

# Elektronentheorie des Festkörpers

H. Sormann

Institut für Theoretische Physik - Computational Physics  
Technische Universität Graz

Oktober 2011

## Vorbemerkungen

Das Anliegen dieser Lehrveranstaltung ist es, Ihnen einen Überblick über die theoretischen Ansätze zu geben, die zur Beschreibung der Physik der wechselwirkenden (korrelierenden) Elektronen in Metallen und Halbleitern entwickelt wurden.

Bei der Konzeption dieser Vorlesung wurde nach den folgenden Gesichtspunkten vorgegangen:

- Trotz des teilweise beträchtlichen mathematischen Aufwandes, der zur theoretischen Beschreibung von Korrelationseffekten im homogenen und inhomogenen Elektronengas erforderlich ist, soll die Vorlesung nicht in eine *Vorführung von langen und komplizierten Ableitungen* ausarten.

### **Das physikalische Konzept soll stets im Vordergrund stehen!**

- Besonderen Wert wird auf die *Gegenüberstellung von theoretischen und experimentellen Ergebnissen* gelegt, um eine kritische Beurteilung der besprochenen Theorien zu ermöglichen.
- Andererseits sollen Sie auch nicht vor vollendete Tatsachen gestellt werden, ohne den *Prozess der mathematischen Herleitung* kennenzulernen. Es liegt durchaus auch in meiner Intention, Sie mit den grundlegenden Arbeitstechniken dieses Gebietes bekanntzumachen. Um den logischen Ablauf des Skriptums nicht zu oft unterbrechen zu müssen, sind größere Ableitungen dem Haupttext als *Appendizes* beigelegt.
- Als Voraussetzung zum Verständnis der Lehrveranstaltung genügen im Prinzip jene Kenntnisse, die Sie in den Vorlesungen und Übungen *Quantenmechanik* und *Theoretische Festkörperphysik 1* erworben haben.
- Was die mächtigen und für diese Lehrveranstaltung unverzichtbaren Hilfsmittel der *Greenfunktionen* sowie der *Feynman-Graphen* betrifft, so werden Vorkenntnisse über diese Techniken ausdrücklich **nicht** vorausgesetzt. Der Preis dafür ist allerdings, daß im Skriptum manches zum Thema *Greenfunktionen* und *Feynman-Graphen* reichlich rezeptiv ist (nach dem Motto: "Man nehme ...").

- Ich habe mir vorgenommen, meine Ausführungen durch eine Reihe von Computer-Demonstrationen und Animationen zu illustrieren. Diese Hilfsmittel werden, genauso wie das Skriptum, aus dem Internet unter der Adresse

<http://www.itp.tu-graz.ac.at> → Lectures

abrufbar sein.

Zuletzt noch einige Hinweise zum Skriptum selbst:

- **Vektoren** werden grundsätzlich mit fett gedruckten Symbolen geschrieben.
- Operatoren werden in der Form  $\hat{O}$  oder manchmal in der Form  $\check{O}$  geschrieben.
- In der Bibliographie am Ende des Skriptums werden nur die wichtigsten Bücher angegeben; weitere Publikationen werden als Fußnoten zitiert.
- Oft finden Sie im Text das Zitat *TF*, was das Skriptum von Schachinger/Sormann für die LV 515468 *Theoretische Festkörperphysik* bedeutet.

Graz, im Oktober 2010

H. Sormann

# Chapter 1

## Physik eines Elektrons im homogenen Elektronengas

### 1.1 Einführung

Das Generalthema dieser Lehrveranstaltung ist die Physik der Elektronen in kristallin aufgebauten Festkörpern, insbesondere in Metallen und Halbleitern. Dabei geht es im speziellen um die Wechselwirkung der Elektronen untereinander, insbesondere um die Korrelationen zwischen diesen Teilchen. Die theoretischen Konzepte, die zur Beschreibung des wechselwirkenden Elektronengases im Laufe der letzten Jahrzehnte erarbeitet wurden, basieren natürlich zum allergrößten Teil auf der Quantenmechanik. Die daraus gewonnenen Ergebnisse werden in dieser Lehrveranstaltung (LV) intensiv mit entsprechenden experimentellen Resultaten verglichen.

In einem kristallinen Festkörper sind die Elektronen nicht nur ihrer gegenseitigen Coulomb-Wechselwirkung unterworfen, sondern sie bewegen sich zusätzlich im elektrischen Feld der positiven Ionen, welche das Kristallgitter aufbauen: deshalb handelt es sich bei den Elektronen in Metallen und Halbleitern um ein hochgradig *räumlich inhomogenes* Elektronengas, d. h. die Teilchenwechselwirkung hängt nicht nur von der Relativposition der Elektronen ab, sondern von den jeweiligen Positionen der einzelnen Teilchen.

In den modernen Konzepten der Elektronentheorie wird dieser Gesichtspunkt der *räumlichen Inhomogenität* des Elektronengases berücksichtigt, was wesentlich zum relativ hohen numerischen Aufwand der entsprechenden Rechnungen beiträgt. Auch diese LV wird sich ausführlich mit der Physik des inhomogenen Elektronengases in Festkörpern beschäftigen.

Nichtsdestoweniger ist es für eine klare Darstellung der theoretischen Grundlagen außerordentlich nützlich, in den ersten Kapiteln dieses Skriptums das wesentlich einfachere Problem des *räumlich homogenen* Elektronengases zu diskutieren; dies insbesondere deshalb, weil die wichtigste Technik zur theoretischen Beschreibung eines wechselwirkenden Elektronengases, nämlich die Technik der Greenfunktion und der Feynman-Diagramme, unter Vernachlässigung des konkreten Kristallpotentials besonders klar und anschaulich dargestellt werden kann. Dies gilt auch für die Präsentation einiger

sehr wichtiger Begriffe der modernen Theoretischen Festkörperphysik wie z. B. der Begriffe *Selbstenergie*, *effektives Wechselwirkungspotential*, *Polarisation* und *dielektrische Funktion*, *Strukturfaktor* usw.

Gänzlich außer Betracht soll in dieser LV der Aspekt der Temperatur bleiben, d. h. die diskutierten Theorien sind alles  $T=0$  K-Theorien. Wir haben es daher (zumindest was die metallischen Festkörper betrifft) mit einer scharfen Grenze zwischen den besetzten und unbesetzten elektronischen Quantenzuständen zu tun (s. die Ausführungen zur Fermi-Dirac-Statistik bei  $T \rightarrow 0$  in TF, Kapitel 3, über das Sommerfeldmodell).

## 1.2 Der Elektronen-Propagator

Die einfachste Näherung für die physikalischen Zustände in einem Metall ist das sogenannte *Jellium-Modell* (von engl.: *jelly* = Gelee), bei welchem der (positive) Ladungshintergrund des Ionengitters über das ganze Kristallvolumen  $\Omega$  als konstant angesehen wird. In den einfachsten Elektronentheorien (Sommerfeld und Hartree-Fock, s. TF, Kapitel 3 und 10) kompensiert dieser positive Ladungshintergrund gerade die ebenfalls über  $\Omega$  "verschmierte" negative Ladung des homogenen Elektronengases, mit der Folge, daß die Quantenzustände der einzelnen Elektronen *ebene Wellen* mit der Quantenzahl  $\mathbf{k}$  sind, wobei  $\hbar\mathbf{k}$  den Impuls des jeweiligen Teilchens bedeutet.

Wir sprechen hier von "einzelnen Elektronen": diese Formulierung ist streng genommen nur solange korrekt, solange die das Elektronengas bildenden Teilchen (ununterscheidbare Fermionen) nicht wechselwirken (wie bei der Sommerfeld-Näherung) bzw. solange diese Wechselwirkung durch ein "effektives Einteilchen-Verhalten" (wie beim Hartree-Fock-Ansatz) approximiert wird.

Geht man bei der theoretischen Beschreibung des Elektronengases über die Hartree-Fock-Theorie hinaus, gibt es prinzipiell keine elektronischen Einteilchenzustände mehr, sondern nur mehr Vielteilchenzustände des gesamten Elektronenensembles<sup>1</sup>.

Dazu noch eine semantische Bemerkung: in der Theoretischen Festkörperphysik bezeichnet man *jede Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung, die über die Hartree-Fock-Wechselwirkung hinausgeht ("beyond Hartree-Fock")*, als *Korrelations-Wechselwirkung*.

Zurück zu den elektronischen Vielteilchenzuständen: eine exakte Eigenlösung der elektronischen Vielteilchen-Schrödingergleichung ist natürlich wegen der immensen Teilchenzahl ( $10^{23}$  pro  $\text{cm}^3$ ) unmöglich. Die folgenden Ausführungen sollen Ihnen nun zeigen, daß man sehr detaillierte quantitative Aussagen über die Physik des Elektronengases (sowohl für

---

<sup>1</sup>Diese prinzipielle Aussage bedeutet nicht, daß man nicht auch für das korrelierende Elektronengas mit dem Ansatz effektiver Potentiale *näherungsweise* gut mit Einteilchen-Zuständen arbeiten kann.

dessen Grundzustand als auch für die angeregten Zustände) machen kann, ohne diese Vielteilchen-Wellenfunktion explizite zu kennen.

Eines der wichtigsten Hilfsmittel stellt dabei die *Greenfunktion eines Elektrons im Elektronengas* dar, die im folgenden eingeführt und erläutert werden soll. Dabei muß, wie bereits im Vorwort erwähnt, auf eine ausführliche mathematische Darstellung verzichtet werden (ich verweise auf die große Zahl von Skripten (s. z.B. E. Schachinger [1]) und auf die Lehrbücher von Raimès [2], [3], Mattuck [4], Fetter und Walecka [5], Gross und Runge [6], Nolting [7]).

Wir beginnen mit der Definition einer Einteilchen-Greenfunktion für ein Elektron (*Elektronen-Propagator*), s. [5], S. 64f:

$$iG_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \langle \Psi_0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{r}t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t')] | \Psi_0 \rangle . \quad (1.1)$$

Dabei bedeutet  $|\Psi_0 \rangle$  den Grundzustand des *wechselwirkenden* Elektronenensembles im *Heisenberg-Bild* (s. u. bzw. TF, Abschnitt 8.3):

$$\hat{H}|\Psi_0 \rangle = E|\Psi_0 \rangle \quad \text{und} \quad \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1 . \quad (1.2)$$

$\hat{T}$  ist der *Zeitordnungsoperator* (s. [5], S. 58), und  $\hat{\psi}_H(\mathbf{r}t)$  stellt einen Elektron-Feldoperator (s. TF, Abschnitt 8.2) dar, ebenfalls im Heisenberg-Bild.

Was bedeutet diese Greenfunktion?

Für  $t > t'$  gilt gemäß Glg. (1.1)

$$iG_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \left( \langle \Psi_0 | \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{r}t) \right) \left( \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t') | \Psi_0 \rangle \right) .$$

$\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t') | \Psi_0 \rangle$  bedeutet einen neuen Zustand, bei dem der aus  $N$  Teilchen bestehende Elektronen-Grundzustand  $\Psi_0$  zum Zeitpunkt  $t'$  am Ort  $\mathbf{r}'$  um ein weiteres Elektron mit Spinorientierung  $\beta$  erweitert wird. Dieser ket-Vektor wird nun skalar mit einem bra-Vektor kombiniert, der ebenfalls einen  $(N+1)$ -Zustand beschreibt, wobei das zusätzliche Elektron (Spinorientierung  $\alpha$ ) zum Orts-Zeitpunkt  $(\mathbf{r}, t)$  betrachtet wird.

Die Greenfunktion  $G_{\alpha\beta}$  stellt ein Maß für die Überlappung dieser beiden  $(N+1)$ -Zustände dar und *beschreibt somit die Wahrscheinlichkeit, daß sich ein dem Grundzustand hinzugefügtes Elektron vom Orts-Zeitpunkt  $(\mathbf{r}', t')$  zum Orts-Zeitpunkt  $(\mathbf{r}, t)$  hinbewegt ("propagiert"), wobei seine Spinorientierung von  $\beta$  nach  $\alpha$  wechselt.*

Man bezeichnet deshalb die in Glg. (1.1) definierte Greenfunktion als *Einteilchen-Elektronen-Propagator*.

### 1.2.1 Die wechselwirkungsfreie Greenfunktion

Das folgende im wesentlichen nach [5], S. 70ff .

Wir wollen nun, ausgehend von der allgemeinen Definition (1.1)

$$iG_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \langle \Psi_0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{r}t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t')] | \Psi_0 \rangle ,$$

die Greenfunktion eines *wechselwirkungsfreien* Elektrons berechnen. Dazu ist vorerst ein kleiner Exkurs über die Begriffe "Operatoren im Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungsbild" erforderlich.

Der (zeitunabhängige) Hamiltonoperator  $\hat{H}$  des Vielteilchensystems sei die Summe aus 2 Termen:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 ,$$

wobei  $\hat{H}_0$  das wechselwirkungsfreie System und  $\hat{H}_1$  die gesamte Wechselwirkung beschreiben soll.

Definitionen:  $\hat{O}$ ,  $\hat{O}_H(t)$  und  $\hat{O}_I(t)$  bedeuten einen beliebigen Operator im Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungs (Interaction)-Bild.

Es gelten die Transformationsgleichungen

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{O} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (1.3)$$

und

$$\hat{O}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{O} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} . \quad (1.4)$$

Dazu brauchen wir noch die zeitliche Ableitung von (1.4):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} [\hat{O}, \hat{H}_0] e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} . \quad (1.5)$$

Der Operator  $\hat{H}_0$  kann (wegen der fehlenden Wechselwirkung) als Summe von Einteilchenoperatoren dargestellt werden, d. h.

