

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gornyi
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. König

Blatt 10: Lösungen
Besprechung 15.01.2015

1. Dynamischer Strukturfaktor

(4+4=8 Punkte)

Der dynamische Strukturfaktor des freien Elektronengases im Grundzustand ist gegeben durch

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int d^3r \int dt e^{-i(\mathbf{q}\mathbf{r} - \omega t)} S(\mathbf{r}, t), \quad S(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi_0 | \rho(\mathbf{r}, t) \rho(0, 0) | \Psi_0 \rangle,$$

mit der zeitabhängigen Teilchendichte $\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t)$.

(a) Zeigen Sie, dass der Strukturfaktor als

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} n_F(\mathbf{k}) [1 - n_F(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \delta(\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})$$

geschrieben werden kann. Dabei ist $n_F(\mathbf{k}) = \theta(k_F - k)$ die Fermi-Funktion bei $T = 0$ und k_F der Fermi-Wellenvektor.

Lösung: Wir verwenden die Fouriertransformation

$$\Psi_{\sigma}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_{\sigma\vec{k}}(t). \quad (1)$$

Die Zeitabhängigkeit der Operatoren ist gegeben durch,

$$c_{\sigma\vec{k}}(t) = e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}}t} c_{\sigma\vec{k}}, \quad (2)$$

$$c_{\sigma\vec{k}}^{\dagger}(t) = e^{+i\epsilon_{\mathbf{k}}t} c_{\sigma\vec{k}}^{\dagger}. \quad (3)$$

Damit erhalten wir für den Strukturfaktor

$$S(\vec{r}, t) = \langle \Psi_0 | \rho(\vec{r}, t) \rho(0, 0) | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} e^{+i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})t} \times \langle \Psi_0 | c_{\sigma\vec{k}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{k}'} c_{\sigma'\vec{p}}^{\dagger} c_{\sigma', \vec{p}'} | \Psi_0 \rangle. \quad (4)$$

Wir werten nun den Erwartungswert in Gl. (4) zunächst für den Fall gleicher Spins, $\sigma = \sigma'$, aus:

$$\langle \Psi_0 | c_{\sigma\vec{k}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{k}'} c_{\sigma\vec{p}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{p}'} | \Psi_0 \rangle = \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \Theta(p_F - p) \Theta(p_F - k) + \delta_{\vec{p}\vec{k}'} \delta_{\vec{k}\vec{p}'} \Theta(p_F - p') [1 - \Theta(p_F - p)]. \quad (5)$$

Für den Fall unterschiedlicher Spins, $\sigma' \neq \sigma$, erhalten wir dagegen:

$$\langle \Psi_0 | c_{\sigma\vec{k}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{k}'} c_{\sigma'\vec{p}}^{\dagger} c_{\sigma, \vec{p}'} | \Psi_0 \rangle = \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \Theta(p_F - p) \Theta(p_F - k). \quad (6)$$

Damit ergibt sich der Strukturfaktor zu $[f(p) = n_F(\vec{p})]$,

$$S(\vec{r}, t) = \frac{1}{V^2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} e^{+i(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})t} \left\{ \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} (1 - \delta_{\sigma\sigma'}) f(k) f(p) \right. \\ \left. + \delta_{\sigma\sigma'} \left[f(p') [1 - f(k')] \delta_{\vec{p}\vec{k}'} \delta_{\vec{k}\vec{p}'} + f(p') f(k') \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \right] \right\}, \quad (7)$$

$$S(\vec{r}, t) = \frac{N^2}{V^2} + \frac{1}{V^2} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} e^{-i(\vec{k}-\vec{p}) \cdot \vec{r}} e^{+i(\varepsilon_k - \varepsilon_p)t} f(k) [1 - f(p)]. \quad (8)$$

Die Spin-Summe ergibt einen zusätzlichen Faktor 2. Fouriertransformation liefert dann

$$S(q, \omega) = \frac{N^2}{V} \delta_{\vec{q},0} \delta(\omega) + \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} f(k) [1 - f(\vec{k} + \vec{q})] \delta(\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}). \quad (9)$$

(b) Skizzieren Sie den Bereich mit $S(\mathbf{q}, \omega) \neq 0$ in der (q, ω) -Ebene.

Lösung: Aus der δ -Funktion in Gl. (9) ergibt sich für die Frequenz,

$$m\omega = \frac{q^2}{2} + \vec{k} \cdot \vec{q} > 0. \quad (10)$$

wobei aufgrund der beiden Fermifunktionen

$$k < k_F, \quad |\vec{k} + \vec{q}| > k_F, \quad (11)$$

gilt. Für den Fall $q > 2k_F$ folgt,

$$\frac{q^2}{2} - k_F q < m\omega < \frac{q^2}{2} + k_F q. \quad (12)$$

Während für $q < 2k_F$,

$$0 < m\omega < \frac{q^2}{2} + k_F q. \quad (13)$$

Der entsprechende Bereich, in dem Teilchen-Loch-Anregungen möglich sind, das sogenannte Teilchen-Loch-Kontinuum, ist in Abb. 1 dargestellt.

