

## 1.7 Zeitgeordnete und retardierte Responsefunktionen

Wie aus den bisherigen Ausführungen hervorgeht, basieren alle Berechnungen, in welchen Feynman-Diagramme verwendet werden, auf Greenfunktionen, die ihrerseits gemäß Glg. (1.1) als Grundzustands-Mittelwerte von zeitgeordneten Feldoperator-Produkten definiert sind.

Diese "Zeit-Geordnetheit" gilt also nicht nur für die Greenfunktionen selbst, sondern auch für alle aus ihnen hervorgehenden *Antwortfunktionen* (*response functions*) eines Elektronensystems auf eine von außen kommende Störung: man spricht also auch von zeitgeordneten Polarsationsfunktionen, dielektrischen Funktionen usw.

Im Zusammenhang mit dem effektiven Elektron-Elektron-Wechselwirkungspotential (im Impuls-Energie-Raum) haben wir als wichtige Größe die *Inverse der dielektrischen Funktion*

$$\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}$$

kennengelernt. Es gibt nun außer der Ableitung aus der Dyson-Gleichung noch einen anderen, unabhängigen theoretischen Zugang zu dieser Größe, nämlich die *zeitabhängige Störungsrechnung*. Eine detaillierte Darstellung dieser Ableitung übersteigt die Intentionen dieser LV, ist aber in zahlreichen Lehrbüchern<sup>14</sup> ausführlich dargestellt. Aus diesem Grund wird im folgenden nur das Ergebnis einer solchen Rechnung angegeben:

$$\left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^T = 1 + \frac{4\pi e^2}{\hbar q^2} \sum_n |(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} - i\eta} \right\}. \quad (1.76)$$

Dabei steht "T" für *time-ordered*.

Die obige Gleichung stellt ein exaktes Resultat für die Inverse der zeitgeordneten dielektrischen Funktion eines Elektronengases in der *jellium* Näherung dar. In der Praxis nützt diese Tatsache allerdings deshalb nicht sehr viel, weil in diesem Ausdruck Größen vorkommen, die man nicht - zumindest nicht exakt - kennt, wie z.B.  $|(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{n0}|$  = das Matrixelement des Dichtefluktuations-Operators  $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$  zwischen den ungestörten Zuständen  $\langle n|$  und  $|0\rangle$  sowie die entsprechenden Anregungsenergien  $\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$ .

Wie Sie nun sehen werden, ist die Gleichung (1.76) aber auch ohne die Möglichkeit einer direkten numerischen Auswertung außerordentlich nützlich für die weiteren theoretischen Überlegungen.

Eine wesentliche Eigenschaft der zeitgeordneten Funktion  $1/\kappa$  ist aus (1.76) sofort zu erkennen: es kommen in beiden Halbebenen der komplexwertigen  $\omega$ -Ebene (d.h. sowohl oberhalb als auch unterhalb der reellen Achse) Polstellen vor, d.h. die Funktion ist weder in der oberen noch in der unteren  $\omega$ -Halbebene *analytisch*.

<sup>14</sup>s. z. B.: D. Pines, *Elementary Excitations in Solids*, Benjamin, New York, 1964, S. 121ff; D. Pines, *The Many-Body Problem*, Benjamin, Reading, 1962, S. 235ff.

Eine Aufspaltung von (1.76) in Real- und Imaginärteil mittels

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

ergibt unmittelbar

$$\Re \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^T = 1 + P \frac{4\pi e^2}{\hbar q^2} \sum_n |(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0}} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0}} \right\} \quad (1.77)$$

und

$$\Im \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^T = -\frac{4\pi^2 e^2}{\hbar q^2} \sum_n |(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{n0}|^2 \{ \delta(\omega - \omega_{n0}) + \delta(\omega + \omega_{n0}) \}. \quad (1.78)$$

Aus diesen Gleichungen gehen sofort die folgenden Eigenschaften des Real- und Imaginärteils von  $1/\kappa$  hervor:

$$\Re \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, -\omega)} \right)^T = \Re \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^T \quad \text{und} \quad \Im \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, -\omega)} \right)^T = \Im \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^T$$

bzw.

$$\left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, -\omega)} \right)^T = \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^T. \quad (1.79)$$

Eine sehr wichtige Beziehung, die für konkrete Rechnungen häufig angewendet wird, soll im folgenden hergeleitet werden. Dazu bringt man Glg. (1.76) in die Form

$$\left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^T = 1 + \frac{4\pi e^2}{\hbar q^2} \int_0^\infty d\sigma \sum_n \delta(\sigma - \omega_{n0}) |(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \sigma + i\eta} - \frac{1}{\omega + \sigma - i\eta} \right\}.$$

Nun gilt gemäß Glg. (1.78) für positive Frequenz-Argumente

$$\Im \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right)^T = -\frac{4\pi^2 e^2}{\hbar q^2} \sum_n |(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{n0}|^2 \delta(\sigma - \omega_{n0}).$$

Eine Kombination der beiden letzten Gleichungen ergibt nach kurzer Rechnung

$$\left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^T = 1 + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\sigma \Im \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right)^T \left\{ \frac{1}{\sigma - \omega - i\eta} + \frac{1}{\sigma + \omega - i\eta} \right\}. \quad (1.80)$$

Allgemein kann gezeigt werden, daß das Arbeiten mit zeitgeordneten Responsefunktionen den großen Vorteil hat, daß diese Funktionen unter Verwendung der Feynman'schen Graphentechnik erhalten werden können. Der Nachteil dieser Responsefunktionen ist allerdings schwerwiegend: sie genügen nicht dem *Kausalitätsprinzip*, d. h. jener prinzipiellen Forderung, daß die Antwort eines Systems auf eine Störung kausal sein muß, d. h., daß keine Reaktion des Elektronengases auftreten darf, bevor es eine Ursache dafür gibt.

Responsefunktionen, welche diese Bedingung erfüllen, werden *retardierte* Funktionen genannt; solche Funktionen können ebenfalls mittels der zeitabhängigen Störungsrechnung erhalten werden. Das entsprechende Resultat, also die Inverse der retardierten dielektrischen Funktion, soll hier ebenfalls nur aus der Spezialliteratur zitiert werden:

$$\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^R = 1 + \frac{4\pi e^2}{\hbar q^2} \sum_n |(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right\}. \quad (1.81)$$

Vergleichen Sie dieses Resultat mit der entsprechenden zeitgeordneten Funktion (1.76), so erkennen Sie sofort, daß die Polstellen der retardierten Funktion alle in der unteren Halbebene des komplexen  $\omega$ -Raumes liegen, d. h., die Funktion  $(1/\kappa)^R$  ist in der gesamten oberen  $\omega$ -Halbebene analytisch.

Im folgenden wird nun eine Analyse dieser Funktion bzgl. des Verhaltens bei  $\omega \rightarrow -\omega$  durchgeführt, und man erhält das Ergebnis

$$\Re\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, -\omega)}\right)^R = \Re\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^R \quad \text{und} \quad \Im\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, -\omega)}\right)^R = -\Im\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^R$$

bzw.

$$\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, -\omega)}\right)^R = \left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^{R*}. \quad (1.82)$$

Ein Vergleich dieser Beziehung mit Glg. (1.79) ergibt den einfachen Zusammenhang zwischen der retardierten und der zeitgeordneten Funktion:

$$\Re\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, -\omega)}\right)^R = \Re\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^T \quad \text{and} \quad \Im\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, -\omega)}\right)^R = \text{sign}(\omega) \Im\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^T. \quad (1.83)$$

Auch für die retardierte Funktion kann eine Beziehung zwischen der Funktion und ihrem Imaginärteil hergeleitet werden, und zwar [vergleichen Sie mit Glg. (1.80)]

$$\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^R = 1 + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\sigma \Im\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)}\right)^R \left\{ \frac{1}{\sigma - \omega - i\eta} + \frac{1}{\sigma + \omega + i\eta} \right\}. \quad (1.84)$$

Aus dieser Gleichung folgt unmittelbar

$$\Re\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^R = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_0^\infty d\sigma \Im\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)}\right)^R \left\{ \frac{1}{\sigma - \omega} + \frac{1}{\sigma + \omega} \right\}.$$

Dieser Ausdruck kann unter Berücksichtigung von (1.82) in die Form

$$\Re\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)}\right)^R = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^\infty d\sigma \Im\left(\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)}\right)^R \frac{1}{\sigma - \omega}. \quad (1.85)$$

gebracht werden: dieser wichtige Zusammenhang zwischen Real- und Imaginärteil der Funktion  $1/\kappa$  wird *Kramers-Kronig-Relation* genannt.

Ohne Ableitung: Es gibt auch eine zu (1.85) komplementäre Kramers-Kronig-Relation, nämlich

$$\Im \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega)} \right)^R = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma \left[ 1 - \Re \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right)^R \right] \frac{1}{\sigma - \omega}, \quad (1.86)$$

die es erlaubt, den Imaginärteil von  $1/\kappa$  aus dem Realteil dieser Funktion zu berechnen.

Die in diesem Abschnitt behandelten Themen der Theorie der dielektrischen Response sind nicht ganz einfach. Es ist daher sehr zu empfehlen, die umfangreiche einschlägige Literatur zu studieren.

Im folgenden werden einige Aspekte zusammengefaßt:

- Die Aussagen, die oben über die Funktion  $\frac{1}{\kappa} - 1$  gemacht wurden, gelten auch für andere Funktionen, die zur Gruppe der *response functions* gehören, wie z.B. für die Funktion  $\kappa - 1$ , aber auch für die Polarisationsfunktion  $\Pi$  usw.
- Die Tatsache, daß retardierte *response functions* in der oberen  $\omega$ -Halbebene keine Polstellen haben (also dort analytisch sind), sowie die Tatsache, daß Real- und Imaginärteil der retardierten *response functions* über die Kramers-Kronig-Relationen verknüpft sind, **sind Konsequenzen des Kausalitätsprinzips**, gelten also für alle *retardierten* Funktionen.

## 1.8 Die Bedeutung der Gleichung (1.78) für die Anwendung

In diesem Abschnitt soll an Hand eines konkreten Problems die praktische Bedeutung der Relation (1.80) demonstriert werden.

In vielen Rechnungen kommen effektive dynamische Potentiale als Teile von Integrandenfunktionen in  $\omega$ -Integralen vor. Wie Sie wissen, werden solche Integrale oft mit Hilfe des Cauchy'schen Satzes ausgewertet. Dazu müssen die Residuen der Integrandenfunktion in der oberen oder unteren Halbebene des komplexwertigen  $\omega$ -Raumes berechnet werden. Dies ist jedoch wegen der relativ komplizierten Singularitäten der Funktion  $1/\kappa(\mathbf{q}, \omega_1 + i\omega_2)$  nicht ganz einfach. Die Verwendung der Relation (1.80) erleichtert die Arbeit ganz erheblich: die  $\omega$ -Abhängigkeit der inversen dielektrischen Funktion wird durch zwei einfach strukturierte Terme beschrieben; der Preis für diesen Vorteil ist allerdings eine zusätzliche Integration, die jedoch *nur entlang der positiven  $\sigma$ -Achse* erfolgt, und der Integrand, der Imaginärteil von  $1/\kappa$ , ist i.a. eine "well-behaved function" von  $\sigma$  (s. Abb. 1.5), sodaß die  $\sigma$ -Integration meist ohne Probleme numerisch ausgeführt werden kann.

