

# Über den Zusammenhang zwischen Selbstenergiefunktional und Ansprechfunktion eines wechselwirkenden Elektronengases

W. KESSEL

Mitteilung aus der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt, Braunschweig

(Z. Naturforsch. 24 a, 1871—1878 [1969]; eingegangen am 18. September 1969)

By linearizing the Dyson equation of the electron gas in an externally applied force field an integral equation for the adiabatic response function is derived. Its relation to the electron self-energy is considered which leads to certain approximations in the response function if the self-energy functional is given. This is illustrated for the case that the self-energy is a linear functional of the electron Green's function.

Bei der Behandlung des Elektronengases unter Einschluß der abstoßenden Coulomb-Wechselwirkung und etwaiger Streuungen an Verunreinigungen oder Gitterschwingungen mit der Methode der Vierteilchen-Green-Funktionen erhält man eine Dyson-Gleichung, die die Elektron-Green-Funktion zur Selbstenergie in Beziehung setzt. Dabei ist die Selbstenergie wiederum ein Funktional der zu berechnenden exakten Elektron-Green-Funktion. Diese Dyson-Gleichung wird gelöst, indem man durch Abschätzung der einzelnen zum Selbstenergiefunktional beitragenden Terme einen Näherungsansatz herleitet, mit diesem in die Dyson-Gleichung eingeht und nach der Elektron-Green-Funktion auflöst. Dabei wird der verwendete Näherungsansatz für das Selbstenergiefunktional i. allg. in der zu berechnenden Elektron-Green-Funktion linear angesetzt.

Unterwirft man das Elektronengas einer äußeren Störung in Form einer von außen wirkenden Kraft, so antwortet es mit einer Änderung der zu beobachtenden Werte seiner dynamischen Variablen. So stellt sich z. B. beim Einschalten eines elektrischen Feldes ein elektrischer Strom ein. Innerhalb der Theorie des linearen Responses sind die Änderungen mit der auf das System einwirkenden Kraft durch die Ansprechfunktion in linearer Weise verknüpft. Auf Grund von Abschätzungen, die zu denen analog sind, die zur Lösung der Dyson-Gleichung führen, kann man eine lineare inhomogene Integralgleichung für die Ansprechfunktion gewinnen, in der im wesentlichen der gleiche Kern auftritt wie in der linearen Näherung des Selbstenergiefunktionalen.

In dieser Arbeit soll gezeigt werden, daß der Kern der die Ansprechfunktion bestimmenden Inte-

gralgleichung durch das Selbstenergiefunktional eindeutig festgelegt ist, und somit jede Näherung im Selbstenergiefunktional eine bestimmte Näherung in der Ansprechfunktion impliziert. Dazu werden im ersten Abschnitt die Formeln der Theorie des linearen Responses, wie sie von KUBO<sup>1</sup> entwickelt wurde, in einer für das Folgende geeigneten Form zusammengestellt. Im zweiten Abschnitt wird die Temperatur-Ansprechfunktion eingeführt, wodurch, wie MATSUBARA<sup>2</sup> gezeigt hat, die Behandlung thermischer Systeme nach der Diagrammtechnik möglich wird. Im dritten Abschnitt wird die Integralgleichung für die Ansprechfunktion aufgestellt und ihr Zusammenhang mit der Dyson-Gleichung erörtert, während in Abschnitt vier die allgemeinen Gleichungen auf den Fall eines linearen Selbstenergiefunktionalen spezialisiert werden.

## 1. Allgemeine Ansprechfunktion

Um die Änderung des Wertes einer dynamischen Variablen unter dem Einfluß einer äußeren Kraft zu berechnen, benutzen wir die von KUBO<sup>1</sup> entwickelte Theorie des linearen Responses. Dazu betrachten wir ein Elektronengas mit dem Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$ , in dem die kinetische Energie der Elektronen und ihre Wechselwirkung zusammengefaßt sei. Bei Berücksichtigung der Bewegung des Ionenhintergrundes soll  $\hat{H}_0$  auch die Energie der Ionenschwingungen und ihre Wechselwirkung mit den Elektronen enthalten. Wird dieses System einer äußeren Störung ausgesetzt, die mit der Kraft  $f(t)$  an der Systemgröße  $B$  angreift, so ist der Hamilton-Operator des gestörten Systems

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{B} f(t). \quad (1)$$

<sup>1</sup> R. KUBO, J. Phys. Soc. Japan **12**, 570 [1957].

<sup>2</sup> T. MATSUBARA, Progr. Theor. Phys. **14**, 351 [1955].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

Im Heisenberg-Bild wird die Zeitabhängigkeit der Operatoren durch

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t) \hat{A} \hat{U}(t) \quad (2)$$

gegeben, wobei für den zeitlichen Entwicklungsoperator  $\hat{U}(t)$  die Bewegungsgleichung gilt:

$$i\hbar \dot{\hat{U}}(t) = \hat{H} \hat{U}(t). \quad (3)$$

Der Index „H“ an den Operatoren soll darauf hinweisen, daß die Zeitabhängigkeit bezüglich des Hamilton-Operators (1) des gestörten Systems zu nehmen ist.

Ist  $\hat{W}$  der statistische Operator des Systems, so ist der Mittelwert des Operators  $\hat{A}$ :

$$A(t) = \langle \hat{A}_H(t) \rangle = \text{Spur}(\hat{A}_H(t) \hat{W}_H(t)). \quad (4)$$

Für Prozesse, bei denen  $\hat{W}_H$  durch die Störung nicht beeinflußt wird, ist

$$\dot{A}(t) = \langle \dot{\hat{A}}_H(t) \rangle. \quad (5)$$

Nach der Definition der Entropie bedeutet die an  $\hat{W}_H$  gestellte Bedingung, daß

$$\dot{S} = -k_B d\langle \ln \hat{W}_H \rangle / dt = 0. \quad (6)$$

Hierbei ist  $k_B$  die Boltzmann-Konstante. Diese Gleichung sagt aus, daß der Prozeß in (5) adiabatisch abläuft und daß daher die mit (5) berechnete Ansprechfunktion die sog. adiabatische Ansprechfunktion ist. (Auf den Zusammenhang zur isothermen Ansprechfunktion hat BRENIG<sup>3</sup> hingewiesen. Er zeigt auch, daß die beiden Ansprechfunktionen in den meisten Fällen übereinstimmen.)