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i ,$$

bzw. in der zweiten Quantisierung (s. TF Kapitel 8):

$$\hat{H}_0 = \sum_{i,j} \langle i | \hat{h} | j \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j .$$

Nimmt man nun als Vektorbasis die Eigenvektoren von  $\hat{h}$ , also

$$\hat{h} |i\rangle = \hbar\omega_i^0 |i\rangle ,$$

so erhält man die folgende Diagonalform für  $\hat{H}_0$ :

$$\hat{H}_0 = \sum_i \hbar\omega_i^0 \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i . \quad (1.6)$$

In dieser Gleichung kommen die Elektron-Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\hat{c}^\dagger$  und  $\hat{c}$  im Schrödingerbild vor. Die Darstellung dieser Operatoren im Interaction-Bild erhält man folgendermaßen:

Die Glg. (1.5) lautet für  $\hat{c}_j$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{c}_{jI}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} [\hat{c}_j, \hat{H}_0] e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}.$$

Unter Verwendung von (1.6) und den Vertauschungsrelationen der Operatoren  $\hat{c}$  (s. TF, Kapitel 9) ergibt sich (bitte selbst verifizieren!)

$$[\hat{c}_j, \hat{H}_0] = \hbar\omega_j^0 \hat{c}_j$$

und damit weiter

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{c}_{jI}(t) = \hbar\omega_j^0 \hat{c}_{jI}(t).$$

Diese Differentialgleichung ist einfach zu lösen, und man erhält

$$\hat{c}_{jI}(t) = \hat{c}_j e^{-i\omega_j^0 t}. \quad (1.7)$$

Eine entsprechende Rechnung für den Erzeugungsoperator ergibt

$$\hat{c}_{jI}^\dagger(t) = \hat{c}_j^\dagger e^{+i\omega_j^0 t}. \quad (1.8)$$

Wir kehren nun wieder zurück zur Berechnung der wechselwirkungsfreien Greenfunktion. In diesem Fall gilt wegen  $\hat{H}_1 = 0$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 \quad \text{bzw.} \quad \hat{H}_0 |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle,$$

wobei  $\Phi_0$  den Grundzustand des wechselwirkungsfreien Systems bedeutet. Eine wichtige Konsequenz von  $\hat{H} = \hat{H}_0$  ergibt sich unmittelbar aus den Transformationsgleichungen (1.3) und (1.4), nämlich die Gleichheit der Heisenberg- mit der Interaction-Darstellung:

$$\hat{O}_H(t) = \hat{O}_I(t).$$

Aus diesen Überlegungen folgt als Formel für die freie Greenfunktion der Ausdruck

$$iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \langle \Phi_0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{\alpha I}(\mathbf{r}t) \hat{\psi}_{\beta I}^\dagger(\mathbf{r}'t')] | \Phi_0 \rangle. \quad (1.9)$$

Entwickelt man die Feldoperatoren nach den Elektron-Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren, so ergibt sich

$$\hat{\psi}_{\alpha I}(\mathbf{r}t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \chi_\lambda(\alpha) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}^0 t} \hat{c}_{\mathbf{k}\lambda} \quad (1.10)$$

und

$$\hat{\psi}_{\beta I}^\dagger(\mathbf{r}'t') = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') \chi_\lambda^\dagger(\beta) e^{+i\omega_{\mathbf{k}}^0 t'} \hat{c}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger. \quad (1.11)$$

Der Grundzustand des wechselwirkungsfreien Elektronensystems ist für  $T \rightarrow 0$  K bekanntlich durch eine vollständig gefüllte Fermikugel mit dem



Radius  $k_F$  repräsentiert. Es hat sich nun als praktisch erwiesen, in diesem Fall den Operator  $\hat{c}$  der folgenden *kanonischen Transformation* zu unterwerfen:

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\lambda} = \begin{cases} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} & \text{''destruction of a particle'' für } |\mathbf{k}| > k_F \\ \hat{b}_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger & \text{''creation of a hole'' für } |\mathbf{k}| < k_F \end{cases} \quad (1.12)$$

Statt  $\hat{c}$  haben wir nun zwei Operatortypen: die Vernichtung eines Elektrons wird außerhalb der Fermikugel durch die Vernichtung (Operator  $\hat{a}$ ) eines Teilchens mit dem Impuls  $\hbar\mathbf{k}$  und innerhalb der Fermikugel durch die Erzeugung (Operator  $\hat{b}^\dagger$ ) eines Loches mit dem Impuls  $-\hbar\mathbf{k}$  beschrieben. Eine Kombination der Gleichungen (1.10) und (1.12) ergibt

$$\hat{\psi}_{\alpha I}(\mathbf{r}t) = \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \sum_{\lambda} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \chi_{\lambda}(\alpha) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}^0 t} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \sum_{\lambda} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \chi_{\lambda}(\alpha) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}^0 t} \hat{b}_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger. \quad (1.13)$$

Setzt man diesen Feldoperator für den Fall  $t > t'$  in die Glg. (1.9) ein, erhält man eine Summe von 4 Termen mit den Matrixelementen  $\langle \Phi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger | \Phi_0 \rangle$ ,  $\langle \Phi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{-\mathbf{k}'\lambda'} | \Phi_0 \rangle$ ,  $\langle \Phi_0 | \hat{b}_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger | \Phi_0 \rangle$  und  $\langle \Phi_0 | \hat{b}_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}'\lambda'} | \Phi_0 \rangle$ . Die Matrixelemente 2 und 4 sind Null, weil im Zustand  $\Phi_0$  kein Loch vernichtet werden kann; das Element 3 verschwindet wegen der Orthogonalität der Zustände  $|\Phi_0 \rangle$  und  $\hat{b}_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger | \Phi_0 \rangle$ . Das Element 1 verschwindet ebenfalls, außer der erzeugte Teilchenzustand  $|\mathbf{k}'\lambda' \rangle$  wird sofort wieder vernichtet, d.h. es gilt

$$\langle \Phi_0 | \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger | \Phi_0 \rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\lambda,\lambda'}.$$

Diese Überlegungen ergeben unter Berücksichtigung der Orthonormalität der Spinfunktionen

$$\sum_{\lambda} \chi_{\lambda}(\alpha) \chi_{\lambda}^\dagger(\beta) = \delta_{\alpha\beta}$$

für die freie Greenfunktion im Fall  $t > t'$  das Ergebnis

$$iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \delta_{\alpha\beta} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') e^{-i\omega_{\mathbf{k}}^0(t-t')}.$$

Eine entsprechende Rechnung kann auch für  $t < t'$  durchgeführt werden; die gesamte Greenfunktion lautet dann

$$iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \delta_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') e^{-i\omega_{\mathbf{k}}^0(t-t')} \times \{ \Theta(t-t') \Theta(|\mathbf{k}| - k_F) - \Theta(t' - t) \Theta(k_F - |\mathbf{k}|) \}. \quad (1.14)$$

Weiters ist es sinnvoll, die hier vorkommenden *Heaviside'schen Stufenfunktionen* mit den Zeitargumenten in der Integraldarstellung<sup>2</sup>

$$\Theta(t-t') = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\eta} \quad (1.15)$$

<sup>2</sup>In diesem Zusammenhang s. den Appendix 1 mit einer kurzen Einführung in die *Berechnung reeller bestimmter Integrale auf komplexem Wege*.

darzustellen. Eine Kombination von (1.14) und (1.15) gibt den Ausdruck

$$iG_{\alpha\beta}^0(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \delta_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') \\ \times \left\{ -\Theta(k - k_F) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i(\omega + \omega_{\mathbf{k}}^0)(t-t')}}{\omega + i\eta} + \Theta(k_F - k) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i(\omega_{\mathbf{k}}^0 - \omega)(t-t')}}{\omega + i\eta} \right\}.$$

Transformiert man den ersten und den zweiten Term der obigen Gleichung mit  $\sigma = \omega_{\mathbf{k}}^0 + \omega$  bzw mit  $\sigma = \omega_{\mathbf{k}}^0 - \omega$ , so erhält man als Endergebnis

$$G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \delta_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') \int \frac{d\sigma}{2\pi} e^{-i\sigma(t-t')} \left\{ \frac{\Theta(k - k_F)}{\sigma - \omega_{\mathbf{k}}^0 + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\sigma - \omega_{\mathbf{k}}^0 - i\eta} \right\}. \quad (1.16)$$

Bisher wurde noch keine Aussage über die Einteilchen-Basisfunktionen  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  bzw. die entsprechenden Eigenenergien  $\hbar\omega_{\mathbf{k}}^0$  gemacht: nachdem wir uns hier mit einem wechselwirkungsfreien homogenen Elektronengas befassen, ist es naheliegend, von der "Ebene-Wellen-Basis"

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{mit} \quad \omega_{\mathbf{k}}^0 = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (1.17)$$

auszugehen ( $\Omega$  ist das Volumen des Kristalls). In diesem Fall erhalten wir für die wechselwirkungsfreie Greenfunktion

$$G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \left\{ \frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 - i\eta} \right\}. \quad (1.18)$$

Dieses Ergebnis zeigt zwei wichtige Eigenschaften von  $G^0$ , nämlich (1) eine sehr einfache Abhängigkeit dieser Funktion von den Spin-Koordinaten, gegeben durch das "Kronecker-Delta"  $\delta_{\alpha\beta}$  (man sagt: " $G^0$  ist im Spinraum diagonal"). (2) zeigt Glg. (1.18) die bereits diskutierte Abhängigkeit von den *relativen* Orts- und Zeitkoordinaten, welche für räumlich und zeitlich homogene Elektronensysteme typisch ist.

Es gilt also

$$G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \delta_{\alpha\beta} G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t'). \quad (1.19)$$

Offensichtlich stellt die Größe innerhalb des Klammerpaares  $\{...\}$  in Glg. (1.18) die *Fouriertransformierte* der wechselwirkungsfreien Greenfunktion dar:

$$G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{k}, \omega) \quad (1.20)$$

mit

$$G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} G^0(\mathbf{k}, \omega) \quad (1.21)$$

und

$$G^0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 + i\eta} + \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 - i\eta}. \quad (1.22)$$

Diese Tatsache ist von großer Bedeutung, weil i. a. alle Rechnungen für das homogene Elektronengas (jellium) nicht im Orts-Zeit-Raum  $(\mathbf{r}; t)$ , sondern im Wellenzahl-Frequenz-Raum  $(\mathbf{k}; \omega)$  durchgeführt werden. Der Vorteil dieses Vorgehens liegt in einem deutlich einfacheren mathematischen Apparat.

## 1.3 Die Greenfunktion des wechselwirkenden Elektronengases; die Selbstenergie

Ohne weitere Ableitungen: Für wechselwirkende Greenfunktionen bleiben unter bestimmten Umständen die oben diskutierten Eigenschaften von  $G^0$  erhalten:

1. Solange die in Betracht gezogene Wechselwirkung *spin-unabhängig* ist, gilt die Diagonalität im Spinraum.
2. Solange keine relativistischen Wechselwirkungseffekte berücksichtigt werden, gilt die Homogenität im Zeitraum.
3. Solange das Elektronengas keinem (lokalen) externen Potential ausgesetzt ist, gilt die Homogenität im Ortsraum.

D. h.: In diesem und den folgenden Abschnitten, in denen wir uns mit dem homogenen Elektronengas unter dem Einfluß einer spin-unabhängigen Coulomb-Wechselwirkung beschäftigen, gelten die Gleichungen (1.19) und (1.21) auch für wechselwirkende Greenfunktionen:

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \delta_{\alpha\beta} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t'), \quad (1.23)$$

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} G(\mathbf{k}, \omega). \quad (1.24)$$

Im allgemeinen ist die wechselwirkende Greenfunktion  $G$  eine sehr komplizierte Funktion, die gewöhnlich als *Störungsentwicklung nach den wechselwirkungsfreien Greenfunktionen*  $G^0$  dargestellt wird. Symbolisch sieht das wie folgt aus:

$$G_{\alpha\beta} = \sum_{\nu=0}^{\infty} f_{\nu}(\cdots G_{\alpha\beta}^0 \cdots) \quad , \quad (1.25)$$

wobei  $\nu$  die Ordnung der Entwicklungsterme in bezug auf den Wechselwirkungsoperator  $\hat{W}$  bedeutet.

Da die Wechselwirkung im Elektronengas durch die gegenseitige Coulombabstoßung der Elektronen beschrieben wird, gilt im Orts-Zeit-Raum<sup>3</sup>:

$$\hat{W} = W(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (1.26)$$

mit

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (1.27)$$

Die Fourier-Transformierte dieses "nackten" Coulombpotentials lautet:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} V(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad \text{mit} \quad V(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2}. \quad (1.28)$$

---

<sup>3</sup> $\delta(t - t')$  bedeutet eine *instantane* Wechselwirkung, d.h. einen unendlich schnellen Impuls- bzw. Energieaustausch zwischen den Teilchen; derartiges widerspricht der Relativitätstheorie, und ist daher nur im nicht-relativistischen Grenzfall korrekt.

Im Zusammenhang mit diesem Fourierkoeffizienten gibt es im Falle des homogenen Elektronengases noch ein wichtiges Detail, daß hier ohne Beweisführung angegeben wird:

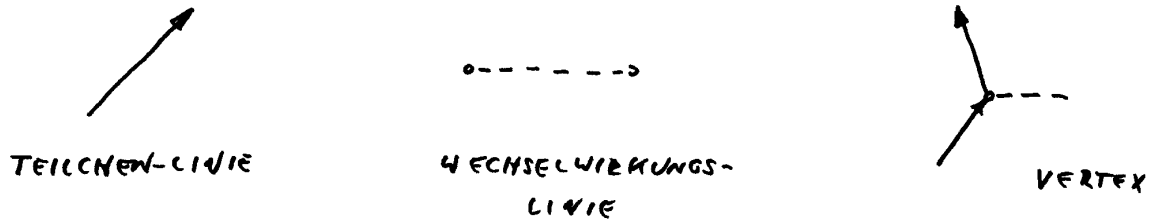
Man kann zeigen, daß der divergente Fourierkoeffizient  $V(\mathbf{0})$  exakt durch die Wirkung des positiven Ladungshintergrundes kompensiert wird; das heißt, daß im Falle der *jellium*-Näherung gilt:

$$V(\mathbf{0}) = 0. \quad (1.29)$$

Die in (1.25) dargestellte Störungsentwicklung der wechselwirkenden Greenfunktion kann am effektivsten mittels der *Graphentechnik von Feynman*<sup>4</sup> durchgeführt werden. Diese Methode wird in den Referenzen [1]–[7] ausführlich dargestellt.

### Regeln für die Aufstellung und Auswertung von Feynman-Graphen für Einteilchen-Propagatoren im $(\mathbf{k};\omega)$ -Raum im homogenen Elektronengas:

#### Aufstellung der Graphen:



- Zeichne alle topografisch verschiedenen, verbundenen Diagramme, die aus  $\nu$  Wechselwirkungslinien sowie aus  $2\nu + 1$  Teilchenlinien bestehen. Dabei ist zu beachten, daß nur eine Teilchenlinie von außen kommen sowie nur eine Teilchenlinie nach außen gehen darf.
- Jede Teilchenlinie entspricht einer freien Greenfunktion und wird mit einem Wellenzahlvektor, einer Frequenz und den entsprechenden Spin-Indizes bezeichnet<sup>5</sup>. An jedem Vertex muß Impuls- und Energieerhaltung gewährleistet sein, außerdem darf sich am Vertex die Spin-Orientierung nicht ändern<sup>6</sup>.

#### Auswertung der Graphen:

- Jede Teilchenlinie wird durch eine Funktion  $G^0$  (1.21) und (1.22) charakterisiert, jede Wechselwirkungslinie durch (1.28) und (1.29).
- Es wird über alle internen Spin-Indizes summiert sowie über alle internen Wellenzahlen und Frequenzen integriert.

<sup>4</sup>R. Feynman (1918-1988), Nobelpreis 1965.

<sup>5</sup>Der einfacheren Schreibweise halber werden Wellenzahlvektor und Frequenz meist zu einem *Vierervektor* zusammengefaßt:  $(\mathbf{k}, \omega) \Rightarrow k$ .

<sup>6</sup>Bei spinunabhängiger Wechselwirkung!