2. Dispersion der Plasmonen

(4 Punkte)

In dieser Aufgabe betrachten wir kollektive Anregungen eines 3D Elektronensystems. In der Vorlesung wurde die Plasmonenfrequenz $\omega_p(q=0)$ abgeschätzt. Bestimmen Sie nun die volle Dispersion des plasmonischen Zweiges $\omega_p(q)$ als Funktion des Wellenvektors q .

Lösung: Plasmonen sind kollektive Dichte-Anregungen. Es sei $\rho = \rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}$ die gesamte Dichte, wobei ρ_{ind} die induzierte Ladungsdichte ist. Diese ist gegeben durch

$$\rho_{\text{ind}} = \frac{4\pi\alpha_0(\omega, q)}{q^2} (\rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}). \quad (14)$$

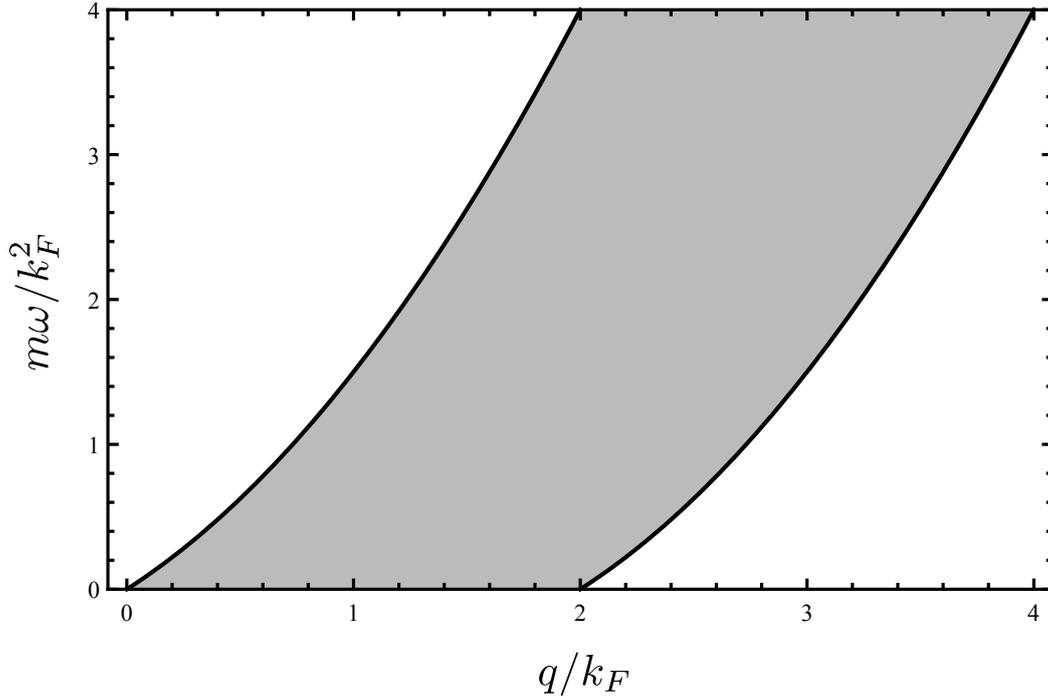


Abbildung 1:

Hierbei ist die Polarisationsfunktion,

$$\alpha_0(\omega, q) = \frac{2e^2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+q}}{\omega - \Delta_{\vec{k}q} + i0}. \quad (15)$$

Diese ist eine allgemeinere Form des Strukturfaktors aus Aufgabe 1). Genauer, ist letzterer der Imaginärteil der Polarisationsfunktion, was mithilfe folgender Identität ersichtlich wird:

$$\frac{1}{x + i0} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x). \quad (16)$$

Hierbei ist \mathcal{P} der Cauchy Hauptwert. Eine alternative Herleitung findet sich am Ende der Musterlösung. Wir berechnen die Polarisationsfunktion für kleine q um daraus die Plasmondispersion zu erhalten. Wir führen im zweiten Term in Gl. (15) eine Variablentransformation durch, sodass

$$\alpha_0(\omega, q) = \frac{2e^2 q^2}{mV} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \frac{1}{(\omega - \vec{q} \cdot \vec{k}/m)^2 - (q^2/2m)^2}. \quad (17)$$