Wird die Störung zur Zeit  $t_0$  eingeschaltet, so läßt sich der zeitliche Entwicklungsoperator auf die Form bringen

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_0(t) \hat{S}(t) \hat{U}_0^+(t_0). \quad (7)$$

Es ist

$$\hat{U}_0(t) = \exp\{-i/\hbar \hat{H}_0 t\} \quad (8)$$

der zeitliche Entwicklungsoperator des ungestörten Systems und

$$\hat{S}(t) = T_t \exp\{-i/\hbar \int_{-\infty}^t dt' \hat{H}_1(t')\}, \quad (9)$$

mit

$$\hat{H}_1(t) = -\hat{B}(t) f(t), \quad \hat{B}(t) = \hat{U}_0^+(t) \hat{B} \hat{U}_0(t). \quad (10)$$

In (9) bedeutet  $T_t$  das Zeitordnungssymbol, das die Anweisung gibt, die Operatoren in den dahinter

stehenden Produkten nach wachsenden Zeiten von rechts nach links zu ordnen. Die Integration über die Zeit ist in (9) von  $-\infty$  bis  $t$  geführt, wobei  $f(t)$  für Zeiten vor dem Einschaltzeitpunkt  $t_0$  gleich Null gesetzt wird. Später werden wir eine zur Zeit  $t_0 = -\infty$  adiabatisch eingeschaltete Störung annehmen! Schließlich muß in (9) und (10) beachtet werden, daß die Zeitabhängigkeit der Operatoren mit dem Hamilton-Operator  $H_0$  zu berechnen ist. Da die Zeitabhängigkeit (10) im Heisenberg-Bild des ungestörten Systems betrachtet wird, wird hier der früher benutzte Index „H“ überflüssig.

Halten wir nun das System vor dem Einschalten der Störung im thermischen Gleichgewicht mit einem Wärmebad der Temperatur  $T$ , so hat der statistische Operator die Form:

$$\begin{aligned} \hat{W}_0 &= (1/Z_0) \exp(-\beta \hat{H}_0), \\ Z_0 &= \text{Spur}(\exp(-\beta \hat{H}_0)). \end{aligned} \quad (11)$$

Hierbei ist  $\beta = 1/k_B T$ . Da der statistische Operator bei der vorausgesetzten adiabatischen Prozeßführung zeitunabhängig ist, liefern (2), (7) und (11) für den Mittelwert (4)

$$A(t) = \langle \hat{S}^+(t) \hat{A}(t) \hat{S}(t) \rangle_0. \quad (12)$$

An der Mittelungsklammer ist hier der Index „0“ angebracht, wodurch angedeutet werden soll, daß sowohl für die Zeitabhängigkeit der Operatoren als auch für die statistische Mittelung der Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$  des ungestörten Systems zu verwenden ist.

Wir linearisieren Gl. (12) in der äußeren Störung und erhalten, wenn der Mittelwert des Operators  $A$  vor dem Einschalten der Störung verschwindet:

$$A(t) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt' P_{AB}^r(t, t') f(t'). \quad (13)$$

Dabei wird der lineare Response des Systems gegenüber der äußeren Kraft durch die Ansprechfunktion

$$P_{AB}^r(t, t') = (1/i\hbar) \langle [A(t), B(t')]_- \rangle_0 \Theta(t-t'). \quad (14)$$

vermittelt, die sich als die retardierte Green-Funktion der beiden Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  herausstellt. Das Symbol  $[., .]_-$  ist der Kommutator der beiden Operatoren und  $\Theta(t)$  die Sprungfunktion, die für  $t < 0$  den Wert null und für  $t > 0$  den Wert eins annimmt. Betrachtet man eine zur Zeit  $t_0 = -\infty$  adiabatisch eingeschaltete in der Zeit periodische Störung

$$f(t) = f_\omega \exp(i\omega t + \eta t) \quad (\eta \rightarrow 0^+),$$

so erhält man

$$A_\omega = P_{AB}^r(\omega) f_\omega.$$

Dabei ist

$$P_{AB}^r(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} dt P_{AB}^r(t) \exp(i\omega t + \eta t) \quad (15)$$

die zeitliche Fourier-Transformierte der retardierten Green-Funktion (14). Wie hier werden auch im Folgenden Originalfunktion und Fourier-Transformierte durch die Wahl des Argumentbuchstabens voneinander unterschieden.

Gleichung (13) liefert den gesuchten Zusammenhang zwischen der auf das System einwirkenden Kraft und der beobachteten Änderung des Mittelwertes von  $A$ . Dabei tritt die Ansprechfunktion (14) als vermittelndes Glied auf. Sie ist nach der hier gegebenen Herleitung als retardierte Green-Funktion aufzufassen. Gegenüber der von KUBO<sup>1</sup> eingeführten Form der Ansprechfunktion hat diese Darstellung den Vorteil, daß bei Rechnungen die allgemeinen Sätze über Green-Funktionen<sup>4, 5</sup> benutzt werden können. Da die Response-Gleichung linear ist und jede hinreichend vernünftige Funktion als Fourier-Entwicklung geschrieben werden kann, verliert man beim Übergang zu den Fourier-Transformierten nichts an Allgemeinheit.