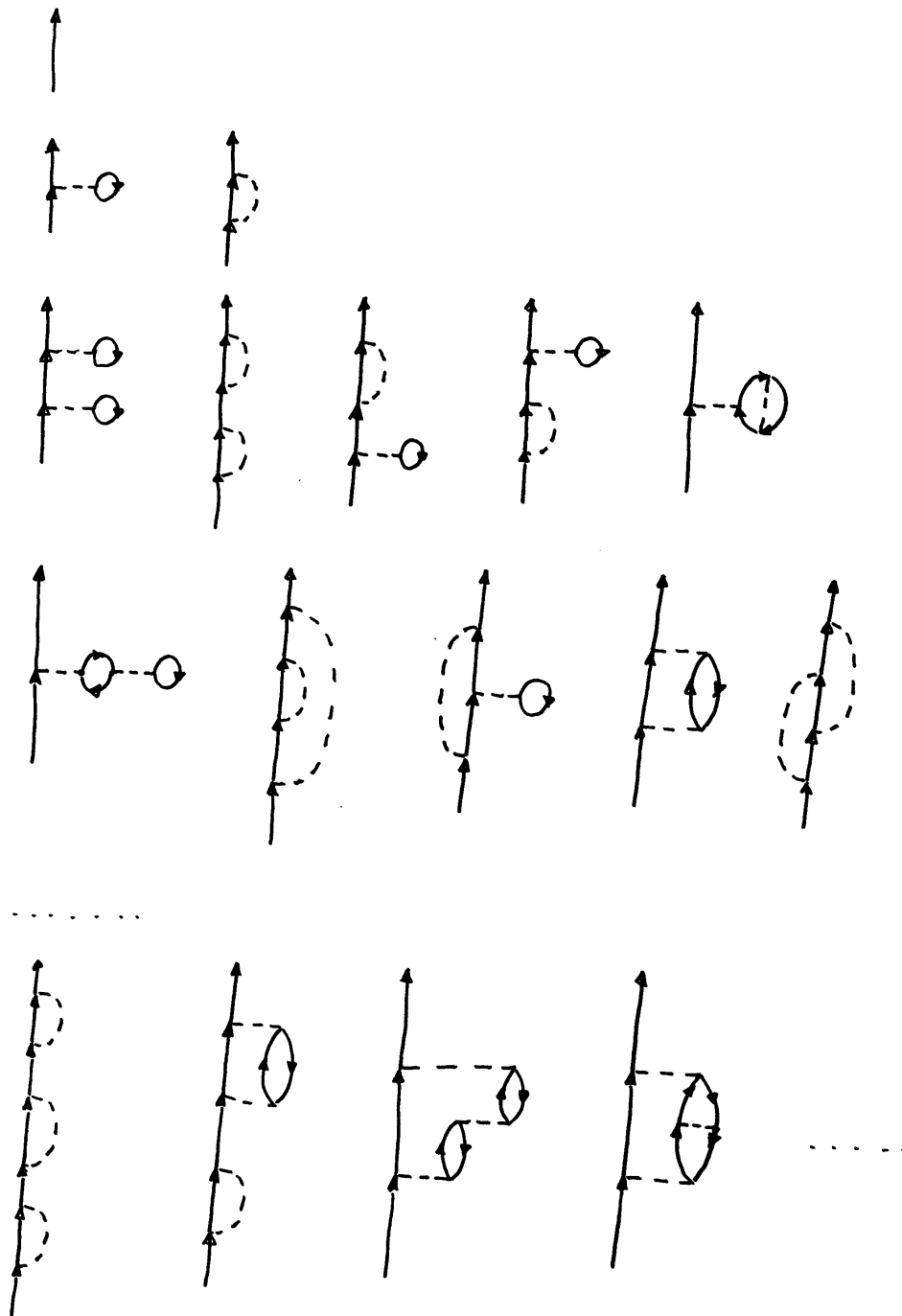


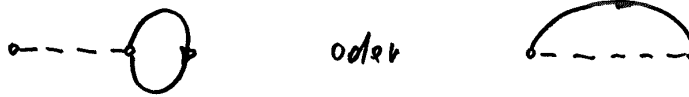
Figure 1.1: Alle Feynman-Diagramme nullter, erster und zweiter Ordnung sowie einige Diagramme dritter Ordnung für  $G$ .

- Es wird mit dem Faktor

$$\left(\frac{i}{\hbar}\right)^\nu (2\pi)^{-4\nu} (-1)^F$$

multipliziert, wobei F die Anzahl der geschlossenen Teilchenloops ist.

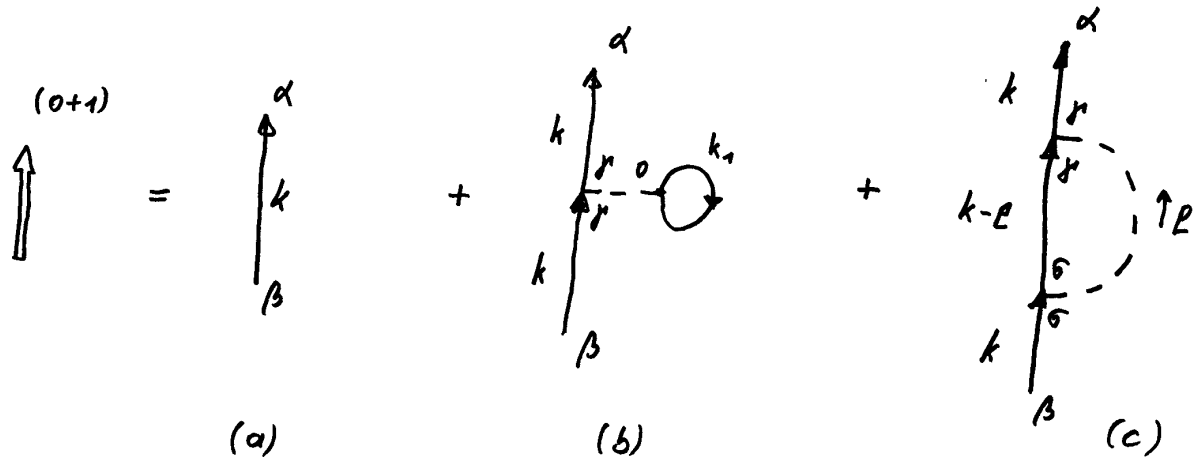
- Jede Teilchenlinie, die die Form



hat, wird durch  $e^{i\omega\eta} G^0(\mathbf{k}, \omega)$  charakterisiert, wobei nach Durchführung der Rechnung der Grenzübergang  $\eta \rightarrow 0^+$  durchgeführt wird.

In der Abbildung 1.1 sind alle topologisch verschiedenen Feynman-Diagramme nullter, erster und zweiter Ordnung bzw. einige Diagramme dritter Ordnung bzgl. der Elektron-Elektron-Wechselwirkung dargestellt. Die sukzessive Auswertung dieser Graphen gemäß den eben formulierten Regeln bildet den Inhalt der folgenden Seiten dieses Skriptums.

### 1.3.1 Graphen nullter und erster Ordnung



Die Auswertung dieser 3 Entwicklungsterme gemäß den Regeln ist kein Problem:

$$G_{\alpha\beta}^a(k) = \delta_{\alpha\beta} G^0(k)$$

$$G_{\alpha\beta}^b(k) = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^4} (-1) V(0) [G^0(k)]^2 \underbrace{\sum_{\gamma} \sum_{\sigma} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\gamma\beta} \delta_{\sigma\sigma}}_{2\delta_{\alpha\beta}} \int d^4 k_1 e^{i\omega_1 \eta} G^0(k_1) = 0 \quad (1.30)$$

wegen Glg. (1.29)<sup>7</sup>.

$$G_{\alpha\beta}^c(k) = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^4} [G^0(k)]^2 \underbrace{\sum_{\gamma} \sum_{\sigma} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\gamma\sigma} \delta_{\sigma\beta}}_{\delta_{\alpha\beta}} \int d^4q V(\mathbf{q}) e^{i(\omega-\omega_1)\eta} G^0(k-q) \quad (1.31)$$

Im Zusammenhang mit diesem (und ähnlichen) Graphen wird häufig der Begriff *virtuelle Wechselwirkung* verwendet: Das soll heißen, daß das propagierende Teilchen 'mit sich selbst', also ohne Mitwirkung anderer Teilchen Coulomb-wechselwirkt.

Bevor wir nun auf die physikalische Bedeutung der einzelnen Graphen eingehen, soll ein wichtiger Begriff der Theoretischen Festkörperphysik erläutert werden, nämlich der Begriff Selbstenergie.

Wenn wir nach dem Graphen (c) aus Abb. 1.1 die Graphen zweiter Ordnung studieren, so sehen wir, daß es einen Graphen gibt, bei dem dasselbe "Wechselwirkungsmotiv" einfach zweimal hintereinander wiederholt wird. Graphen dieser Art treten auch in allen höheren Ordnungen auf; d. h., man kann den Graphen (c) als Ausgangspunkt der unendlichen Graphenreihe

$$\begin{array}{c} (i) \\ \uparrow\uparrow \end{array} = \begin{array}{c} \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \dots \quad (1.32)$$

ansetzen, wobei dasselbe Wechselwirkungsmotiv nullmal, einmal, zweimal usw. hintereinander auftritt. Man kann nun die Graphensumme (1.32) symbolisch auch so schreiben:

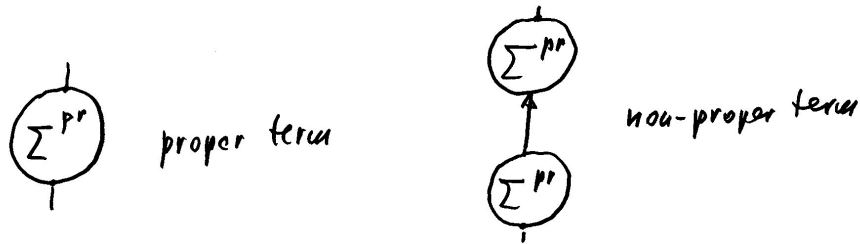
$$\begin{array}{c} \uparrow\uparrow \end{array} = \begin{array}{c} \uparrow \end{array} + \text{---} \circ \begin{array}{c} \uparrow \\ \Sigma(i) \end{array} \quad \text{wobei} \quad \text{---} \circ \begin{array}{c} \uparrow \\ \Sigma(i) \end{array} = \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \dots$$

<sup>7</sup>Graphen, die solche in sich geschlossenen Elektronenlinien enthalten, werden *tadpole terms* ("Kaulquappen-Terme") genannt; alle diese Terme tragen beim homogenen Elektronengas nichts zur Greenfunktion bei.

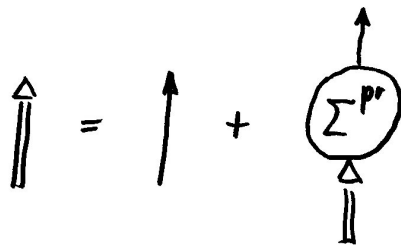
Man nennt dieses  $\Sigma$  den einfachsten Selbstenergie-Einschub (*self-energy insertion*) in die Teilchenlinie. Zur Darstellung der "wirklichen" Selbstenergiefunktion werden (im Prinzip) noch unendlich viele weitere Terme benötigt:

$$\Sigma = \Sigma(\uparrow) + \text{"further terms"}$$

Ein weiterer sehr wichtiger Begriff ist die sog. *eigentliche* oder *irreduzible* (engl.: *proper*) Selbstenergie  $\Sigma^{pr}$ . Diese ist definiert als Selbstenergiebeitrag, der nicht durch Durchschneiden einzelner Teilchenlinien in einfachere Beiträge aufgespalten werden kann. Graphisch sieht das so aus:



Die Bedeutung der *proper self energy terms* wird sofort klar, wenn man die Graphenreihe (1.32) in rekursiver Form darstellt:



$$(1.33)$$

Die Übertragung dieser Diagramme in die entsprechenden mathematischen Formeln ist mittels der oben definierten Regeln kein Problem:

$$G_{\alpha\beta}(k) = G_{\alpha\beta}^0(k) + \delta_{\alpha\beta} G(k) \Sigma^{pr}(k) G^0(k). \quad (1.34)$$

Eine Auswertung von (1.34) ergibt weiters

$$\begin{aligned} G(k) &= G^0(k) + G^0(k) \Sigma^{pr} G^0(k) + G^0(k) \Sigma^{pr}(k) G^0(k) \Sigma^{pr}(k) G^0(k) + \dots \\ &= G^0(k) \left\{ 1 + [\Sigma^{pr}(k) G^0(k)] + [\Sigma^{pr}(k) G^0(k)]^2 + \dots \right\} \end{aligned} \quad (1.35)$$

Die geometrische Reihe (1.35) kann nun gemäß

$$1 + x + x^2 + x^3 + \dots = \frac{1}{1 - x}$$

bis zur Ordnung  $\infty$  aufsummiert werden. Diese sog. *Dyson-Summierung* führt zum Ergebnis

$$G(k) = \frac{G^0(k)}{1 - \Sigma^{pr}(k) G^0(k)} = \frac{1}{[G^0(k)]^{-1} - \Sigma^{pr}(k)}. \quad (1.36)$$



Auch diese letzte mathematische Form hat ihre einfache diagrammatische Entsprechung, nämlich

$$\uparrow = \frac{1}{\uparrow^{-1} - \Sigma^{pr}}$$

Wie sieht die einfachste Näherung von  $\Sigma^{pr}$  aus? Dies ergibt sich sofort aus einem Vergleich der Gleichung (1.31) mit dem zweiten Term von Glg. (1.35):

$$G^0(k) \Sigma^{pr}(k) G^0(k) = G^0(k) \left\{ \frac{i}{\hbar(2\pi)^4} \int d^4q V(\mathbf{q}) e^{i(\omega-\omega_1)\eta} G^0(k-q) \right\} G^0(k)$$

Ergebnis:

$$\hbar \Sigma^{pr(c)}(k) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^4q V(\mathbf{q}) e^{i(\omega-\omega_1)\eta} G^0(k-q). \quad (1.37)$$

## 1.4 Physikalische Aussagen aus der Greenfunktion.

### Das Quasiteilchen-Konzept

Wir werden später sehen, daß die Kenntnis der Greenfunktionen die Berechnung von zahlreichen interessanten (und häufig experimentell zugänglichen) Größen ermöglicht. Vorerst soll nur von jenen Informationen die Rede sein, welche unmittelbar der Greenfunktion (im  $(\mathbf{k}; \omega)$ -Raum) entnommen werden können.

Wir beginnen mit der Behauptung: *Die Polstellen von  $G(\mathbf{k}, \omega)$  bestimmen die Anregungsenergien und die Lebensdauern der angeregten Elektronenzustände.* Betrachtet man z.B. die Polstellen für die wechselwirkungsfreie Greenfunktion (1.22), so ergibt sich einfach

$$\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 = 0 \quad \text{bzw.} \quad \epsilon_{\mathbf{k}}^0 = \hbar \omega_{\mathbf{k}}^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

also – wie zu erwarten ist – die Energie-Dispersionsrelation für ein *freies Teilchen*.