Nun entwickeln wir für kleine q ,

$$\alpha_0(\omega, q) = \frac{2e^2 q^2}{m\omega^2 V} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left[1 + 2 \frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{m\omega} + 3 \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{m\omega} \right)^2 \right]. \quad (18)$$

Im ersten Term benutzen wir

$$\frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} = n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}. \quad (19)$$

Der zweite Term verschwindet und für den dritten Term erhalten wir mit

$$\frac{2}{V} \sum_k f_k 3 \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{m\omega} \right)^2 = \frac{6q^2}{(m\omega)^2 8\pi^3} \int_0^{k_F} dk k^4 \int_{-\pi}^{+\pi} d\varphi \int_{-1}^{+1} d \cos \theta \cos^2 \theta = \frac{3}{5} n \left(\frac{qk_F}{m\omega} \right)^2. \quad (20)$$

Damit erhalten wir schließlich

$$\alpha_0 = \frac{e^2 q^2}{m\omega^2} \frac{N}{V} \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{qk_F}{m\omega} \right)^2 \right]. \quad (21)$$

Es gilt

$$\rho_{\text{ind}}(\omega, q) = \frac{4\pi\alpha_0(\omega, q)}{q^2 - 4\pi\alpha_0(\omega, q)} \rho_{\text{ext}}(\omega, q). \quad (22)$$

Die Eigenmoden des Systems, entsprechen den Anregungen für die $\rho_{\text{ind}} \neq 0$ bei $\rho_{\text{ext}} = 0$ gilt. D.h. es muss

$$q^2 - 4\pi\text{Re}[\alpha_0(\omega, q)] = 0. \quad (23)$$

gelten. Mit der Näherung der Polarisationsfunktion für kleine Impulse erhalten wir damit die Plasmondispersion

$$\omega^2 = \underbrace{\frac{4\pi e^2 n_0}{m}}_{\omega_p^2} \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{qk_F}{m\omega} \right)^2 \right] \simeq \omega_p^2 \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{qk_F}{m\omega_p} \right)^2 \right]. \quad (24)$$

Daraus folgt dann,

$$\omega = \omega_p \left(1 + \frac{9}{10} \frac{q^2}{k_{TF}^2} \right). \quad (25)$$

Hierbei haben wir den Thomas-Fermi-Wellenvektor

$$k_{TF} = [4\pi e^2 \nu(\varepsilon_F)]^{1/2} = \left(\frac{4e^2 m k_F}{\pi} \right)^{1/2} = \left(\frac{6\pi e^2 n}{\varepsilon_F} \right)^{1/2} \quad (26)$$

eingeführt.

3. Thomas-Fermi-Abschirmung in zwei Dimensionen (5+5+8=18 Punkte)

Betrachten Sie ein zweidimensionales Elektronensystem mit einer dreidimensionalen ($1/r$) Coulomb-Wechselwirkung.

(a) Leiten Sie die Dielektrizitätsfunktion $\varepsilon(\mathbf{q})$ in der Thomas-Fermi-Näherung her.

Lösung: Im Folgenden hängen alle Funktionen mit Subskript $3D$ von den $3D$ -Koordinaten x, y, z bzw. q_x, q_y, q_z ab; Funktionen mit Subskript $2D$ dagegen nur von den $2D$ -Koordinaten x, y bzw. q_x, q_y .

Für das $3D$ Coulombpotential gilt

$$V_{3D}(\vec{r}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^{+i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{q^2}. \quad (27)$$

Wir benötigen das 3D Coulombpotential in der Ebene des 2D Elektronengases bei $z = 0$,

$$V_{2D}(\vec{r}) = V_{3D}(\vec{r})|_{z=0} = \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} e^{+i(q_x x + q_y y)} \underbrace{\int \frac{dq_z}{2\pi} \frac{4\pi}{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2}}_{V_{2D}(\vec{q})}. \quad (28)$$

Damit ist

$$V_{2D}(\vec{q}) = \int \frac{dq_z}{2\pi} \frac{4\pi}{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2} = \frac{2\pi}{\sqrt{q_x^2 + q_y^2}} = \frac{2\pi}{q}. \quad (29)$$

Eine alternative Vorgehensweise ist die Poissongleichung zu verwenden. Für das elektrostatische Potential einer 2D-Ladungsverteilung ρ_{2D} gilt die 3D Poissonverteilung

$$-\nabla^2 \phi_{3D} = 4\pi \rho_{2D} \delta(z). \quad (30)$$

Fouriertransformation ergibt dann für die 3D Poissongleichung

$$\phi_{3D}(\vec{q}) = \frac{4\pi}{q^2} \rho_{2D}(q_x, q_y). \quad (31)$$

Integrieren wir die 3D Poissongleichung nun über den Impuls q_z erhalten wir

$$\phi_{2D}(\vec{q}) = \rho_{2D} \int \frac{dq_z}{2\pi} \frac{4\pi}{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2} = \frac{2\pi}{\sqrt{q_x^2 + q_y^2}} \rho_{2D} = \frac{2\pi}{q} \rho_{2D}. \quad (32)$$

wobei wir benutzt haben, dass

$$\int \frac{dq_z}{2\pi} \phi_{3D}(\vec{q}) = \int d^3r \delta(z) \phi_{3D}(\vec{r}) e^{-i(q_x x + q_y y)} = \phi_{2D}(\vec{q}) \quad (33)$$

ist.