Ich möchte Ihnen diese Zusammenhänge für zwei wichtige Anwendungen der dielektrischen Funktion in der RPA-Näherung klar machen, nämlich (1) für die Berechnung der *Impulsdichte (Impulsverteilung)* und (2) für die Berechnung der Selbstenergie der Elektronen im *jellium*.

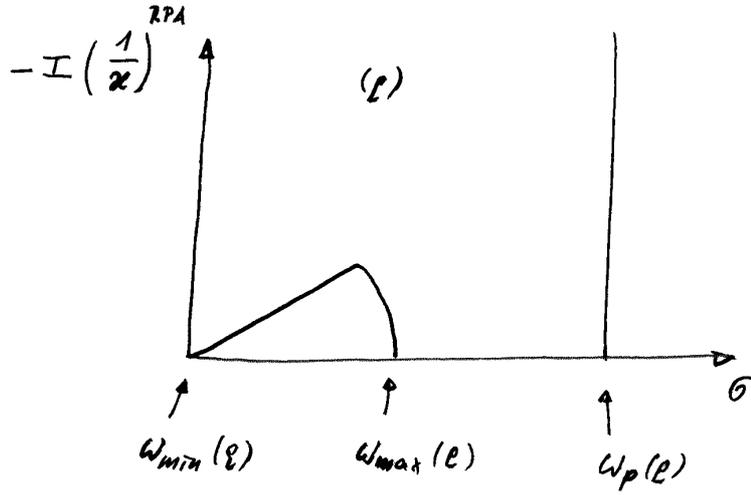


Figure 1.5: Schematische Darstellung des Imaginärteils von  $1/\kappa$  als Funktion von  $\sigma$  (für kleine Impulsweite).

### 1.8.1 Eigenschaften der Funktion $\Im(1/\kappa)$ in der RPA

Wenn man sich die Funktion  $\Im(1/\kappa)$  in der RPA-Näherung<sup>15</sup> für einen festen Wert von  $|\mathbf{q}|$  entlang der reellen, positiven  $\sigma$ -Achse ansieht (s. Abb. 1.5), so erhält man offensichtlich zwei Anteile, nämlich den *continuum part*, der im Bereich  $\omega_{min}(q) \leq \sigma \leq \omega_{max}(q)$  charakterisiert ist, und den *plasmapole part* mit der Eigenschaft  $\Re\kappa = \Im\kappa = 0$ . Schreibt man

$$\kappa(q, \sigma) = \kappa_1(q, \sigma) + i\kappa_2(q, \sigma),$$

wobei die Funktionen  $\kappa_1$  und  $\kappa_2$  in (1.61) und (1.62) angegeben sind, so gilt

$$\Im\left(\frac{1}{\kappa(q, \sigma)}\right) = -\frac{\kappa_2(q, \sigma)}{\kappa_1^2(q, \sigma) + \kappa_2^2(q, \sigma)}. \quad (1.87)$$

Diese Funktion ist in der *continuum region* für reelle  $\sigma$  ohne weiteres auswertbar.

Eine (ungedämpfte) Plasmonen-Nullstelle tritt bekanntlich auf, wenn in einem bestimmten  $\sigma$ -Bereich der Imaginärteil  $\kappa_2$  identisch Null ist und der Realteil  $\kappa_1$  eine Nullstelle hat, also wenn gilt:

$$\kappa_1(q, \omega_p(q)) = 0 \quad \text{und} \quad \kappa_2(q, \sigma) \equiv 0 \quad (\text{Umgebung von } \omega_p).$$

Eine mathematische Formulierung dieses Sachverhaltes kann wie folgt geschehen: man ersetzt  $\kappa_2(q, \sigma) = 0$  durch  $\kappa_2(q, \sigma) = \eta$  mit  $\eta > 0$ , und entwickelt den Realteil an der Nullstelle  $\omega_p(q)$  bis zum linearen Term einer Taylorreihe:

$$\kappa_1(q, \sigma) \approx \underbrace{\kappa_1(q, \omega_p(q))}_{=0} + \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial \sigma} \kappa_1(q, \sigma)\right]_{\omega_p(q)}}_{=\kappa_1'(q)} (\sigma - \omega_p(q)).$$

<sup>15</sup>Da in diesem Abschnitt die dielektrische Funktion stets in der RPA-Näherung verwendet wird, wird im folgenden die Bezeichnung "RPA" weggelassen.

Setzt man diese Entwicklung in (1.87) ein, so erhält man für den Plasmapol-Anteil den Ausdruck

$$\Im \left( \frac{1}{\kappa(q, \sigma)} \right)_P \approx \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{(-\eta)}{[\kappa'_1(q) (\sigma - \omega_p(q))]^2 + \eta^2}.$$

Dieser Grenzwert ist einer der vielen Darstellungsmöglichkeiten der *Dirac-schen Deltafunktion*<sup>16</sup>, und man erhält als näherungsweise Darstellung von  $\Im(1/\kappa)$  im Plasmapol-Bereich

$$\Im \left( \frac{1}{\kappa(q, \sigma)} \right)_P \approx -\frac{\pi}{\kappa'_1(q)} \delta(\sigma - \omega_p(q)). \quad (1.88)$$

Eine Kombination von (1.87) und (1.88) ergibt

$$\Im \left( \frac{1}{\kappa(q, \sigma)} \right) \approx -\underbrace{\left( \frac{\kappa_2(q, \sigma)}{\kappa_1^2(q, \sigma) + \kappa_2^2(q, \sigma)} \right)}_{\omega_{\min}(q) \leq \sigma \leq \omega_{\max}(q)} - \frac{\pi}{\kappa'_1(q)} \delta(\sigma - \omega_p(q)). \quad (1.89)$$

In Erinnerung an die Ausführungen im Kap. 1 wird nochmals darauf hingewiesen, daß der Plasmonenpol nur solange auftritt, solange

$$\omega_{\max}(q) < \omega_p(q)$$

gilt. Der Ausdruck (1.89) wird gewöhnlich verwendet, wenn die Funktion  $\Im(1/\kappa)$  als Teil eines Integranden vorkommt: der *continuum part* macht keine Integrationsprobleme, und auch der deltaförmige Plasmonenpeak ist leicht zu integrieren.

## 1.8.2 Berechnung der Impulsdichte in Jellium

Die Impulsdichte  $n(\mathbf{k})$  ist definiert als der Erwartungswert des *Besetzungszahl-Operators*<sup>17</sup> bzgl. des Grundzustandes des wechselwirkenden Elektronengases *pro Spin-Orientierung*:

$$n(\mathbf{k}) = \langle \Psi_0 | \hat{n}_{\mathbf{k}\alpha} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} | \Psi_0 \rangle. \quad (1.90)$$

Entwickelt man nun die Elektronen-Feldoperatoren für *jellium* auf der Basis ebener Wellen

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} \quad \text{bzw.} \quad \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{\Omega} d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}),$$

kann man die Glg. (1.90) ohne Probleme in die Form

$$n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega} \int \int d^3r d^3r' e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \langle \Psi_0 | \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle. \quad (1.91)$$

Diese Gleichung erinnert an die Definitionsgleichung einer Greenschen Funktion (1.1) unter der Bedingung  $t' > t$ :

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

<sup>16</sup>s. z.B.: Schubert, Weber, *Quantentheorie*, Spektrum-Verlag 1993, S. 587.

<sup>17</sup>Definition s. TF, Abschnitt 8.1.

Durch korrekte Grenzwertbildung im Zeitraum erhält man daraus

$$\langle \Psi_0 | \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle = -i \lim_{(t'-t) \rightarrow 0^+} G_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t').$$

Verwendet man diese Beziehung in der Gleichung (1.91), so findet man

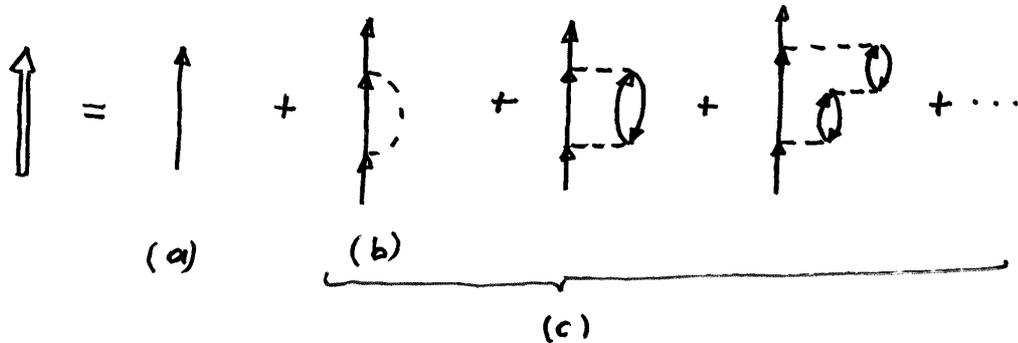
$$n(\mathbf{k}) = -\frac{i}{\Omega} \lim_{(t'-t) \rightarrow 0^+} \int \int d^3r d^3r' e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} G(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t'),$$

bzw. unter Verwendung der Fourier-Transformation für die Greenfunktion

$$n(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{+i\omega\eta} G(\mathbf{k}, \omega). \quad (1.92)$$

### Auswertung dieser Gleichung:

Wir wollen nun in die Gleichung (1.92) verschiedene einfache Näherungen bzw. Entwicklungsterme für die wechselwirkende Greenfunktion einsetzen. All diese Näherungen wurden im Kapitel 1 ausführlich diskutiert. Es sind dies die Approximationen



Ersetzt man als einfachste Approximation die Greenfunktion in (1.92) durch die wechselwirkungsfreie Greenfunktion  $G^0$  (1.22), so ergibt sich

$$\begin{aligned} n^a(\mathbf{k}) &= -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega\eta} \left[ \frac{\Theta(k_F - k)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 - i\eta} + \frac{\Theta(k - k_F)}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 + i\eta} \right] \\ &= -\frac{i}{2\pi} (2i\pi) \Theta(k_F - k) = 2\Theta(k_F - k). \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis entspricht ganz den Erwartungen: im wechselwirkungsfreien *jellium* (Sommerfeld-Modell) haben die Elektronen genau die Impulsverteilung gemäß der Fermi-Dirac-Statistik für  $T \rightarrow 0$  (s. Abb. 1.6 a).