Im Falle der *wechselwirkenden* Greenfunktion wie (1.36) ergibt sich als Polstellen-Bedingung

$$[G^0(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} - \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega) \stackrel{!}{=} 0$$

bzw. unter Verwendung von (1.22)

$$\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 - \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega = \nu - i\gamma) \stackrel{!}{=} 0. \quad (1.38)$$

Hier ist berücksichtigt, daß die Lösung dieser Gleichung, also die Nullstelle für  $\omega$ , i. a. komplexwertig sein wird. Eine solche Gleichung ist normalerweise nur numerisch zu lösen, außer die Nullstelle *liegt nahe der realen  $\omega$ -Achse*, d. h., im Fall

$$|\gamma| \ll |\nu|. \quad (1.39)$$

In diesem Fall lassen sich Real- und Imaginärteil von (1.38) separieren, indem man die Selbstenergie-Funktion nach  $\gamma$  taylorentwickelt und nach dem linearen Glied abbricht:

$$\nu - i\gamma - \omega_{\mathbf{k}}^0 - \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \nu) + \frac{\partial \Sigma^{pr}}{\partial \omega} \Big|_{\nu} i\gamma = 0$$

bzw.

$$\nu - i\gamma - \omega_{\mathbf{k}}^0 - \Re \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \nu) - i\Im \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \nu) + i \frac{\partial \Re \Sigma^{pr}}{\partial \omega} \Big|_{\nu} \gamma - \frac{\partial \Im \Sigma^{pr}}{\partial \omega} \Big|_{\nu} \gamma = 0.$$

Eine Aufspaltung in Real- und Imaginärteil gibt

$$\nu - \omega_{\mathbf{k}}^0 - \Re \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \nu) - \frac{\partial \Im \Sigma^{pr}}{\partial \omega} \Big|_{\nu} \gamma \stackrel{!}{=} 0$$

und

$$\gamma + \Im \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \nu) - \frac{\partial \Re \Sigma^{pr}}{\partial \omega} \Big|_{\nu} \gamma \stackrel{!}{=} 0.$$

Berücksichtigt man hier nur die führenden Terme, erhält man, ohne auf die genaue mathematische Beweisführung einzugehen (die Sie z.B. ausführlich in [6], Kap. 26 finden), die folgenden sehr wichtigen Ergebnisse:

- *Der Realteil der irreduziblen Selbstenergie-Funktion  $\Sigma^{pr}$  beschreibt die Veränderung der Energie-Dispersionsrelation unter dem Einfluß einer Wechselwirkung (energy states of quasi particles):*

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar \nu_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \hbar \Re \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \nu_{\mathbf{k}}). \quad (1.40)$$

- *Der Imaginärteil der irreduziblen Selbstenergie-Funktion  $\Sigma^{pr}$  beschreibt die mittlere Lebensdauer dieser Zustände (lifetime of quasi particles):*

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \gamma_{\mathbf{k}} = -\Im \Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \nu_{\mathbf{k}}). \quad (1.41)$$

Die Gleichungen (1.40, 1.41) können i.a. nur iterativ gelöst werden. In den meisten Fällen erhält man jedoch schon recht gute Ergebnisse, wenn man in  $\Sigma^{pr}$  anstelle der exakten Frequenz  $\nu_{\mathbf{k}}$  die entsprechende Größe  $\hbar k^2/2m$  für ein freies Teilchen einsetzt. Ein wichtiger Aspekt ist dabei jedoch zu beachten: das Quasiteilchen-Konzept ist nur solange sinnvoll, als die durch die endliche Lebensdauer der Quasiteilchen hervorgerufene Energieunschärfe  $\Delta E$  (sehr) klein gegenüber der Anregungsenergie (= der Energie über der Fermienergie) ist:

$$\Delta \epsilon \ll \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_F.$$

Einen Zusammenhang zwischen der Lebensdauer  $\tau$  und der Energieunschärfe  $\Delta \epsilon$  eines quantenmechanischen Zustandes ergibt sich nach *Heisenberg* zu

$$\tau \Delta \epsilon \geq \hbar,$$

d.h., die minimale Energieunschärfe hängt mit der Lebensdauer über  $\Delta \epsilon = \hbar/\tau$  zusammen. Eine Kombination der obigen Gleichungen führt unmittelbar zur "Quasiteilchen-Bedingung"

$$\frac{\hbar}{\tau_{\mathbf{k}}} \ll |\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_F|. \quad (1.42)$$

Nun zurück zum konkreten Selbstenergieausdruck für die einfachste proper insertion (1.37). In diesem Fall ergibt die Auswertung von  $\Sigma^{pr}$  (s. Appendix 2) das Ergebnis

$$\Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} \int_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} \frac{d^3 k'}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}. \quad (1.43)$$

Die weitere Auswertung dieses Integrals ist elementar ([2], S. 171f) und ergibt

$$\Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma^{pr}(\mathbf{k}) = -\frac{e^2 k_F}{2\pi\hbar} \left[ 2 + \frac{k_F^2 - k^2}{kk_F} \ln \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right].$$

Daraus resultieren gemäß (1.40, 1.41) die Anregungsenergien

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{2\pi} \left[ 2 + \frac{k_F^2 - k^2}{kk_F} \ln \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right] \quad (1.44)$$

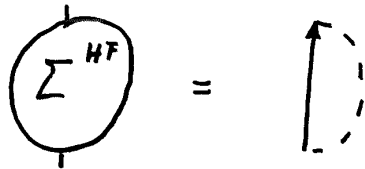
(ohne weitere Approximation, da  $\Sigma^{pr}$  nicht frequenzabhängig ist) sowie die Lebensdauer

$$\tau_{\mathbf{k}} = \infty, \quad (1.45)$$

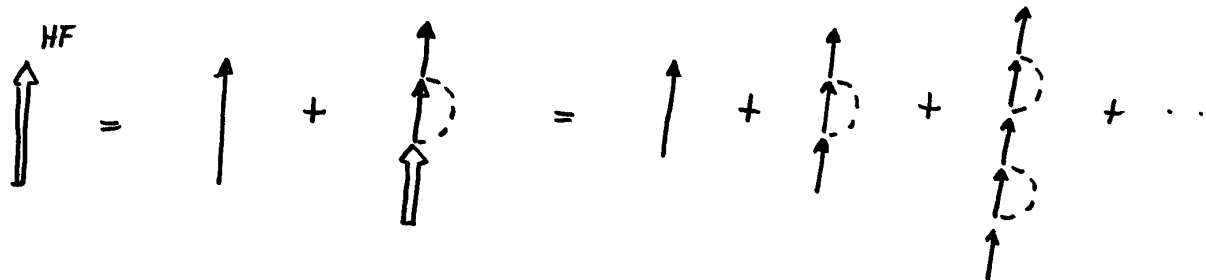
da  $\Sigma^{pr}$  reelwertig ist.

Die Dispersionsrelation (1.44) ist bereits in TF, Glg. (10.40), diskutiert worden. Es handelt sich um die Energie–Wellenzahl–Funktion eines *Hartree-Fock-Elektrons* d.h. die Abweichung der Energien von den freien Energien ist auf Austauscheffekte zurückzuführen. Da es dabei nur zu einem Austausch von Elektronen kommt, bleibt die Fermikugel im Prinzip wie sie in der Sommerfeld-Theorie war: Es gibt keine aus dem Fermisee herausgestreuten Teilchen, daher keine Lochzustände und keine Quasiteilchen mit endlicher Lebensdauer.

*Eine Berechnung der Selbstenergie mittels Feynman-Diagrammen erster Ordnung in bezug auf das Coulombpotential ist äquivalent mit einem Hartree-Fock-Ansatz. Insbesondere gilt für das homogene Elektronengas*



Es ist jedoch zu beachten, daß diese Aussage nur für den irreduziblen Selbstenergie-Einschub gilt, während der entsprechende Propagator durch eine Aufsummierung von  $\infty$  vielen Termen repräsentiert wird:



Später (wenn es um's inhomogene Elektronengas geht) wird eine genauere Analyse zeigen, daß die "richtige" Darstellung des HF-Propagators etwas anders aussieht, nämlich so:

(1.46)

Was stimmt nun? Die Antwort ist einfach: eine konkrete Auswertung von (1.46) zeigt, daß durch diese Veränderung noch weitere Graphen in die Entwicklung der Greenfunktion einbezogen werden (vgl. Abb. 1.1), die bisher nicht berücksichtigt waren. Das bedeutet weiter, daß auch die irreduzible Selbstenergie um diese Terme erweitert wird:

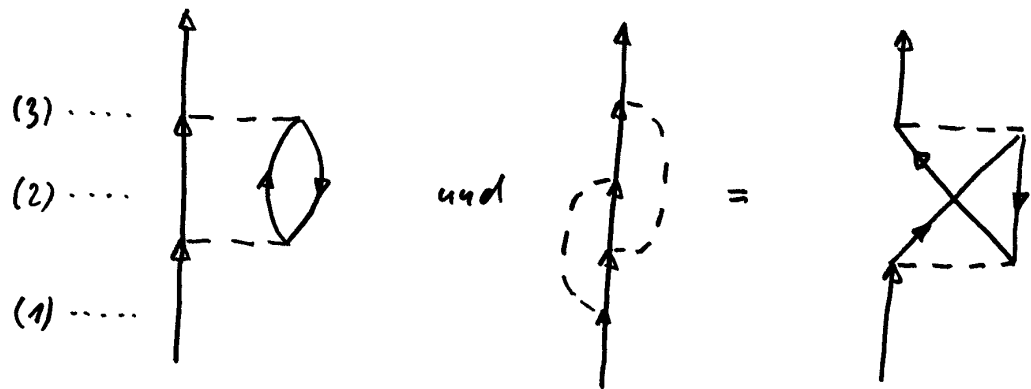
Die Auswertung zeigt jedoch, daß diese "neuen" Terme für das homogene Elektronengas keinen Beitrag liefern, sodaß in diesem Fall gilt:

(1.47)

## 1.5 Beyond Hartree-Fock. Das effektive Wechselwirkungspotential

Schauen wir uns nun nochmals in der Abb. 1.1 die Graphen zweiter Ordnung bzgl. des Coulombpotentials an. Abgesehen von den *tadpole graphs*, die ja keinen Beitrag zu  $G$  leisten, haben wir offenbar mit der "erweiterten" Hartree-Fock-Entwicklung gemäß Glg. (1.46) die meisten Terme zweiter Ordnung bereits berücksichtigt. Es bleiben nur zwei Graphen, die physikalisch über Hartree-Fock hinausgehen (die also definitionsgemäß

Korrelations-Effekte beschreiben) und wirklich "etwas Neues" in die Theorie bringen. Es sind dies die beiden Graphen



(1.48)

Beachten Sie, daß der rechte der beiden Graphen umgezeichnet wurde. Dies ist durchaus erlaubt, man muß nur darauf achten, die Vertices richtig zu verbinden. Wichtig ist, daß Sie verstehen: es handelt sich bei diesen beiden Diagrammen *um denselben Feynman-Graphen, nicht etwa um zwei verschiedene!* Dieser Aspekt macht manchmal Schwierigkeiten, vor allem wenn man verschiedene Bücher oder Fachartikel vergleicht (s. dazu [4], S. 163).

Die Umzeichnung des obigen Graphen hat den folgenden Sinn: ich möchte Ihnen die beiden Graphen zweiter Ordnung physikalisch interpretieren; dafür ist es sinnvoll, die Diagramme im Orts-Zeit-Raum zu diskutieren, wobei eine vertikal nach oben gerichtete Zeitachse angenommen wird. Da aber im nicht-relativistischen Fall angenommen wird, daß die Wechselwirkungen unendlich schnell vonstatten gehen, müssen die Wechselwirkungslinien in den Diagrammen senkrecht zur Zeitachse, also horizontal, gezeichnet werden.

Dies vorausgesetzt, können wir nun an eine physikalische Interpretation der beiden Graphen (1.48) gehen.

Offensichtlich beschreibt der linke Graph als erster einen *echten Streuprozess* aus dem Fermisee heraus. Man kann dieses Diagramm wie folgt "lesen":

(1): ein Elektron propagiert im Raum; (2): das Elektron hat eine Coulomb-Wechselwirkung mit einem zweiten Elektron *und stößt dieses Teilchen aus dem gefüllten Fermisee. Dabei bleibt im Fermisee ein Loch (hole) zurück. Eine gewisse Zeit propagieren nun drei Teilchen nebeneinander: das verursachende Elektron und ein Elektron-Loch-Paar*; (3) das Elektron-Loch-Paar rekombiniert, und (wie zu Beginn) bewegt sich ein Elektron im Raum<sup>8</sup>.

Um nun den Beitrag dieses Graphen zur wechselwirkenden Greenfunktion zu erhalten, muß wieder nach den Regeln aus Abschnitt 1.3 vorgegangen werden. Das Ergebnis lautet:

<sup>8</sup>Typisch klassische Interpretation: quantenmechanisch kann natürlich nicht zwischen dem stoßenden und dem gestoßenen Elektron unterschieden werden!

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{k}, \omega) &= \delta_{\alpha\beta} \frac{2}{\hbar^2 (2\pi)^8} [G^0(\mathbf{k}, \omega)]^2 \\
&\times \int d^3q \frac{(4\pi e^2)^2}{q^4} \int d\sigma G^0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \sigma) \\
&\times \int d^3q_1 \int d\sigma_1 G^0(\mathbf{q}_1, \sigma_1) G^0(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1 - \sigma). \tag{1.49}
\end{aligned}$$

Der Ausdruck  $1/q^4$  im  $q$ -Integral kommt von den beiden Wechselwirkungslinien im Diagramm, die beide einen Impulstransfer  $\hbar\mathbf{q}$  bewirken. Wir erhalten also das betrübliche Ergebnis, daß dieser Beitrag zur wechselwirkenden Greenfunktion divergiert!

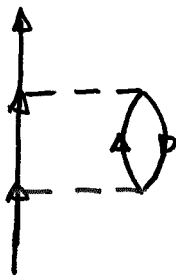
Bevor wir eine Lösung aus diesem Dilemma finden, soll noch der zweite (rechte) Term aus (1.48) ausgewertet werden. Man nennt diesen Term den Austauschterm zweiter Ordnung (*second-order exchange term*): rein phänomenologisch könne Sie diesen Graphen aus dem vorher diskutierten "direkten Term" durch Vertauschen der Vertexpunkte an der oberen Wechselwirkungslinie erhalten.

Die Übertragung dieses Graphen in einen mathematischen Ausdruck lautet:

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{k}, \omega) &= -\delta_{\alpha\beta} \frac{1}{\hbar^2 (2\pi)^8} [G^0(\mathbf{k}, \omega)]^2 \\
&\times \int d^3q \frac{4\pi e^2}{q^2} \int d\sigma G^0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \sigma) \\
&\times \int d^3q_1 \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{q}_1|^2} \int d\sigma_1 G^0(\mathbf{q}_1, \sigma_1) G^0(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1 - \sigma). \tag{1.50}
\end{aligned}$$

Dieser Term liefert offenbar einen endlichen Beitrag zur Greenfunktion. Dieser ist aber relativ klein und spielt deshalb in der Theorie eine nur untergeordnete Rolle.