## 2. Temperatur-Ansprechfunktion

Nachdem im vorigen Abschnitt die Ansprechfunktion eines Systems gegenüber einer Störung definiert wurde, soll jetzt eine Methode angegeben werden, nach der die Ansprechfunktion berechnet werden kann. Diese Methode geht auf ABRIKOSOV, GORKOV und DZYALOCHINSKI<sup>5</sup> zurück, die mit ihr das Verhalten eines Supraleiters in schwachen magnetischen Feldern diskutiert haben. Das Verfahren wird hier in allgemeiner Form dargestellt, um eine einheitliche Basis für den folgenden Abschnitt zu haben. Dabei soll die übliche Diagrammtechnik der Vierteilchensysteme benutzt werden. Wie MATSUBARA<sup>2</sup> gezeigt hat, ist die in (14) eingeführte, der physikalischen Interpretation direkt zugängliche Green-Funktion dafür nicht geeignet. Man kann diese Schwierigkeit umgehen, wenn man ima-

ginäre Zeitargumente verwendet und zur Temperatur-Green-Funktion übergeht.

Betrachten wir dazu den statistischen Operator (11) des ungestörten Systems. Schreibt man ihn in der Form

$$W_0 = (1/Z_0) \hat{\varphi}_0(\beta),$$

so genügt der Anteil  $\hat{\varphi}_0(\beta)$  der Blochschen Gleichung<sup>6</sup>:

$$d\hat{\varphi}_0(\tau)/d\tau = -H_0 \hat{\varphi}_0(\tau), \quad \hat{\varphi}_0(1) = 1.$$

In Analogie zum zeitabhängigen Fall, kann man nun einen Hamilton-Operator benutzen, der eine von  $\tau$  abhängige Störung enthält

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{B} g(\tau). \quad (16)$$

Die Lösung der Blochschen Gleichung hat jetzt die Form

$$\hat{\varphi}(\tau) = \hat{\varphi}_0(\tau) \hat{S}(\tau, 0) \quad (17)$$

mit

$$\hat{S}(\tau, 0) = T_\tau \exp \left\{ - \int_0^\tau d\tau' H_1(-i\hbar\tau') \right\}. \quad (18)$$

$T_\tau$  ist das Ordnungssymbol bezüglich der Variablen  $\tau$ . Für den fiktiven von  $\tau$  abhängigen Mittelwert

$$A(\tau) = \text{Spur} (\hat{\varphi}(\beta) \hat{\varphi}(-\tau) \hat{A} \hat{\varphi}(\tau)) / \text{Spur} (\varphi(\beta)) \quad (19)$$

ergibt sich dann:

$$A(\tau) = \langle T_\tau \{ A(-i\hbar\tau) S(\beta, 0) \} \rangle_0 / \langle S(\beta, 0) \rangle_0. \quad (20)$$

Wie in (12) soll der Index „0“ an der Mittelungsklammer darauf hinweisen, daß für die statistische Mittelung und die Zeithängigkeit der Operatoren der Hamilton-Operator des ungestörten Systems zu verwenden ist. Durch Linearisierung von (20) nach der Störung erhält man, wenn man den Mittelwert von  $A$  für das ungestörte System gleich null setzt:

$$A(\tau) = - \int_0^\beta d\tau' \hat{P}_{AB}(\tau - \tau') g(\tau') \quad (21)$$

mit der Temperatur-Green-Funktion

$$\hat{P}_{AB}(\tau - \tau') = - \langle T_\tau \{ A(-i\hbar\tau) B(-i\hbar\tau') \} \rangle_0. \quad (22)$$

<sup>3</sup> W. BRENIG, Z. Phys. **206**, 212 [1967].  
<sup>4</sup> D. N. ZUBAREV, Soviet Phys. Uspekhi **3**, 320 [1960].  
<sup>5</sup> A. A. ABRIKOSOV, L. P. GORKOV u. I. E. DZYALOCHINSKI, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics, Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1963.

<sup>6</sup> D. J. THOULESS, The Quantum Mechanics of Many-Body Systems, Academic Press, Inc., New York 1961.

Da die Störfunktion  $g(\tau)$  nur in dem Intervall  $0 < \tau < \beta$  definiert ist, kann man sie über diesen Bereich hinaus periodisch fortsetzen und durch eine Fourier-Reihe darstellen. Auf Grund der Linearität der Beziehung (21) braucht man dann nur Störfunktionen der Form

$$g(\tau) = (1/\beta) g_n \exp(-i \zeta_n \tau), \\ \zeta_n = 2\pi n/\beta \quad (n=0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (23)$$

zu betrachten und erhält

$$A_n = \mathfrak{P}_{AB}(i \zeta_n) g_n, \quad (24)$$

wobei

$$\mathfrak{P}_{AB}(i \zeta_n) = \int_0^\beta d\tau \mathfrak{P}_{AB}(\tau) \exp(-i \zeta_n \tau) \quad (25)$$

der Fourier-Koeffizient der Temperatur-Green-Funktion ist. Auf Grund der allgemeinen Eigenschaften der Greenschen Funktionen<sup>4, 5</sup> lässt sich  $\mathfrak{P}_{AB}(i \zeta_n)$  mit der Fourier-Transformierten (15) der retardierten Green'schen Funktion in Beziehung setzen durch

$$\mathfrak{P}_{AB}(i \zeta_n) = P_{AB}^R(i \zeta_n/\hbar), \quad \zeta_n > 0. \quad (26)$$

Diese Gleichung zeigt, welchen Vorteil es bietet, an Stelle der Kuboschen Formulierung die Ansprechfunktion als retardierte Green-Funktion der Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  aufzufassen. Da die Temperatur-Green-Funktion für das Elektronengas, wie im nächsten Abschnitt genauer ausgeführt wird, berechnet werden kann, wird man durch (26) auf folgende Methode zur Bestimmung der Fourier-Transformierten der Ansprechfunktion geführt: Man führt in den Hamilton-Operator nach (16) eine Störung der Form (23) ein und berechnet die in der Störung lineare Änderung des Mittelwertes (19). Nach (23) ergibt sich hieraus der Fourier-Koeffizient der Temperatur-Green-Funktion. Diesen setzt man von den Stellen  $i \zeta_n$  in die obere  $\omega$ -Halbebene nach (26) fort. Die Werte auf der reellen Achse dieser Fortsetzung liefern die gesuchte Fourier-Transformierte der Ansprechfunktion.