Erweitert man nun die Rechnung um den einfachsten (virtuellen) Wechselwirkungsterm (b), so erhält man für den entsprechenden Beitrag zur Impulsdichte

$$\begin{aligned} n^b(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{\hbar(2\pi)^5} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [G^0(\mathbf{k}\omega)]^2 \int d^3q V(\mathbf{q}) \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 e^{-i\omega_1\eta} \left[ \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 + i\eta} + \frac{\Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} \right] \\ &= \frac{i}{\hbar(2\pi)^4} \int d^3q V(\mathbf{q}) \Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [G^0(\mathbf{k}\omega)]^2}_{=0} = 0. \end{aligned}$$

Das Integral über das Quadrat von  $G^0$  ist deshalb Null, weil diese Funktion aus zwei Termen besteht, von denen der erste einen Pol zweiter Ordnung in der oberen  $\omega$ -Halbebene (HE) hat, der zweite hingegen einen Pol zweiter Ordnung in der unteren HE. Da für Pole höherer als erster Ordnung das Jordan'sche Konvergenzprinzip nicht gilt, kann man den Integrationsbereich wählen wo man will: nimmt man nun für jeden Term von  $[G^0]^2$  jene HE, in der gerade kein Pol liegt, so erhält man als Integrationsergebnis natürlich Null.

Physikalisch ist dieses Ergebnis leicht zu verstehen: virtuelle Wechselwirkungen, die keine "echten" Streuprozesse von Elektronen beschreiben, bei welchen Teilchen aus dem Fermisee hinausgestreut werden, ändern natürlich nichts an der Impulsverteilung (s. Abb. 1.6 b).

Die Einbeziehung "echter" Streuprozesse kann durch die Berücksichtigung effektiver, dynamischer Wechselwirkungspotentiale (c) geschehen:

$$n^c(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\hbar(2\pi)^5} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [G^0(\mathbf{k}\omega)]^2 \int d^3q V(\mathbf{q}) \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 e^{-i\omega_1\eta} \left[ \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 + i\eta} + \frac{\Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} \right] \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \omega_1)}.$$

Offensichtlich schafft das Polverhalten von  $1/\kappa$  eine völlig neue Situation. Man sieht aber auch sofort, daß *jede statische Näherung für  $\kappa$  wieder zum Ergebnis Null führt*. Es ist also die durch die Frequenzabhängigkeit von  $\kappa$  eingeführte Dynamik, die eine Änderung des Integralverhaltens mit sich bringt.

Setzt man nun in die obige Gleichung die Integralrelation (1.80) ein, so ergibt sich

$$n^c(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi\hbar(2\pi)^5} \int d^3q V(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [G^0(\mathbf{k}\omega)]^2 \int_0^\infty d\sigma \Im \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right) \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 \left[ \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 + i\eta} + \frac{\Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} \right] \cdot \left[ -\frac{1}{\omega_1 - \sigma + i\eta} + \frac{1}{\omega_1 + \sigma - i\eta} \right]$$

mit  $V(\mathbf{q})$  als der  $\mathbf{q}$ -ten Fourierkomponente des "nackten" Coulomb-Potentials. Das  $\omega_1$ -Integral ergibt den Ausdruck

$$(-2i\pi) \left[ \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\omega + \sigma - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} + \frac{\Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\omega - \sigma - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 + i\eta} \right],$$

was zu

$$n^c(\mathbf{k}) = \frac{i}{\pi\hbar(2\pi)^4} \int d^3q V(\mathbf{q}) \int_0^\infty d\sigma \Im \left( \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right) \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[ \frac{\Theta(k_F - k)}{(\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 - i\eta)^2} + \frac{\Theta(k - k_F)}{(\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 + i\eta)^2} \right] \cdot \left[ \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\omega + \sigma - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} + \frac{\Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\omega - \sigma - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 + i\eta} \right]$$

führt.

Rechnet man nun auch das  $\omega$ -Integral analytisch aus, so ergibt sich, wenn man zusätzlich berücksichtigt, daß die Impulsdichte  $n(\mathbf{k})$  eine reellwertige Größe ist, das Endergebnis

$$n^c(\mathbf{k}) = \frac{1}{\pi\hbar(2\pi)^3} P \int d^3q V(\mathbf{q}) \int_0^\infty d\sigma \Im \left( -\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right) \\ \times \left[ -\Theta(k_F - k) \frac{\Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{(\sigma + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - \omega_{\mathbf{k}}^0)^2} + \Theta(k - k_F) \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{(\sigma - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 + \omega_{\mathbf{k}}^0)^2} \right]. \quad (1.93)$$

Wegen der Tatsache, daß in der obigen Gleichung die Integrandenfunktionen

$$V(\mathbf{q}) \Im \left( -\frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right) \frac{1}{(\sigma \pm \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 \mp \omega_{\mathbf{k}}^0)^2}$$

*positiv definit* sind, muß der erste Term von  $n^c$  (für  $k \leq k_F$ ) negativ und der zweite Term (für  $k \geq k_F$ ) positiv sein! Dies entspricht völlig dem physikalischen Bild: durch Streuprozesse aus dem Fermisee hinaus wird die Impulsdichte der Elektronen unterhalb von  $k_F$  vermindert. Dafür tritt über der Fermigrenze eine von Null verschiedene Impulsdichte auf (s. Abb. 1.6 c). Für eine konkrete Auswertung von (1.93) in der RPA setzt man (1.89) in die Gleichung für  $n^c(\mathbf{k})$  ein.

Diese Rechnung haben als erste Daniel und Vosko (1960) durchgeführt. Das Ergebnis dieser Arbeit ist in der Abb. 1.6 d zusammengefaßt. Abschließend soll darauf hingewiesen werden, daß diese Veränderung der Impulsverteilung von Elektronen absolut keine Ähnlichkeit mit der bekannten *Abschmierung der Fermikante* bei Temperaturen  $T > 0$  hat! In diesem Fall geht die *step function* für jede endliche Temperatur in eine stetige Funktion von  $k$  über, während im Fall der Daniel-Vosko-Rechnung die Unstetigkeit von  $n(k)$  für  $k = k_F$  erhalten bleibt!

Eine neuere Berechnung der Impulsverteilung in *jellium* für einige Werte von  $r_s$  von Bektas und Sormann (1998) finden Sie in der Abb. 1.7.

Eine wichtige Kenngröße für den Einfluß von Elektron-Elektron-Korrelationen im Elektronengas stellt die Diskontinuität von  $n(\mathbf{k})$  auf der Fermifläche dar. Diese Größe heißt  $Z(k_F)$  und ist im Fall der homogenen Elektronengases eine eindeutige Funktion der Elektronendichte  $n_0$  (und damit auch der Parameter  $k_F$  und  $r_s$ ). Weil nun die Korrelationseffekte mit steigendem  $r_s$  zunehmen, ist  $Z(k_F)$  eine monoton fallende Kurve, wie Sie aus der Abb. 1.8 ersehen können.

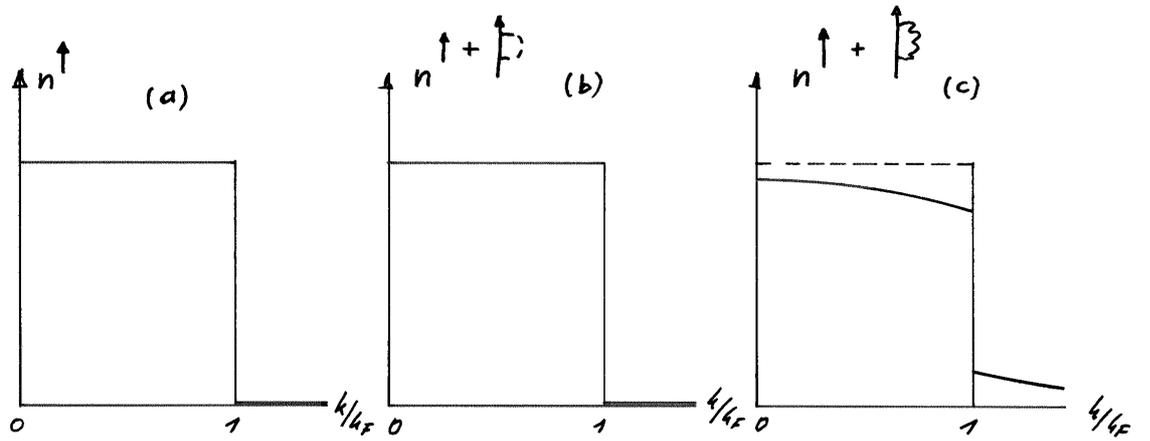


Abbildung 0.1: Impulsdichteverteilung von Elektronen im *jellium*.

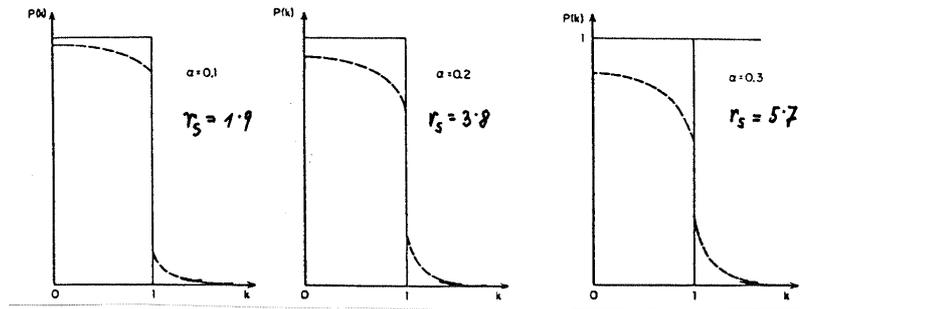


Abbildung 0.2: Impulsdichteverteilung von Elektronen im *jellium* nach Daniel und Vosko.

Figure 1.6: (a-c): Impulsdichteverteilung von Elektronen in jellium (Daniel and Vosko, 1960).

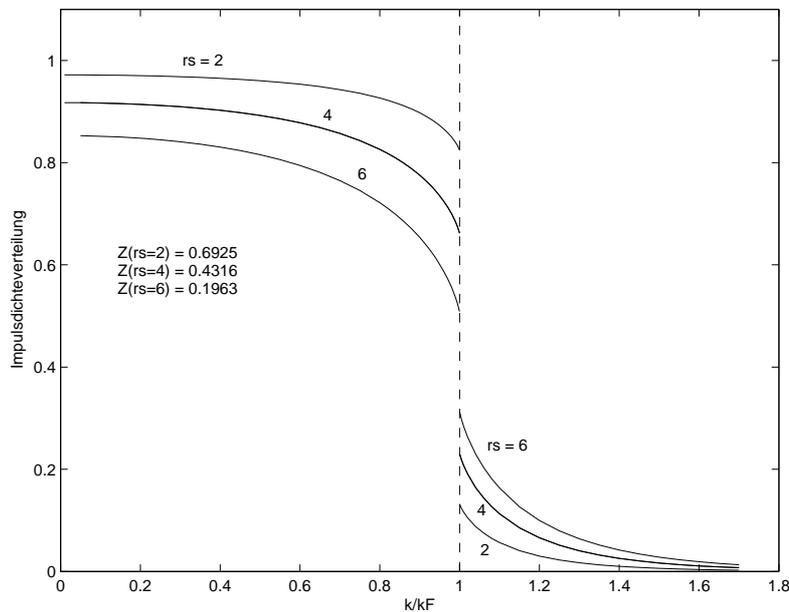


Figure 1.7: Impulsdichteverteilung von Elektronen in jellium (Bektas and Sormann, 1998).