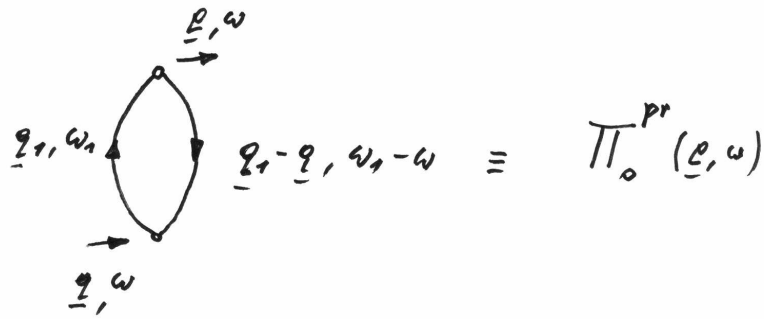
Nun zurück zum divergenten "direkten" Term zweiter Ordnung:



*divergent!*

Wie Sie unmittelbar aus dem Diagramm sehen, haben wir hier eine ganz ähnliche Situation wie bei der Definition einer Selbstenergie: dort gab einen Einschub in eine Teilchenlinie, und hier gibt es einen Einschub in eine Wechselwirkungslinie! Man nennt so etwas einen Polarisations-Einschub (*polarization insertion*), weil derartige Strukturen für Polarisationseffekte innerhalb des Elektronengases auf Grund der Coulomb-Wechselwirkung verantwortlich sind.

Im Sinne dieser Überlegungen stellt das Konstrukt, das wir gerade untersuchen, den einfachsten proper Polarisations-Einschub  $\Pi_0^{pr}(\underline{q}, \omega)$  dar:



$$\text{Diagram} \equiv \Pi_0^{pr}(\underline{q}, \omega)$$

(1.51)

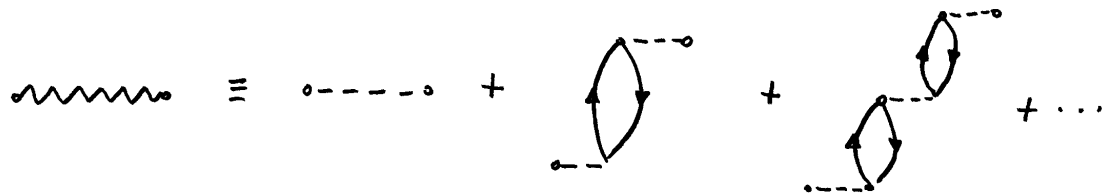
Dieser beschreibt eine Teilchen-Loch-Erzeugung und -Vernichtung und wird aus naheliegenden Gründen in der Literatur oft als *ring approximation*, häufiger jedoch (aus historischen Gründen) als *random phase approximation* (RPA) bezeichnet.

Hier gilt dasselbe, was bereits im Zusammenhang mit der *proper* Selbstenergie gesagt wurde: der Polarisations-einschub  $\Pi_0^{pr}$  von Glg. (1.51) beschreibt nicht die "wirkliche" Polarisation, sondern nur deren ersten (und einfachsten) Term:

$$\Pi^{pr} = \Pi_0^{pr} + \text{further terms.} \quad (1.52)$$

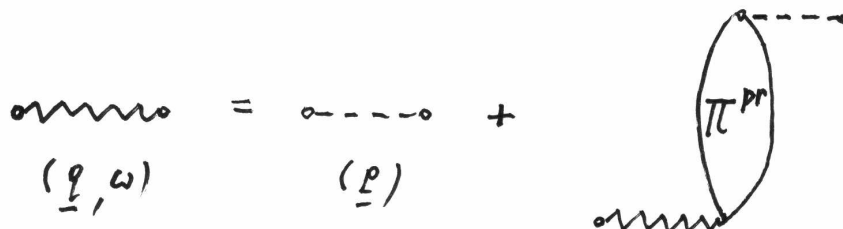
Genauso wie bei der Selbstenergie ist es auch hier sinnvoll, alle Terme aufzusummieren, die sich nur durch die Zahl der aufeinanderfolgenden *proper insertions* unterscheiden. Ein solches Vorgehen führt unmittelbar zur Definition einer

**effektiven Wechselwirkung W:**



Ein wesentlicher Aspekt dieser Aufsummierung besteht nun darin, daß alle einzelnen Terme der Summe divergieren, während die Gesamtsumme konvergiert.

Ebenso wie bei der Selbstenergie kann auch diese Summe als iterativer Prozess angesehen werden, der grafisch die Form



$$\text{Diagram} = \text{Diagram} + \text{Diagram}$$



$$(1.53)$$

hat. Die mathematische Entsprechung dieser Diagramme lautet

$$W(\mathbf{q}, \omega) = V(\mathbf{q}) + W(\mathbf{q}, \omega) \Pi^{pr}(\mathbf{q}, \omega) V(\mathbf{q}) \quad (1.54)$$

und kann mit dem Ergebnis

$$W(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V(\mathbf{q})}{1 - V(\mathbf{q}) \Pi^{pr}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (1.55)$$

nach  $W$  aufgelöst werden. Die Diskussion dieses Ausdrucks ist ein zentraler Punkt der Theorie:

- Im  $(\mathbf{k}, \omega)$ -Raum ist das effektive Potential  $W(\mathbf{q}, \omega)$  das "nackte" Coulombpotential, dividiert durch eine Größe, welche den Einfluß der übrigen Elektronen auf die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei Teilchen beschreibt. Diese Größe ist die Fouriertransformierte (FT) der *dielektrischen Funktion des Elektronengases*:

$$\kappa(\mathbf{q}, \omega) = 1 - V(\mathbf{q}) \Pi^{pr}(\mathbf{q}, \omega). \quad (1.56)$$

Diese Funktion stellt also das Verhältnis zwischen dem ungestörten Coulombpotential und dem effektiven Potential dar, und es gilt:

$$W(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V(\mathbf{q})}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \quad \text{bzw.} \quad \kappa(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V(\mathbf{q})}{W(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (1.57)$$

- Die Polarisationsfunktion (und damit auch die dielektrische Funktion und das effektive Potential) ist i. a. komplexwertig, impulsabhängig *und energieabhängig*. Im Orts-Zeitraum bedeutet das, daß diese Größen *zeitabhängig* sind, d. h., es werden zum ersten Mal in dieser Theorie *dynamische* Prozesse beschrieben.

Die Aussagen der Gleichungen (1.53 – 1.57) gelten für jede Näherung der *proper polarization insertion*  $\Pi^{pr}(\mathbf{k}, \omega)$ . Da die wichtigste Näherung die in (1.51) definierte *random phase approximation* (RPA) darstellt, werden wir uns in den nächsten Abschnitten ausführlich mit dieser Funktion befassen.

## 1.6 Auswertung und Interpretation der dielektrischen Funktion in der RPA-Näherung

Den mathematischen Ausdruck für die *Polarisationsfunktion*  $\Pi_0^{pr}$  erhält man durch Anwendung der im Abschnitt 1.3 formulierten Regeln auf den Graphen

(1.51). Die entsprechende Rechnung ist im Detail im Appendix 3 dargestellt und hat das Ergebnis

$$\begin{aligned} \Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{2}{\hbar(2\pi)^3} \int d^3k_1 \Theta(k_F - k_1) \Theta(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| - k_F) \\ &\times \left[ \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}_1}^0 - \omega_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^0 + i\eta} - \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}_1}^0 + \omega_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^0 - i\eta} \right] \end{aligned} \quad (1.58)$$

Diese komplexwertige Funktion kann (für reelle  $\omega$ ) durch Anwendung der bekannten Rechenvorschrift

$$\frac{1}{\omega \pm i\eta} = P \frac{1}{\omega} \mp i\pi\delta(\omega)$$

in ihren Real- und Imaginärteil aufgespalten werden<sup>9</sup>:

$$\begin{aligned} \Re \Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{2}{\hbar(2\pi)^3} P \int d^3k_1 \Theta(k_F - k_1) \Theta(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| - k_F) \\ &\times \left[ \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}_1}^0 - \omega_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^0} - \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}_1}^0 + \omega_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^0} \right], \end{aligned} \quad (1.59)$$

$$\begin{aligned} \Im \Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{2\pi}{\hbar(2\pi)^3} \int d^3k_1 \Theta(k_F - k_1) \Theta(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| - k_F) \\ &\times \left[ \delta(\omega + \omega_{\mathbf{k}_1}^0 - \omega_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^0) + \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}_1}^0 + \omega_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^0) \right]. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Aus (1.59, 1.60) kann unter Verwendung des allgemeinen Zusammenhanges (1.56)

$$\kappa^{RPA}(\mathbf{q}, \omega) = 1 - V(\mathbf{q}) \Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \kappa_1(\mathbf{q}, \omega) + i \kappa_2(\mathbf{q}, \omega)$$

die *random phase* oder *ring approximation* der Dielektrizitätsfunktion für das homogene Elektronengas berechnet werden. Da wir uns im folgenden ausschließlich mit der RPA-Näherung beschäftigen werden, wird ab nun bei  $\kappa$  der Index "RPA" weggelassen.

Die Auswertung der  $k_1$ -Integrale in (1.59, 1.60) ist nicht schwierig, aber relativ umfangreich. Sie finden sie im Detail z.B. in [5], S. 158ff. Das Ergebnis, das zum ersten Mal von Lindhard<sup>10</sup> publiziert wurde, ist im folgenden angegeben, wobei ich die Formulierung aus [9], S. 144, verwende:

Realteil  $\kappa_1$  der dielektrischen Funktion in der RPA-Näherung:

$$\begin{aligned} \kappa_1(q, \omega) &= 1 + \frac{k_{FT}^2}{q^2} \\ &\times \left\{ \frac{1}{2} + \frac{k_F}{4q} \left[ \left( 1 - \frac{(\omega - \frac{\hbar q^2}{2m})^2}{q^2 v_0^2} \right) \ln \left| \frac{\omega - qv_0 - \hbar q^2/(2m)}{\omega + qv_0 - \hbar q^2/(2m)} \right| + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left( 1 - \frac{(\omega + \frac{\hbar q^2}{2m})^2}{q^2 v_0^2} \right) \ln \left| \frac{\omega + qv_0 + \hbar q^2/(2m)}{\omega - qv_0 + \hbar q^2/(2m)} \right| \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.61)$$

<sup>9</sup> $P$  bedeutet das *Cauchy'sche* Hauptwertintegral.

<sup>10</sup>J. Lindhard, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat-fys. Medd., **28**,8 (1954).

Imaginärteil  $\kappa_2$  der dielektrischen Funktion in der RPA-Näherung:

$$\kappa_2(q, \omega) = \frac{\pi k_{FT}^2 \omega}{2 v_0 q^3} \quad \text{für } q \leq 2k_F \quad \text{und} \quad 0 \leq \omega \leq qv_0 - \frac{\hbar q^2}{2m},$$

$$\kappa_2(q, \omega) = \frac{\pi k_F k_{FT}^2}{4 q^3} \left[ 1 - \frac{\left(\omega - \frac{\hbar q^2}{2m}\right)^2}{q^2 v_0^2} \right] \quad \text{für} \quad (1.62)$$

$$q \leq 2k_F \quad \text{und} \quad qv_0 - \frac{\hbar q^2}{2m} \leq \omega \leq qv_0 + \frac{\hbar q^2}{2m} \quad \text{bzw. für}$$

$$q \geq 2k_F \quad \text{und} \quad -qv_0 + \frac{\hbar q^2}{2m} \leq \omega \leq qv_0 + \frac{\hbar q^2}{2m},$$

$$\kappa_2(q, \omega) = 0 \quad \text{sonst.}$$

Die in diesen Gleichungen vorkommenden Konstanten  $k_{FT}$  (die *Fermi-Thomas-Wellenzahl*) und  $v_0$  (die *Fermi-Geschwindigkeit*) lauten:

$$k_{FT}^2 = \frac{4me^2 k_F}{\pi \hbar^2} \quad \text{und} \quad v_0 = \frac{\hbar k_F}{m}.$$

Da die RPA-Dielektrizitätsfunktion eine außerordentlich wichtige Rolle in der Theoretischen Festkörperphysik spielt, sollen im folgenden noch die Eigenschaften dieser Funktion diskutiert werden.

### 1.6.1 Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion in der RPA-Näherung

Beginnen wir mit einem wichtigen Grenzfall von  $\kappa^{RPA}$ , und zwar mit dem sogenannten *statischen* Grenzfall

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \kappa(q, \omega) = \kappa(q, 0).$$

In diesem Fall ergibt sich aus den Gleichungen (1.61) und (1.62)

$$\kappa_1(q, 0) = 1 + \frac{k_{FT}^2}{2q^2} \left[ 1 + \frac{k_F}{q} \left( 1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| \right] \quad (1.63)$$

sowie

$$\kappa_2(q, 0) = 0 \quad . \quad (1.64)$$

Die *statische* Dielektrizitätsfunktion ist also eine rein reelle Funktion. Wenn man als weitere Näherung nun nur den *langwelligen* Teil der Funktion ( $q \ll k_F$ ) betrachtet, so ergibt sich wegen

$$\lim_{q \rightarrow 0} \left( 1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right| = \frac{q}{k_F}$$

der einfache Ausdruck

$$\kappa_1(q \ll k_F, 0) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2}. \quad (1.65)$$

Dieses Ergebnis enthüllt eine wichtige allgemeine Eigenschaft von  $\kappa$ . Mit (1.65) ergibt sich für die Fouriertransformierte des entsprechenden effektiven Potentials

$$W(q \ll k_F) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2}.$$

In dieser Form ist aber die Rück-Transformation in den Ortsraum kein Problem, und man erhält

$$W(r) = \frac{e^2}{r} e^{-k_{TF} r}. \quad (1.66)$$

Damit ist eine wesentliche Eigenschaft des effektiven Coulombpotentials dargestellt, nämlich die Abschirmung (*screening*) des "nackten" Coulombpotentials durch die Polarisation der Elektronen. Allerdings ist das oben erhaltene exponentielle Abschirmverhalten nicht korrekt, sondern eine Folge der Näherung  $q \ll k_F$ !

Eine genauere Untersuchung des asymptotischen Verhaltens des gemäß (1.63) abgeschirmten Coulombpotentials im Ortsraum ist mit einiger Ausführlichkeit in [10], S.298ff zu finden. Hier soll nur das Ergebnis zitiert werden:

$$V(r \rightarrow \infty) \approx \frac{\Omega m e^2 V(2k_F)}{4\pi^2 \hbar^2 k_F [\kappa(2k_F)]^2} \frac{\cos(2k_F r)}{r^3}.$$

Anstelle eines exponentiellen Abklingens ergibt sich also ein *langsames, oszillierendes* Abklingen der Potentialfunktion. Diese Oszillationen haben ihre Ursache in der *logarithmischen Singularität* von  $\kappa(\mathbf{q}, 0)$  für  $|\mathbf{q}| = 2k_F$  und heißen nach ihrem Entdecker<sup>11</sup> *Friedel-Oszillationen*. Diese Effekte hat man in der Umgebung von Störladungen durch magnetische Kernresonanz experimentell nachweisen können<sup>12</sup>.

