Einführung in die Vielteilchenphysik

E. Müller–Hartmann

WS 1972/73 und WS 1977/78

Die elektronische Version dieser Vorlesung wurde 2008 als Dokumentation für eine vorher nur handschriftlich in der Bibliothek der Physikalischen Institute verfügbare Version erstellt.

Hinweise auf Tippfehler und andere Unzulänglichkeiten sind willkommen (per email an: mh@thp.uni-koeln.de).

Literaturhinweise

Zum Zeitpunkt der Entstehung dieser Vorlesung waren die folgenden Monographien zur Vielteilchenphysik kondensierter Materie besonders populär.

- 1. D. Pines: The Many–Body Problem (1961)
- 2. V.L. Bonch–Bruevich, S.V. Tyablikov: The Green Funktion Method in Statistical Mechanics (1962)
- 3. L. Kadanoff, G. Baym: Quantum Statistical Mechanics (1962)
- 4. R. Brout, P. Carruthers: Lectures on the Many–Electron Problem (1963)
- 5. D. Pines: Elementary Excitations in Solids (1963)
- 6. H.L. Morrison: Quantum Theory of Many–Particle Systems (1963)
- 7. P. Nozières: Theory of Interacting Fermi–Systems (1964)
- 8. A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov, I.E. Dzyaloshinkski: Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics (1965)
- 9. P. Nozières, D. Pines: The Theory of Quantum Liquids (1966)
- 10. D. Ruelle: Statistical Mechanics, Rigorous Results (1969)
- 11. A.L. Fetter, J.D. Walecka: Quantum Theory of Many–Particle Systems (1971)

Vorwort

Die hier dokumentierte Vorlesung **Einführung in die Vielteilchenphysik** wurde erstmals im Wintersemester 1972/73 und später noch einmal im Wintersemester 1977/78 im Physiklehrplan der Universität zu Köln angeboten. Ziel der Vorlesung war eine Einführung in die methodischen Grundlagen der Quantenmechanik von Systemen vieler identischer Teilchen.

Vorausgesetzt wurden Grundkenntnisse in Quantenmechanik und in statistischer Physik. Bei regulärem Studienablauf wurde diese Vorlesung als Wahlpflichtveranstaltung für das siebte oder achte Fachsemester im Anschluß an den viersemestrigen Theoriekurs empfohlen.

Die Vorlesung besteht aus vier Abschnitten mit insgesamt 17 Kapiteln, 3 Anhängen und einem Stichwortverzeichnis. Übungsaufgaben sind in die Kapitel eingestreut und durch Blaufärbung hervorgehoben. Sie sind derart formuliert und mit Hinweisen versehen, dass sich weitere Lösungshilfen der Übungen im allgemeinen erübrigen sollten.

Der Abschnitt I hat zwei Kapitel, in denen eine allgemeine Einführung in die **Grundlagen der quantenmechanischen Beschreibung von Vielteilchen**systemen gegeben wird. In Kapitel 1 führt die Diskussion der Quantenmechanik identischer Teilchen auf **Fermionen und Bosonen** als den einzigen eindimensionalen Darstellungen der Permutationsgruppen. Kapitel 2 präsentiert die Beschreibung derartiger Vielteilchensysteme in **zweiter Quantisierung**. In dem gesamten Manuskript werden Fermionen und Bosonen mittels eines Parameters *s* unterschieden (s = +1 für Fermionen und s = -1 für Bosonen) und meist simultan behandelt.

Im Abschnitt II werden in vier Kapiteln zweizeitige Greenfunktionen als ein elegantes Werkzeug zur Erfassung der Eigenschaften quantenmechanischer Vielteilchensysteme eingeführt. Kapitel 3 diskutiert retardierte und avancierte **Greenfunktionen** mit ihren Fouriertransformierten und deren analytischen Eigenschaften, ihren Bewegungsgleichungen und Spektraldarstellungen. In Kapitel 4 werden die Temperatur- oder Matsubara-Greenfunktionen behandelt, der Zusammenhang von deren Fourierkoeffizienten mit den Fouriertransformierten der retardierten und avancierten Greenfunktionen sowie deren Bedeutung zur Berechnung von Korrelationsfunktionen. Kapitel 5 widmet sich dem Spezialfall der Einteilchen-Greenfunktionen oder -Propagatoren, aus denen man die thermischen Mittelwerte aller Einteilchenoperatoren, aber auch die mittlere Energie eines Vielteilchensystems mit Zweikörperwechselwirkung berechnen kann. Außerdem wird der Massenoperator für diagonale Einteilchen-Propagatoren diskutiert. Kapitel 6 stellt **Responsefunktionen** als einen zweiten wichtigen Spezialfall von Greenfunktionen vor und erläutert ihre Bedeutung für spektroskopische Untersuchungen und ihre Beziehung zum Formfaktor im differentiellen Wirkungsquerschnitt bei **Streuexperimenten**, die in Bornscher Näherung beschrieben werden können. Als Anwendung wird ausführlich die Responsetheorie homogener **dielektrischer Systeme** diskutiert und die Beziehung der Responsefunktion zur **dielektrischen Funktion** und zur **dynamischen Leitfähigkeit** beprochen.

Der Abschnitt III behandelt in fünf Kapiteln Vielteilchensysteme ohne dyna-In Kapitel 7 werden Einteilchen-Propagatoren mische Korrelationen. solcher Systeme betrachtet und es wird gezeigt, dass sich deren Berechnung auf unitäre Basistransformationen zurückführen lässt. Kapitel 8 präsentiert einen Beweis des Wickschen Theorems, das es erlaubt, Greenfunktionen mit beliebig vielen Zeiten durch zweizeitige auszudrücken und damit auch beliebige Korrelationsfunktionen nichtkorrelierter Systeme auszurechnen. Molekularfeldnäherungen, die auf einem Minimalprinzip für die freie Energie unter Benutzung nichtkorrelierter Ersatzsysteme basieren, werden in Kapitel 9 vorgestellt. Selbstkonsistenzgleichungen werden in verschiedener Form hergeleitet, zum einen als Gleichungen für die Matrixelemente des selbstkonsistenten Ersatzsystems, zum anderen als Gleichungen zur Bestimmung einer Diagonalbasis dieses Systems. Kapitel 10 behandelt schließlich allgemeine Systeme mit quadratischen Hamiltonoperatoren, die auch Paarerzeuger und -vernichter enthalten. Die Diagonalisierung der Hamiltonoperatoren solcher Systeme und die Berechnung ihrer Greenfunktionen gelingt mit kanonischen Transformationen, die Erzeuger und Vernichter mischen. Für Fermionen sind die entsprechenden Transformationen unitär, für Bosonen jedoch **symplektisch** und ihre Konstruktion wird erläutert. Ein verallgemeiSdichte-nertes Wicksches Theo**rem** für solche Systeme wird ebenfalls formuliert und bewiesen und **verallge**meinerte Molekularfeldnäherungen werden dargestellt und ihre Selbstkonsitenzgleichungen hergeleitet. Kapitel 11 diskutiert schließlich **Responsefunk**tionen nichtkorrelierter Systeme, wobei der Dichte–Dichte–Response, der in späteren Kapiteln benötigt wird, als Beispiel im Detail berechnet wird.

Der Abschnitt IV gibt in 6 Kapiteln eine Einführung in die Methoden der diagrammatischen Störungsrechnung. In Kapitel 12 wird die Störungsreihe nach Potenzen einer Störung für Greenfunktionen abgeleitet. Am Beispiel eines Vielteilchensystems mit Zweikörperwechselwirkung wird den folgenden vier Kapiteln die diagrammatische Methodik diskutiert und angewandt. Kapitel 13 stellt die Anwendung des Wickschen Theorems auf die Störungsreihe und die graphische Darstellung der Terme der Störungsreihe durch Feynmandiagramme vor. Die Störungsreihe für Einteilchenpropagatoren wird auf die verbundenen Graphen reduziert und die freie Energie durch die unverbundenen **Graphen** ausgedrückt. Der Ubergang von der zeitlichen in die Energiedarstellung wird diskutiert sowie die Ausnutzung von Symmetrien in den Matrixelementen der Wechselwirkung. In Kapitel 14 wird der Begriff der Reduzibilität von Graphen eingeführt, mit dem anhand der **Dysongleichung** Einteilchen-Propagatoren auf ihre **Selbstenergie** zurückgeführt werden. Der Begriff der Skelettgraphen wird definiert und die Molekularfeldnäherung und andere selbstkonsistente Näherungen werden graphisch charakterisiert. Kapitel 15 behandelt die Diagrammatik von Zweiteilchen-Propagatoren. Der Zweiteilchenvertex wird eingeführt und seine Beziehung zur Selbstenergie wird behandelt. Es wird gezeigt, dass es drei verschiedene Typen von zweiteilchen-reduziblen **Skelettgraphen** gibt, die disjunkt zueinander sind. Die **Bethe-Salpeter**-Gleichungen mit den dementsprechenden Typen von irreduziblen Vertizes werden aufgestellt. Mittels des total irreduziblen Vertex wird eine Bilanzgleichung gewonnen, die das System der **Parquettgleichungen** vervollständigt, die die Berechnung von Zweiteilchen-Propagatoren aus ihrem total irreduziblen Vertex erlaubt. Außerdem wird in Kapitel 15 die Diagrammatik für den Dichte-**Dichte–Propagator** für homogene Systeme eingeführt und die Beziehung des **Polarisations**–**Propagators** zur dielektrischen Funktion hergeleitet. In Kapitel 16 wird mit dem **homogenen Elektronengas** eine Anwendung der besprochenen Methoden vorgestellt. Die Grundzustandsenergie wird im Grenzfall hoher Dichte bis zum $\ln r_s$ -Term berechnet, der Grenzfall niedriger Dichte mit dem Wignerkristall wird diskutiert und Interpolationsformeln für die Energie bei beliebigen Dichten werden vorgestellt. Außerdem wird die Regularisierung der in Hartree–Fock–Näherung unendlichen Fermigeschwindigkeit durch Abschirmung ausgerechnet. Das Kapitel 17 stellt anhand eines Elektron–Phonon–Systems die Diagrammatik eines zweikomponentigen Vielteilchensystems vor.

Die Anhänge A bis C enthalten verschiedene mathematische Details zu den Kapiteln 4 und 16. Das alphabetische Stichwortverzeichnis soll das Auffinden von Begriffen erleichtern, die in der Vorlesung vorkommen.

Inhaltsverzeichnis

I.	Quantenmechanische Beschreibung von Mehrteilchensystemen.	7
	1. Identische Teilchen	7
	2. Zweite Quantisierung	13
II.	Zweizeitige Greenfunktionen	23
	3. Retardierte und avancierte Greenfunktionen	23
	4. Matsubara–Greenfunktionen	29
	5. Einteilchen–Propagatoren	36
	6. Responsefunktionen	41
III.	Vielteilchensysteme ohne dynamische Korrelationen	54
	7. Einteilchen–Propagatoren nichtkorrelierter Systeme	54
	8. Wicksches Theorem	60
	9. Molekularfeldnäherungen	65
	10. Systeme mit allgemeinstem quadratischen Hamilton operator $\hfill \ldots \ldots$	72
	11. Responsefunktionen nichtkorrelierter Systeme	82
IV.	Diagrammatische Störungsrechnung	89
	12. Formale Störungsentwicklung für Greenfunktionen	89
	13. Feynmandiagramme	92
	14. Dysongleichung und Selbstenergie	103
	15. Zweiteilchen–Propagatoren und Parquettgleichungen	107
	16. Das homogene Elektronengas	116
	17. Elektron–Phonon–Systeme	125
	Anhänge	132
	A. Zum Satz von Blaschke	132
	B. Zur Herleitung von (4.13) und (4.15)	133
	C. Rechungen zu Kapitel 16	135
	Stichwortverzeichnis	140

I. Quantenmechanische Beschreibung von Mehrteilchensystemen

In diesem Abschnitt fassen wir zunächst in Kapitel 1 die Prinzipien der Quantenmechanik von Systemen mit **identischen Teilchen** zusammen. In Kapitel 2 wird sodann die Beschreibung solcher Systeme in **zweiter Quantisierung** erläutert.

1. Identische Teilchen

Wir betrachten ein quantenmechanisches System von N Teilchen, die wir zunächst als **unterscheidbar** voraussetzen wollen. Die dynamischen Zustände des *i*-ten Teilchens alleine bilden einen Hilbertraum \mathcal{E}_i . Die dynamischen Zustände des gesamten N-Teilchensystems bilden gleichfalls einen Hilbertraum \mathcal{E} . Zwischen dem Raum \mathcal{E} und den Räumen \mathcal{E}_i gibt es den folgenden Zusammenhang:

Der Raum \mathcal{E} der N-Teilchenzustände ist das Tensorprodukt

$$\mathcal{E} = \prod_{i=1}^{N} \otimes \mathcal{E}_i \tag{1.1}$$

der Zustandsräume \mathcal{E}_i der einzelnen Teilchen.

Die konkrete Gestalt des Raumes \mathcal{E}_i ist durch die dynamischen Variablen des *i*ten Teilchens gegeben. Für unsere Zwecke wird es genügen, neben den äußeren dynamischen Variablen Ort \mathbf{r}_i und Impuls \mathbf{p}_i als innere Variable den Spin \mathbf{s}_i zu berücksichtigen. Diese 3×3 Variablen bilden die Basis der **Observablen-Algebra** \mathcal{O}_i des Teilchens *i*, d.h. beliebige Observable \mathcal{O} auf dem Hilbertraum \mathcal{E} sind Funktionen

$$\mathcal{O} = \mathcal{O}(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \mathbf{s}_i\}_{i=1}^N)$$
(1.2)

dieser Observablenbasis. Als Basis des Hilbertraums \mathcal{E}_i kann man dann ein vollständiges orthonormiertes System simultaner Eigenzustände eines vollständigen Satzes vertauschbarer (d.h. kompatibler) Observabler aus O_i wählen. Die verschiedenen Zustände dieser Basis sind durch einen Satz von Quantenzahlen \mathbf{q}_i – die Eigenwerte der betreffenden Observablen – vollständig charakterisiert; wir nennen diese Zustände daher $|\mathbf{q}_i\rangle_i$ (d.h. das *i*-te Teilchen ist im Eigenzustand mit den Quantenzahlen \mathbf{q}_i). Gleichung (1.1) sagt dann aus, dass die Produktzustände

$$|\mathbf{q}_1\rangle_1|\mathbf{q}_2\rangle_2\dots|\mathbf{q}_N\rangle_N \tag{1.3}$$

eine **Basis** für den Hilbertraum \mathcal{E} darstellen, wenn die \mathbf{q}_i für jedes *i* unabhängig voneinander alle Quantenzahlen durchlaufen. In (1.3) bezeichnet \mathbf{q}_i einen Satz von Quantenzahlen und der tiefgestellte Index an den Einteilchenzuständen die Nummer der Teilchens. Diese Basiszustände zeichnen sich im übrigen dadurch aus, dass in ihnen die einzelnen Teilchen völlig unkorreliert sind.

Die physikalischen Zustände des N-Teilchensystems füllen den Raum \mathcal{E} jedoch nur dann vollständig aus, wenn die Teilchen wie oben vorausgesetzt voneinander unterscheidbar sind. Falls gewisse Teilchen des Systems **identisch** sind, kommen nicht alle Zustände von ${\mathcal E}$ in der Natur vor. Dieser Sachverhalt soll im folgenden näher erläutert werden.

Wir wollen einmal annehmen, das betrachtete N-Teilchensystem enthalte nTeilchen $(1 \leq n \leq N)$ von derselben Sorte. Dann kann man zu jedem Zustand $|u\rangle$ aus \mathcal{E} die Menge derjenigen Zustände bilden, die aus $|u\rangle$ durch eine Permutation der n identischen Teilchen hervorgehen. Die lineare Hülle dieser Menge bildet einen Unterraum \mathcal{E}_u von \mathcal{E} mit einer Dimension $\leq n!$. Jede Permutation P identischer Teilchen erzeugt im Hilbertraum \mathcal{E} auf naheliegende Weise einen unitären linearen Operator \mathcal{P} . Es genügt, die Wirkung dieses Operators auf der Basis (1.3) zu definieren:

$$\mathcal{P}|\mathbf{q}_1\rangle_1|\mathbf{q}_2\rangle_2\dots|\mathbf{q}_N\rangle_N=|\mathbf{q}_1\rangle_{P(1)}|\mathbf{q}_2\rangle_{P(2)}\dots|\mathbf{q}_N\rangle_{P(N)},\tag{1.4}$$

d.h. der **Permutationsoperator** \mathcal{P} bildet jeden Basiszustand auf einen anderen ab, bei dem die identischen Teilchen im Sinne der Permutation P vertauscht sind. (In (1.4) ist angenommen, dass für alle anderen Teilchen außer den n identischen P(i) = i gilt.) Da algebraische Relationen zwischen Permutationen sich auf die entsprechenden Permutationsoperatoren übertragen, sagt man, die Permutationsoperatoren bilden eine **unitäre lineare Darstellung** der **Permutationsgruppe** S_n im Hilbertraum \mathcal{E} .

Im Rahmen der Quantenmechanik sind identische Teilchen als notwendigerweise ununterscheidbar anzuschen. Das rührt daher, dass alle Observablen \mathcal{O} unter einer beliebigen Vertauschung identischer Teilchen invariant sind, d.h. die Observablen (1.2) vertauschen mit den oben definierten Permutationsoperatoren \mathcal{P} ,

$$[\mathcal{P}, \mathcal{O}] = 0. \tag{1.5}$$

Daraus folgt, dass alle Messwerte von Zuständen mit identischen Teilchen sich bei einer Vertauschung dieser Teilchen nicht ändern. Es gibt also keine Messung, die zwischen einem Zustand $|u\rangle$ und den Zuständen $\mathcal{P}|u\rangle$ zu unterscheiden gestattet. Daher liegt eine **Austauschentartung** für alle $|u\rangle$ vor, für die die Dimension des Unterraums \mathcal{E}_u größer als 1 ist. Es gibt dann keinen vollständigen Satz kompatibler Observabler, nach deren Eigenwerten man eine Basis des Hilbertraums \mathcal{E} klassifizieren könnte.

Übung 1.1: Wie folgt aus $[\mathcal{P}, \mathcal{O}] = 0$, dass $\langle u \mathcal{P} | \mathcal{O} | \mathcal{P} u \rangle = \langle u | \mathcal{O} | u \rangle$ gilt? \Box

Die Natur befreit uns auf einfache Weise aus dieser unerfreulichen Lage. Es gilt nämlich die

<u>Austausch–Auswahlregel</u> (schwache Form):

Nur solche Zustände $|u\rangle$ sind in der Natur realisiert, für die

$$\dim \mathcal{E}_{\mathrm{u}} = 1 \tag{1.6}$$

gilt.

Damit ist die Problematik der Austauschentartung offensichtlich beseitigt.

