16 Hartree-Fock-Näherung, RPA (Random-Phase-Approximation), Plasmonen

Wir suchen einen Operator A, der die Eigenschaft

$$[H, A] = \epsilon A \tag{16.1}$$

hat. Ein solcher Operator beschreibt eine Anregung der Energie ϵ, denn ist $|\Phi\rangle$ ein Zustand der Energie E, d.h. $H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$, dann folgt

$$HA|\Phi\rangle = [H, A]|\Phi\rangle + AH|\Phi\rangle = \epsilon A|\Phi\rangle + AE|\Phi\rangle = (E + \epsilon)|\Phi\rangle. \tag{16.2}$$

Die Energie des Zustandes $A|\Phi\rangle$ ist also um ϵ höher als die des Zustandes $|\Phi\rangle$. Allerdings ist es nur in idealen Fällen möglich, solche Operatoren exakt zu finden. Doch kann man näherungsweise solche Operatoren bestimmen.

16.a Einteilchen-Anregungen in Hartree-Fock-Näherung

Der Operator $c^\dagger_{\mathbf{k}s}$ beschreibt die Hinzufügung eines Teilchens mit Impuls $\hbar\mathbf{k}$ und Spin s. Wir berechnen

$$[H, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] = \sum_{\mathbf{k}_1,s_1} \epsilon_{\mathbf{k}_1}[c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1,s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] + \frac{1}{2V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{k}_2 s_2 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} [c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]. \tag{16.3}$$

Der erste Kommutator ergibt

$$[c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1,s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] = c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1}[c_{\mathbf{k}_1,s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]_+ - [c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]_+ c_{\mathbf{k}_1,s_1} = c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}} \delta_{s_1,s} \tag{16.4}$$

und der zweite Kommutator

$$\begin{aligned}
[c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] &= c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2} [c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]_+ \\
&- c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} [c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]_+ c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1} \\
&= c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\mathbf{k}} \delta_{s_1,s} \\
&- c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1} \delta_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\mathbf{k}} \delta_{s_2,s}.
\end{aligned} \tag{16.5}$$

Damit folgt dann

$$\begin{aligned}
[H, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] &= \epsilon_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}_2 s_2 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2} - \frac{1}{2V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} \\
&= \epsilon_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}.
\end{aligned} \tag{16.6}$$

Dabei wurde in der ersten Summe $\mathbf{q}$ durch $-\mathbf{q}$ und $\mathbf{k}_2$ durch $\mathbf{k}_1$ ersetzt und in der zweiten Summe wurden die beiden Erzeugungs-Operatoren miteinander vertauscht. Man beachte, dass $V_{-\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}}$ wegen der Ununterscheidbarkeit der Elektronen gilt.

Während der erste Term wieder der Erzeugungs-Operator ist, mit dem wir H kommutiert haben, gilt das nicht für den zweiten Term. Wir müssen für diesen eine Näherung vornehmen. Dazu überlegen wir uns, dass einige Einteilchen-Zustände bereits besetzt sind. Das heißt, dass für $\mathbf{k}_1$ unterhalb der Fermikante die Anwendung des Operators $c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1 s_1}$ den Faktor 1 ergibt, während er für $\mathbf{k}$ oberhalb der Fermikante den Faktor 0 ergibt. Man ersetzt aus diesem Grund

$$c^\dagger_{\mathbf{k}+qs} c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} \approx c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \langle c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}\rangle - c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} \langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}\rangle = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}} n_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}s} - \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1} \delta_{s,s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}. \tag{16.7}$$

Damit erhalten wir

$$[H, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] = \Big(\epsilon_{\mathbf{k}} \underbrace{+\frac{1}{V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} V_0 n_{\mathbf{k}_1 s_1}}_{\text{Hartree-Term}} \underbrace{-\frac{1}{V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}}_{\text{Fock-Term}}\Big) c^\dagger_{\mathbf{k}s} = \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}s}. \tag{16.8}$$

Der Hartee-Term $V_0 N/V_{\rm P}$ wird für das Elektronengas durch die Wechselwirkung mit der positiven Ionenladung kompensiert. Analog findet man

$$[H, c_{\mathbf{k}s}] = [c^\dagger_{\mathbf{k}s}, H]^\dagger = -[H, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]^\dagger \approx -\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}. \tag{16.9}$$

Die Anwendung von $c_{\mathbf{k}s}$ ermiedrigt die Energie des Zustandes um $\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}}$.