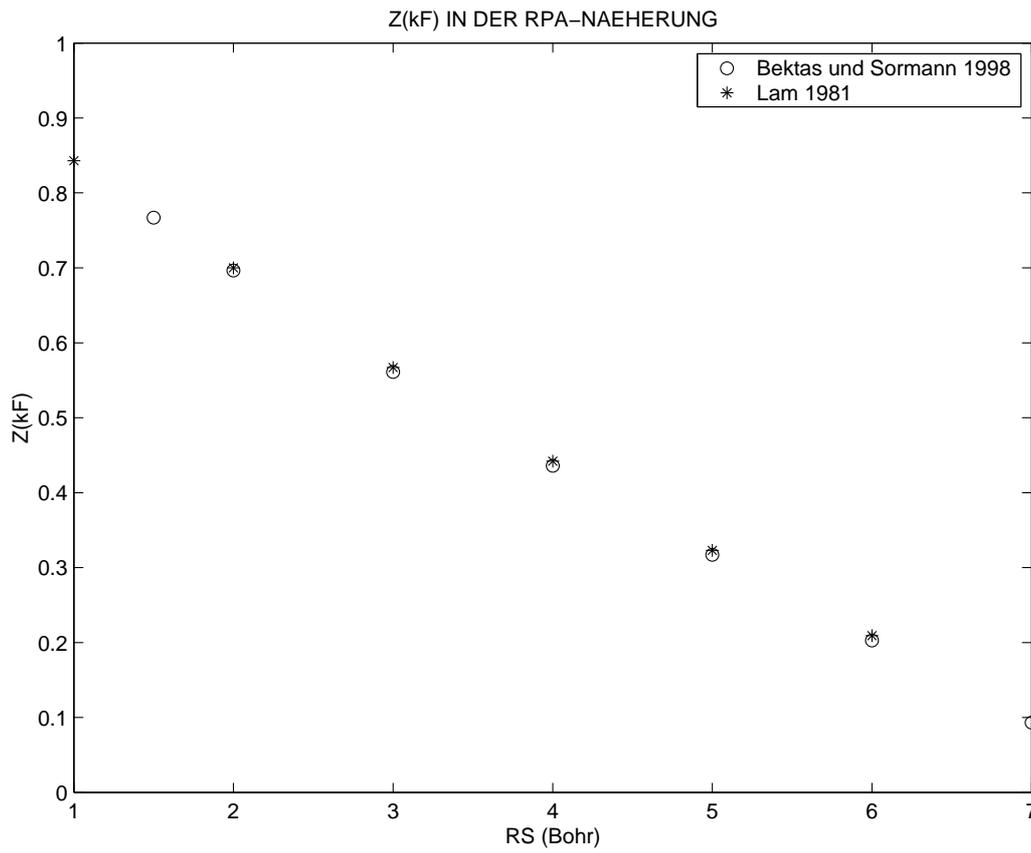


Figure 1.8:  $Z(k_F)$  als Funktion von  $r_s$  in der RP-Näherung. Ergebnisse von Lam (1981) und von Bektas und Sormann (1998).

### 1.8.3 Die RPA-Selbstenergie in Jellium

Auf der Seite 32 dieses Skriptums finden Sie die Formel für die Selbstenergie des homogenen Elektronengases in der *random phase approximation* [Glg. (1.75)]:<sup>18</sup>

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

Die Auswertung dieses Ausdrucks kann nun in ganz ähnlicher Weise geschehen wie die Berechnung der Impulsdichte in Abschnitt 1.9.2. Hier folgen nur die wichtigsten Rechenschritte:

1. Einsetzen der Gleichung (1.80) für die Inverse der dielektrischen Funktion führt zu

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^{(RPA)}(\mathbf{k}, \omega) = & \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^3q V(\mathbf{q}) \int d\omega_1 e^{i(\omega-\omega_1)\eta} G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1) + \\ & + \frac{i}{\pi(2\pi)^4} \int d^3q V(\mathbf{q}) \int_0^\infty d\sigma \left( \Im \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right) \\ & \times \int d\omega_1 e^{i(\omega-\omega_1)\eta} \left( \frac{1}{\omega_1 + \sigma - i\eta} - \frac{1}{\omega_1 - \sigma + i\eta} \right) G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1). \end{aligned}$$

Der erste der beiden Terme ist die schon wohlbekannt und diskutierte Hartree-Fock-Näherung der Selbstenergie (s. Abschnitt 1.3, Glg. (1.37) sowie Abschnitt 1.4, Glg. (1.43) und folgende); der zweite Term beschreibt den Einfluß der Elektron-Elektron-Korrelation auf diese Größe: um diesen Term geht es im folgenden.

2. Wie bereits erläutert, liegt der Vorteil dieser Vorgangsweise darin, daß die Integration über  $\omega_1$  ohne Schwierigkeit analytisch erledigt werden kann. Das Integral lautet

$$\begin{aligned} & - \int d\omega_1 e^{i(\omega-\omega_1)\eta} \left( \frac{1}{\omega_1 + \sigma - i\eta} - \frac{1}{\omega_1 - \sigma + i\eta} \right) \\ & \times \left( \frac{\Theta(|\mathbf{k}-\mathbf{q}| - k_F)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} + \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k}-\mathbf{q}|)}{\omega_1 - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 + i\eta} \right). \end{aligned}$$

Die Rechnung selbst verläuft sehr ähnlich der Integration im Appendix 2 und muß hier nicht nochmals im Detail gezeigt werden. Das Ergebnis lautet

$$2\pi i \left( \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k}-\mathbf{q}|)}{\sigma + \omega - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} - \frac{\Theta(|\mathbf{k}-\mathbf{q}| - k_F)}{\sigma - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} \right),$$

was insgesamt zum Ausdruck

---

<sup>18</sup>In diesen und in den folgenden Kapiteln ist mit "Selbstenergie" immer die *irredizable (proper)* Selbstenergie gemeint.

$$\begin{aligned} \hbar\Sigma^{(RPA-corr)}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{-1}{\pi(2\pi)^3} \int d^3q V(\mathbf{q}) \\ \times \int_0^\infty d\sigma \left( \Im \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right) &\left( \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\sigma + \omega - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} - \frac{\Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\sigma - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0 - i\eta} \right) \end{aligned} \quad (1.94)$$

führt.

3. Nun folgt auf die übliche Weise die Aufspaltung des Ergebnisses in seinen Real- und Imaginärteil:

$$\begin{aligned} \Re \left\{ \hbar\Sigma^{(RPA-corr)}(\mathbf{k}, \omega) \right\} &= \frac{-1}{\pi(2\pi)^3} P \int d^3q V(\mathbf{q}) \\ \times \int_0^\infty d\sigma \left( \Im \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right) &\left( \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\sigma + \omega - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0} - \frac{\Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\sigma - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0} \right) \end{aligned} \quad (1.95)$$

$$\begin{aligned} \Im \left\{ \hbar\Sigma^{(RPA-corr)}(\mathbf{k}, \omega) \right\} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q V(\mathbf{q}) \\ \times \int_0^\infty d\sigma \left( \Im \frac{1}{\kappa(\mathbf{q}, \sigma)} \right) &\left[ \Theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F) \delta(\sigma - \omega + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0) - \right. \\ &\left. - \Theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|) \delta(\sigma + \omega - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^0) \right] \end{aligned} \quad (1.96)$$

4. Als letzter Schritt wird nun in die Glgen. (1.95) und (1.96) für die Inverse der dielektrischen Funktion in der RPA der Ausdruck (1.89) eingesetzt und dadurch eine Aufspaltung in einen *electron-hole*-Teil und in einen Plasmonen-Teil durchgeführt.

Es folgen nun einige konkrete Ergebnisse: in der Abb. 1.9 (oben) sehen Sie den Realteil des Korrelations-Anteils der RPA-Selbstenergie eines homogenen Elektronengases für  $r_s=4$  Bohr und für  $k = k_F$  (also auf der Oberfläche der Fermikugel) als Funktion von  $\omega$ . Wie Sie sehen, wird die Struktur der Kurve hauptsächlich durch den *Plasmonen*-Beitrag gebildet, während der *electron-hole*-Anteil in diesem  $k$ -Bereich eine nur geringe Bedeutung hat.

Wie Sie wissen, besteht die große Bedeutung des Realteils der Selbstenergiefunktion darin, daß sie es ermöglicht, die Anregungsenergien der Quasiteilchen als Funktion von deren Wellenzahl zu berechnen. Dies geschieht, wie bereits im Abschnitt 1.4 ausgeführt, durch die iterative Lösung der Gleichung

$$\epsilon_k = \epsilon_k^0 + \hbar \Re \Sigma(k, \epsilon_k/\hbar) \quad \text{mit} \quad \epsilon_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