Mit rein mathematischen Argumenten, die sich aus den Eigenschaften der **Permu**tationsgruppe ergeben, lässt sich die obige Auswahlregel erheblich verschärfen. Die Bedingung (1.6) besagt ja, dass für jeden Permutationsoperator \mathcal{P} , der identische Teilchen vertauscht, $\mathcal{P}|u\rangle$ linear abhängig von $|u\rangle$ ist, d.h. es gilt

$$\mathcal{P}|u\rangle = c_p|u\rangle. \tag{1.7}$$

Die physikalisch realisierten Zustände sind also simultane Eigenzustände aller Permutationsoperatoren \mathcal{P} der Permutationsgruppe. Wir stellen leicht fest, dass (1.7) und damit (1.6) für alle Zeiten gilt, wenn es nur für einen Zeitpunkt erfüllt ist, weil der Hamiltonoperator und damit der Zeitentwicklungsoperator des Systems mit allen \mathcal{P} vertauscht.

Alle Permutationen P lassen sich durch hintereinander Ausführen von **Transpo**sitionen $P_{(i,j)}$ darstellen, wo $P_{(i,j)} = P_{(j,i)}$ die beiden identischen Teilchen i und j miteinander vertauscht. Die entsprechende Darstellung einer Permutation P ist zwar bekanntlich nicht eindeutig, aber die Zahl der erforderlichen Transpositionen $n_T(P)$ ist immer dieselbe modulo 2 und man nennt $\chi(P) = n_T(P) \mod 2$ den **Charakter** der Permutation P. Da alle Transpositionen **involutorisch** sind, $P_{(i,j)}^2 = 1$, folgt aus (1.7) für deren Eigenwerte $c_{(i,j)}$ die Eigenschaft $c_{(i,j)}^2 = 1$ oder $c_{(i,j)} = \pm 1$. Da weiterhin je zwei Transpositionen $P_{(i,j)}$ und $P_{(k,l)}$ sich anhand der Beziehung $P_{(i,j)} = P_{(i,k)}P_{(j,l)}P_{(k,l)}P_{(k,i)}P_{(l,j)}$ ineinander überführen lassen – gruppentheoretisch bedeutet das: **alle Transpositionen liegen in einer Klasse** – findet man $c_{(i,j)} = c_{(i,k)}^2 c_{(j,l)}^2 c_{(k,l)} = c_{(k,l)}$, das heißt, alle Transpositionen müssen denselben Eigenwert besitzen, entweder $c_{(i,j)} = 1$ oder $c_{(i,j)} = -1$. Damit bleiben nur zwei Möglichkeiten für die Eigenwerte aller Permutationen P: Entweder gilt $c_P = 1$ oder es gilt $c_P = (-1)^{\chi(P)}$. Damit haben wir ein Theorem aus der Darstellungstheorie der Gruppen bewiesen:

Es gibt genau zwei eindimensionale Darstellungen der Permutationsgruppe S_n $(n \ge 2)$, die totalsymmetrische mit der Eigenschaft

$$\mathcal{P}|u\rangle = |u\rangle \tag{1.8}$$

und die totalantisymmetrische mit

$$\mathcal{P}|u\rangle = (-1)^{\chi(P)}|u\rangle. \tag{1.9}$$

Mit der oben formulierten schwachen Form der Austausch–Auswahlregel wären für jede Teilchensorte beide Typen von Zuständen möglich. In Wirklichkeit ist jedoch für jede Teilchensorte nur eine der beiden Symmetrieeigenschaften realisiert. Es gilt die

<u>Austausch–Auswahlregel</u> (starke Form):

Von jeder Teilchensorte kommen in der Natur entweder nur totalsymmetrische oder nur totalantisymmetrische Zustände vor. Teilchen mit totalsymmetrischen Zuständen nennt man **Bosonen**, Teilchen mit totalantisymmetrischen Zuständen **Fermionen**.

Hinsichtlich der Frage, welche der beiden Symmetrien für welche Teilchensorte realisiert ist, ergibt sich im Rahmen der Quantenfeldtheorie das

<u>Spin–Statistik–Theorem von Pauli</u>:

Teilchen mit ganzzahligem Spin sind Bosonen, Teilchen mit halbzahligem Spin Fermionen.

Damit haben wir nunmehr eine vollständige Regel, die uns den Teilraum \mathcal{E}_S des Hilbertraums \mathcal{E} vorgibt, der bei Anwesenheit identischer Teilche in der Natur realisiert ist. Hierbei hängt es von der Art der physikalischen Prozesse ab, ob man Teilchen als identisch oder unterscheidbar anzusehen hat. So würde man auf den ersten Blick Proton und Neutron als unterscheidbare Teilchen ansehen. Da es aber Prozesse gibt, die diese beiden Teilchen ineinander umwandeln, ist man gezwungen, sie als eine Art von Teilchen mit verschiedenen Werten der Quantenzahl Isospin anzusehen und damit nur Zustände zuzulassen, die auch bezüglich einer Vertauschung von Protonen mit Neutronen antisymmetrisch sind. Tatsächlich kann man z.B. die Eigenschaften des Deuterons nur damit richtig verstehen. Eine entsprechende Antisymmetrisierung ist natürlich auch auf das ganze Baryonenoktett anzuwenden. Wenn man die Baryonen schließlich als gebundene Zustände dreier Quarks beschreibt, wird diese Antisymmetrisierung darauf zurückgeführt, dass man alle Quarks als eine Teilchensorte mit verschiedenen Werten ihrer Quantenzahlen Farbe (color) und Geschmack (flavor) aufzufassen hat.

Wir nehmen jetzt an, dass unser N-Teilchensystem r verschiedene Teilchensorten enthält, wobei die *i*-te Sorte n_i -mal vorkommt $(\sum_{i=1}^r n_i = N)$, und wollen den **Projektionsoperator** S angeben, der den Hilbertraum \mathcal{E} auf seinen Unterraum \mathcal{E}_S projiziert. Dieser Operator ist ein Produkt

$$\mathcal{S} = \prod_{i=1}^{r} \mathcal{S}_i, \tag{1.10}$$

wobei der Operator S_i nur auf Teilchen der Sorte *i* wirkt. Wenn die *i*-te Teilchensorte den Spin S_i hat, schreibt sich der Projektor S_i nach dem Paulitheorem als

$$S_i = \frac{1}{n_i!} \sum_{P_i} (-1)^{2S_i \chi(P_i)} \mathcal{P}_i.$$
(1.11)

Hier erstreckt sich die Summe über alle Permutationen der Teilchen der Sorte i.

Übung 1.2: Man beweise die folgenden Relationen und erkläre ihre Bedeutung: (a) $S_i^{\dagger} = S_i$, (b) $S_i^2 = S_i$, (c) $S_i \mathcal{P}_i = \mathcal{P}_i S_i = (-1)^{2S_i \chi(P_i)} S_i$, (d) für alle P_i gelte $\mathcal{P}_i |u\rangle = (-1)^{2S_i \chi(P_i)} |u\rangle \Longrightarrow S_i |u\rangle = |u\rangle$, (e) $S_i S_j = S_j S_i$ und schließlich (f) $S^{\dagger} = S$ und (g) $S^2 = S$. \Box Man erhält eine **Basis** des Raumes \mathcal{E}_S , indem man auf jeden Basiszustand (1.3) des Raumes \mathcal{E} den Symmetrisierungsoperator \mathcal{S} anwendet. Wegen (1.10) haben die resultierenden Zustände die Produktform

$$\prod_{i=1}^{r} |i\rangle, \tag{1.12}$$

wobei der Zustand $|i\rangle$ alle Teilchen der Sorte *i* beschreibt. Verschiedene Teilchensorten sind also weiterhin unkorreliert in diesen Basiszuständen. Die Struktur der Zustände $|i\rangle$ hängt nun wesentlich vom Symmetriecharakter der *i*-ten Teilchensorte ab.

Ist die *i*-te Teilchensorte ein **Fermion** $(2S_i \text{ ungerade})$, dann gilt

$$\mathcal{S}_{i}(|\mathbf{q}_{1}\rangle_{i_{1}}\dots|\mathbf{q}_{n_{i}}\rangle_{i_{n_{i}}}) = \frac{1}{n_{i}!}\sum_{P_{i}}(-1)^{\chi(P_{i})}\mathcal{P}_{i}(|\mathbf{q}_{1}\rangle_{i_{1}}\dots|\mathbf{q}_{n_{i}}\rangle_{i_{n_{i}}})$$

$$= \frac{1}{n_{i}!}\det(|\mathbf{q}_{\mu}\rangle_{i_{\nu}})_{(\mu,\nu=1,\dots,n_{i})}.$$
(1.13)

Wegen der Determinantenform dieses Zustandes sehen wir sofort, dass dieser Basiszustand verschwindende Norm hat, sofern zwei Einteilchenzustände übereinstimmen. Normieren kann man diesen Basiszustand nur dann, wenn alle n_i Einteilchenzustände linear unabhängig sind. Wir setzen daher voraus, dass die Einteilchenzustände die **Orthonormierungsbedingung**

$$\langle \mathbf{q}_{\alpha} | \mathbf{q}_{\beta} \rangle = \delta_{\mathbf{q}_{\alpha}, \mathbf{q}_{\beta}} \tag{1.14}$$

erfüllen. Dann sind die Zustände

$$|\{\mathbf{q}_{1}, \mathbf{q}_{2}, \dots, \mathbf{q}_{n_{i}}\}\rangle_{F} = \sqrt{n_{i}!} S_{i} (|\mathbf{q}_{1}\rangle_{i_{1}} \dots |\mathbf{q}_{n_{i}}\rangle_{i_{n_{i}}})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n_{i}!}} \det(|\mathbf{q}_{\mu}\rangle_{i_{\nu}})_{(\mu,\nu=1,\dots,n_{i})}$$
(1.15)

normierte Basiszustände. Diese totalantisymmetrischen Basiszustände nennt man Slaterdeterminanten.

Übung 1.3: Man zeige, dass die Zustände (1.15) unter der Bedingung (1.14) die Norm 1 haben. □

Unter der Bedingung (1.14) kann in den Basiszuständen (1.15) jeder Einteilchenzustand höchstens einfach besetzt werden. Diese Beschränkung ist auch unter dem Namen **Pauli-Verbot** bekannt.

Ist die *i*-te Teilchensorte ein **Boson** ($2S_i$ gerade), dann haben die symmetrisierten Basiszustände die Form

$$\mathcal{S}_{i}(|\mathbf{q}_{1}\rangle_{i_{1}}\dots|\mathbf{q}_{n_{i}}\rangle_{i_{n_{i}}}) = \frac{1}{n_{i}!}\sum_{P_{i}}\mathcal{P}_{i}(|\mathbf{q}_{1}\rangle_{i_{1}}\dots|\mathbf{q}_{n_{i}}\rangle_{i_{n_{i}}})$$

$$= \frac{1}{n_{i}!}\operatorname{per}(|\mathbf{q}_{\mu}\rangle_{i_{\nu}})_{(\mu,\nu=1,\dots,n_{i})}.$$
(1.16)

Die sich hier ergebende **Permanente** einer Matrix ist eine der Determinante ähnliche homogene Form der Matrixelemente, die jedoch bezüglich einer Spaltenvertauschung symmetrisch statt antisymmetrisch ist. Offenbar erlauben diese Basiszustände durchaus eine **Mehrfachbesetzung** von Einteilchenzuständen. Sie sind im allgemeinen ebenfalls nicht normiert. Ihre Normierung ist ein wenig verwickelter als im Fall der Fermionen. Wenn die nach (1.14) orthonormierten Einteilchenzustände $|\mathbf{q}_{\mathbf{q}}\rangle n_{\mathbf{q}}$ -fach besetzt sind $(\sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} = n_i)$, so gilt für die normierten Basispermanenten

$$|\{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}_{2},\ldots,\mathbf{q}_{n_{i}}\}\rangle_{B} = \left(\frac{n_{i}!}{\prod_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}!}\right)^{1/2} \mathcal{S}_{i}\left(|\mathbf{q}_{1}\rangle_{i_{1}}\ldots|\mathbf{q}_{n_{i}}\rangle_{i_{n_{i}}}\right)$$

$$= \left(n_{i}!\prod_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}!\right)^{-1/2} \operatorname{per}\left(|\mathbf{q}_{\mu}\rangle_{i_{\nu}}\right)_{(\mu,\nu=1,\ldots,n_{i})}.$$
(1.17)

Übung1.4: Man prüfe nach, dass die Zustände (1.17) die Norm 1 haben.□

Die Basiszustände (1.17) für Bosonen sind durch die **Besetzungszahlen** $n_{\mathbf{q}}$ vollständig und eindeutig gekennzeichnet. Auch für Fermionen können die Basiszustände durch Besetzungszahlen charakterisiert werden, die wegen des Pauliverbots natürlich nur die beiden Werte $n_{\mathbf{q}} = 0, 1$ annehmen dürfen. Zur eindeutigen Festlegung der **Phase** muss aber zusätzlich die **Reihenfolge** der besetzten Einteilchenzustände beachtet werden.

Im Vergleich zu den Produktbasiszuständen (1.3) haben die Basiszustände (1.12) wegen ihrer stark verschränkten Faktoren (1.15) und (1.17) eine sehr viel komplexere Struktur. Dies scheint den Umgang mit den Wellenfunktionen identischer Teilchen erheblich zu erschweren. Es gibt jedoch eine Notation, die zweite Quantisierung genannt wird, in der die Verschränkungen nicht explizit zum Ausdruck kommen und in der alle Rechnungen mit Zuständen identischer Teilchen sich sehr einfach und elegant durchführen lassen. Diese Notation werden wir im folgenden Kapitel diskutieren.

2. Zweite Quantisierung

Am Anfang dieses Kapitels sei betont, dass die zweite Quantisierung im Rahmen der in dieser Vorlesung diskutieren Vielteilchenphysik nur eine alternative Notation darstellt und mit keinerlei neuem physikalischen Gehalt verbunden ist. Sie beinhaltet jedoch – wie wir sehen werden – die **Erzeugung und Vernichtung von Teilchen** und eröffnet daher die Möglichkeit, physikalische Prozesse zu beschreiben, in denen die Teilchenzahl nicht erhalten ist. Im Rahmen der Elementarteilchenphysik ist die zweite Quantisierung daher essentiell für die Beschreibung neuer Inhalte.

Die zweite Quantisierung fußt auf Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die dem betrachteten System ein Teilchen hinzufügen oder entnehmen. Da diese (linearen) Operatoren zwischen Zuständen mit verschiedenen (benachbarten) Teilchenzahlen wirken, legt man der zweiten Quantisierung den Fockraum \mathcal{E}^F zugrunde, der die direkte Summe der Hilberträume für alle Teilchenzahlen N = 0, 1, 2, ... ist. Der Fockraum \mathcal{E}^F der r Teilchensorten des vorigen Kapitels ist dabei das Tensorprodukt der Fockräume der einzelnen Teilchensorten, d.h. es gilt

$$\mathcal{E}^F = \prod_{i=1}^r \otimes \left(\sum_{n=0}^\infty \oplus \mathcal{E}_i^{(n)}\right).$$
(2.1)

Es reicht daher, wenn wir die Diskussion im folgenden auf einen der Faktoren dieses Produkts beschränken. Wir werden den entsprechenden Fockraum der Einfachheit halber \mathcal{E}^F nennen und die durch diesen Fockraum beschriebene Teilchensorte kann ein Boson oder ein Fermion sein.

Man baut den Fockraum auf, indem man mit dem Zustand verschwindender Teilchenzahl beginnt, den man den Vakuumzustand $|0\rangle$ nennt. Jedem Einteilchenzustand $|\mathbf{q}\rangle$ aus einer orthonormierten Basis (1.14) ordnet man den Erzeugungsoperator $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ zu, der dem System ein Teilchen im Zustand \mathbf{q} hinzufügen soll. Der zu $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ adjungierte Vernichtungsoperator $a_{\mathbf{q}}$ soll ein Teilchen im Zustand \mathbf{q} entfernen. Der Vakuumzustand ist durch die Bedingung charakterisiert, dass er durch alle Vernichtungsoperatoren anulliert wird, d.h. durch die für alle \mathbf{q} geltende Bedingung

$$a_{\mathbf{q}}|0\rangle = 0. \tag{2.2}$$

Die Algebra der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wird durch kanonische Vertauschungsrelationen definiert. Wenn wir den Symmetrieparameter s einführen, der für Fermionen den Wert s = +1 und für Bosonen den Wert s = -1 hat, lauten diese Vertauschungsrelationen

$$\{a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{p}}\}_{s} \equiv a_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{p}} + s \, a_{\mathbf{p}}a_{\mathbf{q}} = 0$$

$$\{a_{\mathbf{q}}^{\dagger}, a_{\mathbf{p}}^{\dagger}\}_{s} \equiv a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{p}}^{\dagger} + s \, a_{\mathbf{p}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}}^{\dagger} = 0$$

$$\{a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{p}}^{\dagger}\}_{s} \equiv a_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{p}}^{\dagger} + s \, a_{\mathbf{p}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}} = \delta_{\mathbf{qp}}.$$
(2.3)

Für Bosonen sagen uns die Relationen (2.3), dass alle diese Operatoren miteinander **vertauschen** mit der einzigen Ausnahme von Erzeugern und Vernichtern zum gleichen Einteilchenzustand, für deren **Kommutator** $\{a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}\}_{-1} \equiv [a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}] = 1$ gilt. Für Fermionen **antivertauschen** alle Operatoren mit der wiederum einzigen Ausnahme von Erzeugern und Vernichtern zum gleichen Einteilchenzustand, für deren **Antikommutator** $\{a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}\}_{+1} \equiv a_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}}^{\dagger} + a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}} = 1$ gilt.

Die Vertauschungsrelationen (2.3) zusammen mit der Vakuumdefinition (2.2) reichen aus, um alle denkbaren Berechnungen im Fockraum durchzuführen.

Mit der folgenden Ubungsaufgabe wird erläutert, wie der **Fockraum eines Bosons** in der zweiten Quantisierung aufgebaut wird.

Übung 2.1: Zum Fockraum für Bosonen

(a) Man leite aus (2.3) im Bosonfall s = -1 die Kommutatorrelationen

$$[a_{\mathbf{q}}, (a_{\mathbf{q}}^{\dagger})^{n}] = n(a_{\mathbf{q}}^{\dagger})^{n-1}$$
(2.4)

und

$$[a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}}, (a_{\mathbf{q}}^{\dagger})^{n}] = n(a_{\mathbf{q}}^{\dagger})^{n}$$

$$(2.5)$$

her.

(b) Man schließe aus (2.5) und (2.2) die Beziehung

$$a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}}(a_{\mathbf{q}}^{\dagger})^{n}|0\rangle = n(a_{\mathbf{q}}^{\dagger})^{n}|0\rangle, \qquad (2.6)$$

aus der man den Operator

$$n_{\mathbf{q}} = a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} \tag{2.7}$$

als Besetzungszahloperator für den Einteilchenzustand q identifiziert.

(c) Man zeige mittels (2.4), dass der Zustand

$$|n\rangle_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(a_{\mathbf{q}}^{\dagger}\right)^{n} |0\rangle \tag{2.8}$$

ein auf 1 normierter Basiszustand mit *n*-facher Besetzung des Einteilchenzustandes **q** ist. (Hier geht essentiell ein, dass $\langle 0|(a_{\mathbf{q}})^n \text{ der zum ket-Zustand} (a_{\mathbf{q}}^{\dagger})^n |0\rangle$ adjungierte bra-Zustand ist.)