Es gilt nun

$$\phi_{\text{ext}}^{2D}(\vec{r}) = \varepsilon(q) \phi^{2D}(\vec{q}), \quad (34)$$

$$\rho_{\text{ind}}^{2D}(\vec{q}) = \chi(q) \phi^{2D}(\vec{q}). \quad (35)$$

Mit der effektiven 2D Poissongleichung (32) folgt dann

$$\frac{q}{2\pi} [\phi^{2D} - \phi_{\text{ext}}^{2D}] = \chi(q) \phi^{2D}(q). \quad (36)$$

Und daraus

$$\varepsilon(q) = 1 - \frac{2\pi}{q} \chi(q). \quad (37)$$

- (b) Bestimmen Sie die Abschirmung des Potentials einer äußeren Punktladung, die sich im Abstand a von der Ebene befindet.

Lösung:

$$\phi_{\text{ext}}(\vec{r})|_{z=0} = \frac{Q}{\sqrt{x^2 + y^2 + a^2}}. \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \phi_{\text{ext}}(\vec{q}) &= Q \int dx dy \frac{e^{-i(q_x x + q_y y)}}{\sqrt{x^2 + y^2 + a^2}} = \int dr \frac{r}{\sqrt{r^2 + a^2}} \int d\varphi e^{-iqr \cos \varphi} \\ &= 2\pi Q \frac{e^{-qa}}{q}. \end{aligned} \quad (39)$$

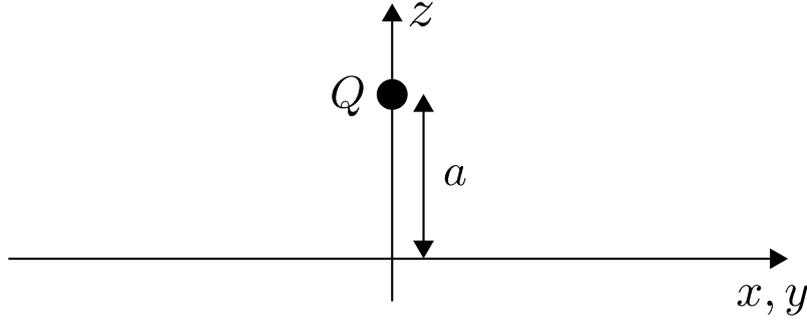


Abbildung 2:

- (c) Betrachten Sie nun die Situation, dass eine Punktladung in der Ebene hinzugefügt wird. Beschreiben Sie die resultierende zeitliche Entwicklung der Ladungsdichte.

Lösung:

Wir betrachten die kleine Störung n_1 zur homogenen Hintergrunddichte n_0 . Es gelten die Gleichungen ($e > 0$)

$$\partial_t n_1 + n_0 \nabla \cdot \vec{u} = \delta(t) \delta(\vec{r}), \quad (40)$$

$$\partial_t \vec{u} = + \frac{e}{m} \nabla \phi_{2D}(\vec{r}), \quad (41)$$

$$\phi_{2D}(\vec{q}) = - \frac{2\pi e}{q} n_1(\vec{q}). \quad (42)$$

Hierbei entsprechen die Quellterme in Gl. (40) der hinzugefügten Ladung. Fouriertransformation führt auf die Lösung

$$n_1^R(\omega, \vec{q}) = \frac{i\omega}{(\omega + i0)^2 - \omega_q^2}. \quad (43)$$

Hierbei haben wir die 2D-Plasmondispersion

$$\omega_q = \sqrt{\frac{2\pi e^2 n_0}{m} q} = \sqrt{cq} \quad (44)$$

eingeführt. Die Rücktransformation liefert

$$n_1(\vec{r}, t) = \Theta(t) \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} e^{+i\vec{q} \cdot \vec{r}} \cos(\omega_q t), \quad (45)$$

$$n_1(\vec{r}, t) = \frac{\Theta(t)}{\pi r^2} \int_0^{+\infty} dl l^3 J_0(-l^2) e^{-sl}, \quad (46)$$

wobei $s = (ct^2/r)^{1/2}$ ist. Der zeitliche Verlauf der Ladungsdichte n_1 ist in Abb. 3 dargestellt.