Wir wenden uns nun den physikalisch interessanteren *dynamischen* Effekten von  $\kappa$  zu, die durch die Abhängigkeit dieser Funktion von  $\omega$  auftreten. Diese Diskussion kann damit beginnen, daß man sich daran erinnert, daß die FT des effektiven Coulombpotentials mit der FT des "nackten" Coulombpotentials in der Beziehung

$$W(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V(\mathbf{q})}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}$$

steht. Der Einfluß der durch die dielektrische Funktion  $\kappa$  beschriebenen Polarisation ist offenbar dann am größten, wenn gilt:

$$\kappa(\mathbf{q}, \omega) = 0. \quad (1.67)$$

Die Diskussion darüber, bei welcher Anregungsfrequenz ein Resonanzverhalten des Elektronengases auftritt, ist am einfachsten für den Grenzfall  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  (*long wavelength limit*) zu führen. Man erhält nach einiger Rechnung aus den Gleichungen (1.61, 1.62)

$$\kappa_1(0, \omega) = 1 - \frac{k_{FT}^2 v_0^2}{3} \frac{1}{\omega^2} \quad \text{und} \quad \kappa_2(0, \omega) = 0. \quad (1.68)$$

<sup>11</sup>J. Friedel, Nuovo Cim., Suppl. **7**, 287 (1958).

<sup>12</sup>T. Rowland, Phys. Rev. **119**, 900 (1960).

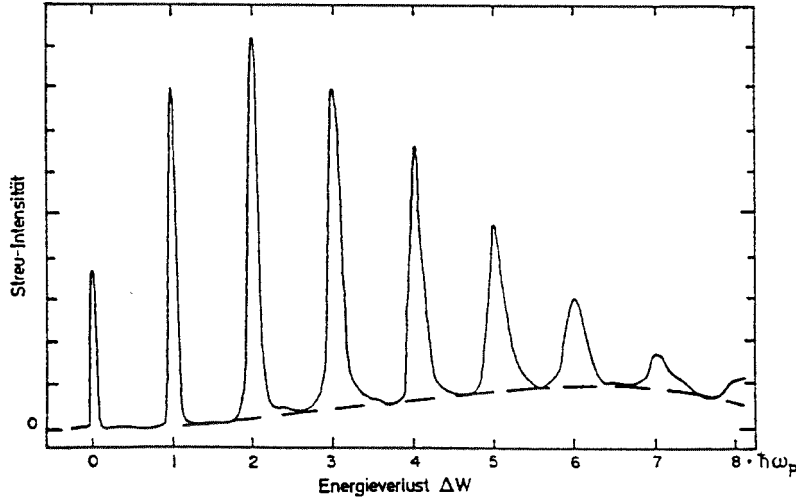


Figure 1.2: Energieverlustspektrum für 20 keV-Elektronen in einer 2080 Angstrom dicken Al-Schicht. Nach Marton, Simpson, Fowler und Swanson (1962).

Daraus ergibt sich sofort die Resonanz-Nullstelle

$$\omega_{res}(q \rightarrow 0) = \omega_p(q \rightarrow 0) = \frac{k_{FT}v_0}{\sqrt{3}} = \left( \frac{4e^2k_F^3}{3\pi m} \right)^{1/2} = \left( \frac{4\pi e^2n_e}{m} \right)^{1/2}. \quad (1.69)$$

*Long wavelength limit* bedeutet, daß die Polarisation des Elektronengases lang-reichweitig ist. d.h. sehr viele Elektronen beeinflusst. Man spricht in solchen Fällen von *kollektiven* Anregungen des Elektronengases: das Gas verhält sich dabei ähnlich einem klassischen Plasma. Die Frequenz  $\omega_p$ , bei der solches geschieht, die sogenannte *Plasmafrequenz*, ist eindeutig durch die Dichte des homogenen Elektronengases gegeben. Die reale Existenz von *Plasma-Schwingungen* des Elektronengases metallischer Festkörper kann durch *energy loss experiments* nachgewiesen werden. Dabei werden die Energieverluste von hochenergetischen Teilchenstrahlen beim Durchdringen von Metallfolien gemessen. Immer dann, wenn die Energie der Teilchen gerade zur Anregung von Plasma-Schwingungen ausreicht, d. h. wenn diese Energie ein ganzzahliges Vielfaches von  $\hbar\omega_p$  ist, wird das Energieverlust-Spektrum ein markantes Maximum aufweisen. Die Abb. 1.2 zeigt das Ergebnis eines derartigen Experiments an Aluminium. Aus dem energetischen Abstand der Maxima wurde aus diesem Diagramm die Anregungsenergie  $\hbar\omega_p$  für Al zu 15.3 eV bestimmt.

Wie paßt unser theoretisches Ergebnis (1.69) dazu? Wendet man das Jelliummodell auf Aluminium an, so ergibt sich für das homogene Valenzelektronengas eine Fermi-Wellenzahl von  $1.75 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ . Diese Zahl in die Glg. (1.69) eingesetzt ergibt den theoretischen Wert  $\hbar\omega_p = 15.79 \text{ eV}$ , der sehr gut zum experimentellen Resultat paßt.

Für einen allgemeinen Wellenzahlvektor  $\mathbf{q}$  ist die dielektrische Funktion komplexwertig, und bei der Nullstellen-Bestimmung (1.67) kann ähnlich

vorgegangen werden wie bei der Selbstenergie (s. Abschnitt 1.4):

$$\kappa(\mathbf{q}, \omega = \nu - i\gamma) = 0. \quad (1.70)$$

Die Nullstelle  $\omega$  wird (i. a.) ebenfalls komplexwertig sein, wobei der Realteil  $\nu$  die Frequenz der kollektiven Anregung und der Imaginärteil  $\gamma$  die inverse Lebensdauer (Dämpfung) dieser Anregung des Elektronengases bestimmt. Wieder entkoppeln für den praktisch häufig auftretenden Fall  $|\gamma| \ll |\nu|$  Real- und Imaginärteil von (1.70), und man erhält approximativ

$$\kappa_1(\mathbf{q}, \nu) = 0 \quad (1.71)$$

sowie

$$\gamma = \kappa_2(\mathbf{q}, \nu) \left( \frac{\partial \kappa_1}{\partial \omega} \right)_\nu^{-1}. \quad (1.72)$$

Aus diesen Gleichungen ergeben sich die folgenden wichtigen Tatsachen:

- Kollektive Anregungen des Elektronengases mit einem Wellenzahlvektor  $\mathbf{q}$  erfolgen bei einer Energie  $\hbar\nu$ , wobei  $\nu$  eine reelle Nullstelle des Realteils der dielektrischen Funktion bedeutet.
- Diese kollektiven Anregungen (*Plasmonen-Anregungen*) sind i. a. gedämpft, wobei die Stärke der Dämpfung durch die reelle Größe  $\gamma$  beschrieben wird, die ihrerseits *dem Imaginärteil der dielektrischen Funktion an der Stelle  $\nu$  proportional ist*.
- Das heißt: für alle  $(\mathbf{q}, \nu)$ , für welche Glg. (1.71) erfüllt wird und gleichzeitig  $\kappa_2$  Null ist, gibt es eine *ungedämpfte Plasmonen-Anregung*.

Um Ihnen einen Eindruck vom Verhalten der dielektrischen RPA-Funktion zu geben, sind in der Abb. 1.3 Real- und Imaginärteil von  $\kappa(\mathbf{q}, \omega)$  für verschiedene  $\mathbf{q}$  als Funktion von  $\omega$  dargestellt. Die Dichte des Elektronengases wird durch den Parameter  $r_s = 4$  Bohr charakterisiert, was in etwa der Situation im Natriummetall entspricht.

Die obere Zeichnung zeigt die Situation für  $|\mathbf{q}| = 0.725$  (in Einheiten  $k_F$ ): der Realteil hat bei  $\omega \approx 2.3$  (in Einheiten  $\hbar k_F^2/(2m)$ ) eine Nullstelle, wobei der Imaginärteil dort Null ist. Es sind also alle Bedingungen für eine ungedämpfte Plasmonenanregung gegeben.

Die mittlere Zeichnung für  $|\mathbf{q}| = 0.95$  zeigt den Moment, wo die Nullstelle des Realteils in den Bereich  $\Im \kappa \neq 0$  "eintaucht". *Ab dieser "kritischen" Wellenzahl gibt es nur mehr gedämpfte Plasmonen-Anregungen, bzw., wie die untere Zeichnung für ein großes  $q$  zeigt, keine Plasmonen-Anregungen mehr.*

In jenem  $\mathbf{q}, \omega$ -Bereich, für welchen

$$\Re \kappa(\mathbf{q}, \omega) \neq 0$$

gilt, kann die Dämpfung soweit gehen, daß die kollektiven Anregungen in einzelne Elektron-Loch-Prozesse im Sinne des Diagramms (1.51) "zerfallen". Aus diesem Grund nennt man den Bereich auf der  $\mathbf{q}, \omega$ -Ebene, für den der

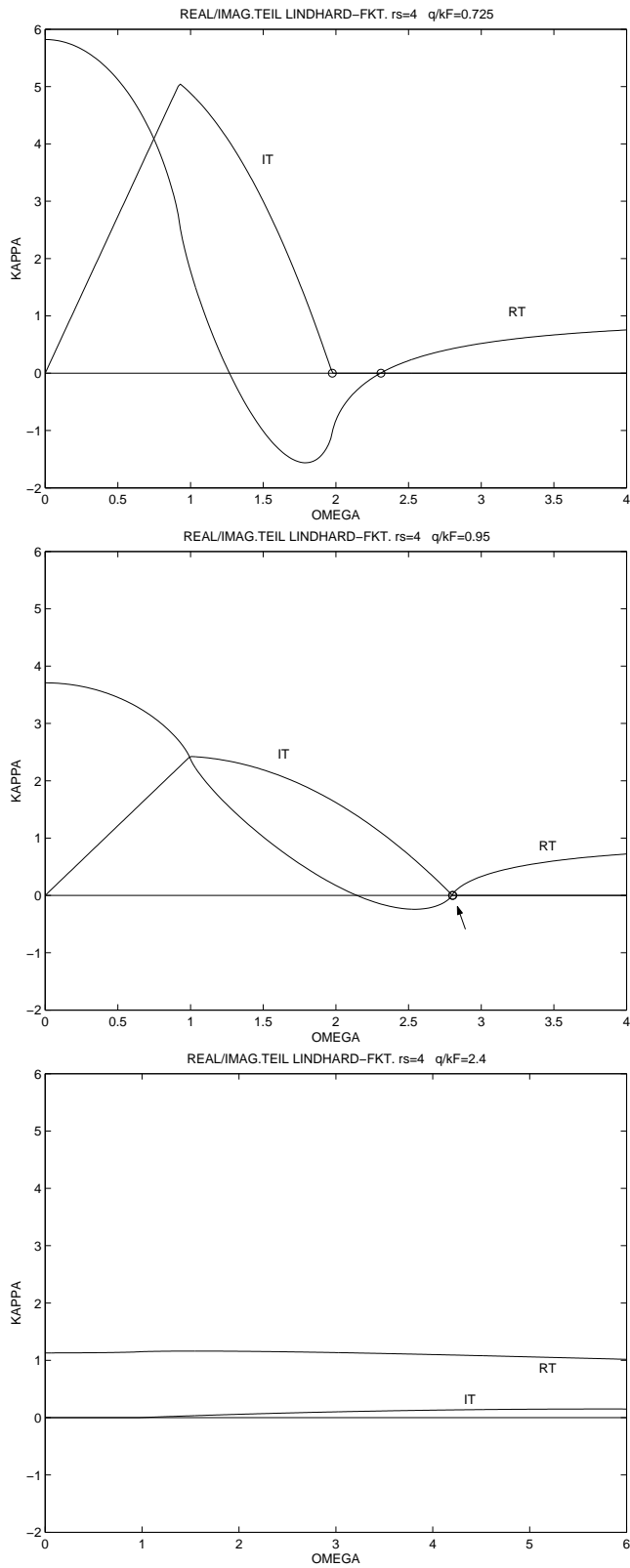


Figure 1.3: Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion in der RPA-Näherung in Abhängigkeit von  $\omega$  für  $q/k_F = 0.725, 0.95$  und  $2.4$ . Die Elektronendichte ist durch  $r_s = 4$  Bohr charakterisiert.

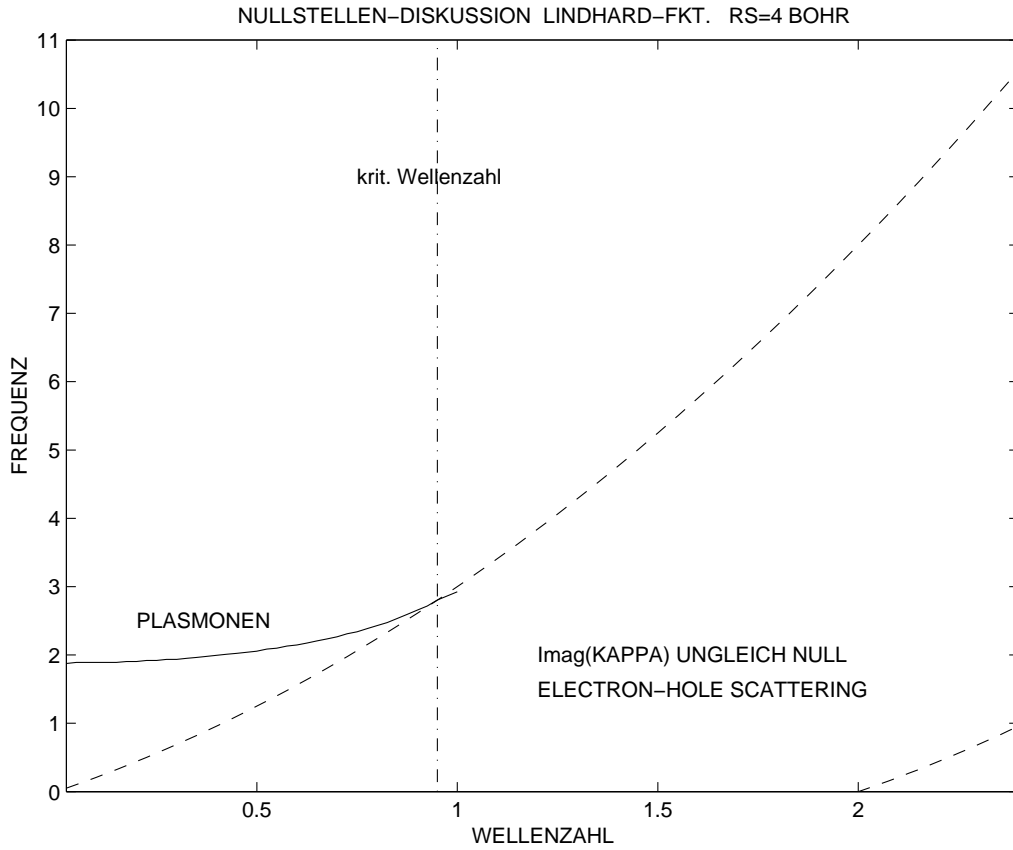


Figure 1.4: Bereiche von *electron-hole scattering* und von ungedämpften Plasmonen-Anregungen für die Dielektrizitätsfunktion in der RPA-Näherung.