(d) Man mache sich klar, dass der Zustand

$$|\{n_{\mathbf{q}}\}\rangle = \prod_{\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{n_{\mathbf{q}}!}} \left(a_{\mathbf{q}}^{\dagger}\right)^{n_{\mathbf{q}}} |0\rangle \tag{2.9}$$

mit dem Basiszustand (1.17) identifiziert werden kann. \Box

Für **Fermionen** sind die analogen Resultate einfacher, weil wegen des Pauliverbots keine Mehrfachbesetzungen möglich sind. Man erkennt leicht, dass für den Besetzungszahloperator dieselbe Gleichung (2.7) gilt. Da – wie schon am Ende des Kapitels 1 betont – für Fermionen die **Phase** der Zustände von der Reihenfolge abhängt, in der die Einteilchenzustände besetzt werden, ergeben sich die (1.15) entsprechenden normierten Basiszustände als

$$|\{n_{\mathbf{q}}\}\rangle = \prod_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}}^{\dagger})^{n_{\mathbf{q}}} |0\rangle, \qquad (2.10)$$

wobei die $n_{\mathbf{q}}$ die Werte 0 oder 1 annehmen können und die Reihenfolge der Faktoren im Produkt dieselbe wie die in der Liste $\{n_{\mathbf{q}}\}$ sein muss.

Übung 2.2: Man zeige mittels der Vertauschungsrelationen (2.3), dass der Zustand (2.10) auf 1 normiert ist, und mache sich klar, dass er mit der Slaterdeterminante (1.15) identifiziert werden kann.

Die Vorteile beim Ubergang zur zweiten Quantisierung zeigen sich auch deutlich, wenn man die gebräuchlichen quantenmechanischen Observablen im Fockraum durch Erzeuger und Vernichter darstellt. Jeder lineare Operator (1.2) ist vollständig charakterisiert durch die Angabe seiner Wirkung auf beliebige Basiszustände (1.15) bzw. (1.17). Wir werden im folgenden diese Wirkung für Systeme mit einer einzigen Teilchensorte untersuchen. Diese Untersuchung wird einfach, wenn man benutzt, dass die Observablen (1.2) dann totalsymmetrisch unter Vertauschung aller Teilchen sind und daher mit dem Symmetrisierungsoperator vertauschen. Man braucht daher nur die Wirkung der Observablen auf Produktzustände vom Typ (1.3) zu betrachten. Bei der Berechnung werden wir die **Vollständigkeitsrelation**

$$\sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}| = 1 \tag{2.11}$$

für Einteilchenzustände benutzen.

Die gebräuchlichen Observablen setzen sich additiv aus Termen zusammen, die nur auf wenige Teilchen wirken, meist nur auf ein oder zwei Teilchen. Betrachten wir zunächst den Spezialfall von **Einteilchenoperatoren** eines Systems mit n Teilchen einer einzigen Teilchensorte

$$\mathcal{O}_1 = \sum_{i=1}^n \mathcal{A}(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \mathbf{s}_i).$$
(2.12)

Die kinetische Energie und eine externe potentielle Energie sind Beispiele für Einteilchenoperatoren. Anwendung des Einteilchenoperators \mathcal{O}_1 auf einen Produktzustand ergibt unter Verwendung von (2.11)

$$\mathcal{O}_1 \prod_{k=1}^n |\mathbf{q}_k\rangle_k = \sum_{i=1}^n \mathcal{A}(i) \prod_{k=1}^n |\mathbf{q}_k\rangle_k = \sum_{\mathbf{p},i} {}_i \langle \mathbf{p} | \mathcal{A}(i) | \mathbf{q}_i \rangle_i \Big(|\mathbf{p}\rangle_i \prod_{k(\neq i)} |\mathbf{q}_k\rangle_k \Big).$$
(2.13)

Durch Anwendung der Symmetrisierungsoperatoren in (1.15) bzw. (1.17) auf die Gleichung (2.13) geht der ursprüngliche Produktzustand in den normierten Zustand $|\{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n\}\rangle$ über und der in Klammern stehende veränderte Zustand im rechten Ausdruck der Gleichung in den (für Bosonen im allgemeinen nicht normierten) Zustand $a_{\mathbf{p}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_i}|\{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n\}\rangle$. Im Falle von Bosonen war hierbei wichtig, dass der Normierungsfaktor in (2.9) in derselben Gestalt in (1.17) auftaucht. Man kann dann im folgenden den Namen *i* des Teilchens im Matrixelement und an den Zuständen durch einen festen Namen 1 und die *i*–Summe durch eine \mathbf{q} –Summe über alle Einteilchenzustände ersetzen und erhält für Einteilchenoperatoren den für alle Zustände im Fockraum gültigen einfachen Ausdruck

$$\mathcal{O}_{1}^{\mathrm{F}} = \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q}} \sqrt{\mathbf{p}} |\mathcal{A}(1)| \mathbf{q} \sqrt{a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}}.$$
(2.14)

Er ist bilinear in den Erzeugern und Vernichtern.

Zweiteilchenoperatoren setzen sich additiv aus Termen zusammen, die jeweils nur auf zwei Teilchen wirken, d.h. sie haben für eine einzige Teilchensorte die Gestalt

$$\mathcal{O}_2 = \sum_{1 \le i < j \le n} \mathcal{B}(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \mathbf{s}_i; \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j, \mathbf{s}_j) \qquad (\mathcal{B}(1; 2) = \mathcal{B}(2; 1))$$
(2.15)

und beschreiben die üblichen Zweikörperwechselwirkungen zwischen identischen Teilchen. Die Anwendung eines solchen Operators auf einen Produktzustand ergibt

$$\mathcal{O}_{2} \prod_{k=1}^{n} |\mathbf{q}_{k}\rangle_{k} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1\\(i\neq j)}}^{n} \mathcal{B}(i;j) \prod_{k=1}^{n} |\mathbf{q}_{k}\rangle_{k}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},i,j} {}_{j} \langle \mathbf{q} |_{i} \langle \mathbf{p} | \mathcal{B}(i;j) | \mathbf{q}_{i} \rangle_{i} | \mathbf{q}_{j} \rangle_{j} \Big(|\mathbf{p}\rangle_{i} | \mathbf{q} \rangle_{j} \prod_{k(\neq i,j)} |\mathbf{q}_{k}\rangle_{k} \Big).$$
(2.16)

Unter Anwendung der Symmetrisierungsoperatoren in (1.15) bzw. (1.17) auf die Gleichung (2.16) geht der in Klammern stehende Produktzustand in der zweiten Zeile in den Zustand

$$a_{\mathbf{p}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_{j}}a_{\mathbf{q}_{i}}|\{\mathbf{q}_{1},\ldots,\mathbf{q}_{n}\}\rangle \tag{2.17}$$

über, in dem die ursprünglichen Einteilchenzustände \mathbf{q}_i bzw. \mathbf{q}_j durch \mathbf{p} bzw. \mathbf{q} ersetzt sind.

Übung 2.3: Warum wäre es falsch, die Ersetzung der beiden Einteilchenzustände in (2.17) durch die Operatoren $a_{\mathbf{p}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_{i}}a_{\mathbf{q}_{j}}$ oder $a_{\mathbf{p}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_{i}}a_{\mathbf{q}_{j}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_{j}}$ zu beschreiben? \Box

Analog zum Fall der Einteilchenoperatoren kann man nunmehr die Namen i und j der Teilchen im Matrixelement und an den Zuständen durch feste Namen 1 und 2 ersetzen, die i- bzw. j-Summen durch \mathbf{r} - bzw. \mathbf{s} -Summen ersetzen und erhält damit für Zweiteilchenoperatoren den für alle Zustände im Fockraum gültigen Ausdruck

$$\mathcal{O}_{2}^{\mathrm{F}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{r}, \mathbf{s}} 2 \langle \mathbf{q} |_{1} \langle \mathbf{p} | \mathcal{B}(1; 2) | \mathbf{r} \rangle_{1} | \mathbf{s} \rangle_{2} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{s}} a_{\mathbf{r}}.$$
(2.18)

Um sich im Falle von Fermionen das Vorzeichen der Formel (2.18) richtig zu wählen, sollte man sich merken, daß die beiden inneren Indizes des Operatorproduktes (hier \mathbf{q} und \mathbf{s} genannt) im Matrixelement des Operators \mathcal{B} zu dem einen Teilchen (hier 2 genannt) gehören und die beiden äußeren (hier \mathbf{p} und \mathbf{r} genannt) zu dem anderen Teilchen (hier 1 genannt).

Wir werden die Operatoren (2.14,18) die **Fockraumdarstellungen** der Operatoren \mathcal{A} bzw. \mathcal{B} nennen.

Die oben benutzten Darstellungen hängen alle von der Wahl der orthonormierten Einteilchenbasis mit den Eigenschaften (1.14, 2.11) ab. Ein **Basiswechsel** von der Einteilchenbasis $|\mathbf{q}\rangle$ zu einer anderen Einteilchenbasis $|\mathbf{p}\rangle$ wird durch die Formel

$$|\mathbf{p}\rangle = \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q} |\mathbf{p}\rangle = \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}\rangle u_{\mathbf{q}\mathbf{p}}$$
(2.19)

geleistet.

Übung 2.4: Wechsel der Einteilchenbasis

- (a) Man zeige, dass die Matrix \hat{u} , die den Basiswechsel in (2.19) beschreibt, unitär ist, d.h. es gelten die Beziehungen $\hat{u}\hat{u}^{\dagger} = \hat{u}^{\dagger}\hat{u} = 1$.
- (b) Man zeige, dass die Umkehrung der Transformation (2.19) daher durch $|\mathbf{q}\rangle = \sum_{\mathbf{p}} |\mathbf{p}\rangle u_{\mathbf{qp}}^*$ gegeben ist. \Box

Wenn wir Erzeuger des Einteilchenzustandes $|\mathbf{p}\rangle$ mit $b_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ bezeichnen, lautet das Transformationsgesetz für die Erzeuger und Vernichter

$$b_{\mathbf{p}}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} u_{\mathbf{q}\mathbf{p}}, \qquad b_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}\mathbf{p}}^{*} a_{\mathbf{q}}.$$
(2.20)

Der Vakuumzustand $|0\rangle$ hängt natürlich nicht von der Wahl der Einteilchenbasis ab und kann anstelle von (2.2) genauso durch die Bedingungen $b_{\mathbf{p}}|0\rangle = 0$ charakterisiert werden. Die **unitäre Transformation** (2.20) lässt offenbar auch die Vertauschungsrelationen (2.3) invariant und wird daher als **kanonisch** bezeichnet.

Übung 2.5: Man prüfe nach, dass die Vertauschungsrelationen (2.2) mit (2.20) für die *b*-Erzeuger und -Vernichter in gleicher Weise gelten. \Box

Die **Ortsdarstellung** mit den Quantenzahlen **r** unterscheidet sich von den bisher verwendeten Darstellungen mit diskreten Quantenzahlen **q** durch ihr **kontinuierliches Spektrum**. Die Orthonormierungs- und Vollständigkeitsbedingungen werden in dieser Darstellung durch

$$\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \qquad \int d\mathbf{r} \, | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | = 1$$
 (2.21)

ersetzt. Es ist deshalb nützlich, die Konvention zu treffen, Integrale über Quantenzahlen bzw. δ -Funktionen von Quantenzahlen im Falle diskreter Quantenzahlen

als Summen bzw. Kroneckersymbole zu interpretieren. Wir bezeichnen die Quantenzahlen in der Ortsdarstellung mit $\xi = (\mathbf{r}, \mu)$, wo μ für etwaige zusätzliche diskrete Quantenzahlen wie die Spinkomponente steht. Diese Darstellung nennt man oft **Standarddarstellung**. In Verallgemeinerung von Gleichung (2.21) und unter Nutzung der obigen Konvention können wir dann den Orthonormierungs– und Vollständgkeitsbedingungen die Form

$$\langle \xi' | \xi \rangle = \delta(\xi - \xi'), \qquad \int d\xi \, |\xi \rangle \langle \xi | = 1$$
 (2.22)

geben.

Die der Standarddarstellung zugeordneten Erzeuger und Vernichter nennt man auch **Feldoperatoren** und benutzt für sie die Notation $\psi^{\dagger}(\xi)$ bzw. $\psi(\xi)$, mit der z.B. $|\xi\rangle = \psi^{\dagger}(\xi)|0\rangle$ gilt. Der Feldoperator $\psi^{\dagger}(\xi)$ erzeugt ein Teilchen am Ort **r** im Zustand μ . Wir halten fest, dass die letzte Vertauschungsrelation in (2.3) in Feldoperatoren die Gestalt

$$\{\psi(\xi),\psi^{\dagger}(\xi')\}_{s} = \delta(\xi-\xi') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta_{\mu,\mu'}$$
(2.23)

hat. Die Transformationsregel zwischen der Standarddarstellung und einer diskreten Darstellung lautet

$$a_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \int d\xi \varphi_{\mathbf{q}}(\xi) \,\psi^{\dagger}(\xi), \qquad \psi^{\dagger}(\xi) = \sum_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}}^{*}(\xi) \,a_{\mathbf{q}}^{\dagger}, \tag{2.24}$$

wo

$$\varphi_{\mathbf{q}}(\xi) = \langle \xi | \mathbf{q} \rangle \tag{2.25}$$

die Wellenfunktion des Einteilchenzustandes $|\mathbf{q}\rangle$ in der Standarddarstellung ist. Mit diesen und den adjungierten Regeln

$$a_{\mathbf{q}} = \int d\xi \varphi_{\mathbf{q}}^*(\xi) \,\psi(\xi), \qquad \psi(\xi) = \sum_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}}(\xi) \,a_{\mathbf{q}} \tag{2.26}$$

können wir die Operatoren (21.4) und (2.18) in die Standarddarstellung transformieren und erhalten

$$\mathcal{O}_{1}^{\mathrm{F}} = \int d\xi \psi^{\dagger}(\xi) \langle \xi | \mathcal{A} | \xi \rangle \psi(\xi)$$
(2.27)

und

$$\mathcal{O}_{2}^{\mathrm{F}} = \frac{1}{2} \int d\xi_{1} d\xi_{2} \psi^{\dagger}(\xi_{1}) \psi^{\dagger}(\xi_{2}) \langle \xi_{2} | \langle \xi_{1} | \mathcal{B}(1;2) | \xi_{1} \rangle | \xi_{2} \rangle \psi(\xi_{2}) \psi(\xi_{1}).$$
(2.28)

Wir beschließen das Kapitel mit einer umfangreichen Übung, die viele Formeln bereitstellt, auf die in späteren Kapiteln Bezug genommen wird.

Übung 2.6: Standarddarstellung, Impulsdarstellung etc.

- (a) Man rechne die Gleichungen (2.26-28) nach.
- (b) Man zeige, dass der μ -unabhängige Einteilchenoperator $\mathcal{A}(1) = p_1^2/2m + v_1(\mathbf{r}_1)$ die Fockraumdarstellung

$$\mathcal{A}^{\mathrm{F}} = \sum_{\mu} \int d\mathbf{r} \, \psi^{\dagger}(\mathbf{r},\mu) (-\hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}}/2m + v_1(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r},\mu) \tag{2.29}$$

hat.

(c) Man beweise, dass die μ -unabhängige Zweiteilchenwechselwirkung $\mathcal{B}(1;2) = v_2 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ die Fockraumdarstellung

$$\mathcal{B}^{\rm F} = \frac{1}{2} \sum_{\mu_1,\mu_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \, \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_1,\mu_1) \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_2,\mu_2) v_2(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_2,\mu_2) \psi(\mathbf{r}_1,\mu_1) \quad (2.30)$$

besitzt.

(d) Man transformiere (2.29) und (2.30) in die **Impulsdarstellung**, indem man Gleichung (2.26) mit der Basis von auf das Systemvolumen V normierten ebenen Wellen

$$\varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \tag{2.31}$$

benutzt. Mit den Fouriertransformierten der Potentiale in (2.29,30)

$$v_{i,\mathbf{q}} = \int d^3 r \, e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \, v_i(\mathbf{r}) \quad (i=1,2)$$
 (2.32)

zeige man, dass in (2.30) Impulserhaltung gilt, und bestätige die Ergebnisse

$$\mathcal{A}^{\rm F} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q},\mu} q^2 a^{\dagger}_{\mathbf{q},\mu} a_{\mathbf{q},\mu} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}',\mu} v_{1,\mathbf{q}-\mathbf{q}'} a^{\dagger}_{\mathbf{q}',\mu} a_{\mathbf{q},\mu}$$
(2.33)

und

$$\mathcal{B}^{\rm F} = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q} \\ \mu, \mu'}} v_{2,\mathbf{q}} a^{\dagger}_{\mathbf{q}_1, \mu} a^{\dagger}_{\mathbf{q}_2, \mu'} a_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}, \mu'} a_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}, \mu}.$$
(2.34)

(e) Der Operator der Teilchendichte eines einkomponentigen Systems ist

$$n(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{2.35}$$

(hier ist \mathbf{r}' der Name eines Teilchens und \mathbf{r} ein Parameter, der angibt, an welchem Ort die Dichte gemessen wird.) Man zeige, dass dessen Ortsdarstellung im Fockraum

$$n^{\rm F}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \psi^{\dagger}(\mathbf{r},\mu)\psi(\mathbf{r},\mu)$$
(2.36)

und dessen Impulsdarstellung

$$n^{\mathrm{F}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}',\mu} a^{\dagger}_{\mathbf{q},\mu} a_{\mathbf{q}',\mu} e^{i(\mathbf{q}'-\mathbf{q})\mathbf{r}}$$
(2.37)

ist. Die Fouriertransformierte der Teilchendichte $n({\bf r})$ ist durch den Operator

$$\rho_{\mathbf{k}} = \int d^3 r \, n(\mathbf{r}) \, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \tag{2.38}$$

gegeben. Man bestätige die dementsprechende Fockraumformel in der Impulsdarstellung

$$\rho_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}} = \sum_{\mathbf{q},\mu} a_{\mathbf{q},\mu}^{\dagger} a_{\mathbf{q}+\mathbf{k},\mu}.$$
(2.39)

(f) Für Systeme, deren Hamiltonoperator $H^{\rm F}$ aus der nichtrelativistischen kinetischen Energie und einem Potential wie in (2.29) sowie einer Wechselwirkung wie in (2.30) besteht, kann man mittels der Kontinuitätsgleichung anhand des Kommutators (zur Definition von ι siehe (2.44)))

$$[\rho_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}}, H^{\mathrm{F}}] = \hbar \mathbf{k} \, \boldsymbol{\iota}_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}} \tag{2.40}$$

schließen, dass der zum Teilchendichteoperator (2.35) gehörige **Teilchen**stromdichteoperator durch

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}' \,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \,\mathbf{p}' \right) \tag{2.41}$$

gegeben ist. Man leite daraus die Fockraumformeln

$$\mathbf{j}^{\mathrm{F}}(\mathbf{r}) = \frac{-i\hbar}{2m} \sum_{\mu} \left[\psi^{\dagger}(\mathbf{r},\mu) \left(\nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r},\mu) \right) - \left(\nabla_{\mathbf{r}} \psi^{\dagger}(\mathbf{r},\mu) \right) \psi(\mathbf{r},\mu) \right]$$
(2.42)

und

$$\mathbf{j}^{\mathrm{F}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mV} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}',\mu} (\mathbf{q} + \mathbf{q}') a^{\dagger}_{\mathbf{q},\mu} a_{\mathbf{q}',\mu} e^{i(\mathbf{q}'-\mathbf{q})\mathbf{r}}$$
(2.43)

in Orts– und Impuls
darstellung ab. Man zeige dass die Fouriertransformierte der Funktion
 $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ durch

$$\boldsymbol{\iota}_{\mathbf{k}} = \int d^3 r \, \mathbf{j}(\mathbf{r}) \, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{1}{2m} \Big(\mathbf{p}' \, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \, \mathbf{p}' \Big) \tag{2.44}$$

gegeben ist und die Fockraumdarstellung

$$\boldsymbol{\iota}_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}} = \frac{\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{q},\mu} (2\mathbf{q} + \mathbf{k}) a_{\mathbf{q},\mu}^{\dagger} a_{\mathbf{q}+\mathbf{k},\mu} = \frac{\hbar}{m} \sum_{\mathbf{q},\mu} \mathbf{q} a_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2},\mu}^{\dagger} a_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2},\mu}$$
(2.45)

hat.