4. Zusatz: Herleitung der Polarisationsfunktion aus den Heisenberg Bewegungsgleichungen

Wir suchen die Dispersionsrelation von kollektiven Dichteanregungen in einer Fermiflüssigkeit. Dazu betrachten wir die Bewegungsgleichung für die Elektronendichte und suchen nach den Eigenmoden des Systems.

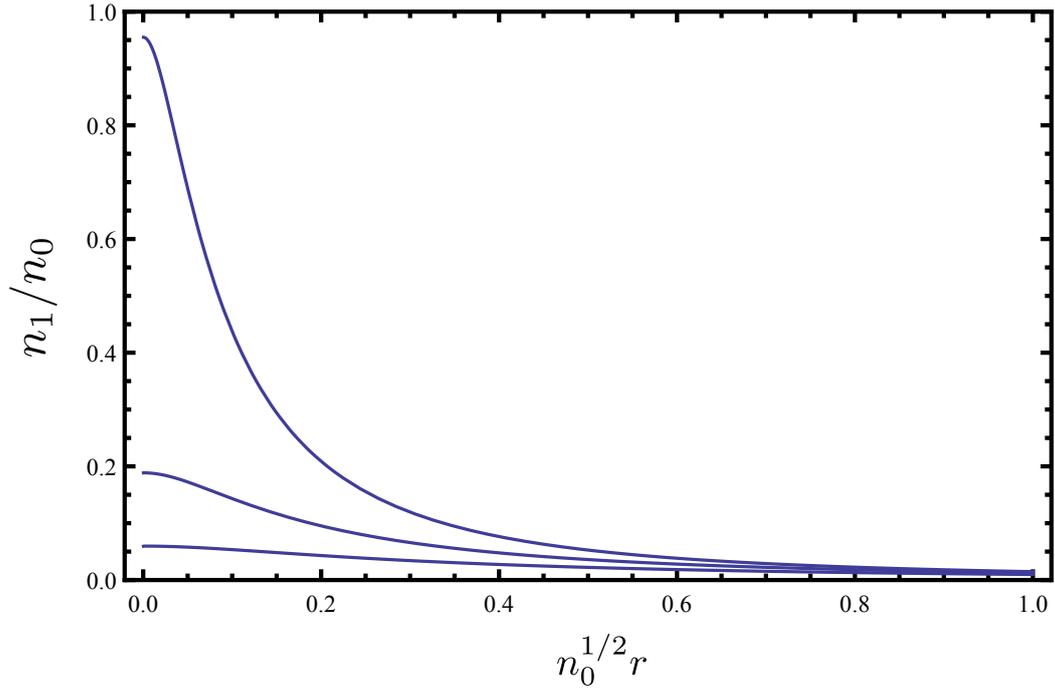


Abbildung 3: Ladungsdichte für verschiedene Zeiten.

Die Fouriertransformierte der Dichte ist gegeben durch

$$\rho(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} \rho_{\vec{k},\vec{q}}, \quad (47)$$

wobei wir die Abkürzung

$$\rho_{\vec{k},\vec{q}} = \sum_{\sigma} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \quad (48)$$

eingeführt haben.

Die Bewegungsgleichung für die Operatoren $\rho(\vec{q})$ erhalten wir aus den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für die $\rho_{\vec{k},\vec{q}}$,

$$i\partial_t \rho_{\vec{k},\vec{q}} = [\rho_{\vec{k},\vec{q}}, H], \quad (49)$$

wobei der Hamiltonoperator

$$H = H_0 + H_{\text{int}} + H_{\text{ext}}, \quad (50)$$

aus den Beiträgen

$$H_0 = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma}, \quad (51)$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{\vec{q}} c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}'+\vec{q},\sigma'}^{\dagger} c_{\vec{k}'\sigma'} c_{\vec{k}\sigma}, \quad (52)$$

$$H_{\text{ext}} = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{q}} \rho(-\vec{q}, t) \phi_{\text{ext}}(\vec{q}, t). \quad (53)$$

besteht. Die notwendigen Kommutatoren lauten dann:

1) Kommutator mit kinetischer Energie

$$[a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}, a_{k'\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'}] = a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \delta_{\sigma\sigma'} (\delta_{\vec{k}',\vec{k}+\vec{q}} - \delta_{\vec{k}\vec{k}'}) . \quad (54)$$

2) Kommutator mit externer Störung

$$[a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}, H_{\text{ext}}] = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{q}} \phi_{\text{ext}}(\vec{q}, t) (a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}',\sigma} - a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{q}-\vec{q}',\sigma}) . \quad (55)$$