### 3. Integralgleichung für die Ansprechfunktion

Für die Temperatur-Ansprechfunktion (22) kann jetzt eine Integralgleichung hergeleitet werden, indem man auf die Teilchen-Green-Funktionen des Elektronengases zurückgreift. Dazu denken wir uns Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ ,  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ , die den Fermi-Vertauschungsrelationen ge-

nügen, eingeführt, und alle übrigen Operatoren mit diesen ausgedrückt. So ist z. B.

$$\hat{A} = \int d^3x \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) A(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}). \quad (27)$$

Hierbei ist  $\mathbf{x}$  der Ortsvektor mit den Komponenten  $x_1, x_2, x_3$  und  $d^3x$  das Volumenelement. Die Integration ist über das Periodizitätsvolumen des Systems zu erstrecken. Der Teilchenspin ist nicht berücksichtigt, um die Schreibweise der Formeln einfacher zu halten. Man kann ihn aber im Ortsvektorsymbol  $\mathbf{x}$  enthalten denken und dann die Raumintegration auch noch zusätzlich als Summation über die Spinindizes interpretieren.

Faßt man den Ortsvektor  $\mathbf{x}$  mit der gleichzeitig auftretenden Temperaturvariablen  $\tau$  zu  $x = (\mathbf{x}, \tau)$  zusammen, so ist der gesuchte Mittelwert (20) des Operators  $\hat{A}$

$$A(\tau) = \int d^3x A(\mathbf{x}) \mathfrak{G}(x, x')_{x' \rightarrow x\tau+0}. \quad (28)$$

Hierbei tritt die Teilchen-Green-Funktion  $\mathfrak{G}(x, x')$  für das gestörte System auf, die der in Abb. 1 durch Diagramme symbolisierten Dyson-Gleichung genügt:

$$\begin{aligned} & \mathfrak{G}(x_1, x_1') \\ &= \mathring{\mathfrak{G}}(x_1, x_1') + \int_0^\beta dx_2 \mathring{\mathfrak{G}}(x_1, x_2) h_s(x_2) \mathfrak{G}(x_2, x_1') \\ &+ \int_0^\beta dx_2 dx_2' \mathring{\mathfrak{G}}(x_1, x_2) \Sigma(x_2, x_2') \mathfrak{G}(x_2', x_1'). \end{aligned} \quad (29)$$

Die Integration mit dem vierdimensionalen Volumenelement  $dx = d\tau d^3x$  läuft in der Ortsvariablen  $\mathbf{x}$  über das Periodizitätsvolumen und in der Temperaturvariablen von 0 bis  $\beta$ . In dieser Weise sind auch die Integrale in den folgenden Formeln zu interpretieren.  $\mathring{\mathfrak{G}}(x, x')$  ist die thermische Green-Funktion des Elektronengases ohne Berücksichtigung der äußeren Störung und der Wechselwirkungen zwischen den Teilchen.  $h_s(x)$  ist der in der Einteilchen-Schrödinger-Gleichung durch die Störung hervorgerufene Term

$$h_s(x) = B(\mathbf{x}) g(x), \quad (30)$$

wobei gleichzeitig eine räumliche Verteilung der Störung vorausgesetzt wird.  $\Sigma(x, x')$  ist das Selbstenergiiefunktional des Elektronengases. Es enthält explizit nur die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen und die Temperatur-Green-Funktionen des Systems, jedoch nicht die äußere Störung. Letztere tritt nur mittelbar auf, und zwar über die Teilchen-Green-Funktionen. Für die Ansprechfunktion werden die in der Störung linearen Terme benötigt. Sie mögen durch ein vorgesetztes  $\delta$  hervorgehoben

werden. Den in der störenden Kraft linearen Teil des Mittelwertes (27) erhält man, indem man dort die exakte Temperatur-Green-Funktion  $\mathfrak{G}(x, x')$  durch  $\delta\mathfrak{G}(x, x')$  ersetzt, während man die Bestim-



Abb. 1. Graphische Darstellung der Dyson-Gleichung eines wechselwirkenden Elektronengases, das einer äußeren Kraft ausgesetzt ist.

mungsgleichung für  $\delta\mathfrak{G}(x, x')$  durch Linearisierung der Dyson-Gleichung nach der Störfunktion erhält

$$\begin{aligned} \delta\mathfrak{G}(x_1, x_1') = & \int_0^\beta dx_2 \mathring{\mathfrak{G}}(x_1, x_2) h_s(x_2) \mathfrak{G}_0(x_2, x_1') \\ & + \iint_0^\beta dx_2 dx_2' \mathring{\mathfrak{G}}(x_1, x_2) \delta\Sigma(x_2, x_2') \mathfrak{G}_0(x_2', x_1') \\ & + \iint_0^\beta dx_2 dx_2' \mathring{\mathfrak{G}}(x_1, x_2) \Sigma_0(x_2, x_2') \delta\mathfrak{G}(x_2', x_1'). \end{aligned} \quad (31)$$

