ y $K_B = 1.38 \times 10^{-23} J/K$

Con lo cual nos queda $\beta = 2.4 \times 10^{20} J$

Reemplazando los valores en la ecuación (31):

$$\kappa = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n \beta}{\epsilon_0}} = \sqrt{\frac{4\pi(1.6 \times 10^{-19})^2 8.45 \times 10^{28} m^{-3} \cdot 2.4 \times 10^{20} J^{-1}}{10 \times 10^{-12} \frac{C^2}{Jm}}}$$
$$\kappa = \sqrt{\frac{6.52 \times 10^{12} m^{-3}}{10 \times 10^{-12} m^{-1}}} = \sqrt{(6.52 \times 10^{23}) m^{-2}}$$

$$\boxed{\kappa = 8.07 \times 10^{11} m^{-1}} \quad (33)$$

Comparando los valores de (32) y de (33) ,**¿cuál es más eficaz?**

Dado que κ nos indica la longitud de apantallamiento inverso podemos decir que el método de Thomas-Fermi es más eficaz, ya que el apantallamiento va a extenderse a una mayor longitud.