Noch einige Anmerkungen:

a) Diese Rechnung ist nicht auf den Grundzustand beschränkt. Für endliche Temperaturen hat man $n_{\mathbf{k}s}$ durch den thermischen Erwartungswert zu ersetzen.

b) Wir sind hier von einem translationsinvarianten Hamilton-Operator ausgegangen. Haben wir etwa ein gitterperiodisches Potential und rechnen mit ebenen Wellen, so wird das periodische Einteilchen-Potential zwischen Elektronen und Ionen auf der rechten Seite der Gleichung (16.8) auch Beiträge mit Operatoren $c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{G}s}$ erzeugen, wobei $\mathbf{G}$ reziproke Gittervektoren sind. Dann muss erst ähnlich wie im Abschnitt (11.b) diagonalisiert werden, was auf die Blochzustände führt. Dabei ist zu beachten, dass dann die Besetzungen n selbst-konsistent bestimmt werden müssen. Das führt faktisch auf ein nicht-lineares Gleichungssystem.

16.b Normal-Ordnung

Wir haben oben die Ersetzung (16.7) vorgenommen. Es gibt ein systematisches Verfahren dafür, das als Normal-Ordnung bezeichnet wird. Im Detail findet es sich unter http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~wegner/Wick_Normal.ps . Hier nur einige Bemerkungen dazu. Die Normal-Ordnung wird durch Doppelpunkte gekennzeichnet. Dabei gilt

$$\begin{aligned}
:1: &= 1, &(16.10)\\
:\alpha A(c^\dagger, c) + \beta B(c^\dagger, c): &= \alpha :A(c^\dagger, c): + \beta :B(c^\dagger, c):, &(16.11)\\
c^\dagger_k :A: &= :c^\dagger_k A: + \sum_l \langle c^\dagger_k c_l\rangle :[c^\dagger_l, A]_\pm:, &(16.12)\\
c_k :A: &= :c_k A: + \sum_l \langle c_k c^\dagger_l\rangle :[c_l, A]_\pm:. &(16.13)
\end{aligned}$$

Sie gilt also für bestimmte Erwartungswerte $\langle c^\dagger_k c_l\rangle$, wobei auf Grund der Antikommutator-Beziehung dann natürlich $\langle c_k c^\dagger_l\rangle = \delta_{k,l} - \langle c^\dagger_l c_k\rangle$ gelten muss. Dabei ist $[.., A]_\pm$ als Kommutator auszuwerten für Monome in A mit einer geraden Anzahl von Faktoren c und $c^\dagger$, und als Anti-Kommutator für eine ungerade Anzahl derartiger Faktoren. Grob gesagt wird aus A ein Faktor c_l herausgezogen und in den Erwartungswert $\langle c^\dagger_k c_l\rangle$ hineingezogen, was auf $\langle c^\dagger_k c_l\rangle [c^\dagger_l, A]_\pm$ führt.

Zunächst finden wir

$$c^\dagger_k = :c^\dagger_k:, \quad c_k = :c_k: \tag{16.14}$$

Man muss sich nur vorstellen, man multipliziert $c^\dagger_k$ oder c_k mit $1 =: 1$:.Dann ergibt sich obiges Resultat, da $c^\dagger_l$ und c_l mit der 1 kommutieren. Als nächstes betrachten wir

$$c^\dagger_k c_{k'} = c^\dagger_k :c_{k'}: = :c^\dagger_k c_{k'}: + \sum_l \langle c^\dagger_k c_l\rangle :[c^\dagger_l, c_{k'}]_\pm: = :c^\dagger_k c_{k'}: + \langle c^\dagger_k c_{k'}\rangle \tag{16.15}$$

Ähnlich finden wir

$$c_{k'} c^\dagger_k = :c_{k'} c^\dagger_k: + \langle c_{k'} c^\dagger_k\rangle. \tag{16.16}$$

Addiert man beide Ausdrücke, so findet man

$$:c^\dagger_k c_{k'}: + :c_{k'} c^\dagger_k: = 0. \tag{16.17}$$

Dies ist ein Beispiel für den allgemeinen Satz, dass man unter der Normal-Ordnung Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren miteinander vertauschen kann und dass sich dabei nur das Vorzeichen ändert. Eine δ-Funktion tritt dabei nicht auf. Diese steckt bereits in den abgespaltenen Erwartungs-Werten.

Der normalgeordnete Anteil $:c_k^\dagger c_{k'}:$ stellt die Fluktuation des Operators $c_k^\dagger c_{k'}$ um seinen Mittelwert dar.