$\mathfrak{G}_0(x, x')$  ist die thermische Green-Funktion des Elektronengases ohne den Einfluß der äußeren Störung jedoch unter Einschluß der Coulomb-Abstoßung oder etwaiger Streuungen an Störatomen und Gitterschwingungen.  $\Sigma_0(x, x')$  ist die zugehörige Selbstenergie.  $\mathring{\mathfrak{G}}(x, x')$  befriedigt die Gleichung

$$\left\{ -\frac{\partial}{\partial \tau} - h(\mathbf{x}) \right\} \mathring{\mathfrak{G}}(x, x') = \delta(x - x')$$

mit dem Hamilton-Operator  $h(\mathbf{x})$  der Einteilchen-Schrödinger-Gleichung des ungestörten Systems. Durch Multiplikation von (31) mit dem hier auf der linken Seite stehenden Operator erhält man

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\partial}{\partial \tau} - h(\mathbf{x}) \right\} \delta\mathfrak{G}(x, x') - & \int_0^\beta dx_2 \Sigma_0(x, x_2) \delta\mathfrak{G}(x_2, x') \\ = & h_s(x) \mathfrak{G}_0(x, x') + \int_0^\beta dx_2 \delta\Sigma(x, x_2) \mathfrak{G}_0(x_2, x'). \end{aligned} \quad (32)$$

Durch Umordnung der zur thermischen Green-Funktion beitragenden Diagramme findet man für  $\mathfrak{G}_0(x, x')$  die Dyson-Gleichung in der Form

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}_0(x, x') = & \mathring{\mathfrak{G}}(x, x') \cdot \\ & + \iint_0^\beta dx_2 dx_2' \mathfrak{G}_0(x, x_2) \Sigma_0(x_2, x_2') \mathring{\mathfrak{G}}(x_2', x'), \end{aligned}$$

wobei gegenüber der üblichen Formulierung  $\mathring{\mathfrak{G}}(x, x')$  und  $\mathfrak{G}(x, x')$  im zweiten Glied der rechten Seite vertauscht sind. Ebenso genügt  $\mathring{\mathfrak{G}}_0(x, x')$  der Glei-

chung

$$\left\{ -\frac{\partial}{\partial \tau} - h(\mathbf{x}') \right\} \mathring{\mathfrak{G}}(x, x') = \delta(x - x').$$

Multipliziert man daher (32) mit  $\mathfrak{G}_0(x, x')$  und integriert über  $x$ , so liefert eine partielle Integration unter Benutzung der letzten beiden Gleichungen

$$\begin{aligned} \delta\mathfrak{G}(x, x') = & \int_0^\beta dx_1 \mathfrak{G}_0(x, x_1) h_s(x_1) \mathfrak{G}_0(x_1, x') \\ & + \iint_0^\beta dx_1 dx_1' \mathfrak{G}_0(x, x_1) \delta\Sigma(x_1, x_1') \mathfrak{G}_0(x_1, x'). \end{aligned}$$

Nach der oben gemachten Bemerkung über die Selbstenergie hängt diese von der Störung der mittelbar über die Teilchen-Green-Funktionen ab, so daß die benötigte lineare Änderung gegeben wird durch

$$\delta\Sigma(x_1, x_1') = \iint_0^\beta dx_2 dx_2' V(x_1 x_2; x_1' x_2') \delta\mathfrak{G}(x_2', x_2). \quad (33)$$

Die Tatsache, daß die Störung in dem Selbstenergiefunktional nicht unmittelbar auftritt, kann nun noch zur Bestimmung der Funktion  $V(x_1 x_2; x_1' x_2')$  ausgenutzt werden, da dann der Funktionalzusammenhang zwischen der Selbstenergie und der Teilchen-Green-Funktion im gestörten und im ungestörten Elektronengas der gleiche ist.

Die Funktion  $V(x_1 x_2; x_1' x_2')$ , die die Änderung in der Teilchen-Green-Funktion auf die Änderung der Selbstenergie hinüberwälzt, wird somit durch die Eigenschaften des ungestörten Systems eindeutig festgelegt; man erhält sie, indem man entsprechend (33) die sich bei einer Änderung der Green-Funktion für das ungestörte System einstellende lineare Änderung der Selbstenergie berechnet.

Nach Gl. (28) oder der ihr entsprechenden Gleichung für die lineare Änderung erscheint es nun sinnvoll, von der ursprünglichen Definition der Ansprechfunktion (14) etwas abzugehen und die Funktion  $A(\mathbf{x})$  abzuspalten. Das kann andererseits auch so geschehen, daß aus  $\delta\mathfrak{G}(x, x')$  die Störfunktion  $g(x)$  herausgezogen wird. Berücksichtigt man (21) und (30), so sieht man, daß die neue Ansprechfunktion in der Form auftritt:

$$\delta\mathfrak{G}(x, x') = \int_0^\beta dx_1 \Pi_B(x, x'; x_1) g(x_1). \quad (34)$$

Aus den Gleichungen für  $\delta\mathfrak{G}(x, x')$  folgt dann mit (33) und (34) die Integralgleichung

$$\begin{aligned} \Pi_B(x, x'; x'') &= \mathcal{G}_0(x, x'') B(\mathbf{x}'') \mathcal{G}_0(x'', x) \\ &+ \int_0^{\beta} \int \int dx_1 dx_1' dx_2 dx_2' \mathcal{G}_0(x_1, x) \mathcal{G}_0(x_1', x') \\ &\cdot V(x_1 x_2; x_1' x_2') \Pi_B(x_2', x_2; x''). \quad (35) \end{aligned}$$

In den Gln. (33) und (35) ist der Zusammenhang zwischen dem Selbstenergiefunktional und dem linearen Response eines Elektronengases dargestellt. Wie die im Anschluß an (33) gemachten Bemerkungen über die Selbstenergie des Elektronengases und die Funktion  $V(x_1 x_2; x_1' x_2')$  zeigen, wird die Integralgleichung (35) für die Ansprechfunktion  $\Pi_B(x, x'; x'')$  durch das Selbstenergiefunktional eindeutig festgelegt. Einerseits bestimmt dieses nämlich direkt die Variationsableitung (33), zum anderen aber über den Umweg der Dyson-Gleichung die in (35) auftretenden Teilchen-Green-Funktionen  $\mathcal{G}_0(x, x')$  des ungestörten Systems. Wegen dieser Abhängigkeit müssen Näherungen, die zu einer Lösung der Dyson-Gleichung und der Gl. (35) führen sollen, in konsistenter Weise durchgeführt werden. Neben dieser Forderung nach der Konsistenz liefern die Gln. (33) und (35) auch gleichzeitig das Verfahren, eine Näherung in der Selbstenergie auf die entsprechende Näherung in der Ansprechfunktion zu übertragen. Am Beispiel der linearen Selbstenergieapproximation soll dies im nächsten Abschnitt näher erläutert werden.