Bisher erhalten wir damit die Bewegungsgleichungen

$$[i\partial_t - \underbrace{(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}})}_{\Delta_{\vec{k}\vec{q}}}] \rho_{\vec{k}\vec{q}} = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{q}'} \phi_{\text{ext}}(\vec{q}', t) [\rho_{\vec{k},\vec{q}-\vec{q}'} - \rho_{\vec{k}+\vec{q},\vec{q}-\vec{q}'}] . \quad (56)$$

Hiervon nehmen wir nun den Erwartungswert. Wir nehmen an, dass auf der rechten Seite der Gleichung in erster Näherung Translations-Invarianz besteht, d.h. wir vernachlässigen alle höheren Gradienten. Damit sind die Erwartungswerte auf der rechten Seite diagonal im Impuls. Außerdem nehmen wir auch an, dass wir in einem stationären Zustand sind. D.h. die Erwartungswerte sind zeitunabhängig. Insgesamt erhalten wir

$$[i\partial_t - \underbrace{(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}})}_{\Delta_{\vec{k}\vec{q}}}] \langle \rho_{\vec{k}\vec{q}} \rangle = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{q}'} \phi_{\text{ext}}(\vec{q}', t) [\delta_{\vec{q}\vec{q}'} \langle \rho_{\vec{k},0} \rangle - \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \langle \rho_{\vec{k}+\vec{q},0} \rangle] \quad (57)$$

$$= -\frac{2e}{V} \phi_{\text{ext}}(\vec{q}, t) [f(\vec{k}) - f(\vec{k} + \vec{q})] . \quad (58)$$

3) Wechselwirkung:

$$[\rho_{\vec{k}\vec{q}}, H_{\text{int}}] = \sum_{\vec{q}'} V_{\vec{q}'} \left\{ a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} a_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}',\sigma} + a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \right\} . \quad (59)$$

Auch von dem Wechselwirkungsbeitrag nehmen wir den Erwartungswert. Daraufhin koppelt die Gleichung für den Zweiteilchen-Erwartungswert an den Vierteilchen-Erwartungswert. Um diese Hierarchie zu entkoppeln führen wir die Hartree-Fock Näherung für den Wechselwirkungsterm durch:

$$\langle a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} a_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}',\sigma} \rangle = \langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} \rangle \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}',\sigma} \rangle - \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} \rangle \langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}',\sigma} \rangle . \quad (60)$$

Und für den zweiten Term erhalten wir

$$\langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle = \langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} \rangle \langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle - \langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} \rangle \langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle . \quad (61)$$

Damit erhalten wir für die Wechselwirkung

$$\begin{aligned} \langle [\rho_{\vec{k}\vec{q}}, H_{\text{int}}] \rangle &= \sum_{\vec{k}',\vec{q}'} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{\vec{q}'} \left\{ \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}',\sigma} \rangle \langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} \rangle - \langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle \langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} \rangle \langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle - \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'} \rangle \langle a_{\vec{k}'-\vec{q}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}',\sigma} \rangle \right\} \end{aligned} \quad (62)$$