Für den obigen Operator $c_{k+qs}^\dagger c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} c_{k+qs}^\dagger c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} &= c_{k+qs}^\dagger (: c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} : + \langle c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} \rangle) \\ &= : c_{k+qs}^\dagger c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} : - : c_{k_1 s_1}^\dagger : \langle c_{k+qs}^\dagger c_{k_1+qs_1} \rangle + : c_{k+qs}^\dagger : \langle c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} \rangle. \end{aligned} \tag{16.18}$$

Wir haben also in der Hartree-Fock-Näherung den Fluktuations-Anteil $: c_{k+qs}^\dagger c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} :$ vernachlässigt.

Die normal geordneten Produkte haben noch eine weitere interessante Eigenschaft. Falls $H - \mu\mathcal{N}$ eine Linearkombination von Operatoren $c_k^\dagger c_l$ ist, dann ist der Erwartungswert im großkanonischen Ensemble beschrieben durch $\mathrm{e}^{-\beta(H-\mu\mathcal{N})}$ für einen Operator $A =: \hat{A}:$ gegeben durch den konstanten Beitrag von $\hat{A}$.

16.c Teilchen-Loch-Anregungen in RPA

Der Operator der Teilchendichte lässt sich

$$\rho(r) = \sum_{i,j} c_i^\dagger c_j \langle i|\rho(r)|j\rangle = \sum_{i,j} c_i^\dagger c_j \phi_i^*(r)\phi_j(r) \tag{16.19}$$

ausdrücken. Verwenden wir als Basis ebene Wellen, so folgt

$$\rho(r) = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',s} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k}',s} \frac{1}{V_\mathrm{P}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \tag{16.20}$$

und deren Fourier-Transformierte schreibt sich

$$\rho(\mathbf{q}) = \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}',\mathbf{k},s} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k}',s} \frac{1}{V_\mathrm{P}} \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k},s} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}. \tag{16.21}$$

Für Operatoren dieses Typs wollen wir nun den Kommutator mit H bilden

$$\begin{aligned} [H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}] &= [H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + c_{\mathbf{k}s}^\dagger [H, c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}] \\ &= (\epsilon_\mathbf{k} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}',\mathbf{k}_1 s_1} V_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \\ &\quad - \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}',\mathbf{k}_1 s_1} V_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'+\mathbf{q}s}. \end{aligned} \tag{16.22}$$

Wir haben Terme der Form $c^\dagger c$ mit H kommutiert und neben Termen dieser Form auch solche vom Typ $c^{\dagger 2} c^2$ erhalten. Wir wenden daher erneut die Normalordnung an und finden

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} &= -\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} \delta_{ss_1} : c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : + \delta_{\mathbf{q}',0} n_{\mathbf{k}_1 s_1} : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \\ &- \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}+\mathbf{q}} \delta_{s_1 s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} : + \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} : c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} : \\ &+ \text{const.} + : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \end{aligned} \tag{16.23}$$

Die ersten beiden Beiträge tragen zur Hartree-Fock-Energie bei, die nächsten beiden sind neu und zeigen, dass zwischen Teilchen und Loch eine Wechselwirkung besteht. Die Konstante tritt nur für $\mathbf{q} = 0$ auf. Der letzte Beitrag ist der Fluktuations-Beitrag, den wir vernachlässigen. Ähnlich gehen wir mit dem letzten Term in (16.22) vor und erhalten schließlich

$$\begin{aligned} [H, : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} :] &= (\epsilon_\mathbf{k}^\mathrm{HF} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\mathrm{HF}) : c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \\ &+ \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} V_\mathbf{q} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} : c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} : - \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} : c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'s} : \end{aligned} \tag{16.24}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \quad \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} n_\mathbf{k} : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'s} : - \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} V_{-\mathbf{q}} n_\mathbf{k} : c^\dagger_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}s_1} c_{\mathbf{k}_1 s_1} : \\
&= \quad (\epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \\
&+ \quad \frac{1}{V_\mathrm{P}} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_\mathbf{k}) V_\mathbf{q} \underbrace{\sum_{\mathbf{k}_1 s_1} : c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} :}_{\rho(\mathbf{q})} - \frac{1}{V_\mathrm{P}} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'s} :
\end{aligned}
\tag{16.25}
$$

Die zweite Summe ist schwierig zu behandeln. Sie wird häufig vernachlässigt. Für kleine $\mathbf{q}$ ist das beim Elektronengas gerechtfertigt, da $V_\mathbf{q}$ divergiert.