(g) Der Operator des Gesamtimpulses ist

$$\mathbf{P} = m \int d^3 r \, \mathbf{j}(\mathbf{r}) = m \, \boldsymbol{\iota}_{\mathbf{k}=0}.$$
 (2.46)

Der Operator $\rho_{\mathbf{q}}^{\mathrm{F}}$ (2.39) erzeugt Teilchen–Loch–Paare mit Impuls $-\hbar \mathbf{k}$ und der Operator $(\rho_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}})^{\dagger} = \rho_{-\mathbf{k}}^{\mathrm{F}}$ solche mit Impuls $\hbar \mathbf{k}$. Man beweise die Kommutatorrelation

$$[\mathbf{P}, (\rho_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}})^{\dagger}] = \hbar \, \mathbf{k} \cdot (\rho_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}})^{\dagger}, \qquad (2.47)$$

die bestätigt, dass der Operator $(\rho_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}})^{\dagger}$ den Gesamtimpuls um $\hbar \mathbf{k}$ ändert. (h) Man beweise die Kommutatorrelationen

$$[\rho_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}}, \rho_{\mathbf{k}'}^{\mathrm{F}}] = 0, \qquad [\boldsymbol{\iota}_{\mathbf{k}}^{\mathrm{F}}, \rho_{\mathbf{k}'}^{\mathrm{F}}] = \frac{\hbar \, \mathbf{k}'}{m} \rho_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}}^{\mathrm{F}}$$
(2.48)

und mit kartesischen Komponenten $\iota_{{\bf k},\alpha}$ und k_{α}

$$[\iota_{\mathbf{k},\alpha}^{\mathrm{F}}, \iota_{\mathbf{k}',\beta}^{\mathrm{F}}] = \frac{\hbar}{m} \Big(k_{\beta} \cdot \iota_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\alpha}^{\mathrm{F}} - k_{\alpha}' \cdot \iota_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\beta}^{\mathrm{F}} \Big).$$
(2.49)

Wie man sieht, bilden die Operatoren ρ und **j** unter der Kommutatorbildung einen abgeschlossenen linearen Raum mit der Struktur einer Lie-Algebra.

(i) Als wichtiges Beispiel für eine Zweiteilchenwechselwirkung (2.34) betrachten wir das **Yukawapotential**

$$v_2(\mathbf{r}) = \frac{e^{-\kappa r}}{r}.\tag{2.50}$$

Man zeige, dass seine Fouriertransformierte (2.32) durch

$$v_{2,\mathbf{q}} = \frac{4\pi}{q^2 + \kappa^2} \tag{2.51}$$

gegeben ist.

Hinweis: Man führe die Integration natürlich in Kugelkoordinaten aus und benutze den Kunstgriff

$$\int_0^\infty dr \, e^{-\kappa r} \sin qr = \Im \int_0^\infty dr \, e^{-(\kappa - iq)r}.$$

Für $\kappa = 0$ schließt dies das langreichweitige **Coulombpotential** ein, wobei die Divergenz von $v_{2,\mathbf{q}}$ bei q = 0 kennzeichnend für die **lange Reichweite** dieses Potentials ist.

(j) Man beweise die Identität

$$\sum_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}_{2} \atop \mu,\mu'} a^{\dagger}_{\mathbf{q}_{1},\mu} a^{\dagger}_{\mathbf{q}_{2},\mu'} a_{\mathbf{q}_{2}-\mathbf{q},\mu'} a_{\mathbf{q}_{1}+\mathbf{q},\mu} = \rho_{\mathbf{q}} \rho^{\dagger}_{\mathbf{q}} - \rho_{\mathbf{0}}, \qquad (2.52)$$

mit der sich die Zweiteilchenwechselwirkung (2.34) durch die Operatoren (2.29) der Teilchendichte ausdrücken lässt:

$$\mathcal{B}^{\mathrm{F}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} v_{2,\mathbf{q}} (\rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} - \rho_{\mathbf{0}}).$$
(2.53)

Mit der Umkehrung

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$
(2.54)

der Fouriertransformation (2.38) schreibt sich die Formel (2.53) in Ortsraumdarstellung als

$$\mathcal{B}^{\rm F} = \frac{1}{2} \int_{V} d^{3}\mathbf{r} \int_{V} d^{3}\mathbf{r}' n(\mathbf{r}) v_{2}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') - \frac{1}{2} v_{2}(\mathbf{0}) \int_{V} d^{3}\mathbf{r} n(\mathbf{r}). \quad (2.55)$$

Man mache sich klar, dass der in (2.53,55) zweite Term die im ersten Term enthaltene **Selbstwechselwirkung** der Teilchen beseitigt. Während in der Ortsdarstellung (2.55) die Annahme eines endlichen Wertes für $v_2(\mathbf{0})$ zu machen ist, ist diese Einschränkung in der Impulsdarstellung (2.53) nicht erforderlich.

II. Zweizeitige Greenfunktionen

In diesem Abschnitt definieren wir zunächst in Kapitel 3 zeitabhängige retardierte und avancierte Kommutator-Greenfunktionen und deren Fouriertransformierte. Danach werden in Kapitel 4 Matsubara- oder Temperatur-Greenfunktionen eingeführt und deren Zusammenhang mit den Kommutator-Greenfunktionen wird beschrieben. In Kapitel 5 werden Einteilchenpropagatoren und in Kapitel 6 Responsefunktionen als spezielle Beispiele für Greenfunktionen diskutiert.

3. Retardierte und avancierte Greenfunktionen

Wie man aus der statistischen Physik weiß, ist die detaillierte mikroskopische Angabe eines Vielteilchenzustandes im allgemeinen weder notwendig noch erwünscht. Sie ist nicht notwendig, weil man doch nur relativ wenige Messwerte über den Zustand zur Verfügung hat, die sich als Mittelwerte einfacher Observabler (meist Einteilchen- oder Zweiteilchenoperatoren) ergeben. Sie ist unerwünscht, weil, selbst wenn man die vollständige Struktur eines 10- oder 10^{20} -Teilchenzustandes zu speichern in der Lage wäre, die enthaltene Information unüberschaubar und daher nutzlos wäre. Daher ist es zweckmäßig, die Beschreibung von Vielteilchensystemen von Anfang an auf die Mittelwerte der relevanten einfachen Observablen zu beschränken.

Die Vielteilchendichteverteilung $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = |\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2$ eines N–Teilchenzustandes $|\Phi\rangle$ zum Beispiel ist für große N total informationsüberladen.

Übung 3.1: Wie sieht die Ortsdarstellung des Operators \hat{N} im N-Teilchenraum aus, mit der $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \langle \Phi | \hat{N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) | \Phi \rangle$ gilt? \Box

Sehr aufschlussreich sind dagegen die Teilchendichte

$$\langle \Phi | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Phi \rangle = N \int |\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^3 r_2 \dots d^3 r_N$$
(3.1)

des Zustandes oder auch die Dichtekorrelation

$$\langle \Phi | \hat{n}(\mathbf{r}) \hat{n}(\mathbf{r}') | \Phi \rangle = N(N-1) \int |\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{r}_3 \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^3 r_3 \dots d^3 r_N + N \,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int |\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^3 r_2 \dots d^3 r_N.$$

$$(3.2)$$

Übung 3.2: Wie sieht die Ortsdarstellung des Operators $\hat{n}(\mathbf{r})$ im N–Teilchenraum aus? Man rechne die obigen Formeln nach!

In den meisten Fällen wird man sich für einen Zustand des thermischen Gleichgewichts des Vielteilchensystems oder Zustände in der Nähe eines solchen interessieren. Unter diesen Umständen können die Ergebnisse einer Messung als Mittelwerte geeigneter Observabler im Gleichgewicht ausgedrückt werden. Es hat sich nun gezeigt, dass es am geschicktesten ist, solche Mittelwerte mit Hilfe sogenannter Greenfunktionen zu berechnen. Wir werden hier zunächst die Greenfunktionen definieren und ihre formalen Eigenschaften in einiger Ausführlichkeit diskutieren, bevor wir ihre Nützlichkeit demonstrieren.

Zu einem Paar von Operatoren A, B, die nicht notwendig hermitesch sein müssen, wird eine **retardierte (Kommutator–)Greenfunktion** durch

$$\mathcal{G}_{A,B}^{r}(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \langle \{A_H(t), B_H(t')\}_s \rangle \Theta(t-t')$$
(3.3)

definiert. Hier ist

$$X_H(t) = e^{iHt/\hbar} X e^{-iHt/\hbar}$$
(3.4)

der zu X gehörige Operator im Heisenbergbild, wobei die Zeitentwicklung durch den zeitunabhängigen Hamiltonoperator H bestimmt wird. Das Symbol

$$\{A, B\}_s = A + sB$$
 (s = ±1) (3.5)

bezeichnet, wie schon in (2.3) definiert, für s = +1 den Antikommutator und für s = -1 den Kommutator der beiden Operatoren A und B. Der Mittelwert

$$\langle X \rangle = \operatorname{Sp}\left(\rho X\right) \tag{3.6}$$

ist mit dem Gleichgewichtsdichteoperator

$$\rho = e^{-\beta H} / Z, \qquad Z = \operatorname{Sp}\left(e^{-\beta H}\right) \tag{3.7}$$

gebildet. Wir stellen uns dabei eine **großkanonische Gesamtheit** vor und denken uns für jede Teilchensorte mit erhaltener Teilchenszahl N_i einen Beitrag $-\mu_i N_i$ mit dem chemischen Potential μ_i im Hamiltonoperator (in den Gleichungen (3.3,4,7)) absorbiert. Die auftretenden Spuren erstrecken sich dann über den gesamten Fockraum des Vielteichensystems.

Für die Wahl des Parameters $s = \pm 1$ gibt es eine einfache Regel, die sich daraus ergibt, dass der Kommutator $\{A, B\}_s$ ein möglichst einfacher Operator sein sollte. Daher wählt man im allgemeinen s = -1. Nur wenn sowohl A als auch B Produkte einer ungeraden Zahl von Fermioperatoren sind, wählt man s = +1.

Die oben definierte Greenfunktion erinnert unmittelbar an die verallgemeinerten Suszeptibilitäten, wie sie in der Theorie des linearen Responses für kleine Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht auftreten (siehe dazu auch Kapitel 6) In diesem Fall ist s = -1 und A entspricht einer Observablen, deren Abweichung von Gleichgewicht man beobachtet, wenn eine äußere Störung, die an die Observable B koppelt, auf das Vielteilchensystem wirkt.

Wegen der durch zyklisches Vertauschen unter der Spur gewonnenen Identität

$$\langle \{A_{H}(t), B_{H}(t')\}_{s} \rangle = \frac{1}{Z} \operatorname{Sp} \left[e^{-\beta H} \left(\underbrace{e^{iHt/\hbar} A \, e^{-iH(t-t')/\hbar} B \, e^{-iHt'/\hbar}}_{\rightarrow e^{iH(t-t')/\hbar} A \, e^{-iH(t-t')/\hbar} B} + s \, \underbrace{e^{iHt'/\hbar} B \, e^{-iH(t'-t)/\hbar} A \, e^{-iH(t-t')/\hbar} B}_{\rightarrow B \, e^{iH(t-t')/\hbar} A \, e^{-iH(t-t')/\hbar}} \right) \right]$$

$$= \langle \{A_{H}(t-t'), B_{H}(0)\}_{s} \rangle$$

$$(3.8)$$

hängt \mathcal{G} tatsächlich nur von der Differenz der Zeiten ab. Dies ist Ausdruck der zeitlichen Translationsinvarianz des thermischen Gleichgewichts.

Eine wichtige Manipulation der Greenfunktion \mathcal{G} besteht darin, ihre Fouriertransformierte zu bilden, d.h. eine Frequenzanalyse ihrer zeitlichen Entwicklung vorzunehmen. Da \mathcal{G}^r eine retardierte Funktion ist, hat ihre Fouriertransformierte die Eigenschaften einer Laplace–Transformierten. Die Funktion

$$G_{A,B}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{G}_{A,B}^{r}(t) e^{izt/\hbar} dt \quad (\Im z > 0)$$
(3.9)

ist holomorph in der oberen komplexen Energiehalbebene $\Im z > 0$. Damit diese Aussage richtig ist, muss natürlich die in (3.3) nur formal definierte retardierte Greenfunktion existieren. Wir nehmen für das folgende an, dass sie existiert und eine beschränkte Funktion der Zeit t - t' ist. Unter dieser Voraussetzung schätzt man leicht mittels (3.9) ab, dass $G_{A,B}(z)$ für jedes $\epsilon > 0$ in der Halbebene $\Im z > \epsilon$ beschränkt ist. Diese Eigenschaft werden wir in Kapitel 4 brauchen.

Es erweist sich als nützlich, neben der retardierten Greenfunktion \mathcal{G}^r die avancierte Greenfunktion

$$\mathcal{G}^{a}_{A,B}(t) = \frac{i}{\hbar} \langle \{A_H(t), B\}_s \rangle \Theta(-t)(t-t'), \qquad (3.10)$$

zu betrachten, deren Fouriertransformierte

$$G_{A,B}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{G}_{A,B}^{a}(t) e^{izt/\hbar} dt \quad (\Im z < 0)$$
(3.11)

unter entsprechenden Voraussetzungen für die Existenz und Beschränktheit von $\mathcal{G}_{A,B}^{a}$ holomorph in der unteren Halbebene $\Im z < 0$ und beschränkt in jeder Halbebene $\Im z < \epsilon < 0$ ist. Da die Definitionsbereiche von (3.9) und (3.11) sich nicht überschneiden, betrachtet man beide als Teil einer analytischen Funktion und belegt sie wie oben geschehen mit dem gemeinsamen Symbol $G_{A,B}(z)$. Die reelle z-Achse ist als natürliche Grenze des Analytizitätsbereichs der beiden in den Halbebenen analytischen Funktionen zu betrachten. Wie wir anhand von Gleichung (3.17) erkennen werden, liegen auf der reellen z-Achse immer Singularitäten von $G_{A,B}(z)$. Wir werden allerdings später auch sehen, dass die beiden Funktionen (3.9) und (3.11) über Teilintervalle der reellen z-Achse hinweg häufig analytische Fortsetzungen voneinander sind.

Wir werden nun Bewegungsgleichungen für die Greenfunktionen ${\mathcal G}$ und Gherleiten. Wegen

$$i\hbar \frac{d}{dt}A_H(t) = [A_H(t), H] = \left([A, H]\right)_H(t)$$

kann man die folgende Umformung vornehmen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \{A_H(t), B\}_s \rangle = \langle \{[A, H]_H(t), B\}_s \rangle$$
$$= \langle AHB - \underbrace{HAB}_{\rightarrow ABH} + s(\underbrace{BAH}_{\rightarrow HBA} - BHA) \rangle$$
$$= \langle \{A_H(t), [H, B]\}_s \rangle.$$

Hier konnte der Hamilton operator H unter der Spur zyklisch mit AB bzw. BA vertauscht werden, weil er mit der kanonischen Dichtematrix ρ kommuiert. Es gilt folglich

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}_{A,B}^{r/a}(t) = \mathcal{G}_{[A,H],B}^{r/a}(t) = \mathcal{G}_{A,[H,B]}^{r/a}(t) \quad \begin{cases} r: t > 0\\ a: t < 0 \end{cases}.$$
 (3.12)

Zusammen mit den Randbedingungen

$$\mathcal{G}^{r}_{A,B}(0+) = \frac{-i}{\hbar} \langle \{A, B\}_s \rangle, \quad \mathcal{G}^{a}_{A,B}(0-) = \frac{i}{\hbar} \langle \{A, B\}_s \rangle$$
(3.13)

ergeben sich daraus mittels der Zwischenrechnung (partielle Integration)

$$i\hbar \int_{0}^{\infty} \left(\frac{d}{dt} \mathcal{G}_{A,B}^{r}(t)\right) e^{izt/\hbar} dt = i\hbar \mathcal{G}_{A,B}^{r}(t) e^{izt/\hbar} |_{0}^{\infty} + z \int_{0}^{\infty} \mathcal{G}_{A,B}^{r}(t) e^{izt/\hbar} dt$$
$$= -i\hbar \mathcal{G}_{A,B}^{r}(0+) + z \mathcal{G}_{A,B}(z) = z \mathcal{G}_{A,B}(z) - \langle \{A,B\}_{s} \rangle \quad (\Im z > 0)$$

und

$$i\hbar \int_{-\infty}^{0} \left(\frac{d}{dt} \mathcal{G}^{a}_{A,B}(t)\right) e^{izt/\hbar} dt = i\hbar \mathcal{G}^{a}_{A,B}(0-) + z G_{A,B}(z)$$
$$= z G_{A,B}(z) - \langle \{A,B\}_s \rangle \quad (\Im z < 0)$$

die prägnanten Bewegungsgleichungen

$$z G_{A,B}(z) - \langle \{A,B\}_s \rangle = G_{[A,H],B}(z) = G_{A,[H,B]}(z)$$
(3.14)

für die Laplace–Transformierte G, die für $\Im z > 0$ wie für $\Im z < 0$ gleichermaßen gelten. Diese Bewegungsgleichungen finden vielfältige Anwendung.

Übung 3.3: Man leite mittels der Bewegungsgleichungen (3.14) unter Benutzung der Definitionen (2.39,45) und der Kommutatoren (2.40,48) die Beziehung

$$z^2 G_{\rho_{\mathbf{k}},\rho_{\mathbf{k}}^{\dagger}}(z) = \frac{\hbar^2 k^2}{m} N + \hbar^2 \sum_{\alpha,\beta} k^{\alpha} k^{\beta} G_{\iota_{\mathbf{k}}^{\alpha},(\iota_{\mathbf{k}}^{\beta})^{\dagger}}(z)$$
(3.15)

zwischen dem Teilchendichte–Propagator und dem longitudinalen Anteil des Stromdichte–Propagators her. Hier ist $N = \langle \rho_0 \rangle$ die mittlere Teilchenzahl und m die Masse der Teilchen.