#### 4. Lineare Selbstenergie-Näherung

Bei den für die Festkörperphysik wesentlichen Fällen wird die Selbstenergie des ungestörten Systems linear in der exakten Green-Funktion angesetzt<sup>7-12</sup>. Für diesen Fall wollen wir die Integralgleichung (35) genauer angeben.

Wird die Translationsinvarianz des Elektronengases ausgenutzt, so läßt sich die Teilchen-Green-Funktion in der Form einer Fourier-Entwicklung schreiben:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0(x, x') &= \mathcal{G}_0(x - x') \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{z_n} \int \frac{d^3 k}{(2 \pi)^3} \mathcal{G}_0(k) \exp\{i k(x - x')\}. \quad (36) \end{aligned}$$

Dabei ist  $k = (\mathbf{k}, z_n)$ ,  $k x = \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + z_n \tau$ , während die Summation über alle  $z_n = (2n+1)\pi/\beta$  mit  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  läuft. Eine entsprechende Entwicklung gilt für die Selbstenergie. Die lineare Beziehung zwischen Selbstenergie und exakter Green-Funktion wird nun für die Fourier-Transformierten formuliert:

$$\Sigma_0(k) = \frac{1}{\beta} \sum_{z_n} \int \frac{d^3 k'}{(2 \pi)^3} F(k - k') \mathcal{G}_0(k'). \quad (37)$$

Die im einzelnen auftretenden Funktionen  $F(q)$  sind für die Streuung der Elektronen an statistisch verteilten Störatomen, für die Wechselwirkung der Elektronen untereinander über ein abgeschirmtes Coulomb-Feld und für die Wechselwirkung der Elektronen mit den Gitterschwingungen in Abb. 2 zusammengestellt.

Streuprozeß	Selbstenergie-diagramm	$F(\mathbf{q}, i\zeta_n)$
Verunreinigungsstreuung		$n u(\mathbf{q}) ^2 \delta(i\zeta_n)$
Elektron-Elektronstreuung		$v_s(\mathbf{q}) \delta(i\zeta_n)$
Elektron-Phononstreuung		$\sum_\lambda  g_\lambda(\mathbf{q}) ^2 D_\lambda(\mathbf{q}, i\zeta_n)$

Abb. 2. Die bei den einzelnen Streuprozessen in Gl. (37) zu verwendenden Funktionen  $F(q)$ . Es ist:  $n$  die Dichte der Verunreinigungsatome,  $u(\mathbf{q})$  der Fourier-Koeffizient ihres Streupotentials,  $v_s(\mathbf{q})$  der Fourier-Koeffizient des abgeschirmten Coulomb-Potentials,  $g_\lambda(\mathbf{q})$  das Matrixelement der effektiven Elektron-Phonon-Wechselwirkung und  $D_\lambda(\mathbf{q}, i\zeta_n)$  der Fourier-Koeffizient der Temperatur-Green-Funktion eines Phonons mit dem Polarisationsindex  $\lambda$  und dem Impuls  $\mathbf{q}$ .

Transformiert man (37) in den Ortsraum zurück, so erhält man

$$\Sigma_0(x, x') = F(x - x') \mathcal{G}_0(x, x'), \quad (38)$$

mit der zu  $F(q)$  gehörenden Originalfunktion

$$F(x) = \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d^3 q}{(2 \pi)^3} F(q) \exp(i q x). \quad (39)$$

Hier ist  $q = (\mathbf{q}, \zeta_n)$ ,  $q x = \mathbf{q} \cdot \mathbf{x} + \zeta_n \tau$  und  $\zeta_n = 2n\pi/\beta$ . Aus (38) gewinnt man nun die Funktion  $V(x_1 x_2; x_1' x_2')$ . Der Vergleich mit (33) zeigt näm-

<sup>7</sup> S. F. EDWARDS, Phil. Mag. (8) **3**, 1020 [1958].

<sup>8</sup> A. A. ABRIKOSOV u. L. P. GORKOV, Soviet Phys.-JETP **8**, 1090 [1959].

<sup>9</sup> G. RICKAYZEN, in: The Many-Body Problem (ed. by C. FRONSDAL), W. A. Benjamin, Inc., New York 1962.

<sup>10</sup> J. J. QUINN u. R. A. FERRELL, Phys. Rev. **112**, 812 [1958].

<sup>11</sup> A. B. MIGDAL, Soviet Phys.-JETP **7**, 996 [1958].

<sup>12</sup> G. M. ELIASHBERG, Soviet Phys.-JETP **11**, 696 [1960].

lich, daß man

$$V(x_1 x_2; x_1' x_2') = F(x_1 - x_2') \delta(x_1 - x_2) \delta(x_1' - x_2') \quad (40)$$

zu setzen hat. Der Kern der Integralgleichung (35) hat somit, abgesehen von den beiden Teilchen-Green-Funktionen, im wesentlichen die gleiche Form wie der, der den Zusammenhang zwischen Selbstenergie der Elektronen und ihrer Green-Funktion vermittelt.