Wir setzen nun unseren Operator A als Überlagerung

$$A = \sum_{\mathbf{k},s} a_\mathbf{k} c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \tag{16.26}$$

mit Amplituden a an. Dann folgt durch Einsetzen unter Vernachlässigung der zweiten Summe in (16.25)

$$[H, A] = \sum_{\mathbf{k},s} a_\mathbf{k} (\epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + \frac{2V_\mathbf{q}}{V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_\mathbf{k}) a_\mathbf{k} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}, \tag{16.27}$$

was mit

$$\hbar\omega \sum_{\mathbf{k}s} a_\mathbf{k} c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} \tag{16.28}$$

übereinstimmen soll, wobei $\hbar\omega$ die Anregungsenergie ist. Daraus ergeben sich die Koeffizienten-Gleichungen für $c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}$

$$(\epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega) a_\mathbf{k} + 2V_\mathbf{q} \underbrace{\frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) a_{\mathbf{k}'}}_{C} = 0. \tag{16.29}$$

Mit der zunächst unbekannten Konstanten C finden wir

$$a_\mathbf{k} = \frac{2V_\mathbf{q}}{\hbar\omega + \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k}} C, \tag{16.30}$$

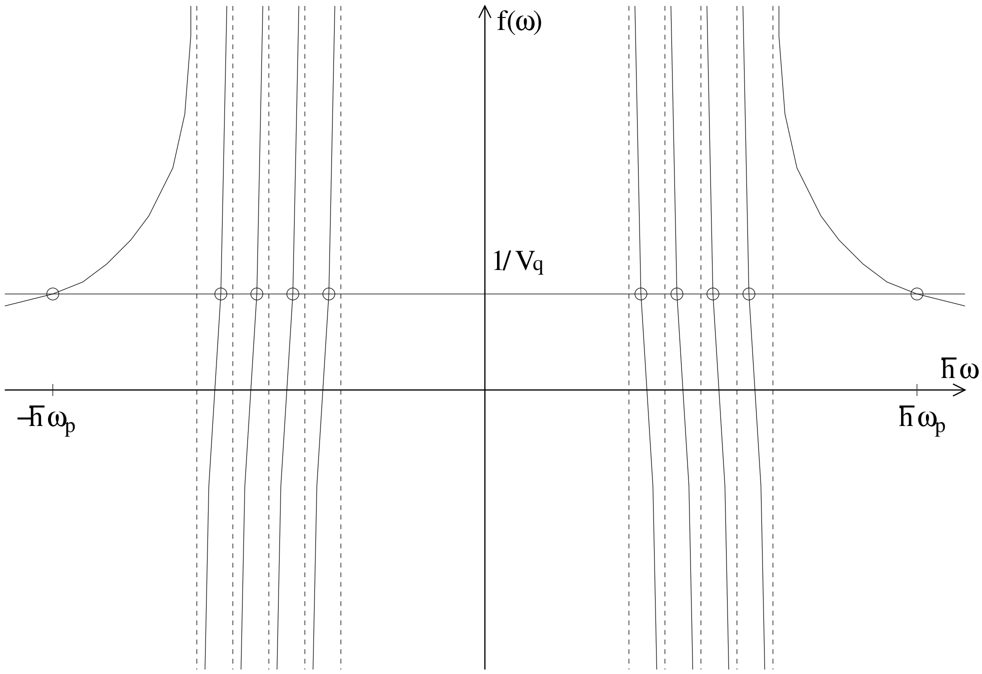
was eingesetzt in die Definition von C auf die Gleichung

$$C = \underbrace{\frac{2V_\mathbf{q}}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}'}}} C \tag{16.31}$$

führt. Dies ist die Eigenwertgleichung für die Anregungsenergie $\hbar\omega$. Daraus folgt entweder $C = 0$, was ein von 0 verschiedenes $a_\mathbf{k}$ nur für $\hbar\omega = \epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ ergibt, oder $C \neq 0$, woraus dann folgt, dass die obige Klammer gleich 1 sein muss, d.h.

$$f(\omega) := \frac{2}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}'}} = \frac{1}{V_\mathbf{q}} \tag{16.32}$$

folgt.



Die Funktion $f(\omega)$ hat Pole bei $\hbar\omega = \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$ und zwar mit positivem (negativem) Residuum bei positivem (negativem) ω, da dort $\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$ und $n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}$ ebenfalls positiv (negativ) sein muss. Zwischen diesen Polen ist die Funktion monoton fallend (steigend). Es gibt also dort jeweils einen Eigenwert. Bei Temperatur $T = 0$ erstreckt sich der Bereich der Pole über ein endliches Intervall, da ein Impuls $\mathbf{k}' + \mathbf{q}$ außerhalb der Fermifläche, der andere $\mathbf{k}'$ innerhalb liegen muss, oder umgekehrt. Das führtt bei gegebenem $\mathbf{q}$ auf eine maximale Energiedifferenz $\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$. Außerhalb kann aber $f(\omega)$ langsam auf $1/V_{\mathbf{q}}$ abfallen, so dass diese Lösung im Gegensatz zu den anderen weit von den Energiedifferenzen $\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$ entfernt liegt. Dies ist eine kollektive Lösung. Charakteristisch ist, dass $a_{\mathbf{k}}$ nur langsam variiert.