Indem man die Zeitableitung über die gesamte Zeitachse $-\infty < t < \infty$ erstreckt, kann man die Gleichungen (3.12) und (3.13) auch zu einer Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}_{A,B}(t) = \langle \{A, B\}_s \rangle \cdot \delta(t) + \mathcal{G}_{[A,H],B}(t) \quad (-\infty < t < \infty)$$
(3.16)

für die retardierte und avancierte Greenfunktion zusammenfassen. Mit

$$i\hbar \int_0^\infty \left(\frac{d}{dt}\mathcal{G}_{A,B}(t)\right) e^{izt/\hbar} = i\hbar \,\mathcal{G}_{A,B}(t) \, e^{izt/\hbar}|_{-\infty}^\infty + zG_{A,B}(z) = zG_{A,B}(z)$$

erhält man so eine kompaktere Herleitung der Bewegungsgleichung (3.14).

Wir wollen nun die Greenfunktionen $\mathcal{G}_{A,B}$ in der Spektraldarstellung ihres Hamiltonoperators H betrachten. Sei $\{|n\rangle\}$ ein vollständiges orthonormiertes System von Eigenzuständen des Hamiltonoperators im Fockraum mit den Energien E_n , sodass $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ gilt. Bildet man dann die Spuren in (3.6) und (3.7) in der Eigenbasis $\{|n\rangle\}$, so findet man $Z = \operatorname{Sp} e^{-\beta H} = \sum_n e^{-\beta E_n}$ und

$$\mathcal{G}_{A,B}^{r}(t) = \frac{-i}{\hbar Z} \Theta(t) \sum_{n} e^{-\beta E_{n}} \langle n | \{A_{H}(t), B\}_{s} | n \rangle$$

$$= \frac{-i}{\hbar Z} \Theta(t) \sum_{n,m} e^{-\beta E_{n}} \left(\langle n | A | m \rangle \langle m | B | n \rangle e^{i(E_{n} - E_{m})t/\hbar} + s \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle e^{i(E_{m} - E_{n})t/\hbar} \right)$$

$$= \frac{-i}{\hbar Z} \Theta(t) \sum_{n,m} \langle n | A | m \rangle \langle m | B | n \rangle e^{i(E_{n} - E_{m})t/\hbar} (e^{-\beta E_{n}} + s e^{-\beta E_{m}}).$$
(3.17)

Die Laplacetransformation (3.9) kann man nun leicht (unter der Summe Term für Term) ausführen und erhält die **Spektraldarstellung**

$$G_{A,B}(z) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \frac{\langle n|A|m \rangle \langle m|B|n \rangle}{z + E_n - E_m} (e^{-\beta E_n} + s e^{-\beta E_m}).$$
(3.18)

Man überzeugt sich leicht anhand der zu (3.17) analogen Spektraldarstellung von $\mathcal{G}^{a}_{A,B}$, dass (3.18) nicht nur für $\Im z > 0$, sondern auch für $\Im z < 0$ gilt.

Die Greenfunktion (3.18) ist eine analytische Funktion in der komplexen Variablen z bis auf einfache Pole an den Energien $z_{nm} = E_n - E_m$. Für endliche Systeme (d.h. für Systeme mit endlichem Volumen V) bilden diese Energien eine diskrete Menge auf der reellen Achse und die retardierte ($\Im z > 0$) und die avancierte ($\Im z < 0$) Greenfunktion (3.9,11) sind analytische Fortsetzungen voneinander. Dies gilt auch im thermodynamischen Limes $V \to \infty$, wenn die Energien z_{nm} nicht überall auf der reellen Achse dicht liegen.

Übung 3.4: Man verifiziere die Bewegungsgleichungen (3.14) direkt mittels der Spektraldarstellung (3.18).[□]

Wie man, z.B. anhand von (3.14) oder (3.18), erkennen kann, hat die Greenfunktion $G_{A,B}(z)$ die Eigenschaft

$$G_{A,B}(z) \propto 1/z \qquad (|z| \to \infty).$$
 (3.19)

Dies erlaubt wegen der analytischen Eigenschaften der Greenfunktion aufgrund des Cauchyschen Integralsatzes die Darstellung

$$G_{A,B}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} \frac{G_{A,B}(z')}{z'-z} dz', \qquad (3.20)$$

wo der Weg C als die Summe der beiden Integrale $\int_{-\infty+i0}^{\infty+i0}$ und $\int_{\infty-i0}^{-\infty-i0}$ zu verstehen ist. Hier konnten wegen der Asymptotik (3.19) die Weganteile, die die beiden linearen Wege im Unendlichen halbkreisförmig schließen, weggelassen werden.

4. Matsubara–Greenfunktionen

Als nächstes führen wir mit der Matsubara– oder Temperatur–Greenfunktion

$$\mathcal{G}_{A,B}(\tau - \tau') = -\langle T_s(A_\tau B_{\tau'}) \rangle$$
(4.1)

$$= \begin{cases} -\langle A_{\tau}B_{\tau'}\rangle & (0 < \tau - \tau' < \beta) \\ s \langle B_{\tau'}A_{\tau}\rangle & (-\beta < \tau - \tau' < 0) \end{cases}$$
(4.2)

eine zweite Art von Greenfunktion ein. Hier bezeichnet

$$X_{\tau} = e^{H\tau} X e^{-H\tau} \tag{4.3}$$

den Operator X im Heisenbergbild mit der imaginären "Zeit" $\tau = it$ ($\hbar \tau$ ist eine echte Zeit). Die großkanonische Mittelung $\langle \rangle$ ist wie in (3.6,7) zu verstehen. Die **Zeitordnungsoperation** T_s in (4.1) ist durch (4.2) definiert. Die Begrenzungen für die Variable $\tau - \tau'$ in (4.2) garantieren, dass die davorstehenden Ausdrücke sinnvoll sind. Da der Hamiltonoperator H nämlich im allgemeinen nur nach unten beschränkt ist, wird $e^{-H \cdot x}$ nur für $\Re x \ge 0$ ein beschränkter Operator sein (mit Eigenwerten $e^{-E_n x}$). In

$$\langle A_{\tau}B_{\tau'}\rangle = \frac{1}{Z} \operatorname{Sp}(e^{-H(\beta-\tau+\tau')}Ae^{-H(\tau-\tau')}B)$$

bewirkt die Einschränkung 0<
 $\tau-\tau'<\beta$ gerade, dass beide Exponentiale beschränkt sind. Entsprechendes gilt für

$$\langle B_{\tau'}A_{\tau}\rangle = \frac{1}{Z} \operatorname{Sp}(e^{-H(\beta - \tau' + \tau)}Be^{-H(\tau' - \tau)}A)$$

mit der Einschränkung $-\beta < \tau - \tau' < 0.$

Die Temperatur–Greenfunktion $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ hängt eng mit den vorher definierten Kommutator–Greenfunktionen $\mathcal{G}_{A,B}^{r/a}(t)$ zusammen. Bevor wir den Zusammenhang im einzelnen studieren, sei bemerkt, dass $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ bei $\tau = 0$ um den Wert $-\langle \{A, B\}_s \rangle$ springt, ähnlich wie $\mathcal{G}_{A,B}^r(t)$ und $\mathcal{G}_{A,B}^a(t)$, die beide bei t = 0 um $-\frac{i}{\hbar}\langle \{A, B\}_s \rangle$ springen. Außerdem sei darauf hingewiesen, dass $e^{-H \cdot x}$ ein in $\Re x > 0$ holomorpher Operator ist. Daher kann $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ in die beiden Streifen $0 < \Re \tau < \beta$ und $-\beta < \Re \tau < 0$ analytisch fortgesetzt werden. An der gemeinsamen Grenze $\Re \tau = 0$ der beiden Streifen springt die Matsubara–Greenfunktion um

$$\mathcal{G}_{A,B}(\tau+0) - \mathcal{G}_{A,B}(\tau-0) = \frac{\hbar}{i} \cdot \begin{cases} \mathcal{G}_{A,B}^r(t) & (t>0) \\ -\mathcal{G}_{A,B}^a(t) & (t<0) \end{cases} \quad \text{mit } \tau = it/\hbar.$$
(4.4)

Wegen

$$\langle BA_{\tau} \rangle = \frac{1}{Z} \operatorname{Sp}(e^{-H(\beta+\tau)} B e^{H\tau} A) = \frac{1}{Z} \operatorname{Sp}(e^{-H[\beta-(\beta+\tau)]} A e^{-H(\beta+\tau)} B) = \langle A_{\tau+\beta} B \rangle$$

sind schließlich die Werte von $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ in den beiden Streifen durch die **Periodizitätsbeziehung**

$$\mathcal{G}_{A,B}(\tau) = -s \,\mathcal{G}_{A,B}(\tau + \beta) \qquad (-\beta < \Re \tau < 0) \tag{4.5}$$

miteinander verknüpft.

Die Temperatur-Greenfunktion $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ kann für reelle Werte von τ im Intervall $-\beta < \tau < \beta$ durch eine Fourierreihe dargestellt werden. Die relevanten Fourierkoeffizienten sind durch

$$G_{A,B}^{(n)} = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} \mathcal{G}_{A,B}(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \qquad (\omega_n = \frac{\pi n}{\beta})$$
(4.6)

mit ganzahligem n gegeben. Es ist angesichts von (4.5) sofort klar, dass für s = +1 die geraden Koeffizienten $G_{A,B}^{(2m)}$ und für s = -1 die ungeraden Koeffizienten $G_{A,B}^{(2m+1)}$ (m ganzzahlig) verschwinden. Daher lauten die Fourierreihen für die beiden Fälle

$$\mathcal{G}_{A,B}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} G_{A,B}^{(2m+1)} e^{-i\omega_{2m+1}\tau} \qquad (s=+1)$$
(4.7)

$$\mathcal{G}_{A,B}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} G_{A,B}^{(2m)} e^{-i\omega_{2m}\tau} \qquad (s = -1).$$
(4.8)

Die in den Fourierreihen (4.7,8) vorkommenden Frequenzen nennt man Matsubara-Frequenzen.

Die nicht verschwindenden Fourierkoeffizienten $G_{A,B}^{(n)}$ in (4.7,8) hängen eng mit der Fouriertransformierten $G_{A,B}(z)$ (3.9,11) der Kommutator-Greenfunktion zusammen. Wir führen dazu zunächst für den Fall s = +1 die folgende Rechnung aus:

$$\begin{aligned} G_{A,B}^{(2m+1)} &= \int_{0}^{\beta} \mathcal{G}_{A,B}(\tau) e^{i\omega_{2m+1}\tau} d\tau \\ &= \begin{cases} \left(\int_{0}^{i\infty} \mathcal{G}_{A,B}(\tau+0) - \int_{\beta}^{\beta+i\infty} \mathcal{G}_{A,B}(\tau-0) \right) e^{i\omega_{2m+1}\tau} d\tau & (2m+1>0) \\ \left(\int_{0}^{-i\infty} \mathcal{G}_{A,B}(\tau+0) - \int_{\beta}^{\beta-i\infty} \mathcal{G}_{A,B}(\tau-0) \right) e^{i\omega_{2m+1}\tau} d\tau & (2m+1<0) \end{cases} \\ &= \begin{cases} \int_{0}^{i\infty} (\mathcal{G}_{A,B}(\tau+0) - \mathcal{G}_{A,B}(\tau-0)) e^{i\omega_{2m+1}\tau} d\tau = \int_{0}^{\infty} \mathcal{G}_{A,B}^{r}(t) e^{-\omega_{2m+1}t/\hbar} dt \\ \int_{0}^{-i\infty} (\mathcal{G}_{A,B}(\tau+0) - \mathcal{G}_{A,B}(\tau-0)) e^{i\omega_{2m+1}\tau} d\tau = \int_{-\infty}^{0} \mathcal{G}_{A,B}^{a}(t) e^{-\omega_{2m+1}t/\hbar} dt \end{cases} \\ &= G_{A,B}(i\omega_{2m+1}) & \text{(für alle } m\text{).} \end{aligned}$$

Die in dieser Rechnung benutzten Integrationswege in der komplexen τ -Ebene sind in der folgenden Figur dargestellt. In der ersten Zeile von (4.9) wurde zunächst unter Beachtung von (4.5) und $e^{i\omega_{2m+1}(\tau+\beta)} = -e^{i\omega_{2m+1}\tau}$ das Integrationsintervall in (4.6) halbiert. Sodann wurde der rote Integrationsweg in Abhängigkeit vom Vorzeichen von ω_{2m+1} in einen der blauen so deformiert, dass der Beitrag des horizontalen blauen Weges verschwindet, wenn dieser ins Unendliche geschoben wird. So entsteht die zweite Zeile von (4.9). Die dritte Zeile erhält man dann, indem man die beiden Integrale mittels (4.5) vereinigt und (4.4) benutzt. Die letzte Zeile folgt dann sofort aus (3.9,11).



Ubung 4.1: Man führe eine zu (4.9) analoge Rechnung für den Fall s = -1 durch und zeige $G_{A,B}^{(2m)} = G_{A,B}(i\omega_{2m})$ für $m \neq 0$. Warum kann man für m = 0 keine entsprechende Aussage machen?

Insgesamt halten wir für die nicht verschwindenden Fouierkoeffizienten der Matsubara-Greenfunktion für die beiden Fälle $s = \pm 1$ das folgende Ergebnis fest:

$$s = +1: G_{A,B}^{(2m+1)} = G_{A,B}(i\,\omega_{2m+1})$$

$$(4.10)$$

$$s = -1:$$
 $G_{A,B}^{(2m)} = G_{A,B}(i\,\omega_{2m})$ $(m \neq 0),$ (4.11)

d.h. in Worten: Der Fourierkoeffizient einer Temperatur–Greenfunktion zu einer Matsubara–Frequenz $\omega \neq 0$ ist durch den Wert der Fouriertransformierten der entsprechenden Kommutator–Greenfunktion auf der imaginären Achse bei $i\omega$ gegeben.

Tatsächlich charakterisieren die diskreten Werte $G_{A,B}^{(2m+1)}$ bzw. $G_{A,B}^{(2m)}$ die analytische Funktion $G_{A,B}(z)$ vollständig und eindeutig. Denn nach einem funktionentheoretischen Theorem gibt es nur eine einzige in den beiden Halbebenen $\Im z > 0$ und $\Im z < 0$ holomorphe und im Unendlichen beschränkte Funktion $G_{A,B}(z)$, die den Bedingungen (4.10) bzw. (4.11) genügt (siehe dazu Anhang A):

Die Fourierkoeffizienten $G_{A,B}^{(2m+1)}$ bzw. $G_{A,B}^{(2m)}$ charakterisieren die analytische Funktion $G_{A,B}(z)$ eindeutig.

Eine Bestimmung der analytischen Fortsetzung für $G_{A,B}(z)$ aus Funktionswerten (4.10,11) wird oft ausgehend von numerischen Werten für die Fourierkoeffizienten

versucht. In Anhang A wird erläutert, warum jeder dazu verwendete Algorithmus problembehaftet sein muss.

Die Fourierreihen (4.7) bzw. (4.8) stellen die Matsubara–Greenfunktionen $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$, die durch (4.1,2) im Streifen $-\beta < \Re \tau < \beta$ definiert werden, nur für reelle τ im Intervall $-\beta < \tau < \beta$ dar. Die Beziehungen (4.10) bzw. (4.11) können dazu genutzt werden, eine nützliche im gesamten Streifen $-\beta < \Re \tau < \beta$ gültige Integraldarstellung für $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ zu finden. Dies gelingt, indem man wie im folgenden beschrieben die Fourierreihen (4.7,8) für reelle τ als Summe von Residuen auffasst. Einzelheiten der Umformung und der Notation (z.B. Definition des Weges \mathcal{C} und der Symbole \mathbf{z}_{\pm}) sind in Anhang B erläutert.

Im Fall s = +1 nimmt man die **Fermifunktion**

$$f(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1} = \frac{1}{2}(1 - \operatorname{tgh}\frac{\beta z}{2})$$
(4.12)

zur Hilfe, die bis auf einfache Pole mit den Residuen $-1/\beta$ an den Matsubara-Frequenzen $z = i \omega_{2m+1}$ eine ganze analytische Funktion ist. Man erhält ausgehend von den Fourierreihen mittels funktionentheoretischer Methoden (Cauchyscher Integralsatz, Residuensatz, Identitätssatz) die Darstellung

$$s = +1: \quad \mathcal{G}_{A,B}(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \begin{cases} \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) \left(-f(z)\right) e^{-z\tau} dz & (-\beta < \Re \tau < 0) \\ \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) \left(1 - f(z)\right) e^{-z\tau} dz & (0 < \Re \tau < \beta) \end{cases}$$
$$= \frac{1}{2\pi i} \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \left(G_{A,B}(z_{+}) - G_{A,B}(z_{-})\right) \left(-f(z)\right) e^{-z\tau} dz & (-\beta < \Re \tau < 0) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \left(G_{A,B}(z_{+}) - G_{A,B}(z_{-})\right) \left(1 - f(z)\right) e^{-z\tau} dz & (0 < \Re \tau < \beta). \end{cases}$$
(4.13)

Im Fall s = -1 nimmt man die **Bosefunktion**

$$g(z) = \frac{1}{e^{\beta z} - 1} = \frac{1}{2} (\operatorname{ctgh} \frac{\beta z}{2} - 1)$$
(4.14)

zur Hilfe. Sie ist eine ganze analytische Funktion bis auf einfache Pole mit den Residuen $1/\beta$ an den Matsubara-Frequenzen $z = i \omega_{2m}$. Hier erhält man die Darstellung

$$s = -1: \quad \mathcal{G}_{A,B}(\tau) = \frac{G_{A,B}^{(0)}}{\beta} + \frac{1}{2\pi i} \begin{cases} \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) g(z) e^{-z\tau} dz & (-\beta < \Re\tau < 0) \\ \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) (1+g(z)) e^{-z\tau} dz & (0 < \Re\tau < \beta) \end{cases}$$
$$= \frac{G_{A,B}^{(0)}}{\beta} + \frac{1}{2\pi i} \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} (G_{A,B}(z_{+}) - G_{A,B}(z_{-})) g(z) e^{-z\tau} dz & (-\beta < \Re\tau < 0) \\ \int_{-\infty}^{\infty} (G_{A,B}(z_{+}) - G_{A,B}(z_{-})) (1+g(z)) e^{-z\tau} dz & (0 < \Re\tau < \beta). \end{cases}$$
(4.15)

Indem man insbesondere mit $\tau = it/\hbar$ zu reellen Zeiten t übergeht, erhält man mit (4.2) aus (4.13) bzw. (4.15) Formeln für Korrelationsfunktionen. Für s = +1 lauten sie

$$\langle A_H(t)B\rangle = \frac{-1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) (1 - f(z)) e^{-izt/\hbar} dz, \qquad (4.16)$$

$$\langle BA_H(t) \rangle = \frac{-1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) f(z) e^{-izt/\hbar} dz \qquad (4.17)$$

und für s = -1

$$\langle A_H(t)B\rangle = \frac{-1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) (1+g(z)) e^{-izt/\hbar} dz - \frac{1}{\beta} G_{A,B}^{(0)},$$
 (4.18)

$$\langle BA_H(t) \rangle = \frac{-1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) g(z) e^{-izt/\hbar} dz - \frac{1}{\beta} G_{A,B}^{(0)}.$$
 (4.19)

Damit sind zeitliche Korrelationsfunktionen (im Fall s = -1 bis auf einen zeitunabhängigen additiven Summanden) auf die Laplace-Transformierte der Kommutator-Greenfunktionen zurückgeführt.