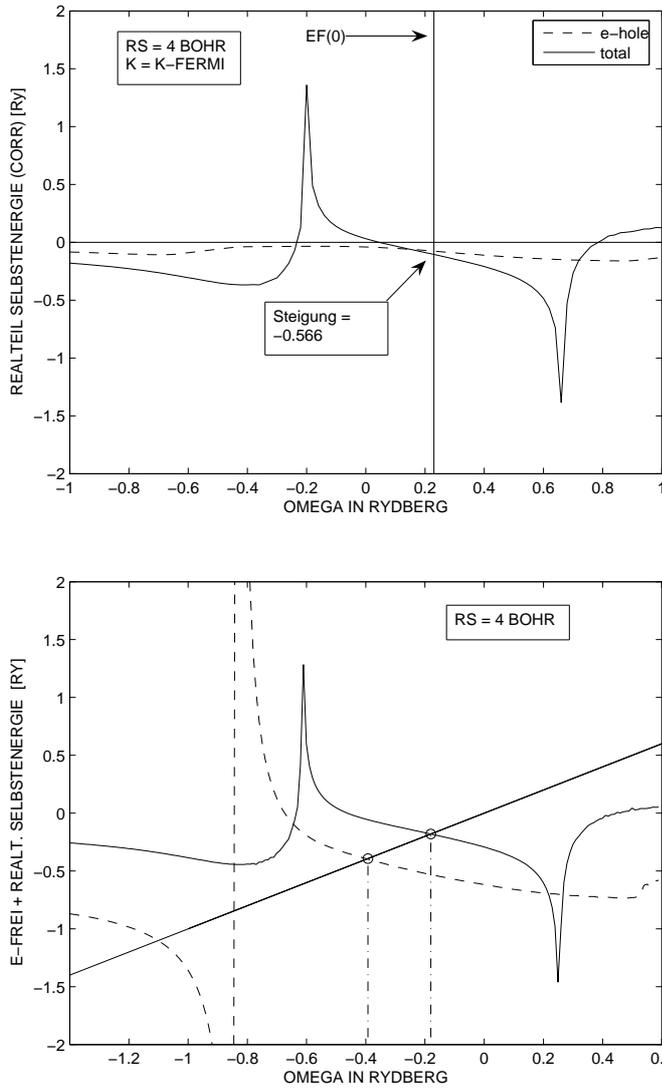


Figure 1.9: (oben) Realteil des Korrelationsanteils der RPA-Selbstenergiefunktion eines homogenen Elektronengases ( $r_s=4$  Bohr) für  $k = k_F$  als Funktion von  $\omega$ .  $\hbar\Sigma$  und  $\hbar\omega$  sind in Einheiten Rydberg angegeben. Die volle Kurve gibt die gesamte Selbstenergie, die strichlierte Kurve zeigt den Anteil des *electron-hole scattering*. Zur Bedeutung der ersten Ableitung der Funktion an der Stelle  $\omega = \omega_F^0$  siehe Abschnitt 1.8.4. (unten) Diese Abbildung zeigt die Summe aus der freien Elektronen-Energie plus der gesamten RPA-Selbstenergie (also inklusive dem Austausch-Anteil) für  $k = 0$  (strichlierte Kurve) sowie für  $k = k_F$  (volle Kurve). Wie im Text erläutert, ergeben sich die entsprechenden Eigenenergien der Elektronen aus den Schnittpunkten dieser Kurven mit der Geraden  $\omega = \epsilon$ . Der Abstand zwischen beiden Schnittpunkten (im obigen Bild durch die strich-punktierten Geraden angezeigt) stellt die Bandbreite der besetzten Elektronenzustände dar; sie beträgt im konkreten Fall 0.2124 Rydberg. Beachten Sie, daß die Selbstenergiekurven gegenüber der Abb. darüber um ca. 0.4 Ry nach links verschoben ist. Die Begründung dafür finden Sie im Abschnitt 1.8.4 "Impulsdichte und Selbstenergie".

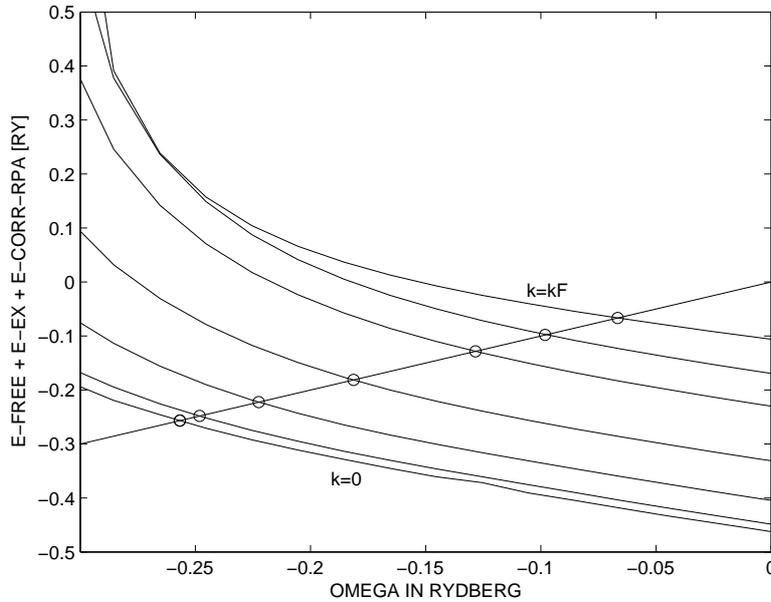


Figure 1.10: Dargestellt sind Kurven  $\epsilon_k^0 + \hbar\Sigma^{ex}(k) + \hbar\Re\Sigma^{corr}(k, \omega)$  für (von unten nach oben) die Wellenzahlen  $k/k_F=0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9$  und  $1.0$ . Die Rechnungen wurden für den Parameter  $r_s = 3.9405$  Bohr durchgeführt, was der Valenzelektronendichte im Natrium-Metall entspricht. Die Lösung der Glg. (1.97) bedeutet grafisch die Ermittlung der Schnittpunkte dieser Energiekurven mit der Geraden  $\epsilon = \hbar\omega$ .

Eine solche Rechnung wird im folgenden dargestellt, und zwar für ein homogenes Elektronengas mit einer Dichte, welche der Valenzelektronendichte im Natrium-Metall entspricht. Dazu wird die Gleichung

$$\epsilon_k = \epsilon_k^0 + \hbar\Sigma^{ex}(k) + \hbar\Re\Sigma^{corr}(k, \epsilon_k/\hbar) \quad (1.97)$$

für verschiedene Werte von  $k$  numerisch gelöst (s. Abb. 1.10). Die entsprechende  $\epsilon(k)$ -Dispersion (Bandkurve) ist zusammen mit anderen Ergebnissen in der Abb. 1.11 dargestellt.

### Diskussion der Abb. 1.11

Wie für ein typisches *jellium-Metall* wie Natrium nicht anders zu erwarten ist, paßt die Dispersionsrelation für freie Elektronen sehr gut zu dem LAPW-Bandstruktur-Ergebnis. Interessanterweise zeigen aber experimentelle Daten (wie z.B. von Lyo und Plummer, 1988) eine deutlich (um etwa 17 Prozent) geringere Bandbreite für das Na-Valenzband als die auf LDA beruhenden Bandstruktur-Rechnungen.

Eine Erweiterung der Theorie in Richtung Fock'scher Austausch-Wechselwirkung bringt keine Verbesserung, sondern im Gegenteil eine massive Verschlechterung der Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. Erst die Einbeziehung von RPA-Korrelationseffekten durch

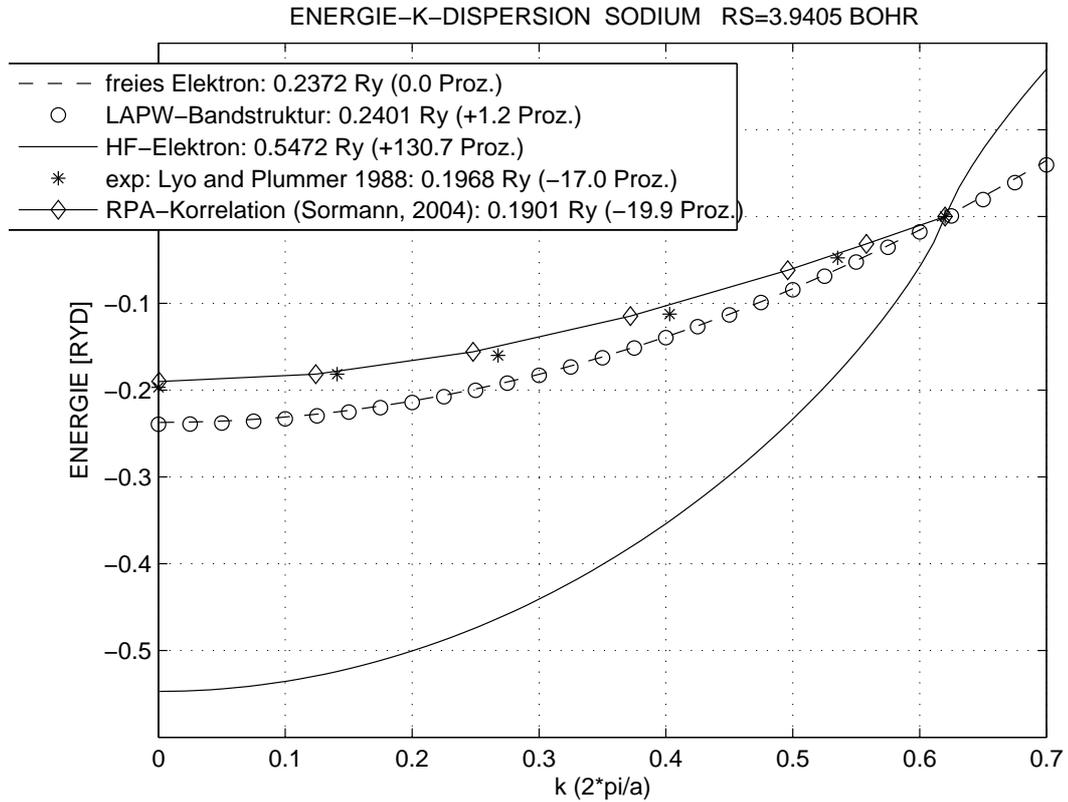


Figure 1.11: In dieser Abbildung sind verschiedene Dispersionsrelationen  $\epsilon(k)$  für ein Elektronengas mit der Valenzelektronendichte im Natrium-Metall ( $r_s = 3.9405$  Bohr) dargestellt (s. Diskussion im Text). Zum Unterschied zu den vorherigen Abbildungen ist hier die Wellenzahl  $k$  nicht in Einheiten  $k_F$ , sondern in Einheiten  $2\pi/a$  angegeben, wobei  $a$  die Gitterkonstante des Natrium-Kristalls von 8.003 Bohr bedeutet.

Berücksichtigung der dynamischen RPA-Selbstenergie macht die theoretischen Resultate wieder realistisch: die massiven Fehler durch die Austausch-Wechselwirkung werden kompensiert, ja sogar überkompensiert, was zu einer deutlichen Verringerung der Bandbreite gegenüber dem LDA-Bandstruktur-Ergebnis führt. Dieses theoretisch ermittelte *narrowing* des Na-Valenzbandes passt recht gut zu den experimentellen Ergebnissen.

### 1.8.4 Impulsdichte und Selbstenergie

Die Glg. (1.108) gibt den Zusammenhang zwischen der Impulsdichte (pro Spin) im Elektronengas und der Elektronen-Greenfunktion in der Form

$$n(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{+i\omega\eta} G(\mathbf{k}, \omega).$$

Im Abschnitt 1.8.2 wurde diese Beziehung für die drei Entwicklungsterme (a), (b) und (c) der Greenfunktion ausgewertet.