Diese kollektive Lösung betrachten wir etwas genauer: Für kleine q nehmen wir an, dass $\hbar\omega \gg \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$. Wir setzen noch $V_{\mathbf{q}}$ für das Coulomb-Potential (15.54) ein und entwickeln in Gleichung (16.32)

$$\begin{aligned} & \frac{4\pi e^2}{q^2}\frac{2}{V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k}'}\frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'}} \\ = & \frac{8\pi e^2}{V_{\rm P} q^2}\left(\frac{1}{\hbar\omega}\sum_{\mathbf{k}'}(n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) + \frac{1}{(\hbar\omega)^2}\sum_{\mathbf{k}'}(\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})(n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) + ...\right) = 1 \end{aligned} \quad (16.33)$$

Nun ist $\sum_{\mathbf{k}'}(n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) = 0$, da die Anzahl der Elektronen von der gleichen Anzahl abgezogen wird. Den nächsten Term formen wir für kleines q um

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}'}(\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{k}'}(\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})n_{\mathbf{k}'} &= \sum_{wk'}(\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - 2\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} + \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})n_{\mathbf{k}'} \\ = \sum_{\mathbf{k}'} q_\alpha q_\beta \frac{{\rm d}^2\epsilon_{\mathbf{k}'}}{{\rm d}k'_\alpha {\rm d}k'_\beta} n_{k'} &= \sum_{\mathbf{k}'}\hbar^2 q_\alpha q_\beta \left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} n_{\mathbf{k}'}. \end{aligned} \quad (16.34)$$

Im isotropen Fall ist das dann gleich $\hbar^2 q^2 N/(2m^*)$, wobei $1/m^*$ über die besetzten Zustände gemittelt wird. Damit ergibt sich als Frequenz die Plasmafrequenz

$$\omega_{\rm P}^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m^*}. \quad (16.35)$$

16.d Plasmonen-Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Die Plasmonen sind Ladungsschwingungen, die näherungsweise Bosonen sind. Die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren kann man folgendermaßen einführen:

$$A^\dagger_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}, \quad a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \frac{2V_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega_{\mathrm{p}} + \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}}} \tag{16.36}$$

mit einer Normierung $C_{\mathbf{q}}$. Wir betrachten den Kommutator

$$[A_{\mathbf{q}'}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] = \sum_{\mathbf{k}s} (a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} a_{\mathbf{q}',\mathbf{k}} - a_{\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}. \tag{16.37}$$

Für $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ ersetzt man $c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \approx n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ und erhält

$$\begin{aligned} [A_{\mathbf{q}}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] &= 8V^2_{\mathbf{q}} C^2_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{(\hbar\omega_{\mathrm{p}} + \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}})^2} \\ &= -4V^2_{\mathbf{q}} C^2_{\mathbf{q}} V_{\mathrm{P}} \left. \frac{\mathrm{d}f(\omega)}{\mathrm{d}\omega} \right|_{\omega=\omega_{\mathrm{p}}} \end{aligned} \tag{16.38}$$

Diesem Ausdruck entnimmt man, dass $C_{\mathbf{q}} = O(1/\sqrt{V_{\mathrm{P}}})$, damit der Kommutator $[A_{\mathbf{q}}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] = 1$ wird. Man erhält also

$$A^\dagger_{\mathbf{q}} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}} \sum_{\mathbf{k}s} ... c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}, \tag{16.39}$$

$$[A_{\mathbf{q}'}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] \propto \frac{1}{V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}s} ... c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}} A^\dagger_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \text{ für } \mathbf{q} \neq \mathbf{q}' \tag{16.40}$$

$$[A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}] \propto \frac{1}{V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}s} ... c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}} A_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'}. \tag{16.41}$$

Speziell $[A_{\mathbf{q}}, A_{-\mathbf{q}}]$ verschwindet, falls nur $\epsilon_{-\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$. Wegen der Faktoren $1/\sqrt{V_{\mathrm{P}}}$ können diese Kommutatoren häufig vernachlässigt werden. Man führt dann den Plasmonen-Anteil

$$\sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathrm{p}} A^\dagger_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} \tag{16.42}$$

separat im Hamilton-Operator mit den Bosonen-Kommutator-Beziehungen

$$[A_{\mathbf{q}'}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}, \quad [A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}] = 0 \tag{16.43}$$

ein.