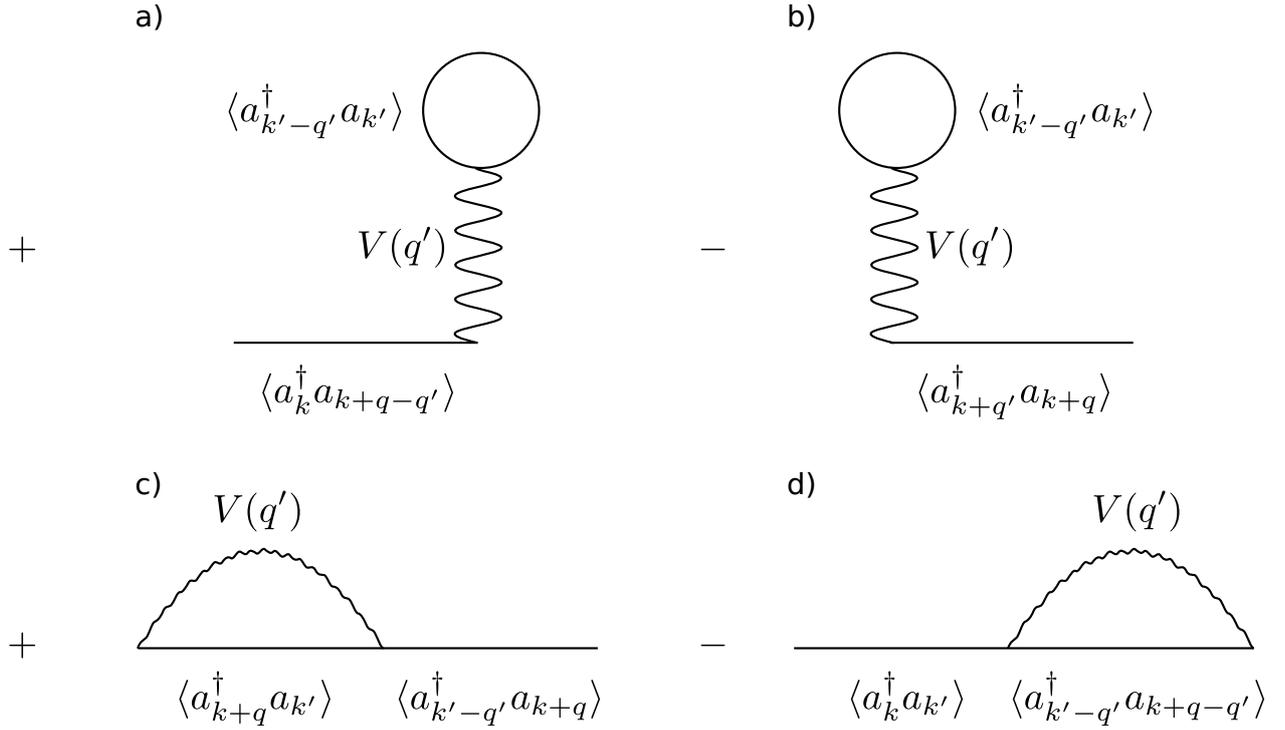


Abbildung 4:

Die Terme sind graphisch in Abb. 4 dargestellt. Wir vernachlässigen die Diagramme c) und d) in Abb. 4, da sie lediglich einer Renormierung der Quasiteilchen-Kinematik entsprechen. Des weiteren nehmen wir für die Terme in der Wechselwirkung auch die Gradientenentwicklung vor. D.h. in führender Ordnung nehmen wir an, dass die Erwartungswerte in der Orstdarstellung translationsinvariant sind. Das bedeutet wiederum, dass die Erwartungswerte diagonal im Impuls werden,

$$\langle a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}',\sigma} \rangle = \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \langle a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma} \rangle, \quad (63)$$

$$\langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle = \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle. \quad (64)$$

$$\langle [\rho_{\vec{k}\vec{q}}, H_{\text{int}}] \rangle \simeq \sum_{\vec{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} V_{\vec{q}} \left\{ \langle a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma} \rangle \langle a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}'\sigma'} \rangle - \langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle \langle a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}'\sigma'} \rangle \right\} \quad (65)$$

$$= \sum_{\sigma} V_{\vec{q}} \left\{ \langle a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma} \rangle \rho(\vec{q}) - \langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \rangle \rho(\vec{q}) \right\} \quad (66)$$

$$= 2V_{\vec{q}} [f(\vec{k}) - f(\vec{k} + \vec{q})] \rho(\vec{q}). \quad (67)$$

Wir sehen also, dass die Wechselwirkung zu einem ähnlichen Term führt, wie das externe Potential. Tatsächlich beschreibt Gl. (67) das selbstkonsistente Abschirmen des externen Potentials durch die wechselwirkenden Elektronen. Insgesamt erhalten wir die Bewegungsgleichung

$$[i\partial_t - \Delta_{\vec{k}\vec{q}}] \langle \rho_{\vec{k}\vec{q}} \rangle = -\frac{2e}{V} \phi(\vec{q}, t) [f(\vec{k}) - f(\vec{k} + \vec{q})]. \quad (68)$$

Hierbei ist ϕ nun das gesamte Potential, bestehend aus dem externen Potential ϕ_{ext} und dem induzierten Potential $\rho V(q)$. Wieder ist $\Delta_{\vec{k}\vec{q}} = \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}$. Um Gl. (68) zu lösen, verwenden wir die Green'sche Funktion

$$[i\partial_t - \Delta_{\vec{k}\vec{q}}]G(\vec{q}, t - t') = \delta(t - t'). \quad (69)$$

Fouriertransformation der Zeit liefert dann

$$G(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\omega - \Delta_{\vec{k}\vec{q}}}. \quad (70)$$

Offensichtlich ist diese für $\omega = \Delta_{\vec{k}\vec{q}}$ divergent und die Rücktransformation in die Zeit-Domäne ist nicht wohl-definiert. Die richtige Regularisierung mit $G^R(t - t') = 0$ für $t < t'$ ist

$$G^R(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\omega - \Delta_{\vec{k}\vec{q}} + i0}. \quad (71)$$