Für die nullte Fourierkomponente $G_{A,B}^{(0)}$ kann man aus der Fourierreihe (4.8) für $\tau = 0$ eine Summenregel ableiten. Man hat hier allerdings mit Vorsicht vorzugehen, weil die Greenfunktion $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ im Punkt $\tau = 0$ im allgemeinen unstetig ist. Angesichts eines Satzes aus der Theorie der Fourierreihen, nach dem in einem solchen Punkt die Fourierreihe den Wert des Mittelwertes $\frac{1}{2}[\mathcal{G}_{A,B}(0+)+\mathcal{G}_{A,B}(0-)]$ hat, erhält man jedoch die Beziehung

$$\lim_{N \to \infty} \sum_{m=-N}^{N} G_{A,B}^{(2m)} + \frac{\beta}{2} \langle AB + BA \rangle = 0, \qquad (4.20)$$

die zeigt, dass $G_{A,B}^{(0)}$ außer durch $G_{A,B}(z)$ durch den Erwartungswert $\langle AB + BA \rangle$ bestimmt ist.

Durch Kombination von (4.16,17) bzw. von (4.18,19) erhält man die Gleichung

$$s = \pm 1: \quad \langle \{A_H(t), B\}_s \rangle = \frac{-1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} G_{A,B}(z) \, e^{-izt/\hbar} dz,$$
 (4.21)

die im wesentlichen die Umkehr der Laplace–Transformationen (3.9) und (3.11) beschreibt. Hier trägt der obere Teil des Integrationsweges C nur für t > 0 bei und ergibt bis auf den Faktor $-i/\hbar$ die retardierte Greenfunktion, während der untere Teil des Integrationsweges C nur für t < 0 beiträgt und bis auf den Faktor i/\hbar die avancierte Greenfunktion ergibt. Man kann daher (4.21) auch in der Form

$$\mathcal{G}_{A,B}^{r/a}(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} G_{A,B}(z_{\pm}) \, e^{-izt/\hbar} dz \tag{4.22}$$

notieren.

Sehr nützlich ist auch die für reelle Frequenzen definierte Spektralfunktion

$$C_{A,B}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \{A_H(t), B\}_s \rangle e^{i\omega t/\hbar} dt$$

= $i [G_{A,B}(\omega + i 0) - G_{A,B}(\omega - i 0)].$ (4.23)

Die zweite Zeile in (4.23) folgt sofort aus den Gleichungen (3.3) und (3.9-11). Durch Anwendung der formalen Identität

$$\frac{1}{\omega - \omega_0 \pm i \, 0} = \frac{P}{\omega - \omega_0} \mp i \pi \delta(\omega - \omega_0) \tag{4.24}$$

auf die Spektraldarstellung (3.18) ergibt sich als Spektraldarstellung der Spektralfunktion die Beziehung

$$C_{A,B}(\omega) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} \langle n|A|m \rangle \langle m|B|n \rangle \,\delta(\omega + E_n - E_m)(e^{-\beta E_n} + s \, e^{-\beta E_m}). \tag{4.25}$$

Übung 4.2: Man folgere aus (4.25) die Positivität von Spektralfunktionen $C_{A,A^{\dagger}}(\omega) \geq 0$ für Fermionen und von $\omega C_{A,A^{\dagger}}(\omega) \geq 0$ für Bosonen.

Wenn man den aus (4.25) besonders deutlich erkennbaren Distributionscharakter der Spektralfunktion in Kauf nimmt, schreiben sich viele der obigen Gleichungen recht elegant. So nimmt Gleichung (3.20) die Form

$$G_{A,B}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C_{A,B}(\omega)}{z - \omega} d\omega$$
(4.26)

an, womit die Fouriertransformierten (3.9,11) durch die Spektralfunktion ausgedrückt werden. Analog schreiben sich (4.21) als

$$\langle \{A_H(t), B\}_s \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) \, e^{-i\omega t/\hbar} d\omega, \qquad (4.27)$$

und für s = +1 die Gleichungen (4.13,16,17) als

$$\mathcal{G}_{A,B}(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) f(\omega) e^{-\omega\tau} d\omega & (-\beta < \Re\tau < 0) \\ \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) (1 - f(\omega)) e^{-\omega\tau} d\omega & (0 < \Re\tau < \beta), \end{cases}$$
(4.28)

und

$$\langle A_H(t)B\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) (1 - f(\omega)) e^{-i\omega t/\hbar} d\omega,$$
 (4.29)

$$\langle BA_H(t) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) f(\omega) e^{-i\omega t/\hbar} d\omega.$$
 (4.30)

Weil die Funktion g(z) bei z = 0 einen Pol hat, erhält man für die Gleichungen (4.15,18,19) zu s = -1 ähnliche Formeln nur, wenn die Grenzwerte $G_{A,B}(\pm i0)$ existieren. Wenn dann auch noch $\frac{1}{2}(G_{A,B}(+i0) + G_{A,B}(-i0)) = G_{A,B}^{(0)}$ gilt, kompensiert das Residuum bei z = 0 gerade den $G_{A,B}^{(0)}$ -Term in (4.15) und es gilt

$$\mathcal{G}_{A,B}(\tau) = \begin{cases} \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) g(\omega) e^{-\omega\tau} d\omega & (-\beta < \Re\tau < 0) \\ \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) (1 + g(\omega)) e^{-\omega\tau} d\omega & (0 < \Re\tau < \beta), \end{cases}$$
(4.31)

wobe
i \oint das Hauptwertintegral bei $\omega=0$ bezeichnet. Die Gleichungen (4.18.19) werden dann zu

$$\langle A_H(t)B \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) (1+g(\omega)) e^{-i\omega t/\hbar} d\omega,$$
 (4.32)

$$\langle BA_H(t) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,B}(\omega) g(\omega) e^{-i\omega t/\hbar} d\omega.$$
 (4.33)

Aus der Gleichung (4.27) können **Summenregeln** für die Spektralfunktion hergeleitet werden, die Aussagen über ihre **n-ten Momente**

$$C_{A,B}^{(n)} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n C_{A,B}(\omega) \, d\omega \tag{4.34}$$

erlauben. Für das nullte Moment muss man in (4.27) nur t = 0 setzen und erhält

$$C_{A,B}^{(0)} = 2\pi \langle \{A, B\}_s \rangle.$$
 (4.35)

Das erste Moment entsteht, wenn man in (4.27) vorher die Zeitableitung bildet. Indem man (3.4) beachtet, erhält man so

$$C_{A,B}^{(1)} = 2\pi \langle \{ [A,H], B \}_s \rangle.$$
(4.36)

Die Herleitung der Summenregeln für höhere Momente ergibt sich entsprechend.

Damit ist die Diskussion der wichtigsten formalen Eigenschaften von Greenfunktionen der Vielteilchenphysik abgeschlossen. Im Zentrum stand die Greenfunktion $G_{A,B}(z)$, die in den beiden durch $\Im z \neq 0$ definierten Halbebenen holomorph ist und, wie wir gesehen haben, durch eine diskrete Folge von Funtionswerten, den Fourierkoeffizienten der entsprechenden Temperatur-Greenfunktion, eindeutig bestimmt ist. Die Greenfunktion $G_{A,B}(z)$ gestattet die Berechnung von Mittelwerten wie $\langle AB \rangle$ und von zeitlichen Korrelationsfunktionen wie $\langle A_H(t)B \rangle$ sowie von verallgemeinerten Suszeptibilitäten oder Responsefunktonen, die die Struktur $\langle \{A_H(t), B\}_{-} \rangle$ haben. Wir werden sehen, dass $G_{A,B}(z)$ darüber hieraus auch direkten Einblick in die physikalische Natur des betrachteten Systems bietet. Schließlich haben wir gesehen, wie $G_{A,B}(z)$ sich auf eine Spektralfunktion $C_{A,B}(\omega)$ zurückführen lässt, die eine Funktion reeller Frequenzen ω ist.

5. Einteilchen–Propagatoren

Eine sehr wichtige und zugleich die einfachste Art von Greenfunktion ist die sogenannte **Einteilchen–Greenfunktion**, für die $A = \psi(\xi)$ und $B = \psi^{\dagger}(\xi')$ die in Kapitel 2 eingeführten **Feldoperatoren** einer der Teilchensorten des betrachteten Systems sind. Wir werden diese Greenfunktionen abkürzend mit $\mathcal{G}_{\xi,\xi'}^{r/a}(t)$ (anstelle von $\mathcal{G}_{\psi(\xi),\psi^{\dagger}(\xi')}^{r/a}(t)$ – siehe (3.3,10)) bezeichnen (und entsprechend mit $\mathcal{G}_{\xi,\xi'}(\tau)$ – siehe (4.1) – bzw. mit $G_{\xi,\xi'}(z)$ – siehe (3.9,11)). Man nennt diese Greenfunktionen auch **Einteilchen–Propagatoren**, da sie das Schicksal eines dem System hinzugefügten Teilchens zu verfolgen gestatten. Zum Beispiel gibt der Mittelwert $\langle \psi_H(\xi,t)\psi_H^{\dagger}(\xi',t') \rangle$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür an, ein Teilchen, das zur Zeit t' im Zustand ξ' dem System hinzugefügt wurde, zur Zeit t im Zustand ξ wiederzufinden. Entsprechend gibt der Mittelwert $\langle \psi_H^{\dagger}(\xi',t')\psi_H(\xi,t) \rangle$ die Auskunft darüber, mit welcher Amplitude ein bei ξ' zur Zeit t' weggenommenes Teilchen zur Zeit t bei ξ fehlt. Man beachte hierzu im übrigen, dass $\langle \psi_H^{\dagger}(\xi',t')\psi_H(\xi,t) \rangle^* = \langle \psi_H(\xi,t)\psi_H^{\dagger}(\xi',t') \rangle$ gilt.

Anstelle von Feldoperatoren $\psi(\xi)$ in Standarddarstellung kann man auch Erzeuger und Vernichter zu einer diskreten Basis von Zuständen $|q\rangle$ zur Konstruktion von Einteilchen–Propagatoren benutzen. Die zu $A = a_q$ und $B = a_{q'}^{\dagger}$ gehörige Einteilchen–Greenfunktion bezeichnen wir kurz mit $\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{r/a}(t)$. Anhand von (2.24,26) hängen die verschiedenen Darstellungen der Einteilchen–Greenfunktionen auf einfache Weise miteinander zusammen:

$$\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(t) = \int d\xi d\xi' \, \mathcal{G}_{\xi,\xi'}(t) \, \varphi^*_{\mathbf{q}}(\xi) \, \varphi_{\mathbf{q}'}(\xi'), \ G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z) = \int d\xi d\xi' \, G_{\xi,\xi'}(z) \, \varphi^*_{\mathbf{q}}(\xi) \, \varphi_{\mathbf{q}'}(\xi')$$
(5.1)

bzw. umgekehrt

$$\mathcal{G}_{\xi,\xi'}(t) = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(t) \,\varphi_{\mathbf{q}}(\xi) \,\varphi_{\mathbf{q}'}^{\dagger}(\xi'), \ G_{\xi,\xi'}(z) = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z) \,\varphi_{\mathbf{q}}(\xi) \,\varphi_{\mathbf{q}'}^{\dagger}(\xi').$$
(5.2)

Wir werden im folgenden die Notation am Fall einer diskreten Basis orientieren.

Man erkennt leicht, dass man aus den Einteilchen-Greenfunktionen die **thermi**schen Mittelwerte beliebiger Einteilchenoperatoren berechnen kann. Es gilt nämlich nach (4.2)

$$\langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}'}\rangle = s\,\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau = -0). \tag{5.3}$$

Für einen Einteilchenoperator $\mathcal{O}_1 = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} A_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'}$ gilt demnach (siehe (4.7,8))

$$\langle \mathcal{O}_1 \rangle = s \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} A_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \,\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(-0) = \frac{s}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} A_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \,G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{(n)} \,e^{-i\omega_n \cdot (-0)}. \tag{5.4}$$

(Wir erinnern uns daran, dass $G^{(n)}$ im Falle von Bosonen für ungerade und im Falle von Fermionen für gerade n verschwindet.)
In dem wichtigen Spezialfall, dass das System nur aus einer einzigen Teilchensorte besteht und sein Hamiltonoperator $H = H_1 + H_2$ sich aus einem Einteilchenund einem Zweiteilchenoperator zusammensetzt, kann mann aus der Einteilchen-Greenfunktion auch die **mittlere Energie** $E = \langle H \rangle$ des Systems berechnen. Um dies einzusehen, braucht man die Identität

$$\sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \left[a_{\mathbf{q}}, \mathcal{O}_n \right] = n \mathcal{O}_n, \tag{5.5}$$

die für beliebige *n*-Teilchenoperatoren (n = 1, 2) einer einzigen Teilchensorte gilt. **Übung 5.1:** Man leite die Identität (5.5) für n = 1, 2 für Einteilchenoperatoren (2.14) und Zweiteilchenoperatoren (2.18) ab. (Man beachte die Analogie von (5.5) zum Eulerschen Theorem für homogene Funktionen.)

Nutzen wir jetzt die Bewegungsgleichung (3.14), $zG_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z) = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + G_{[a_{\mathbf{q}},H],a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}}(z)$, so erhalten wir für Fermionen mit der Gleichung (4.10)

$$s = +1: \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{q}} \left[i\omega_{2m+1} G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}^{(2m+1)} - 1 \right] e^{-i\omega_{2m+1}\cdot(-0)}$$

$$= \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{G}_{[a_{\mathbf{q}},H],a_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\tau = -0) = \langle H_1 \rangle + 2\langle H_2 \rangle.$$
(5.6)

Eine analoge Beziehung folgt auch für Bosonen, da die Bewegungsgleichung auch für den nullten Fourierkoeffizienten gilt.

Übung 5.2: Man überprüfe die folgende Rechnung:

$$G_{[A,H],B}^{(0)} = -\int_0^\infty d\tau \langle [A,H]_\tau B \rangle = \langle A_\tau B \rangle |_0^\beta = \langle A_\beta B \rangle - \langle AB \rangle = -\langle [A,B] \rangle.$$
(5.7)

Für Bosonen gilt daher mit (4.11) und (5.7)

$$s = -1: \frac{-1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{q}} \left[i\omega_{2m} G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}^{(2m)} - 1 \right] e^{-i\omega_{2m} \cdot (-0)}$$

$$= \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{G}_{[a_{\mathbf{q}},H],a_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\tau = -0) = \langle H_1 \rangle + 2 \langle H_2 \rangle. \square$$
(5.8)

Da wir den Mittelwert $\langle H_1 \rangle$ anhand von (5.4) kennen, können wir die mittlere Energie des Systems nun durch seinen Einteilchen–Propagator alleine ausdrücken und erhalten mit $H_1 = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'}$

$$E = \sum_{m,\mathbf{q},\mathbf{q}'} \begin{cases} \frac{1}{2\beta} \Big[\left(i\omega_{2m+1} \cdot \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \right) G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{(2m+1)} - \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \Big] e^{-i\omega_{2m+1} \cdot (-0)} & (s = +1) \\ \frac{-1}{2\beta} \Big[\left(i\omega_{2m} \cdot \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \right) G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{(2m)} - \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \Big] e^{-i\omega_{2m} \cdot (-0)} & (s = -1) \end{cases}$$

$$(5.9)$$

Bekanntlich ist die mittlere Energie als Funktion der Temperatur kein thermodynamisches Potential, sodass wir mit (5.9) noch nicht die Gleichgewichtsthermodynamik des System beherrschen. Es gibt jedoch Möglichkeiten, dieses Defizit durch Berechnung der freien Energie zu beheben.

Ein Weg zur freien Energie besteht in der Verwendung der Formel

$$F(T) = E(0) - T \int_0^T \frac{dT'}{T'^2} \left(E(T') - E(0) \right), \tag{5.10}$$

mit der man die freie Energie auf die innere Energie zurückführen kann. (Man beachte immer, dass wir hier die großkanonische Gesamtheit benutzen, sodass wir folglich die Größen $E - \mu N$ und $F - \mu N$ kurz als E und F bezeichnen.)

Ubung 5.3: Man leite die Formel (5.10) unter Verwendung des **Nernstschen Theorems** her.[□]

Die Anwendung der Gleichung (5.10) ist nicht immer praktikabel, da sie (a) die Kenntnis der inneren Energie für alle Temperaturen zwischen 0 und T und (b) die Gültigkeit des Nernstschen Theorems voraussetzt.

Ein anderer Weg zur freien Energie besteht darin, eine (fiktive) Schar von Systemen mit den Hamiltonoperatoren $H_{\lambda} = H_1 + \lambda H_2$ ($0 \le \lambda \le 1$) zu betrachten. Für die freie Energie $F(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln \operatorname{Sp} e^{-\beta H_{\lambda}}$ dieser Schar gilt bekanntlich $\delta F/\delta \lambda = \langle H_2 \rangle_{\lambda}$, wobei die Mittelung mit H_{λ} durchzuführen ist. Man hat daher die Beziehung

$$F = F(\lambda = 1) = F(\lambda = 0) + \int_0^1 d\lambda \langle H_2 \rangle_{\lambda}.$$
 (5.11)

Die freie Energie $F(\lambda = 0)$ des nicht wechselwirkenden Systems ist vergleichsweise leicht zu berechnen (siehe hierzu auch Kapitel 7). Für die freie Energie F des voll (d.h. mit $\lambda = 1$) wechselwirkenden Systems brauchen wir dann nur die mittlere Wechselwirkungsenergie $\langle H_2 \rangle_{\lambda}$ für alle Werte von λ ($0 \le \lambda \le 1$). Diese erhalten wir aber angesichts von (5.6,8) aus der Formel

$$\langle H_2 \rangle_{\lambda} = \sum_{m,\mathbf{q},\mathbf{q}'} \begin{cases} \frac{1}{2\beta} \left[\left(i\omega_{2m+1} \cdot \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} - h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \right) G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{(2m+1)} - \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \right] e^{-i\omega_{2m+1} \cdot (-0)} & (s=+1) \\ \frac{-1}{2\beta} \left[\left(i\omega_{2m} \cdot \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} - h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \right) G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{(2m)} - \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \right] e^{-i\omega_{2m} \cdot (-0)} & (s=-1) \end{cases},$$

$$(5.12)$$

die sich von der rechten Seite von (5.9) nur durch das Vorzeichen vor $h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$ unterscheidet und in der die Greenfunktion von λ abhängt. Man kann also die freie Energie und damit die volle Thermodynanik eines wechselwirkenden Systems aus der Propagation eines Teilchens für alle reduzierten Wechselwirkungsstärken herleiten.

Im Prinzip kommt man für alle Zwecke mit **diagonalen Einteilchen–Propaga**toren $\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}}$ aus. Dies gilt für die Gleichungen (5.6,8) sowieso in allen Darstellungen, für die Gleichungen (5.4,9) gilt es in einer Darstellung, in der $A_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$ bzw. $h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$ diagonal ist. Diagonalität dieser hermiteschen Matrizen kann man aber immer durch eine kanonische Transformation wie (2.20) erreichen.