Im Abschnitt 1.3 des Skriptums wurde aber gezeigt, daß man mittels der (proper) Selbstenergie des Elektronengases noch umfassendere Näherungen für  $G$  erhalten kann, wobei der Ausdruck (1.36)

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{[G^0(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)} \quad (1.98)$$

gilt. Eine Kombination der obigen Gleichungen unter Berücksichtigung von  $[G^0(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} = \omega - \omega_{\mathbf{k}}^0$  ergibt

$$n(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{+i\omega\eta}}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}^0 - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (1.99)$$

Dieses Skriptum soll Ihnen ein Einführung in die modernen theoretischen Methoden der Elektronentheorie in Festkörpern bieten, und es ist dabei nicht nötig (und manchmal sogar hinderlich), auf alle Nuancen der entsprechenden Rechnungen einzugehen. Dennoch möchte ich hier auf ein Detail der Theorie eingehen, welches für das Verständnis der einschlägigen Publikationen von Bedeutung ist:

Wie Sie aus der Gleichung (1.98) erkennen, definiert die Selbstenergie  $\Sigma$  eine neue, realistischere Greenfunktion. Da aber die Funktion  $\Sigma$  ihrerseits die Greenfunktion enthält, ist es natürlich naheliegend, den Ausdruck (1.98) als *iterativen Prozess* zu verstehen, d.h. die "verbesserte" Funktion  $G$  zur neuerlichen Berechnung von  $\Sigma$  zu verwenden usw. So gesehen, stellt (1.99) nur den ersten Schritt dieses iterativen Prozesses dar.

Nun ergibt sich aber das folgende Problem: setzt man die erste iterative Verbesserung der Greenfunktion in die Impulsdichten-Gleichung ein, so haben die Funktionen  $G$  und  $\Sigma$  *nicht dasselbe Qualitäts-Niveau*, weil ja  $\Sigma$  mittels der freien Greenfunktion  $G^0$  berechnet wurde. Um dieses Problem zu vermindern, wird nun die im Ausdruck (1.99) verwendete Selbstenergiefunktion bzgl. der  $\omega$ -Achse horizontal verschoben, und zwar um die Differenz der

Fermienergien des *wechselwirkenden* und des *freien* Elektronengases<sup>19</sup>:

$$\Delta \equiv \omega_F - \omega_F^0. \quad (1.100)$$

Anstelle der Gleichung (1.99) wird also der Ausdruck

$$n(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{+i\omega\eta}}{\omega - \omega_k^0 - \Sigma(\mathbf{k}, \omega - \Delta)} \quad (1.101)$$

ausgewertet (Anmerkung: die Limesbildung  $\eta \rightarrow 0^+$  wird im folgenden nicht mehr explizite hingeschrieben.).

Wie Sie wissen, spielen für die Auswertung des  $\omega$ -Integrals mittels der Cauchy'schen Formel die Polstellen der Greenfunktion in der komplexwertigen  $\omega$ -Ebene eine entscheidende Rolle, d. h. die Lösungen der Gleichung

$$\omega - \omega_k^0 - \Re\Sigma(k, \omega - \Delta) - i\Im\Sigma(k, \omega - \Delta) = 0. \quad (1.102)$$

Wie ebenfalls bereits erläutert, beschreiben die reellen Lösungen der Gleichung

$$\omega - \omega_k^0 - \Re\Sigma(k, \omega - \Delta) = 0 \quad (1.103)$$

die Anregungsenergien  $\omega_k$  der Elektronen, und die entsprechenden Funktionswerte des Imaginärteils der *shifted selfenergy function* sind die inversen Lebensdauern dieser Quasiteilchen:

$$\frac{1}{\tau_k} = |\Im\Sigma(k, \omega_k - \Delta)|. \quad (1.104)$$

Für  $\omega = \omega_F$  ergibt sich aus Glg. (1.103) unmittelbar

$$\Delta = \omega_F - \omega_F^0 = \Re\Sigma(k_F, \omega_F^0). \quad (1.105)$$

Für die weitere Rechnung wird nun im Nennerausdruck von Glg. (1.101) der Realteil der Selbstenergie an der Stelle  $\omega = \omega_k$  in eine Taylorreihe entwickelt, die nach dem linearen Term in  $\omega$  abgebrochen wird:

$$\Re\Sigma(k, \omega - \Delta) \approx \Re\Sigma(k, \omega_k - \Delta) + \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} \Re\Sigma(k, \omega) \right]_{\omega=\omega_k-\Delta} (\omega - \omega_k).$$

Setzt man diese Entwicklung in den Nenner in Glg. (1.101) ein, erhält man

$$\omega - \omega_k^0 - \Re\Sigma(k, \omega_k - \Delta) - \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} \Re\Sigma(k, \omega) \right]_{\omega=\omega_k-\Delta} (\omega - \omega_k) - i\Im\Sigma(k, \omega - \Delta)$$

bzw.

$$\underbrace{\{\omega_k - \omega_k^0 - \Re\Sigma(k, \omega_k - \Delta)\}}_{=0} + (\omega - \omega_k) \left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} \Re\Sigma(k, \omega) \right]_{\omega=\omega_k-\Delta} \right\} - i\Im\Sigma(k, \omega - \Delta).$$

<sup>19</sup>zu dieser *shifted selfenergy function* s. z.B. von Barth and Holm, PRB **54**, 8411 (1996).

Dies in die Glg. (1.101) für die Impulsdichte eingesetzt, ergibt

$$n(\mathbf{k}) \approx -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{+i\omega\eta}}{(\omega - \omega_k) \left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial\omega} \Re\Sigma(k, \omega) \right]_{\omega=\omega_k-\Delta} \right\} - i\Im\Sigma(k, \omega - \Delta)}$$

bzw.

$$n(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{+i\omega\eta} \left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial\omega} \Re\Sigma(k, \omega) \right]_{\omega=\omega_k-\Delta} \right\}^{-1}}{\omega - \omega_k - i\Im\tilde{\Sigma}(k, \omega - \Delta)} + F(k), \quad (1.106)$$

wobei der Term  $F(k)$  eine Korrektur für die Näherung ist, die man bei der Linearisierung der Taylorreihe für  $\Re\Sigma$  machte.

Wir wollen uns im folgenden nicht mit der Impulsverteilung der Elektronen im gesamten  $k$ -Bereich, sondern speziell mit der Diskontinuität der Impulsverteilung für  $k = k_F$  beschäftigen. Für  $k$ -Werte nahe dem Fermi-Impuls läßt sich die obige Gleichung in der Form

$$n(k_F) = -\frac{i}{2\pi} \lim_{k \rightarrow k_F} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{+i\omega\eta} \left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial\omega} \Re\Sigma(k_F, \omega) \right]_{\omega=\omega_F-\Delta} \right\}^{-1}}{\omega - \omega_k - i\Im\tilde{\Sigma}(k, \omega - \Delta)} + F(k_F) \quad (1.107)$$

schreiben. Für den Abschluß dieser Rechnung spielt nun der Imaginärteil der Selbstenergie die Hauptrolle: er entscheidet nämlich darüber, in welcher Halbebene der komplexen  $\omega$ -Ebene sich ein Pol befindet.

Was nun die Funktion  $\Im\Sigma(k, \omega)$  betrifft, gibt es die wichtige allgemeine Aussage von Luttinger (1961)

$$\lim_{\omega \rightarrow \omega_F} \Im\Sigma(\mathbf{k}, \omega - \Delta) = -|C_k| \operatorname{sgn}(\omega - \omega_F) (\omega - \omega_F)^2, \quad (1.108)$$

wobei  $C_k$  eine reelle Größe ist. Dies besagt, daß für die durch  $\Sigma$  repräsentierte Wechselwirkung die Polstelle an der Stelle  $\omega_F$  aus der oberen in die untere  $\omega$ -Halbebene wechselt. Dieses allgemeine Verhalten der Funktion  $\Im\Sigma$  wird am Beispiel der RP-Approximation in den Abbildungen 1.12 und 1.13 dokumentiert und erläutert.

Setzt man die Formel von Luttinger (1.108) in die Gleichung (1.107) ein, ergibt sich

$$n(k_F) = -\frac{i}{2\pi} \lim_{k \rightarrow k_F} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{+i\omega\eta} \left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial\omega} \Re\Sigma(k_F, \omega) \right]_{\omega=\omega_F-\Delta} \right\}^{-1}}{\omega - \omega_k + i|\tilde{C}_k| \operatorname{sgn}(\omega - \omega_F) (\omega - \omega_F)^2} + F(k).$$

Abschließend soll noch berücksichtigt werden, daß das Vorzeichen des Imaginärteils speziell in der Umgebung des reellen Nullstellen-Teils  $\omega = \omega_k$  interessant ist; man ersetzt demnach in der obigen Gleichung im Imaginärteil  $\omega$  durch  $\omega_k$  und erhält den Ausdruck

$$n(k_F) = -\frac{i}{2\pi} \lim_{k \rightarrow k_F} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{+i\omega\eta} \left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial\omega} \Re\Sigma(k_F, \omega) \right]_{\omega=\omega_F-\Delta} \right\}^{-1}}{\omega - \omega_k + i|\tilde{C}_k| \operatorname{sgn}(\omega_k - \omega_F) (\omega_k - \omega_F)^2} + F(k). \quad (1.109)$$