Imaginärteil von  $\kappa$  von Null verschieden ist, die *electron-hole scattering region*. Die Grenzlinien, welche diesen Bereich einschließen, werden gemäß (1.62) durch die Gleichungen

$$\frac{\hbar q^2}{2m} + qv_0 \quad \text{und} \quad \frac{\hbar q^2}{2m} - qv_0$$

repräsentiert. All diese Zusammenhänge sind in der Abb. 1.4 dokumentiert. Die Abhängigkeit der Plasmonen-Anregungsenergie von der Wellenzahl  $\mathbf{q}$  kann numerisch durch Lösung der Gleichung (1.71) bestimmt werden. Für nicht zu große  $|\mathbf{q}|$  folgt diese Dispersionsrelation (s. [9], S. 147f) dem Ausdruck

$$\omega_p(q) = \omega_p(0) \left( 1 + \frac{9}{10} \frac{q^2}{k_{\text{TF}}^2} + \dots \right), \quad (1.73)$$

wobei  $\omega_p(0)$  der in Glg. (1.69) definierten Plasmafrequenz entspricht.



### Zwischenbilanz:

Kehren wir zurück zu dem in den Abschnitten 1.3 und 1.4 behandelten Begriff der "Selbstenergie". Die einfachste Näherung für die Funktion  $\Sigma^{pr}$  besteht aus einem Propagator für ein freies Elektron und der Wechselwirkungslinie eines "nackten" Coulombpotentials (*exchange or Hartree-Fock approximation to the self-energy insertion*). Der entsprechende mathematische Ausdruck steht in (1.37) und lautet

$$\hbar\Sigma^{pr}(\mathbf{k}) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^3q d\omega_1 V(\mathbf{q}) e^{i(\omega-\omega_1)\eta} G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1).$$

Es liegt nun selbstverständlich nahe, im Sinne einer Weiterentwicklung der Theorie das "nackte" Coulombpotential in der obigen Gleichung durch ein "effektives" Potential (s. Abschnitt 1.5) zu ersetzen: da ein solches Potential in der Regel *dynamisch* d.h. im Fourier-Raum frequenzabhängig ist, ergibt sich auch eine dynamische Selbstenergie-Funktion, nämlich

$$\hbar\Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^3q d\omega_1 W(\mathbf{q}, \omega_1) e^{i(\omega-\omega_1)\eta} G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1). \quad (1.74)$$

Die letzten Abschnitte haben sich mit der sehr wichtigen *random phase approximation* für das effektive Potential beschäftigt; in dieser Näherung haben wir

$$W(\mathbf{q}, \omega_1) \approx W^{RPA}(\mathbf{q}, \omega_1) = \frac{V(\mathbf{q})}{\kappa^{RPA}(\mathbf{q}, \omega_1)}$$

bzw.

$$\hbar\Sigma^{(RPA)pr}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^3q V(\mathbf{q}) \int \frac{d\omega_1}{\kappa^{RPA}(\mathbf{q}, \omega_1)} e^{i(\omega-\omega_1)\eta} G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1). \quad (1.75)$$

$\kappa^{RPA}$ , die dielektrische Funktion in der RPA, wird durch die Lindhard'schen Formeln (1.61) und (1.62) beschrieben.

Wie bereits ausführlich erläutert, ist diese Funktion nicht nur frequenzabhängig, sondern auch komplexwertig; dementsprechend ist auch die Selbstenergiefunktion  $\Sigma^{RPA}$  eine komplexe Größe; das bedeutet nach Abschnitt 1.4, daß die dadurch beschriebenen Teilchen echte *Quasiteilchen* mit einer endlichen Lebensdauer sind.

Es wäre nun sehr interessant, die RPA-Selbstenergie gemäß Glg. (1.75) auszuwerten; um diese nicht einfache Rechnung durchführen zu können, müssen wir aber noch mehr über die dielektrische Funktion  $\kappa$  erfahren: dies soll in den folgenden Abschnitten dieses Skriptums geschehen.

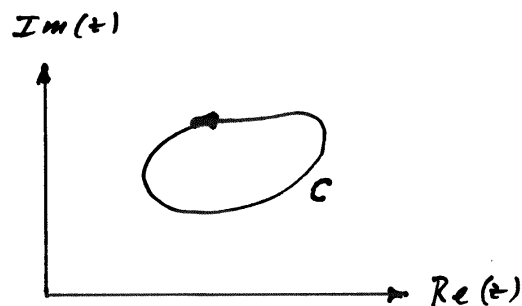
## Appendix 1: Berechnung reeller bestimmter Integrale auf komplexem Wege

Quelle: S. Flügge, *Mathematische Methoden der Physik I*, Springer-Verlag, Heidelberg, 1979, S. 1ff.

Die Basis aller folgenden Überlegungen ist der *Cauchy'sche Satz*

$$\oint dz f(z) = 0.$$

Dabei ist  $f$  eine komplexwertige Funktion des komplexwertigen Argumentes  $z$ , und die Integration verläuft entlang des geschlossenen Weges  $C$ , wobei  $C$  gegen den Uhrzeigersinn durchlaufen wird:



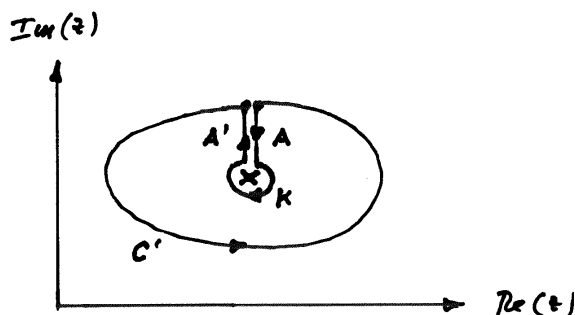
Der Cauchy'sche Satz gilt in der obigen einfachen Form nur dann, wenn die Funktion  $f$  innerhalb des von  $C$  umschlossenen Gebietes und auf  $C$  *keine Singularitäten besitzt*.

Was ändert sich nun, wenn  $f(z)$  in einem Punkt  $z_0$  im Inneren des Integrationsgebietes eine Singularität in Form einer *Polstelle  $n$ -ter Ordnung* hat, d.h. in der Form

$$f(z) = \frac{F(z)}{(z - z_0)^n} \quad (n = 1, 2, \dots)$$

geschrieben werden kann, wobei  $F(z)$  eine reguläre (analytische) Funktion ist?

Eine Möglichkeit, das Problem anzugehen, besteht darin, den geschlossenen Weg  $C$  in der folgenden Weise zu deformieren:



$C$  stellt sich nun also als Summe von vier Teilstücken dar:

$$C = C' + A + K + A'.$$

Die Integralbeiträge der entgegengesetzten Wege  $A$  und  $A'$  heben sich heraus. es bleibt aber der Beitrag vom Weg  $K$  übrig, sodaß man schreiben kann:

$$\int_{C'} dz \frac{F(z)}{(z - z_0)^n} = - \int_K dz \frac{F(z)}{(z - z_0)^n}.$$

Weiters wird angenommen, daß  $K$  um  $z_0$  einen Kreis mit dem Radius  $r$  beschreibt, d.h. daß auf  $K$

$$z = z_0 + re^{i\varphi} \quad \text{bzw.} \quad dz = ire^{i\varphi} d\varphi$$

gilt. Man erhält dann

$$\int_K dz \frac{F(z)}{(z - z_0)^n} = -ir \int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi e^{i\varphi} \frac{F(z)}{r^n e^{in\varphi}}.$$

$F$  ist an der Stelle  $z_0$  regulär und kann daher dort in eine Taylorreihe entwickelt werden:

$$F(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{(k)}(z_0)}{k!} (z - z_0)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{(k)}(z_0)}{k!} r^k e^{1k\varphi}.$$

Eine Kombination der letzten 3 Gleichungen ergibt

$$\int_{C'} dz \frac{F(z)}{(z - z_0)^n} = i \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{(k)}(z_0)}{k!} r^{k-n+1} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(k-n+1)\varphi}}_{=2\pi \delta_{k,n-1}} = 2\pi i \frac{F^{(n-1)}(z_0)}{(n-1)!}.$$

Dies ist die *Cauchy'sche Formel*, auch *Cauchy'scher Residuensatz* genannt: man nennt nämlich

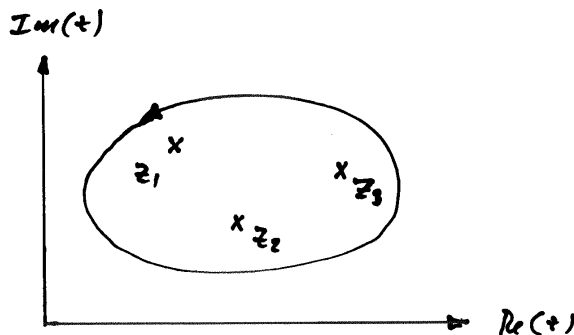
$$Res_f(z_0) \equiv \frac{F^{(n-1)}(z_0)}{(n-1)!}$$

das *Residuum* der Funktion  $f(z)$  für den Pol  $n$ -ter Ordnung an der Stelle  $z_0$ .

Man kann also die letzte Abbildung in der folgenden Weise verallgemeinern: wenn der Integrationsbereich von  $f(z)$  auf der komplexwertigen  $z$ -Ebene von einer geschlossenen Kurve  $C$  gegen den Uhrzeigersinn durchlaufen wird, lautet das Integrationsergebnis

$$\oint dz f(z) = 2\pi i \sum_j Res_f(z_j),$$

d.h. der Wert des Integrals wird durch die Summe der Residuen von  $f(z)$  an den Polstellen  $z_1, z_2, \dots$  bestimmt:



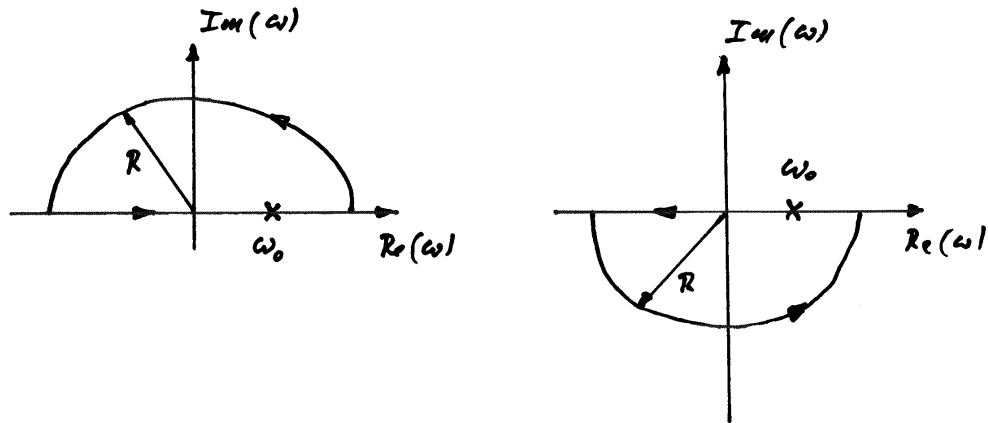
In der physikalischen Anwendung (z. B. in der Theoretischen Festkörperphysik) wird der Cauchy'sche Residuensatz sehr häufig zur Berechnung von

Integralen der Form

$$I(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{F(\omega) e^{i\omega t}}{(\omega - \omega_0)^n} \quad n = 1, 2, \dots$$

verwendet, wobei  $\omega_0$  eine reelle Zahl ist, d.h. die Polstelle auf der reellen  $\omega$ -Achse liegt.

Wie kann man in diesem Fall den Integrationsweg auf der komplexen  $\omega$ -Ebene wählen?



Wie die obigen Skizzen zeigen, kann man den Integrationsbereich von  $-\infty$  bis  $+\infty$  in der komplexen  $\omega$ -Ebene dadurch schließen, daß man einen Halbkreis (HK) entweder in der oberen Halbebene oder in der unteren Halbebene zeichnet. Was den Radius des Halbkreises  $R$  betrifft, so wird die Grenzwertbildung  $R \rightarrow \infty$  durchgeführt.

Die (geschlossene) Integrationslinie besteht also aus der reellen  $\omega$ -Achse und einem Halbkreis mit dem Radius  $R \rightarrow \infty$ , wobei dieser Halbkreis entweder in der oberen (oHK) oder in der unteren (uHK)  $\omega$ -Halbebene liegt.

Es gilt demnach bei Integration in der oberen Halbebene

$$\int_C d\omega f(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) + \int_{oHK} d\omega f(\omega) = 2\pi i \operatorname{Res}_f(\omega_0)$$

bzw. in der unteren Halbebene

$$\int_C d\omega f(\omega) = - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) + \int_{uHK} d\omega f(\omega) = 2\pi i \operatorname{Res}_f(\omega_0).$$

Dies ergibt sofort

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) = - \int_{oHK} d\omega f(\omega) + 2\pi i \operatorname{Res}_f(\omega_0)$$

bzw.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega) = \int_{uHK} d\omega f(\omega) - 2\pi i \operatorname{Res}_f(\omega_0).$$

Wie sehen nun die 'Halbkreisintegrale' für die gegebene Integrandenfunktion

$$f(\omega) = \frac{F(\omega) e^{i\omega t}}{(\omega - \omega_0)^n}$$

aus? Man erhält unter Verwendung der Transformation  $\omega = R e^{i\varphi}$  für den oberen Halbkreis das Integral

$$iR \int_0^\pi d\varphi \frac{F(Re^{i\varphi})}{(Re^{i\varphi} - \omega_0)^n} e^{itR \cos \varphi} e^{-tR \sin \varphi}$$

bzw. für den unteren Halbkreis

$$iR \int_0^\pi d\varphi \frac{F(-Re^{i\varphi})}{(-Re^{i\varphi} - \omega_0)^n} e^{-itR \cos \varphi} e^{+tR \sin \varphi}.$$

Was nun die Grenzwerte der obigen Integrale für  $R \rightarrow \infty$  betrifft, ergibt sich bei Integration in der oberen Halbebene der Ausdruck

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\pi d\varphi \dots \frac{e^{-tR \sin \varphi}}{R^{n-1}}$$

bzw. in der unteren Halbebene

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\pi d\varphi \dots \frac{e^{+tR \sin \varphi}}{R^{n-1}}$$

Daraus ergeben sich die folgenden wichtigen Konsequenzen:

- Wenn ein Pol erster Ordnung vorliegt ( $n=1$ ):
  - Für  $t > 0$  : das Halbkreis-Integral ist bei Integration über die *obere* Halbebene Null und divergiert bei Integration über die *untere* Halbebene.  
**Es muss in diesem Fall also über die obere  $\omega$ -Halbebene integriert werden.**
  - Für  $t < 0$  : das Halbkreis-Integral ist bei Integration über die *untere* Halbebene Null und divergiert bei Integration über die *obere* Halbebene.  
**Es muss in diesem Fall also über die untere  $\omega$ -Halbebene integriert werden.**

Diese Regel, die in der Rechenpraxis große Bedeutung hat, wird als *Jordan'sches Lemma* bezeichnet.