Diagonale Einteilchen-Greenfunktionen $G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z)$ haben eine besondere Eigenschaft, die wir im folgenden aufzeigen wollen. Sie gehören zum Typ von Greenfunktionen $G_{A,B}(z)$ mit $B = A^{\dagger}$, deren Spektralfunktion $C_{A,B}(\omega)$ reell ist, wie man aus Gleichung (4.25) abliest. Aus der Spektraldarstellung (3.18) entnimmt man zunächst für Fermionen (s = +1)

$$\Im G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z) = \frac{-\Im z}{Z} \sum_{m,n} \frac{|\langle n|a_{\mathbf{q}}|m\rangle|^2}{|z+E_n-E_m|^2} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \neq 0 \qquad (\Im z \neq 0).$$
(5.13)

Hier konnten nicht alle Matrixelemente $\langle n|a_{\mathbf{q}}|m\rangle$ verschwinden, weil wegen (4.25) und (4.35) die Summenregel

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega C_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} |\langle n|a_{\mathbf{q}}|m\rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) = 1$$
(5.14)

gilt. Wir ziehen aus (5.13) den Schluss, dass $G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z)$ für $\Im z \neq 0$ nicht verschwinden kann.

Für Bosonen (s = -1) versagt eine entsprechende Argumentation zunächst, weil der dort auftretende Faktor $e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}$ nicht definit ist. Man kann jedoch diese Schwierigkeit leicht umgehen, indem man für Bosonen die Beziehung

$$\Im \left(z \, G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z) \right) = \frac{-\Im z}{Z} \sum_{m,n} \frac{|\langle n | a_{\mathbf{q}} | m \rangle|^2}{|z + E_n - E_m|^2}$$

$$\times (E_n - E_m) (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \neq 0 \quad (\Im z \neq 0).$$
(5.15)

betrachtet. Hier galt zunächst $(E_n - E_m)(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \ge 0$ (= 0 nur, wenn $E_n = E_m$). Es können aber nicht nur Terme mit $E_n = E_m$ beitragen wegen der (5.14) entsprechenden bosonischen Summenregel

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, C_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} |\langle n|a_{\mathbf{q}}|m\rangle|^2 (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) = 1.$$
(5.16)

Also kann auch für Bosonen die Funktion $G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z)$ für $\Im z \neq 0$ nicht verschwinden.

Wir können aus (5.13,15) ganz generell folgern, dass auch $G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}^{-1}(z)$ in den beiden Halbebenen $\Im z > 0$ und $\Im z < 0$ holomorph ist. Da außerdem $G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z) = 1/z + O(1/z^2)$ $(z \to \infty)$, kann man mit

$$G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}^{-1}(z) = z - M_{\mathbf{q}}(z) \tag{5.17}$$

einen Massenoperator $M_{\mathbf{q}}(z)$ einführen, der für $\Im z \neq 0$ holomorph und im Unendlichen beschränkt ist. Der Massenoperator, der eng mit der **Selbstenergie** $\Sigma(\mathbf{q}, z)$ (siehe hierzu Kapitel 14) zusammenhängt, ist eine sehr wichtige Größe zur Beschreibung von Einteilchen-Propagatoren. Es ist deshalb so nützlich, ihn einzuführen, weil er oft weniger "Struktur" hat als die Greenfunktion, d.h. seine z-Abhängigkeit ist sanfter. Übung 5.4: Massenoperator und Selbstenergie

Der Einteilchenanteil eines Vielteilchensystems mit dem Hamiltonoperator $H = H_1 + H_2$ sei diagonal, $H_1 = \sum_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}$. (a) Man zeige, dass

$$\delta n_2 \doteq \langle \{ [a_{\mathbf{q}}, H_2], a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \}_s \rangle = \langle \{ a_{\mathbf{q}}, [H_2, a_{\mathbf{q}}^{\dagger}] \}_s \rangle \tag{5.18}$$

und reell ist.

(b) Man leite mittels zweifacher Anwendung der Bewegungsgleichungen (3.14) für den Massenoperator den Ausdruck

$$M_{\mathbf{q}}(z) = h_{\mathbf{q}} + \delta n_2 + \Sigma(\mathbf{q}, z) \tag{5.19}$$

 mit

$$\Sigma(\mathbf{q},z) = G_{[a_{\mathbf{q}},H_2],[H_2,a_{\mathbf{q}}^{\dagger}]}(z) - \frac{\left(\delta n_2 + G_{[a_{\mathbf{q}},H_2],[H_2,a_{\mathbf{q}}^{\dagger}]}(z)\right)^2}{z - h_{\mathbf{q}} + \delta n_2 + G_{[a_{\mathbf{q}},H_2],[H_2,a_{\mathbf{q}}^{\dagger}]}(z)} \quad (5.20)$$

ab. Die Selbstenergie $\Sigma(\mathbf{q}, z)$ unterscheidet sich hier vom Massenoperator also nur um einen z-unabhängigen reellen Summanden und hat die Eigenschaft $\Sigma(\mathbf{q}, z) = O(1/z)$ für $z \to \infty$.

6. Responsefunktionen

Eine zweite Art von physikalischen Größen, die sich unter den Formalismus der Greenfunktionen subsumieren lassen, sind die **verallgemeinerten Suszeptibilitäten** oder **linearen Responsefunktionen**. Ein System mit dem Hamiltonoperator H, das sich zunächst im thermodynamischen Gleichgewicht befinde, werde durch ein äußeres Feld F(t) gestört, welches über den Operator B so an das System ankopple, dass der gesamte Hamiltonoperator

$$H(t) = H + \Phi(t), \qquad \Phi(t) = -B \cdot F(t) \tag{6.1}$$

lautet. Der Mittelwert einer Observablen A des Systems wird dann im allgemeinen von seinem Gleichgewichtswert $\overline{A} = \langle A \rangle_H$ abweichen. Falls das störende Feld F(t) schwach genug ist, kann man die Abweichung durch Linearisierung nach F(t)berechnen. Man spricht dann von einem **linearen Response** und erhält die Formel

$$\langle A \rangle_{H(t)} - \bar{A} = \int_{-\infty}^{\infty} X_{A,B} (t - t') F(t') dt',$$
 (6.2)

wobei die zeitabhängige Responsefunktion X mit der bosonischen retardierten Greenfunktion (3.3) nach

$$X_{A,B}(t) = -\mathcal{G}_{A,B}^{r}(t) \qquad (s = -1)$$
 (6.3)

zusammenhängt. Zerlegt man das FeldF(t)spektral in Fourierkomponenten F_{ω} nach der Formel

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_{\omega} e^{-i\omega t} d\omega, \qquad (6.4)$$

so erhält man eine entsprechende spektrale Zerlegung A_{ω} des Responses

$$\langle A \rangle_{H(t)} - \bar{A} = \int_{-\infty}^{\infty} A_{\omega} e^{-i\omega t} d\omega.$$
 (6.5)

Für die Fourierkomponenten ergibt sich dann die einfache multiplikative Beziehung

$$A_{\omega} = \chi_{A,B}(\omega) \cdot F_{\omega}, \qquad (6.6)$$

mit der frequenzabhängigen dynamischen Suszeptibilität

$$\chi_{A,B}(\omega) = -G_{A,B}(\hbar\omega + i0).$$
(6.7)

Details der Herleitung der obigen Formeln (6.2,3,6,7) finden sich in Kapitel 24 meines Vorlesungsmanuskripts zur Theoretischen Physik IV (Statistische Physik).

Übung 6.1: Man vollziehe diese Herleitung nach. \Box

Die in der dynamischen Suszeptibilität für $\omega = 0$ enthaltene **statische Suszeptibilität**

$$\chi_{A,B}^{\text{statisch}} = -G_{A,B}(+i0) \tag{6.8}$$

heisst auch die **adiabatische statische Suszeptibilität** und ist grundsätzlich zu unterscheiden von der **isothermen Suszeptibilität**, die wie folgt definiert ist:

$$\chi_{A,B}^{\text{isotherm}} = \frac{\partial}{\partial F_0} \langle A \rangle|_{F_0 = 0} \quad \text{mit } \langle A \rangle = \frac{\text{Sp}(Ae^{-\beta(H - BF_0)})}{\text{Sp}e^{-\beta(H - BF_0)}}.$$
 (6.9)

Mittels der Operatoridentität

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}e^{-\beta H(\lambda)} = -\int_0^\infty e^{-(\beta-\tau)H(\lambda)}\frac{\partial H}{\partial\lambda}e^{-\tau H(\lambda)}\,d\tau \tag{6.10}$$

führt man die Differentiation in (6.9) leicht aus und erhält

$$\chi_{A,B}^{\text{isotherm}} = \int_{0}^{\infty} \langle B_{\tau}A \rangle_{H} d\tau - \beta \langle A \rangle_{H} \langle B \rangle_{H} = \int_{0}^{\infty} \langle B_{\tau}(A - \bar{A}) \rangle_{H} d\tau = -G_{A - \bar{A},B}^{(0)}.$$
(6.11)

Wir sehen, dass der Unterschied zwischen der adiabatischen (6.8) und der isothermen Suszeptibilität (6.11) mit dem Unterschied zwischen $G(\pm i0)$ und $G^{(0)}$ zu tun hat, den wir schon im Zusammenhang mit Gleichung (4.20) diskutiert haben.

Übung 6.2: Man leite die Identität (6.10) her, indem man die Exponentialfunktion in der Form $\prod_{1}^{N} e^{-\beta H(\lambda)/N}$ schreibt, auf das *N*-fache Produkt bei der Differentiation die Produktregel anwendet und zum Grenzwert $N \to \infty$ übergeht. \Box

Folgendes Beispiel macht deutlich, weshalb isotherme und adiabatische Suszeptibilitäten verschieden sein können. Wir nehmen an, A (z.B. die Gesamtmagnetisierung des Systems) sei eine Erhaltungsgröße, [A, H(t)] = 0. Dann gilt nach (6.3) und (3.3) offenbar $X_{A,B}(t) = 0$ und folglich nach (6.8) $\chi_{A,B}^{\text{statisch}} = 0$. Dies drückt aus, dass sich durch adiabatisches Einschalten der Störung der Mittelwert von A nicht beeinflussen lässt. Andererseits findet man jedoch nach (6.11) mit $\chi_{A,B}^{\text{isotherm}} = \beta \langle B(A - \bar{A}) \rangle$ ein durchaus von null verschiedenes Ergebnis. Durch thermischen Kontakt mit der Umgebung kann der Mittelwert von A sich aufgrund der Störung sehr wohl ändern. Eine Messung der statischen Suszeptibilität liefert daher im allgemeinen die isotherme Suszeptibilität.

Von großer praktischer Bedeutung ist der **absorptive Anteil der Suszeptibilität**. Wenn man annimmt, dass auf das System in leichter Verallgemeinerung von (6.1) eine Störung der Form

$$\Phi(t) = -\sum_{j=1}^{n} A_j F_j(t)$$
(6.12)

wirkt, dann ändert sich die Energie des Systems aufgrund der Störung um

$$\Delta H = 4\pi \int_0^\infty \sum_{j,l=1}^n F_{j\omega}^* \cdot \omega \chi_{jl}^{\prime\prime}(\omega) \cdot F_{l\omega} \, d\omega.$$
(6.13)

Hierbei ist der absorptive oder dissipative Anteil der Suszeptibilität durch

$$\chi_{jl}^{''}(\omega) = -\frac{i}{2} \left(\chi_{jl}(\omega) - \chi_{lj}(-\omega) \right)$$
(6.14)

gegeben, wobei wir die Kurznotation $\chi_{A_j,A_l} \Rightarrow \chi_{jl}$ verwenden. Details der Herleitung der Formeln (6.13,14) finden sich ebenfalls in Kapitel 24 meines Vorlesungsmanuskripts zur Theoretischen Physik IV (Statistische Physik), wo auch die Positivität von ΔH bewiesen wird.

Übung 6.3: Man vollziehe auch diese Herleitung nach.

In Greenfunktionssprache ist uns $\chi^{''}$ wohlbekannt als Spektralfunktion. Wir beachten die Identität

$$G_{B,A}(-z) = (-s) \cdot G_{A,B}(z), \tag{6.15}$$

die man leicht aus der Spektraldarstellung (3.18) abliest. Damit folgt aus (6.14) mit (4.23) sofort

$$\chi_{jl}^{''}(\omega) = \frac{1}{2} C_{A_j,A_l}(\hbar\omega).$$
 (6.16)

Die Spektraldarstellung (4.25) der Spektralfunktion unterstreicht ihre Bedeutung als **Absorptionswahrscheinlichkeit**.

Es sei darauf hingewiesen, dass eine Kenntnis des dissipativen Anteils einer Suszeptibilität über den gesamten Frequenzbereich angesichts der Cauchy–Formel (4.26) und (6.16) zur Bestimmung der gesamten Suszeptibilität ausreicht. Aus (4.26) leitet man auch leicht die **Kramers–Kronig–Relationen**

$$\chi_{jl}'(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{jl}'(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$

$$\chi_{jl}''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{jl}'(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'$$
(6.17)

zwischen dem dissipativen und dem reaktiven Anteil

$$\chi_{jl}^{'}(\omega) = \frac{1}{2} \Big(\chi_{jl}(\omega) + \chi_{lj}(-\omega) \Big) = -\frac{1}{2} \Big(G_{A_j,A_l}(\hbar\omega + i0) + G_{A_l,A_j}(-\hbar\omega - i0) \Big)$$
(6.18)

her.

Übung 6.4: Man beweise diese Relationen. □

Die hervorgehobene Rolle des dissipativen Anteils $\chi''(\omega)$ von Suszeptibilitäten ist dadurch motiviert, dass viele wichtige experimentelle Messmethoden Absorptionsmessungen sind. Ein ganz anderer Typ von Experiment, die **Streuung** von Teilchen oder Strahlung an Vielteilchensystemen, liefert ganz ähnliche Informationen. Wichtige Beispiele sind die Streuung von Neutronen oder Photonen an Materie. Wir wollen hier nur den wichtigen Fall betrachten, dass das gestreute Teilchen an die Dichte des Vielteilchensystems ankoppelt, d.h. der Wechselwirkungsoperator habe die Gestalt

$$H_{\text{int}} = \sum_{\nu=1}^{N} v(\mathbf{r}_{\nu} - \mathbf{R}) = \int v(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \, n(\mathbf{r}) \, d^3 \mathbf{r} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \, \rho_{\mathbf{k}} \, e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \qquad (6.19)$$

wenn V das Normierungsvolumen und v das Wechselwirkungspotential zwischen dem Streuteilchen am Ort **R** und einem Teilchen des Targetsystems am Ort \mathbf{r}_{ν} bezeichnet. Bei der Fouriertransformation in (6.19) wurden die Konventionen (2.32,38) benutzt. Für Photonen wie auch für Neutronen besteht ein wichtiger Anteil ihrer Kopplung an Materie aus der obigen Dichtekopplung.

Ein besonders nützliches spektroskopisches Werkzeug stellen Streuexperimente dann dar, wenn die Kopplung an das Target so schwach ist, dass die Streuung in **Bornscher Näherung** berechnet werden kann. Dann testet das Streuteilchen die Eigenschaften des Systems aus, ohne sie gleichzeitig zu beeinflussen. Der Streuvorgang besteht in einem Übergang von einem Anfangszustand $|i\rangle$ in einen Endzustand $|f\rangle$. In beiden Zuständen sind Streuteilchen und Targetsystem entkoppelt, d.h. $|i\rangle = |\mathbf{k}_i\rangle|n_i\rangle$ und $|f\rangle = |\mathbf{k}_f\rangle|n_f\rangle$, wo $\hbar\mathbf{k}_i$ und $\hbar\mathbf{k}_f$ die Impulse des Projektils und n_i und n_f Eigenzustände des Targetsystems vor und nach der Streuung bezeichnen. Durch die Streuung sollen ein Impuls $\hbar\mathbf{q} = \hbar\mathbf{k}_i - \hbar\mathbf{k}_f$ und eine Energie $\omega = \omega_i - \omega_f$ auf das Target übertragen werden. Wir benutzen für die Projektilenergien

$$\omega_{i/f} = c\sqrt{M^2 c^2 + (\hbar \mathbf{k}_{i/f})^2} = M_{i/f} \cdot c^2 \tag{6.20}$$

die relativistischen Ausdrücke, um Photonen mit Ruhemasse M = 0 zu implizieren. Mit ebenen Wellen nach (2.31) für die Projektilzustände $|\mathbf{k}_{i,f}\rangle$ finden wir die Übergangsamplitude

$$\langle i|H_{\rm int}|f\rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \underbrace{\langle \mathbf{k}_i | e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} | \mathbf{k}_f \rangle}_{=\delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}} \langle n_i | \rho_{\mathbf{k}} | n_f \rangle = \frac{v_{\mathbf{q}}}{V} \langle n_i | \rho_{\mathbf{q}} | n_f \rangle.$$

Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, dass das Projektil aus dem einlaufenden Zustand $|\mathbf{k}_i\rangle$ in den auslaufenden Zustand $|\mathbf{k}_f\rangle$ gestreut wird, ergibt sich dann nach der goldenen Regel als

$$W(\mathbf{k}_i \to \mathbf{k}_f) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n_i, n_f} \frac{e^{-\beta E_{n_i}}}{Z} \cdot \frac{|v_\mathbf{q}|^2}{V^2} \cdot |\langle n_i | \rho_\mathbf{q} | n_f \rangle|^2 \cdot \delta(\omega + E_{n_i} - E_{n_f}).$$

Das Targetsystem wurde dabei im thermischen Gleichgewicht mit der Wahrscheinlichkeit $e^{-\beta E_{n_i}}/Z$ ($Z = \sum_i e^{-\beta E_{n_i}}$) im Zustand $|n_i\rangle$ angetroffen und konnte in alle Endzustände $|n_f\rangle$ übergehen, die mit der Energieerhaltung vereinbar sind.

Die Größe W hat die Dimension einer Rate (d.h. Zeit⁻¹). Um den differentiellen Wirkungsquerschnitt zu erhalten, hat man die Zahl der ein- und auslaufenden

Teilchen zu bestimmen. Die Zahl der pro Zeiteinheit einlaufenden Teilchen im Zustand $|\mathbf{k}_i\rangle$ bestimmt sich einfach als Produkt aus Dichte und Geschwindigkeit zu v_i/V . Durch diesen Faktor ist W zu dividieren und erhält dadurch schon die Dimension eines Wirkungsquerschnitts, Länge². Die Zahl der auslaufenden Teilchen bestimmt man in einem Volumenelement $d\mathbf{k}_f^3$ zu $d\mathbf{k}_f^3 \cdot V/(2\pi)^3$. Das Volumenelement wird durch ein Raumwinkelelement $d\gamma$ mit $d\mathbf{k}_f^2 = k_f^2 dk_f d\gamma$ und durch ein Energieintervall $d\omega$ mit $d\omega = \hbar^2 k_f dk_f/M_f$ charakterisiert und man erhält für den **differentiellen Wirkungsquerschnitt** die Formel

$$\frac{d\sigma}{d\omega d\gamma} = A \cdot S(\mathbf{q}, \omega). \tag{6.21}$$

Hier ist der Vorfaktor

$$A = \frac{|v_{\mathbf{q}}|^2 M_f^2}{(2\pi\hbar)^3 \cdot \hbar} \cdot \frac{v_f}{v_i}$$
(6.22)

durch das Streupotential v und kinematische Größen des Streuteilchens bestimmt, während der **dynamische Formfaktor**

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} \langle n | \rho_{\mathbf{q}} | m \rangle \langle m | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | n \rangle e^{-\beta E_n} \delta(\omega + E_n - E_m)$$
(6.23)

allein von den Eigenschaften des untersuchten Targets abhängt. Eine solch einfache Faktorisierung liegt nur in Bornscher Näherung vor und gilt folglich nur für schwache Kopplung.