Setzt man die Entwicklung (36) in die Gleichung für  $\delta\mathfrak{G}(x, x')$  ein, so erhält man  $\delta\mathfrak{G}(x, x')$  in der Form

$$\delta\mathfrak{G}(x, x') = \frac{1}{\beta^2} \sum_{z_n z_{n'}} \int \int \frac{d^3 k d^3 k'}{(2\pi)^6} \delta\mathfrak{G}(k, k') \cdot \exp(i k x - i k' x').$$

In der Gleichung für  $\delta\mathfrak{G}(k, k')$  tritt das Matrixelement auf

$$h_S(k, k') = \int_0^\beta dx \exp(-i k x) h_S(x) \exp(i k' x) = \frac{1}{(2\pi)^3} g(q) B(\mathbf{k}') \delta(k - k' - q).$$

Die zweite Gleichung folgt, wenn man als Störfunktion eine ebene Welle verwendet

$$g(x) = \frac{1}{\beta(2\beta)^3} g(q) \exp(i q x), \quad q = (\mathbf{q}, \zeta_n).$$

Das stellt insofern keine Einschränkung dar, als sich einerseits jede hinreichend vernünftige Funktion nach ebenen Wellen entwickeln läßt, andererseits sich die Beiträge der einzelnen Anteile innerhalb der linearen Theorie additiv überlagern. Spaltet man daher in Analogie zu (34) von der Funktion  $\delta\mathfrak{G}(k, k')$  die Störfunktion ab

$$\delta\mathfrak{G}(k, k') = \frac{1}{(2\pi)^3} g(q) \Pi_B(k + q, k') \delta(k - k' - q),$$

so erhält man für die Fourier-Transformierte der Ansprechfunktion die Gleichung

$$\Pi_B(k_+, k_-) = \mathfrak{G}_0(k_+) \mathfrak{G}_0(k_-) \left\{ B(\mathbf{k}) + \frac{1}{\beta} \sum_{z_n} \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} F(k - k') \Pi_B(k'_-, k'_+) \right\}. \quad (41)$$

Dabei ist  $k_\pm = (\mathbf{k} - q/2, z_n \pm \zeta_n/2)$ . Es muß jedoch beachtet werden, daß  $z_n$  hier nicht immer die Form  $(2n+1)\pi/\beta$  besitzt. Vielmehr ist es so zu wählen, daß  $z_n \pm \zeta_n/2$  von dieser Form ist. Mit Gl. (41) ist

die Integralgleichung für die Ansprechfunktion aufgestellt, die einer linearen Näherung (37) in der Selbstenergie entspricht. Iteriert man (41), so erhält man eine Reihe von Termen, die man in der Sprache der Diagrammtechnik als Leiternäherung interpretiert. Die Gln. (37) und (41) zeigen somit, daß eine lineare Approximation in der Selbstenergie auf eine Leiternäherung für die Ansprechfunktion führt.

Für den Fall der Streuung der Elektronen an Verunreinigungsatomen haben ABRIKOSOV und GORKOV<sup>8</sup> die Integralgleichung (41) für das Elektronengas im Grundzustand aus einer Leiter-Näherung gefolgert. Sie führen sie unabhängig von der ebenfalls benutzten linearen Selbstenergiénäherung ein und berechnen damit den Restwiderstand des Elektronengases. Die hier gegebene Herleitung zeigt, inwieweit die beiden Approximationen in Relation zueinander stehen. Sie zeigt auch, daß eine Leiternäherung zur Diskussion der Responseeigenschaften bei anderen Streuprozessen, insbesondere bei der Streuung der Elektronen an Gitterschwingungen gerechtfertigt ist, sofern man eine lineare Selbstenergiénäherung bei der Berechnung der Teilchen-Green-Funktionen benutzt. In diesem Fall wird man jedoch wegen der schon bei niedrigen Temperaturen merklichen thermischen Anregung der Gitterschwingungen nicht ohne die hier gegebene temperaturabhängige Formulierung auskommen.

Bei der Diskussion der Transportphänomene eines Elektronengases, speziell bei der Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit, bietet die Benutzung der Ansprechfunktion gegenüber der üblichen Behandlung mit einer Boltzmannschen Stoßgleichung<sup>13, 14</sup> zwei Vorteile. Einmal gehen in die Integralgleichungen (41) oder (35) nicht elementare, sondern effektive Wechselwirkungen ein, bei denen die Abschirmungen durch die übrigen Elektronen berücksichtigt werden. Diese effektiven Wechselwirkungen treten dabei schon im Selbstenergiénfunktional auf, wo sie den Übergang vom nackten Elektron zum Quasiteilchen bewirken. Für einen Boltzmannschen Stoßansatz müssen sie hingegen in den Quasiteilchen eingeführt werden. Zum anderen berücksichtigt die Behandlung nach der Methode der Green-Funktionen in natürlicher Weise alle Teilchenrenormierungen, die beim Einführen von Quasiteilchen auftreten.

<sup>13</sup> A. H. WILSON, The Theory of Metals, Cambridge University Press, Cambridge 1936.

<sup>14</sup> J. M. ZIMAN, Electrons and Phonons, Clarendon Press, Oxford 1960.

Die hier dargestellten Überlegungen haben ihren Ursprung in einer Anregung von Herrn Prof. G. SIMON. Dafür und für die kritischen Diskussionen, mit denen er die Durchführung der Arbeit förderte, möchte ich ihm hier danken. Mein Dank gilt ebenso den Mitglie-

dern des Kältelabors der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt, Herrn Dr. W. RÜHL, Herrn Dr. P. HILSCH und Herrn Dr. W. NEUBERT, die in zahlreichen Gesprächen viele Anregungen für die Gestaltung gaben.