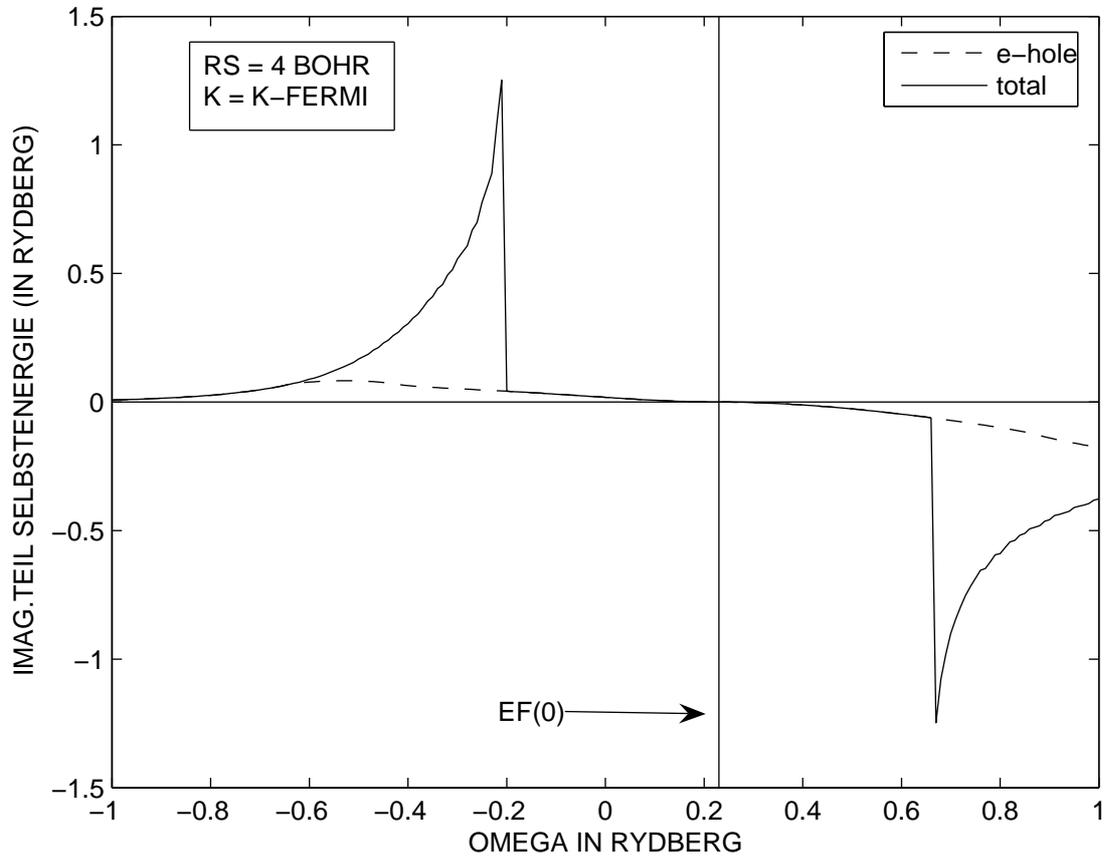


Figure 1.12: Imaginärteil der RPA-Selbstenergiefunktion eines homogenen Elektronengases ( $r_s=4$  Bohr) für  $k = k_F$  als Funktion von  $\omega$ . Die volle Kurve gibt die gesamte Selbstenergie, die strichlierte Kurve zeigt den Anteil des *electron-hole scattering*. Beachten Sie, daß wie beim Realteil die Gesamtkurve hauptsächlich vom *Plasmonen*-Beitrag gebildet wird, allerdings mit Ausnahme des  $\hbar\omega$ -Bereichs um die Fermi-Energie  $\epsilon_F^0 = \hbar\omega_F^0$ : dort ist der Plasmonen-Anteil exakt Null, und die  $\Sigma$ -Kurve wird allein durch deren *electron-hole*-Anteil bestimmt.

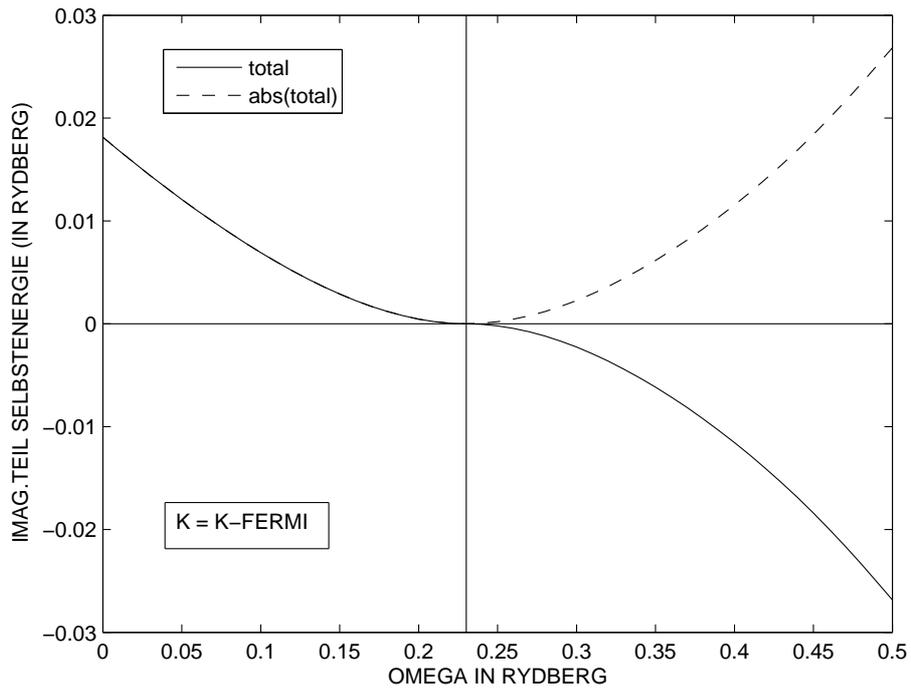
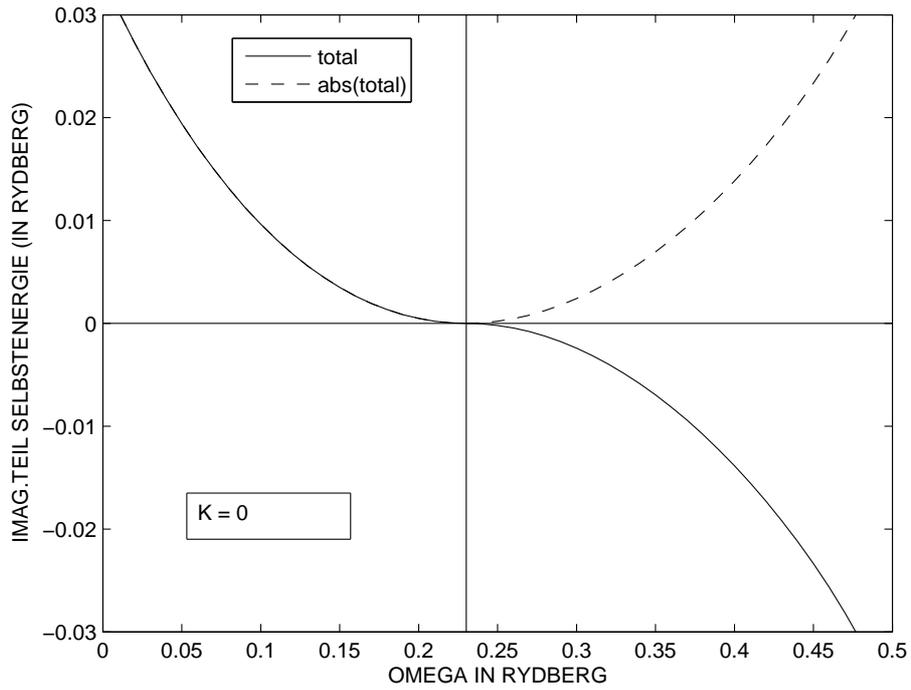


Figure 1.13: Imaginärteil der RPA-Selbstenergiefunktion im Bereich  $\hbar\omega \approx \hbar\omega_F$  für (oben)  $k = 0$  und (unten)  $k = k_F$ . Die Erfüllung der Luttinger-Beziehung (1.105) ist in beiden Fällen evident.

Beachten Sie nun, daß bei einer Annäherung an  $k_F$  "von links" (also für  $k < k_F$  und demnach  $\omega_k < \omega_F$ ) ein Pol in der oberen  $\omega$ -Halbebene auftritt, bei einer Annäherung "von rechts" in der unteren Halbebene. Nun erzwingt aber bei der Auswertung des  $\omega$ -Integrals in Glg. (1.109) der Faktor  $e^{+i\omega\eta}$  eine Integration in der oberen Halbebene, wobei das Residuum der zu integrierenden Funktion

$$\left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} \Re \Sigma(k_F, \omega) \right]_{\omega_F - \Delta} \right\}^{-1}$$

lautet. Man erhält daher das wichtige Ergebnis

$$\lim_{k \rightarrow k_F} n(k < k_F) = -\frac{i}{2\pi} 2\pi i \left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} \Re \Sigma(k_F, \omega) \right]_{\omega_F - \Delta} \right\}^{-1} + F(k_F)$$

bzw.

$$\lim_{k \rightarrow k_F} n(k > k_F) = F(k_F).$$

Weiters kann gezeigt werden, daß die Korrekturfunktion  $F(k)$  für  $k = k_F$  stetig ist, d.h. nichts zur Diskontinuität der Impulsdichte an der Fermigrenze beiträgt. Das Ergebnis lautet demnach

$$\Delta n(k_F) \equiv Z(k_F) = \frac{1}{\left\{ 1 - \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} \Re \Sigma(k_F, \omega) \right]_{\omega_F - \Delta} \right\}}. \quad (1.110)$$

Diese Gleichung stellt eine Beziehung zwischen zwei wichtigen Größen der theoretischen Metallphysik her, nämlich zwischen der elektronischen Selbstenergie (bzw. deren Ableitung nach  $\omega$ ) und der Höhe der Unstetigkeit der Impulsverteilung der Elektronen an der Fermikante. Diese Größe  $Z(k_F)$  wird in der Literatur als der *Renormalisierungsfaktor* des Elektronengases an der Fermikante bezeichnet. Die folgende Tabelle gibt dazu einige Zahlenwerte<sup>20</sup>:

$r_s$	$\frac{\partial \Re \Sigma(k_F, \omega_F - \Delta)}{\partial \omega}$	$Z_F$ [Glg. (1.110)]	$Z_F$ [Glg. (1.111)]	Erg. Abb. 1.7
2	-0.30505	0.76625	0.69495	0.6925
4	-0.56595	0.63859	0.43405	0.4316
6	-0.80120	0.55519	0.19880	0.1963

Vergleichen Sie nun die Ergebnisse der Rechnung von Bektas und Sormann aus Abb. 1.7 mit den Ergebnissen nach Glg. (1.110), so sehen Sie, daß die entsprechenden Werte keineswegs übereinstimmen. Was ist die Ursache dafür?

Die Ergebnisse aus Abb. 1.7 wurden mit der in Abschnitt 1.8.2 erläuterten Theorie berechnet. Dabei wurde jedoch als Greenfunktion nicht die Lösung der Dyson-Gleichung

$$\frac{1}{[G^0]^{-1} - \Sigma} = G^0 + G^0 \Sigma G^0 + G^0 (\Sigma G^0)^2 + \dots$$

<sup>20</sup>Für  $r_s = 4$  ist die Ableitung von  $\Re \Sigma(k_F, \omega - \Delta)$  an der Stelle  $\omega = \omega_F$  in der Abb. 1.9 angegeben.

verwendet, *sondern nur die beiden ersten Terme dieser Entwicklung*. Um eine Übereinstimmung der Resultate zu erhalten, darf man daher auch die Glg. (1.110) nur bis zum linearen Term in  $\Sigma$  berücksichtigen:

$$Z(k_F) \approx 1 + \left[ \frac{\partial}{\partial \omega} \Re \Sigma(k_F, \omega) \right]_{\omega_F - \Delta} . \quad (1.111)$$

Beachten Sie die gute Übereinstimmung dieses Ergebnisses mit den Werten aus der Bektas-Sormann-Rechnung (die beiden letzten Spalten der obigen Tabelle).

