Aufgabe 11.1 Suszeptibilität in der RPA

Der zweitquantisierte Hamiltonian eines wechselwirkenden Elektronensystems mit uniformem Ionenhintergrund ist gegeben durch

$$H = \sum_{\mathbf{p},\sigma} \epsilon_{\mathbf{p}} c^\dagger_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p},\sigma} + \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q},\sigma\sigma'} \frac{V_{\mathbf{q}}}{2} c^\dagger_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} c^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{p}',\sigma'} c_{\mathbf{p},\sigma}, \tag{1}$$

wobei $V_{\mathbf{q}} = (4\pi e^2/q^2)(1-\delta_{\mathbf{q}=0})$. Die Kopplung der Dichte ρ an ein elektrisches Feld ϕ erfolgt über den Term $\lim_{\eta\to 0^+}[e\rho^\dagger_{\mathbf{q}}\phi_{\text{ext}}(\mathbf{q},\omega)e^{-i\omega t+\eta t}+\text{h.c.}]$. Die Antwort des Systems ist der Erwartungswert des Dichteoperators $\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{p}\sigma} c^\dagger_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}$. Man kann sie über die Bewegungsgleichungen

$$i\dot{\rho}_{\mathbf{pq},\sigma} = [\rho_{\mathbf{pq},\sigma}, H] \tag{2}$$

bestimmen, wobei $\rho_{\mathbf{pq},\sigma} \equiv c^\dagger_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}$.

i. In der Hartree-Fock Näherung (HFA) wird angenommen, dass die elektronische Struktur durch die Elektron-Elektron Wechselwirkung nicht verändert wird. Zeige unter dieser Annahme ($V_q = 0$), dass

$$\begin{aligned} i\dot{\rho}_{\mathbf{pq},\sigma} &= (\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}}) c^\dagger_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} + (c^\dagger_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p},\sigma} - c^\dagger_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}) e\phi_{\text{ext}} e^{-i\omega t+\eta t} + \\ &\quad + (c^\dagger_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p}+2\mathbf{q},\sigma} - c^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}) e\phi_{\text{ext}} e^{i\omega t+\eta t} \end{aligned} \tag{3}$$

Berechne den Erwartungswert von (3) im nichtwechselwirkenden Grundzustand und bestimme damit $\langle\rho_{\mathbf{q}}\rangle$. Zeige, dass die Suszeptibiliät $\chi(\mathbf{q},\omega) = \langle\rho_{\mathbf{q}}\rangle/e\phi_{\text{ext}}$ in der HFA gegeben ist durch

$$\chi_{\text{HFA}} = \chi_0 = 2\sum_{\mathbf{p}} \frac{n^0_{\mathbf{p}} - n^0_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{\omega - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}} + i\eta}. \tag{4}$$

ii. Jetzt berücksichtigen wir die Elektron-Elektron Wechselwirkung. Zeige, dass diese einen Term von der Form

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}}{2} \Big[\rho_{\mathbf{k}}(c^\dagger_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k},\sigma} - c^\dagger_{\mathbf{p}+\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}) + (c^\dagger_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k},\sigma} - c^\dagger_{\mathbf{p}+\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma})\rho_{\mathbf{k}}\Big] \tag{5}$$

zur Bewegungsgleichung Gl. (3) hinzufügt. In der Random Phase Approximation (RPA) wird nur der Term mit $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ berücksichtigt; dies ist der Ursprung des Begriffs RPA. Zeige, dass der Erwartungswert von (5) im nichtwechselwirkenden Grundzustand gegeben ist durch $V_{\mathbf{q}}\langle\rho_{\mathbf{q}}\rangle(n^0_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})$. Bestimme die Suszeptibilität

$$\chi_{\text{RPA}} = \frac{\chi_{\text{HFA}}}{1 - (4\pi e^2/q^2)\chi_{\text{HFA}}} \tag{6}$$

und zeige, dass die abgeschirmte Suszeptibiliät in der RPA einfach die HFA Suszeptibilät reproduziert, also $\chi^{\text{sc}}_{\text{RPA}} = \chi_{\text{HFA}}$.

iii. Vergleiche die RPA Bewegungsgleichungen im langwelligen Grenzfall $q \to 0$ mit der Landau-Silin Transportgleichung mit der Beziehung $\langle\rho_{\mathbf{pq}}\rangle = \delta n_{\mathbf{p}}(\mathbf{q},\omega)$. Was ist die RPA in diesem Zusammenhang?

iv. * Beschreibe, wie man die Bewegungsgleichungen (3) und (5) mit Diagrammen darstellt. Zeige dann wie in der RPA, $\mathbf{q} = \mathbf{k}$, die Suszeptibilität als unendliche Reihe geschrieben werden kann.