## Dispersion der ordentlichen und außerordentlichen Polaritonen in $\alpha$ -Quarz

L. MERTEN

Physikalisches Institut der Universität Münster

(Z. Naturforsch. 24 a, 1878—1882 [1969]; eingegangen am 10. September 1969)

Es werden die Polariton-Dispersionszweige von  $\alpha$ -Quarz berechnet und diskutiert. Die Polariton-Zweige von  $\alpha$ -Quarz unterteilen sich in 9 *ordentliche richtungsunabhängige Zweige* und 13 *außerordentliche richtungsabhängige Zweige*. Die *ordentlichen* Polariton-Wellen sind streng transversal, die *außerordentlichen* dagegen streng transversal oder longitudinal nur für die Winkel  $\vartheta=0^\circ$  und  $\vartheta=90^\circ$  und gemischt transversal-longitudinal für die Zwischenwinkel  $0^\circ < \vartheta < 90^\circ$  (mit  $\vartheta$  als Winkel zwischen Wellenvektor und optischer Achse). Für die Zwischenwinkel  $0^\circ < \vartheta < 90^\circ$  sind Schnittpunkte der *außerordentlichen* Polariton-Zweige verboten. — Für die Richtung der optischen Achse ( $\vartheta=0^\circ$ ) entarten die *ordentlichen* Polaritonen mit den *transversalen außerordentlichen*.

Die ultrarot-aktiven langen optischen Gitterwellen (Phononen) und elektromagnetischen Wellen (Photonen) koppeln im Bereich kleiner Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  ( $k \lesssim 10^4 \text{ cm}^{-1}$ ) miteinander. Nach HOPFIELD<sup>1</sup> werden diese mechanisch-elektromagnetisch gemischten Wellen (gekoppelte Phononen-Photonen) auch kurz als Polaritonen bezeichnet. Polaritonen in ein- und zweiachsigen Kristallen sind dabei von besonderem Interesse wegen ihrer im allgemeinen ausgeprägten anisotropen Eigenschaften.

Polaritonen wurden im Raman-Effekt kürzlich in einer Reihe von Arbeiten direkt nachgewiesen (GaP<sup>2</sup>, ZnO<sup>3</sup>,  $\alpha$ -Quarz<sup>4</sup>, BaTiO<sub>3</sub><sup>5</sup>, LiNbO<sub>3</sub><sup>6</sup>). Unter geeigneten experimentellen Bedingungen ist auch ein *stimulierter* Raman-Effekt, der auf Polaritonen-Erzeugungs- bzw. Vernichtungsprozessen beruht, zu erwarten, jedoch scheinen solche stimulier-

ten Übergänge bisher nur in einem Falle (LiNbO<sub>3</sub><sup>7</sup>) \* beobachtet worden zu sein.

Beim Vergleich mit der Theorie wurde die Dispersion von Polaritonen bisher stets als isotrop vorausgesetzt. Polaritonen in ein- und zweiachsigen Kristallen zeigen jedoch im allgemeinen<sup>8</sup> eine ausgeprägte Richtungsdispersion. Um diese Richtungsdispersion zu erfassen, hat man von den vollständigen Dispersionsgleichungen auszugehen. Im folgenden werden diese Gleichungen speziell auf  $\alpha$ -Quarz angewandt. (Zur Diskussion der Polariton-Dispersion im tetragonalen BaTiO<sub>3</sub> vgl. auch<sup>9</sup>.)

### I. Dispersionsgleichungen der Polaritonen

Die vollständigen Dispersionsgleichungen für die Frequenzen  $\omega(\mathbf{k})$  der Polaritonen lassen sich aus einer verallgemeinerten Fresnelschen Normalengleichung gewinnen. Für einachsige Kristalle spaltet die Dispersionsgleichung auf in die zwei Gleichungen<sup>8</sup>:

$$\varepsilon_{\perp}^{\infty} \omega^2 \prod_{j=1}^v ((\omega_{\perp j}^l)^2 - \omega^2) - c^2 k^2 \prod_{j=1}^v (\omega_{\perp j}^2 - \omega^2) = 0 \quad (1)$$

Sonderdruckanforderungen erbeten an Dozent Dr. L. MERTEN, Physikalisches Institut der Universität Münster, D-4400 Münster (Westf.), Schloßplatz 7.

<sup>1</sup> J. J. HOPFIELD, Phys. Rev. **112**, 1555 [1958].

<sup>2</sup> C. H. HENRY u. J. J. HOPFIELD, Phys. Rev. Letters **15**, 964 [1965].

<sup>3</sup> S. P. S. PORTO, B. TELL u. T. C. DAMEN, Phys. Rev. Letters **16**, 450 [1966].

<sup>4</sup> J. F. SCOTT, L. E. CHEESMAN u. S. P. S. PORTO, Phys. Rev. **162**, 834 [1967].

<sup>5</sup> A. PINCZUK, E. BURSTEIN u. S. USHIODA, Solid State Commun., to be published.

<sup>6</sup> H. E. PUTHOFF, R. H. PANTELL, B. G. HUTH u. M. A. CHACON, J. Appl. Phys. **39**, 2144 [1968].

\* Anm. b. d. Korrig.: Inzwischen wurde ein *stimulierter* Polariton-Raman-Effekt an mehreren Linien in LiNbO<sub>3</sub> auch beobachtet von GELBWACHS et al.<sup>7a</sup>.

<sup>7</sup> S. K. KURTZ u. J. A. GIORDMAINE, Phys. Rev. Letters **22**, 192 [1969].

<sup>7a</sup> J. GELBWACHS, R. H. PANTELL, H. E. PUTHOFF u. J. M. YARBOROUGH, Appl. Phys. Letters **14**, 258 [1969].

<sup>8</sup> L. MERTEN, Phys. Status Solidi **30**, 449 [1968].

<sup>9</sup> L. MERTEN, erscheint in: Proc. European Meeting of Ferroelectricity, Saarbrücken 1969.