Es erhebt sich nun sofort die Frage, welches der beiden Ergebnisse "das bessere" ist. Im Prinzip würde man natürlich vermuten, daß die Berechnung von  $Z(k_F)$  gemäß Glg. (1.110) der gemäß Glg. (1.111) vorzuziehen ist, weil in (1.110) eine aufwändiger berechnete Greenfunktion steckt. Eine entscheidende Antwort auf diese Frage könnte nur vom Experiment her kommen; leider ist es bisher nicht möglich, die Größe  $Z(k_F)$  mit der nötigen Genauigkeit zu messen. Die Auflösung der experimentell erhaltenen Impulsverteilungen reicht dafür einfach nicht aus. Der einzige Versuch einer quantitativen Bestimmung von  $Z(k_F)$  aus einem Compton-Streuexperiment stammt meines Wissens von Schülke<sup>21</sup>, und dieser Autor erhält für das Lithium-Metall ( $r_s=3.25$  Bohr) den Wert

$$Z(k_F) \approx 0.1 \pm 0.1 \quad !!$$

Diese betrübliche Tatsache bedeutet aber keineswegs, daß überhaupt keine Qualitätskontrolle der zur Berechnung von  $Z(k_F)$  verwendeten Theorien möglich ist. Das Gegenteil ist der Fall, wie nun an Hand der in Abb. 1.14 gezeigten Ergebnisse demonstriert wird.

In diesem Diagramm wird die Abhängigkeit des Renormalisierungsfaktors  $Z(k_F)$  vom "Elektronendichte-Parameter"  $r_s$  dargestellt. Erinnern Sie sich: je größer  $r_s$ , desto kleiner die Dichte des homogenen Elektronengases. Auch hier zeigt sich wieder, daß alle Effekte, die von der Korrelation der Elektronen untereinander abhängen, mit steigendem  $r_s$  deutlicher werden. Wie Sie aus Abb. 1.14 ersehen, streben alle theoretischen Kurven *im high-density limit*, also für  $r_s \rightarrow 0$ , zum Wert  $Z(k_F) = 1.0$ : das ist aber genau das Ergebnis, das man für ein Elektronengas nach dem Sommerfeld-Modell (am absoluten Temperatur-Nullpunkt) erwarten würde. Die Ursache dafür ist folgende: wie Sie aus verschiedenen früheren LV wissen, ist die mittlere kinetische Energie pro Elektron für ein homogenes Elektronengas eine Funktion von  $(1/r_s^2)$ , während die potentielle (HF-)Energie eine Funktion von  $(1/r_s)$  ist (s. z.B. TF, Kapitel 10, Glg. 10.45). Das bedeutet, daß bei hohen Elektronendichten ( $r_s \rightarrow 0$ ) die kinetische Energie die potentielle Energie dominiert. Da aber die Korrelationseffekte im Elektronengas durch die potentielle Energie beschrieben werden, verhält sich ein solches Gas mit steigender Dichte immer "Sommerfeld-ähnlicher".

Betrachten wir zuerst die gestrichelte RPA-Kurve in Fig. 1.14: wie man sieht, führt die Berechnung von  $Z(k_F)$  nach Glg. (1.111) mit steigendem  $r_s$  zu sehr

<sup>21</sup>W. Schülke et al, PRB **54**, 14381 (1996).

starken Korrelationseffekten, d.h., zu einer sehr deutlichen Verringerung der step-Höhe der Impulsverteilung der Elektronen für  $k = k_F$ . Oftmals wird hier die Frage gestellt: *Was geschieht, wenn bei etwa  $r_s = 8$  Bohr diese Kurve die Null-Linie erreicht?* Die Diskussion dieser Frage ist insofern müßig, als man in der Abbildung sieht, daß die RPA-Lösung gemäß Glg. (1.111) massiv von allen anderen, "fortgeschritteneren" Theorien abweicht und daher mit Sicherheit nicht die Realität beschreibt.

Verwendet man zur Berechnung der Impulsdichte eine Greenfunktion, welche aus der Lösung der Dyson-Gleichung resultiert, so erhält man mittels Glg. (1.110) eine  $Z(k_F)$ -Kurve, die viel moderater nach unten geht als vorhin (volle Kurve in der Abbildung). Wie "gut" ist nun dieses Ergebnis? Da man - wie oben erwähnt - die Renormalisierungsfaktoren nicht mit der erforderlichen Genauigkeit messen kann, bleiben nur zwei Möglichkeiten der Qualitätskontrolle: (1) einen Vergleich mit (vermutlich) leistungsfähigeren theoretischen Ansätzen, und (2) einen Vergleich mit Computer-Experimenten, also z.B. mit Monte-Carlo-Simulationsergebnissen. Da man davon ausgehen kann, daß die Aussage *MC results are essentially exact ...*<sup>22</sup> für das homogene Elektronengas gültig ist, sollen für die gegenwärtige Diskussion die VMC-Ergebnisse von Ortiz und Ballone (1994)<sup>23</sup> als Referenzdaten genommen werden (X in der Abbildung). Es ist völlig klar, daß auch die "vollständige" RPA-Näherung gemäß Glg. (1.110) noch signifikant unter den Referenzwerten liegt.

Eine sehr interessante Theorie, die leider auf Grund ihrer relativ komplizierten mathematischen Aspekte hier nicht behandelt werden kann, ist die von Lantto und anderen Autoren entwickelte *Fermi HyperNetted Chain (FHNC) Theorie*<sup>24</sup>. Einer der Vorteile der FHNC-Theorie besteht darin, daß man relativ leicht über die RPA hinausgehen kann ("*beyond RPA*"): es ist also durchaus verständlich, daß das FHNC-Ergebnis in der Abb. 1.14 näher beim MC-Ergebnis liegt als das RPA-Resultat.

Nun noch zum Stichwort "*leistungsfähigere Theorien*": selbstverständlich kann auch die Elektronen-Theorie, welche auf Greenfunktionen beruht, über das in diesem Abschnitt präsentierte Niveau hinaus weiterentwickelt werden. Dies ist auch ein Schwerpunkt in den folgenden Kapiteln dieser LV, insbesondere was die heutzutage sehr populäre *GW*-Methode betrifft. Um bereits hier zu zeigen, "was da noch alles drinnen ist", finden Sie in der folgenden Abbildung auch Ergebnisse von  $Z(k_F)$  für  $r_s = 4$  Bohr, die ich einem sehr lesenswerten paper von Holm und von Barth (1998)<sup>25</sup> entnommen habe. Ohne auf die später ausführlich diskutierten Details der *GW*-Theorie einzugehen, soll bereit hier erwähnt werden, daß es mehrere "Approximationsstufen" gibt: die niederste Stufe heißt  $G_0W_0$ , und das Ergebnis entspricht offenbar genau dem RPA-Resultat aus diesem Kapitel; die nächste Stufe heißt  $GW_0$

<sup>22</sup>Aus dem paper von P. Garcia-Gonzalez und R. W. Godby, Phys. Rev. B **63**, 075112 (2001).

<sup>23</sup>G. Ortiz and P. Ballone, Phys. Rev. B **50**, 1391 (1994); VMC = *variational Monte Carlo*.

<sup>24</sup>Die erste Adresse zu diesem Thema in Österreich ist Herr Prof. E. Krotscheck vom Institut für Theoretische Physik an der Uni Linz.

<sup>25</sup>B. Holm and U. von Barth, *Fully self-consistent GW self-energy of the electron gas*, Phys. Rev. B **57**, 2108 (1998).

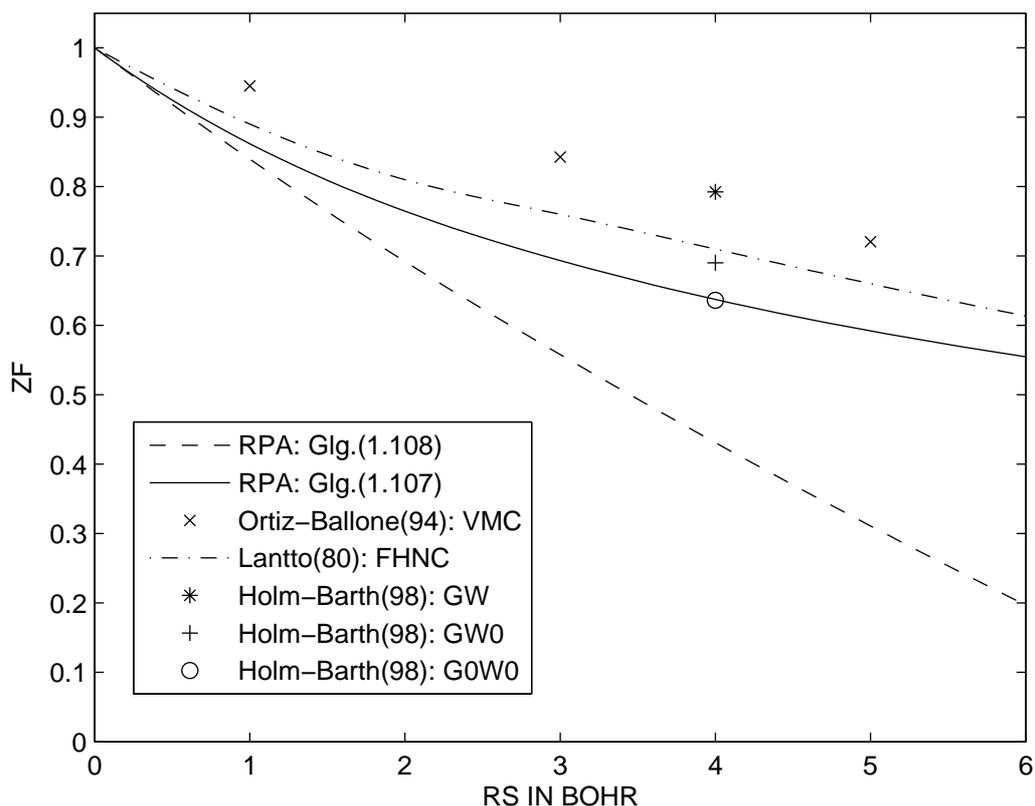


Figure 1.14:  $Z(k_F)$  als Funktion von  $r_s$  für verschiedene Theorien. Die Bedeutung der verschiedenen Kurven ergibt sich aus dem zugehörigen Text .

und entspricht etwa der Qualität der Lantto'schen FHNC-Theorie. Sehr erfreulich und überzeugend ist der letzte Schritt: eine vollständige, kompromisslose GW-Berechnung von  $Z(k_F)$  ("*fully self-consistent*") führt - zumindest für  $r_s = 4$  - zu einer perfekten Übereinstimmung mit dem VMC-Ergebnis von Ortiz und Ballone.

Quasi als Vorbereitung für die letzten Kapitel dieser LV gibt Ihnen das folgende Kapitel einen Einblick in die Querverbindungen der Responsefunktionen, insbesondere der dielektrischen Funktion, zu anderen wichtigen Größen der theoretischen Festkörperphysik: es trägt deshalb den Titel "Zusammenhänge".