- Wenn ein Pol höherer Ordnung vorliegt ( $n > 1$ ):  
Wie die Grenzwert-Analyse zeigt, strebt das Integral für jedes  $t$  für  $R \rightarrow \infty$  wegen des Nenners  $R^{n-1}$  gegen Null, **egal ob in der oberen oder in der unteren Halbebene integriert wird.**

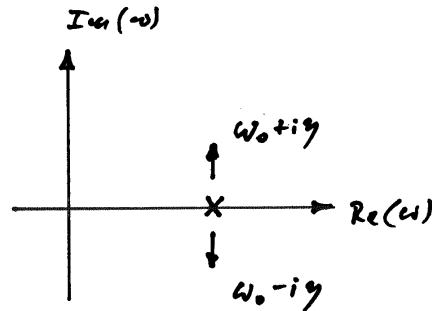
Wenn diese Regeln befolgt werden, ist also stets gewährleistet, daß das 'Halbkreis-Integral' für  $R \rightarrow \infty$  verschwindet, und man erhält bei einer Integration in der oberen bzw. unteren  $\omega$ -Halbebene die Ergebnisse

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{F(\omega)e^{i\omega t}}{(\omega - \omega_0)^n} = +2\pi i \operatorname{Res} \left[ \frac{F(\omega)e^{i\omega t}}{(\omega - \omega_0)^n} \right] (\omega_0)$$

bzw.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{F(\omega)e^{i\omega t}}{(\omega - \omega_0)^n} = -2\pi i \operatorname{Res} \left[ \frac{F(\omega)e^{i\omega t}}{(\omega - \omega_0)^n} \right] (\omega_0)$$

Ein Problem im Zusammenhang mit der Polstelle bei  $\omega_0$  muss noch diskutiert werden: es ist rechen technisch ungünstig, wenn die Polstelle auf der Integrationslinie liegt. Aus diesem Grund wird diese reelle Polstelle durch Verschiebung um den Faktor  $+i\eta$  oder  $-i\eta$  ( $\eta =$  eine kleine, reelle, positive Größe) von der reellen  $\omega$ -Achse in die obere oder untere Halbebene verlegt:



Nach Ausführung der Integration wird dann der Grenzwert  $\eta \rightarrow 0$  gebildet:

$$I(t) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{F(\omega) e^{i\omega t}}{(\omega - \omega_0 \mp i\eta)^n}.$$

Abschließend soll die hier beschriebene Rechen technik an der im Skriptum auf S. 8, Glg. (1.15), angegebenen Integraldarstellung der *Heaviside'schen Stufenfunktion* demonstriert werden:

$$\Theta(\tau) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\eta}.$$

Wie man sieht, liegt die Singularität an der Stelle  $\omega = -i\eta$ , also in der unteren  $\omega$ -Halbebene. Diese Polstelle ist erster Ordnung, es ist also das *Jordan'sche Lemma* zu beachten.

- Auswertung des Integrals für  $\tau > 0$ : es muß in der unteren Halbebene integriert werden, und das Residuum der zu integrierenden Funktion

$$f(\omega) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\eta}$$

lautet

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \left[ -\frac{1}{2\pi i} e^{-\eta\tau} \right] = -\frac{1}{2\pi i}.$$

Daraus folgt sofort der Integrationswert  $\Theta(\tau > 0) = 1$ .

- Auswertung des Integrals für  $\tau < 0$ : es muß in der oberen Halbebene integriert werden; da es dort jedoch keine Singularität gibt, ist das Integrationsergebnis ohne weitere Rechnung Null:  $\Theta(\tau < 0) = 0$ .

## Appendix 2: Auswertung des Selbstenergie-Terms (1.37)

$$\Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{i}{\hbar(2\pi)^4} \int d^3q V(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 e^{i(\omega-\omega_1)\eta} G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1).$$

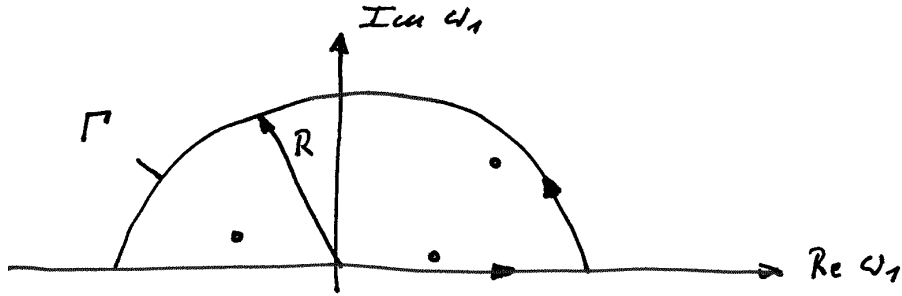
Einsetzen der wechselwirkungsfreien Greenfunktion (1.22) ergibt

$$\Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{i}{\hbar(2\pi)^4} e^{i\omega\eta} \int d^3q V(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 e^{-i\omega_1\eta} \times (-1) \left[ \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k}-\mathbf{q}|)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 + i\eta} + \frac{\Theta(|\mathbf{k}-\mathbf{q}| - k_F)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} \right]. \quad (\text{A2.1})$$

Was die Auswertung der  $\omega_1$ -Integration betrifft, ist es sinnvoll, in der komplexwertigen  $\omega_1$ -Ebene zu integrieren und dabei den *Residuensatz von Cauchy* zu verwenden, der besagt, daß jedes Integral bzgl. einer geschlossenen (und gegen den Uhrzeigersinn durchlaufenen) Linie gleich ist  $2\pi i$  mal der Summe der *Residuen* des Integranden im Inneren des Integrationsgebietes.

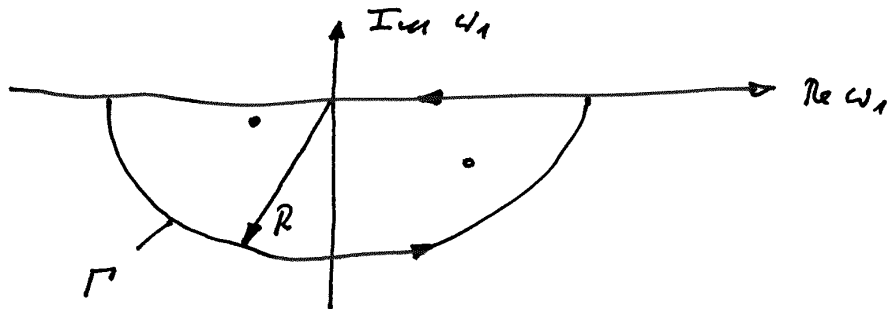
Im konkreten Fall gibt es 2 Möglichkeiten, den *Cauchysatz* anzuwenden:

Integration bzgl. der oberen  $\omega_1$ -Halbebene:



$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 f(\omega_1) + \int_{\gamma(R \rightarrow \infty)} d\omega_1 f(\omega_1) = 2\pi i \sum_{\text{obere HE.}} \text{Residuen}$$

Integration bzgl. der unteren  $\omega_1$ -Halbebene:



$$\int_{+\infty}^{-\infty} d\omega_1 f(\omega_1) + \int_{\gamma(R \rightarrow \infty)} d\omega_1 f(\omega_1) = 2\pi i \sum_{\text{untere HE.}} \text{Residuen}$$

Entscheidend für die Wahl "obere oder untere Halbebene" ist das Verhalten des Integrals entlang des Halbkreises im Grenzfall  $R \rightarrow \infty$ . Man kann nun *im*

Fälle von Polstellen erster Ordnung zeigen, daß ein im Integranden vorkommender Faktor  $\exp(\pm i\omega_1\eta)$  [ $\eta$  reell und  $> 0$ ] das Verschwinden des "Halbkreis-Integrals" für  $R \rightarrow \infty$  in der oberen HE (*positives* Vorzeichen) bzw. in der unteren HE (*negatives* Vorzeichen) gewährleistet (*Jordansches Lemma*). Für Polstellen höherer Ordnung verschwindet das "Halbkreis-Integral" in jeder Halbebene.

Im konkreten Fall der Auswertung des  $\omega_1$ -Integrals in (A1.1) muß wegen des Faktors  $\exp(-i\omega_1\eta)$  in der unteren  $\omega_1$ -HE integriert werden. Wie man sieht, hat in diesem Bereich nur der erste Term von (A1.1) eine Polstelle, nämlich für

$$\omega_1 = \omega - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta.$$

Man erhält also nach *Cauchy*

$$\Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{-i}{\hbar(2\pi)^4} \int d^3q V(\mathbf{q}) (-2\pi i) \Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|) \exp[-i(\omega - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})\eta]$$

bzw.

$$\Sigma^{pr}(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma^*(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\hbar(2\pi)^3} \int d^3q V(\mathbf{q}) \Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|).$$

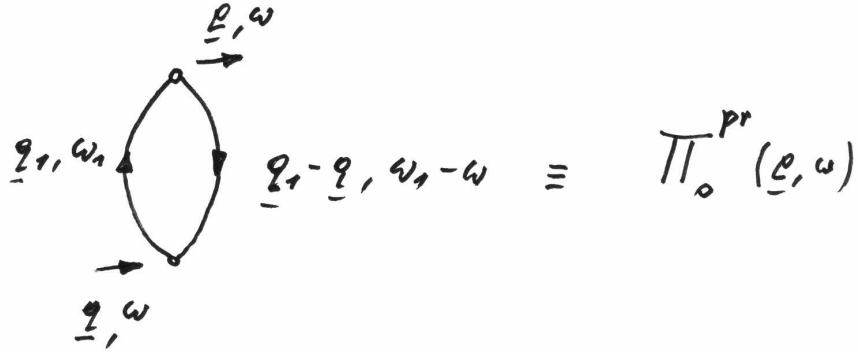
Mit der Transformation  $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}$  und mit  $V(\mathbf{q}) = 4\pi e^2/q^2$  ergibt sich schließlich

$$\Sigma^{pr}(\mathbf{k}) = -\frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \int_{|\mathbf{k}'| \leq k_F} \frac{d^3k'}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} \quad \text{s. Glg. (1.43).}$$



### Appendix 3: Polarisationsfunktion in der random phase approximation RPA

Es geht im folgenden um die Auswertung des Graphen



nach den Regeln, die im Abschnitt 1.3 dieses Skriptums besprochen wurden. Man erhält sofort die Gleichung

$$\Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) = \left[ \frac{i(-1)}{\hbar(2\pi)^4} \right] \underbrace{\sum_{\gamma} \sum_{\sigma} \delta_{\gamma\sigma}}_{=2} \int d^3q_1 d\omega_1 G^0(\mathbf{q}_1, \omega_1) G^0(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}, \omega_1 - \omega),$$

wobei der Vorfaktor sich daraus erklärt, daß jedes Auftreten eines Polarisations-einschubes  $\Pi_0^{pr}$  einen Teilchenloop und eine zusätzliche Wechselwirkungslinie in den Elektronen-Propagator einbringt und somit die Ordnung des Propagators um Eins erhöht.

Setzt man in diesen Ausdruck für die freien Greenfunktionen die Gleichung (1.22) ein, ergibt sich

$$\Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{2i}{\hbar(2\pi)^4} \int d^3q_1 \int d\omega_1 \left[ \frac{\Theta(q_1 - k_F)}{\underbrace{\omega_1 - \omega_{\mathbf{q}_1}^0 + i\eta}_u} + \frac{\Theta(k_F - q_1)}{\underbrace{\omega_1 - \omega_{\mathbf{q}_1}^0 - i\eta}_o} \right] \times \left[ \frac{\Theta(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}| - k_F)}{\underbrace{\omega_1 - \omega - \omega_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}}^0 + i\eta}_u} + \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}|)}{\underbrace{\omega_1 - \omega - \omega_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}}^0 - i\eta}_o} \right].$$

Die Auswertung des  $\omega_1$ -Integrals erfolgt wieder mittels des *Cauchyschen* Residuensatzes. Die Angaben "o" bzw. "u" unter den Energienennern geben an, ob der entsprechende Pol in der oberen oder unteren Halbebene des komplexwertigen  $\omega_1$  liegt.

In Fällen wie diesem, wo die Nennerpolynome von höherer als erster Ordnung sind, hat der *Jordansche* Konvergenzfaktor keine Bedeutung mehr: die *Halbkreisintegrale* (s. Appendix 1) verschwinden in jedem Fall, egal ob man in der oberen oder unteren HE integriert!

Diese Tatsache nützt man wie folgt aus: sind beide  $\omega_1$ -Pole eines Produktterms in derselben HE, so integriert man einfach in der anderen HE und

erhält natürlich Null. Es bleiben also nur die beiden *verschränkten* Terme übrig:

$$\Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{2i}{\hbar(2\pi)^4} \int d^3q_1 \int d\omega_1 \left[ \frac{\Theta(q_1 - k_F)\Theta(k_F - |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}|)}{(\omega_1 - \omega_{\mathbf{q}_1}^0 + i\eta)(\omega_1 - \omega - \omega_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}}^0 - i\eta)} + \frac{\Theta(k_F - q_1)\Theta(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}| - k_F)}{(\omega_1 - \omega_{\mathbf{q}_1}^0 - i\eta)(\omega_1 - \omega - \omega_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}}^0 + i\eta)} \right].$$

Die Auswertung bzgl. der *oberen* HE<sup>13</sup> ergibt

$$\Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{2i(2\pi i)}{\hbar(2\pi)^4} \int d^3q_1 \times \left[ \frac{\Theta(q_1 - k_F)\Theta(k_F - |\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}|)}{\omega + \omega_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}}^0 - \omega_{\mathbf{q}_1}^0 + i\eta} - \frac{\Theta(k_F - q_1)\Theta(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}| - k_F)}{\omega + \omega_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}}^0 - \omega_{\mathbf{q}_1}^0 - i\eta} \right].$$

Transformiert man den ersten Term mit  $\mathbf{q}_1 \rightarrow \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$  und den zweiten Term mit  $\mathbf{q}_1 \rightarrow -\mathbf{k}_1$ , so erhält man unter Berücksichtigung von  $\omega_{\mathbf{k}}^0 = \omega_{-\mathbf{k}}^0$  das Ergebnis Glg. (1.58):

$$\Pi_0^{pr}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{\hbar(2\pi)^3} \int d^3k_1 \Theta(k_F - k_1)\Theta(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| - k_F) \times \left[ \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}_1}^0 - \omega_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^0 + i\eta} - \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}_1}^0 + \omega_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}^0 - i\eta} \right].$$

---

<sup>13</sup>Die Auswertung in der *unteren* HE würde natürlich genau dasselbe Ergebnis bringen. Probieren Sie's aus!