Mit der Green'schen Funktion erhalten wir nun die Lösung von Gl. (68),

$$\langle \rho_{\vec{k}\vec{q}} \rangle(t) = -\frac{e}{V} \int dt' G^R(t - t') \phi(\vec{q}, t') [f(\vec{k}) - f(\vec{k} + \vec{q})]. \quad (72)$$

Nach Fouriertransformation ergibt dies

$$\langle \rho_{\vec{k}\vec{q}} \rangle(\omega) = -\frac{2e}{V} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\omega - \Delta_{\vec{k}\vec{q}} + i0} \phi(\vec{q}, \omega). \quad (73)$$

Nach Summation über \vec{k} erhalten wir

$$\rho_{\text{ind}} = -2e \sum_{\vec{k}} \langle \rho_{\vec{k}\vec{q}} \rangle = \frac{4\pi\alpha_0(\omega, q)}{q^2} (\rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}). \quad (74)$$

Wobei

$$\alpha_0(\omega, q) = \frac{2e^2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\omega - \Delta_{\vec{k}\vec{q}} + i0}. \quad (75)$$

5. Zusatz: Plasmondispersion in der hydrodynamischen Näherung

Wir berechnen die Plasmondispersion für ein Fermigas in der hydrodynamischen Beschreibung. Dazu verwenden wir die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (76)$$

für die Massendichte $\rho(\vec{r}, t) = mn(\vec{r}, t)$, wobei $n(\vec{r}, t)$ die Teilchendichte des Systems ist. Die Ladungsdichte wiederum ist gegeben durch $-en(\vec{r})$ ($e > 0$). Es gilt die Poissongleichung

$$\nabla^2 \phi = 4\pi en. \quad (77)$$

Außerdem verwenden wir die Eulergleichung

$$\partial_t(\rho \vec{u}) = -enE - \nabla P. \quad (78)$$

Der Druck des Elektronengases folgt aus der inneren Energie gemäß

$$P = -\frac{\partial U}{\partial V}. \quad (79)$$

Wir verwenden die innere Energie des freien Elektronengases

$$U = \frac{8\pi V}{10mh^3} p_F^5. \quad (80)$$

Daraus folgt der Druck

$$P = c_1 n^{5/3}, \quad (81)$$

wobei $c_1 = h^2(3/\pi)^{2/3}/20m$.

Wir linearisieren nun die Bewegungsgleichung für kleine Störungen um das homogene System mit Dichte n_0 , Potential ϕ_0 und $\vec{u}_0 = 0$:

$$n = n_0 + n_1(\vec{r}, t), \quad (82)$$

$$\phi = \phi_0 + \phi_1(\vec{r}, t), \quad (83)$$

$$\vec{u} = \vec{u}_1(\vec{r}, t). \quad (84)$$

Damit erhalten wir

$$\partial_t n_1 + n_0 \nabla \cdot \vec{u}_1 = 0, \quad (85)$$

$$\nabla^2 \phi_1 = 4\pi e n_1, \quad (86)$$

$$\partial_t \vec{u}_1 = \frac{e}{m} \nabla \phi_1 - \frac{1}{mn_0} \nabla P. \quad (87)$$

Dabei gilt

$$\nabla P = \frac{5c_1 n_0^{2/3}}{3} \nabla n_1. \quad (88)$$

Entkoppeln der Gleichungen führt auf

$$\partial_t^2 n_1 + \underbrace{\frac{4\pi e^2 n_0}{m}}_{\omega_p^2} n_1 - \underbrace{\frac{5c_1 n_0^{2/3}}{3m}}_{v_F^2/3} \nabla^2 n_1 = 0. \quad (89)$$

Fouriertransformation führt uns zu

$$[-\omega^2 + \omega_p^2 + v_F^2 q^2/3] n_1 = 0. \quad (90)$$

Damit erhalten wir die Dispersionsrelation

$$\omega(q) = \omega_p \left(1 + \frac{v_F^2 q^2}{6\omega_p^2} \right) = \omega_p \left(1 + \frac{q^2}{2k_{TF}^2} \right). \quad (91)$$

Zuletzt haben wir den Thomas-Fermi-Wellenvektor $k_{TF} = (6\pi e^2 n_0 / \epsilon_F)^{1/2}$ verwendet.

Tatsächlich gilt die hydrodynamische Beschreibung nur für Frequenzen $\omega\tau < 1$, wobei τ eine charakteristische Streuzeit ist. Für typische Plasmonfrequenzen in Metallen ist diese Bedingung nicht erfüllt. Um die Dispersion des RPA Ergebnisses in der hydrodynamischen Näherung zu erhalten, muss der Druckterm $(\nabla P)/mn_0$ durch $3v_F^2(\nabla n_1)/5$ ersetzt werden.