Übung 6.5: Man berechne den Formfaktor (6.23) bei T = 0, wenn das Target ein ideales Bosegas von N Teilchen mit der kinetischen Einteilchenenergie $\epsilon_{\mathbf{q}}$ ist, und interpretiere das Ergebnis

$$S(\mathbf{q},\omega) = 2\pi N \,\delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{q}}).$$

Hinweis: Man beachte die Normierung der Eigenzustände (2.8).

Ein Vergleich des Formfaktors $S(\mathbf{q}, \omega)$ mit der Spektralfunktion (4.25) ergibt anhand der Identität

$$(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m})\delta(\omega + E_n - E_m) = e^{-\beta E_n}\delta(\omega + E_n - E_m) \cdot (1 - e^{-\beta\omega})$$

die Beziehung $(g(\omega) \text{ ist die Bosefunktion } (4.14))$

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{C_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega)}{1 - e^{-\beta\omega}} = \left(1 + g(\omega)\right) \cdot C_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega)$$
(6.24)

zwischen dem dynamischem Formfaktor für Dichtekopplung und der Spektralfunktion der Dichte–Dichte–Greenfunktion. Streuexperimente liefern also ähnlich wie Absorptionsexperimente Information über gewisse Suszeptibilitäten oder Greenfunktionen. Anhand der Beziehung (6.24) folgt angesichts (4.18,31) weiterhin

$$\langle \rho_{\mathbf{q}}(t)\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}\rangle = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{q},\omega) \, e^{-i\omega t/\hbar} \, d\omega, \qquad (6.25)$$

aus der wir den Formfaktor als Fouriertransformierte der **Dichte–Dichte– Korrelationsfunktion** identifizieren. (Man beachte hier die Bemerkung vor Gleichung (4.31).)

Im folgenden wollen wir **Summenregeln** für den dynamischen Formfaktor $S(\mathbf{q}, \omega)$ herleiten, die einfache Ausdrücke für die Momente von $S(\mathbf{q}, \omega)$ angeben. Das erste Moment werden wir auf das erste Moment der Spektralfunktion $C_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega)$ zurückführen. Die allgemeine Methode zur Berechnung dieses Moments ist durch die Doppelkommutatorformel (4.26) gegeben. Eine entsprechende Rechnung haben wir allerdings mit der Herleitung von Gleichung (3.15) schon vorgenommen. Indem wir die Chauchy–Formel (4.36) für große z entwickeln und den Term proportional zu $1/z^2$ mit (3.15) vergleichen, erhalten wir das Moment

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{C}_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega) \, d\omega = \frac{\hbar^2 q^2}{m} \, N. \tag{6.26}$$

Übung 6.6: Man bestätige das Ergebnis (6.26). □

Um aus (6.26) eine entsprechende Summenregel für den Formfaktor zu gewinnen, beachten wir die Symmetriebeziehung

$$C_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(-\omega) = -C_{\rho_{-\mathbf{q}},\rho_{-\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega) \Longrightarrow -C_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega), \qquad (6.27)$$

die unmittelbar aus Gleichung (4.25) abzulesen ist, wobei der Übergang von $-\mathbf{q}$ zu \mathbf{q} für hier vorausgesetzte zeitumkehrinvariante Targetsysteme gilt. Mit (6.24) erhalten wir daraus

$$S(\mathbf{q},-\omega) = \left(1 + g(-\omega)\right) \cdot C_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(-\omega) = -e^{-\beta\omega}S(\mathbf{q},\omega)$$
(6.28)

oder weiter

$$C_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega) = S(\mathbf{q},\omega) + S(\mathbf{q},-\omega)$$
(6.29)

und schließlich mit (6.26) die **f-Summenregel**

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega S(\mathbf{q}, \omega) \, d\omega = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \, N. \tag{6.30}$$

Das nullte Moment des dynomischen Formfaktors ist nach (6.25) durch

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{q}, \omega) \, d\omega = \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle \equiv S(\mathbf{q}) \tag{6.31}$$

gegeben. Die Größe $S(\mathbf{q})$ wird als statischer Formfaktor bezeichnet.

Die beiden Summenregeln (6.30,31) können dazu benutzt werden, den mittleren zum Impuls $\hbar \mathbf{q}$ gehörigen Energieübertrag zu bestimmen. Der dynamische Formfaktor gibt ja Auskunft darüber, mit welcher Wahrscheinlickeit eine Dichteschwankung der Wellenzahl \mathbf{q} im Target die Anregungsenergie ω benötigt. Da $S(\mathbf{q}, \omega)$ nach (6.23) nicht negativ ist, kann es mittels der Normierung (6.31) zu einer normierten Wahrscheinlichkeitsverteilung gemacht werden. Damit gilt dann

$$\omega_{\mathbf{q}} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \omega S(\mathbf{q},\omega) \, d\omega \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{q},\omega) \, d\omega = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \cdot \frac{N}{S(\mathbf{q})}.$$
 (6.32)

Der Faktor $\hbar^2 q^2/2m$ ist die Rückstoßenergie eines freien Targetteilchens, das in Ruhe war und bei dem Streuprozess den Impuls $\hbar \mathbf{q}$ aufgenommen hat.

Übung 6.7: Man überlege, dass $\hbar^2 q^2/2m$ auch die entsprechende mittlere Rückstoßenergie ist, wenn die Teilchen nicht alle ruhen, sondern eine beliebige inversionssymmetrische Geschwindigkeitsverteilung besitzen und allerdings weiterhin unkorreliert sind.

Der Faktor $N/S(\mathbf{q})$ in (6.32) beschreibt daher die Modifikation der Rückstoßenergie aufgrund der statistischen und dynamischen Korrelationen des gestoßenen Teilchens im Targetsystem.

Eine dritte Summenregel betrifft das (-1)-te Moment des Formfaktors. Man kann sie durch die statische Suszeptibilität der Dichte-Dichte-Responsefunktion ausdrücken, indem man mithilfe von (4.26) und (6.7,29) folgende Rechnung durchführt:

$$\chi_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega/\hbar) \equiv \chi(\mathbf{q},\omega/\hbar) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega)}{\omega - \omega' + i0} d\omega' = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \Big(\frac{S(\mathbf{q},\omega')}{\omega - \omega' + i0} + \frac{S(\mathbf{q},\omega')}{-\omega - \omega' - i0}\Big),$$
(6.33)

aus der für $\omega = 0$ die gesuchte Summenregel

$$\chi(\mathbf{q},0) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{S(\mathbf{q},\omega)}{\omega} d\omega.$$
(6.34)

folgt. Nützlich ist diese Summenregel insbesondere für $\mathbf{q} \to 0$, weil in diesem Grenzfall die Suszeptibilität $\chi(\mathbf{q}, 0)$ eine einfache makroskopische Bedeutung hat und leicht messbar ist. Wir betrachten dazu ein langwelliges statisches Potential $\delta f(\mathbf{r}) = -v_{\mathbf{q}} \cos \mathbf{q} \mathbf{r} = -\frac{1}{2} v_{\mathbf{q}} (e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}})$. Das Potential stellt nach (6.1) eine Störung des Systems der Gestalt

$$\Phi = \int d\mathbf{r}^3 \delta f(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) = -v_{\mathbf{q}} (\rho_{\mathbf{q}} + \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger})/2$$
(6.35)

dar. Diese Störung verursacht eine Dichteschwankung $\delta n(\mathbf{r})$ von der Art, dass die dabei auftretende Druckschwankung $\delta p(\mathbf{r})$ die Potentialdichte kompensiert:

$$\frac{N}{V}\delta f(\mathbf{r}) + \delta p(\mathbf{r}) = 0 \qquad (\mathbf{Gleichgewichtsbedingung}). \tag{6.36}$$

In makroskopischer Betrachtungsweise ist der Zusammenhang zwischen Dichteund Druckschwankungen durch die Kompressibilität gegeben mittels

$$\kappa = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,N} = \frac{1}{n} \left(\frac{\partial n}{\partial p}\right)_{T,N}.$$
(6.37)

Mikroskopisch können wir die Dichteschwankung mit der Responseformel (6.6) ausrechnen. Nach (2.38) gilt

$$\begin{split} \delta n(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}'} \delta \rho_{\mathbf{q}'} \, e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}} = \frac{v_{\mathbf{q}}}{2V} \sum_{\mathbf{q}'} \Big[\delta_{\mathbf{q}',\mathbf{q}} \, \chi(\mathbf{q},0) + \delta_{\mathbf{q}',-\mathbf{q}} \, \chi(-\mathbf{q},0) \Big] e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}} \\ &= \frac{v_{\mathbf{q}}}{V} \chi(\mathbf{q},0) \cos \mathbf{q}\mathbf{r} = -\frac{\chi(\mathbf{q},0)}{V} \delta f(\mathbf{r}). \end{split}$$

Indem man dies in die Gleichgewichtsbedingung (6.36) einsetzt, erhält man für die Kompressibilität (6.37) die Beziehung

$$\lim_{\mathbf{q}\to 0} \chi(\mathbf{q}, 0) = N \cdot n \cdot \kappa.$$
(6.38)

Der Limes in dieser Beziehung ist physikalisch so zu verstehen, dass $qa \ll 1$ gelten muss, wenn a die relevanten inneren Längenskalen des Targetsystems charakterisiert.

Es ist an dieser Stelle zu betonen, dass man in der Formel (6.38) den Limes nicht einfach durch $\chi(0,0)$ ersetzen darf. Da $\rho_{\mathbf{q}=0} = N$ die Teilchenzahl des Targetsystems ist, für die [N,H] = 0 gilt, erkennt man sofort, dass $\mathcal{G}_{N,N}^r(t) \equiv 0$ und damit auch $\chi(0,\omega) \equiv 0$. Die Suszeptibilität $\chi(\mathbf{q},\omega)$ hat bei (0,0) ein kompliziertes Verhalten.

Übung 6.8: Man zeige mittels (6.23), dass $S(0,\omega) = 2\pi \langle N^2 \rangle \delta(\omega)$ gilt. \Box

Die Nützlichkeit der Summenregeln sei durch folgende Anwendung belegt. Wir nehmen einmal an, das an die Dichte koppelnde Anregungsspektrum eines Systems sei bei genügend kleinen **q** so scharf, dass wir es in guter Näherung durch eine δ -Funktion approximieren können: $S(\mathbf{q}, \omega) = 2\pi A_{\mathbf{q}} \cdot \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}})$. Dann folgt aus den Summenregeln (6.30), (6.31) und (6.34,38) in dieser Reihenfolge: $A_{\mathbf{q}} \cdot \omega_{\mathbf{q}} = \hbar^2 q^2 N/2m$, $S(\mathbf{q}) = A_{\mathbf{q}}$ und $2A_{\mathbf{q}}/\omega_{\mathbf{q}} = Nn \kappa$. Daraus ergibt sich durch Auflösen

$$\omega_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar q}{\sqrt{mn\kappa}}$$
 und $A_{\mathbf{q}} = \frac{N\hbar q}{2}\sqrt{\frac{n\kappa}{m}}$ $(\mathbf{q} \to 0).$

Aus der Schärfe der Anregungen folgt also notwendig, dass die Anregungen schallartig sind. Die (isotherme) Schallgeschwindigkleit s ist dabei durch $s = 1/\sqrt{mn\kappa}$ gegeben.

Als ein zentrales Beispiel für den linearen Response behandeln wir im folgenden den Response von Systemen aus geladenen Teilchen auf elektromagnetische **Felder**, dessen Behandlung etwas abweicht von der am Anfang dieses Kapitels beschriebenen Routine.

Wir erinnern zunächst an die Logik der dabei verwandten Begriffe. Bekanntlich erzeugen externe elektromagnetische Felder in Materie induzierte Strom- und Ladungsdichten, ein Prozess, der durch Materialgleichungen beschrieben wird. Diese erzeugen nach Maßgabe der Maxwellgleichungen (im Vakuum) induzierte Felder, die die externen Felder zu den totalen Feldern ergänzen:

$\begin{array}{ccc} {\bf Materialgln.} & {\bf Maxwellgln.} \\ \downarrow & \downarrow \\ {\bf externe \ Felder \, \Rightarrow \ induzierte \ Ströme \, \Rightarrow \ induzierte \ Felder \, \Rightarrow \ totale \ Felder } \end{array}$

Zur Formulierung der **Maxwellgleichungen** denken wir uns Felder und Quellen fourierzerlegt und betrachten Komponenten wie

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E} e^{i(\mathbf{qr}-\omega t)} \quad \text{oder} \quad \mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \mathbf{J} e^{i(\mathbf{qr}-\omega t)}.$$
(6.39)

Es genügt dann für Frequenzen $\omega \neq 0$ angesichts des Induktionsgesetzes und der Kontinuitätsgleichung,

$$\mathbf{q} \times \mathbf{E} = \frac{\omega}{c} \mathbf{B} \quad \text{und} \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{J} = \omega \rho,$$
 (6.40)

das elektrische Feld **E** und die elektrische Stromdichte **J** zu kennen, da das magnetische Feld **B** und die elektrische Ladungsdichte ρ sich daraus bis auf einen statischen Anteil eindeutig ergeben. Das Gaußsche Gesetz

$$i \mathbf{q} \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho = \frac{4\pi}{\omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{J}$$
 (6.41)

bestimmt die longitudinale und das Oersted-Maxwellsche Gesetz

$$i\mathbf{q} \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J} - i\frac{\omega}{c}\mathbf{E}$$
 (6.42)

unter Verwendung des Faradayschen Gesetzes aus (6.40) die transversale Komponente des von den Strömen erzeugten elektrischen Feldes **E**,

$$i \mathbf{q} \times (\mathbf{q} \times \mathbf{E}) = i \frac{\omega}{c} \mathbf{q} \times \mathbf{B} = \frac{4\pi\omega}{c^2} \mathbf{J} - i \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{E}.$$
 (6.43)

Da wir nicht an einer Zerlegung in die beiden Komponenten interessiert sein werden, lösen wir die Gleichungen (6.41) und (6.43) nach **E** auf und erhalten

$$\mathbf{E}^{\text{ind}} = \frac{4\pi}{i\omega} \frac{(\omega^2 - c^2 \mathbf{q} \circ \mathbf{q})}{(\omega^2 - c^2 q^2)} \mathbf{J}^{\text{ind}}.$$
(6.44)

Übung 6.9: Man überprüfe mittels der Gleichung $\mathbf{q} \times (\mathbf{q} \times \mathbf{E}) = \mathbf{q}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}) - q^2 \mathbf{E} = \frac{4\pi}{i\omega} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{J}) \mathbf{q} - q^2 \mathbf{E}$ die Herleitung von (6.44), wo das dyadische Produkt $(\mathbf{q} \circ \mathbf{q}) \mathbf{J} = \mathbf{q}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{J})$ verwendet wurde.

Die Ankopplung des elektromagnetischen Feldes an geladene Materie erfolgt über **Potentiale** Φ und **A**, aus denen die Felder sich wie folgt berechnen:

$$\mathbf{E} = -i\,\mathbf{q}\,\Phi - i\frac{\omega}{c}\mathbf{A}, \qquad \mathbf{B} = i\,\mathbf{q}\times\mathbf{A}. \tag{6.45}$$

Der Hamilton
operator eines Systems von r Sorten von geladenen Teil
chen in einem externen elektromagnetischen Feld ist

$$H(t) = \sum_{l=1}^{r} \sum_{\nu=1}^{n_l} \left[\frac{1}{2m_l} \left(\mathbf{p}_{l,\nu} - \frac{e_l}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{l,\nu}, t) \right)^2 + e_l \Phi(r_{l,\nu}, t) \right] + H'$$

= $H - \sum_{l=1}^{r} \int d\mathbf{r}'^3 \left[\frac{e_l}{c} \mathbf{j}_l(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{A}(r', t) - \frac{e_l^2}{2m_l c^2} n_l(\mathbf{r}') A^2(\mathbf{r}', t) - e_l n_l(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}', t) \right].$
(6.46)

Hier ist H' die in H enthaltene Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Der Operator n_l der Teilchendichte der Teilchensorte l ergibt sich aus der Formel

$$n_l(\mathbf{r}) = \sum_{\nu=1}^{n_l} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{l,\nu})$$
(6.47)

und der Operator \mathbf{j}_l der Teilchenstromdichte aus

$$\mathbf{j}_{l}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m_{l}} \sum_{\nu=1}^{n_{l}} \Big(\mathbf{p}_{l,\nu} \,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{l,\nu}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{l,\nu}) \,\mathbf{p}_{l,\nu} \Big), \tag{6.48}$$

womit der **eichinvariante** Operator der elektrischen Stromdichte, der mit $e_l n_l$ die Kontinuitätsgleichung div $\mathbf{J}_l + e_l \dot{n}_l = 0$ erfüllt und dessen Erwartungswert den gemessenen elektrischen Strom ergibt, durch

$$\mathbf{J}_{k}(\mathbf{r}) = e_{k}\mathbf{j}_{k}(\mathbf{r}) - \frac{e_{k}^{2}}{m_{k}c}n_{k}(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r})$$
(6.49)

gegeben ist. Aus (6.46) lesen wir durch Vergleich mit (6.1) den Störoperator

$$\Phi(t) = -\sum_{l=1}^{r} \int d\mathbf{r}^{\prime 3} \left[\frac{e_l}{c} \mathbf{j}_l(\mathbf{r}^{\prime}) \cdot \mathbf{A}(r^{\prime}, t) - e_l n_l(\mathbf{r}^{\prime}) \Phi(\mathbf{r}^{\prime}, t) \right]$$
(6.50)

ab, da der in A quadratische Term zum linearen Response nicht beiträgt.

Der Stromoperator (6.49) hat zwei Anteile. Vom ersten hat man den linearen Response nach Gleichung (6.6) zu berechnen. Vom zweiten Anteil braucht man nur den Mittelwert im Gleichgewicht des ungestörten Systems zu bilden, weil er schon explizit proportional zum externen Feld ist. Indem wir kartesische Komponenten der auftretenden Vektoren durch hochgestellte griechische Indizes kennzeichnen und die **Summationskonvention** für gleiche Indizes vereinbaren, erhalten wir so

$$\langle J_{\omega}^{\alpha}(\mathbf{r})\rangle = \sum_{k,l=1}^{r} \int d\mathbf{r}'^{3} e_{k} e_{l} \Big[\chi_{j_{k}^{\alpha}(\mathbf{r}), j_{l}^{\beta}(\mathbf{r}')}(\omega) \cdot \frac{1}{c} A_{\omega}^{\beta}(\mathbf{r}') - \chi_{j_{k}^{\alpha}(\mathbf{r}), n_{l}(\mathbf{r}')}(\omega) \cdot \Phi_{\omega}(\mathbf{r}') \Big] - \sum_{k=1}^{r} \frac{e_{k}^{2}}{m_{k}c} \langle n_{k}(\mathbf{r}) \rangle A_{\omega}^{\alpha}(\mathbf{r}).$$

$$(6.51)$$

Dieses Ergebnis kann man mittels der Bewegungsgleichung für die gemischte Suszeptibilität $\chi_{j,n}$ vereinfachen. Man braucht dazu die Kommutatoren

$$\left[j_{k}^{\alpha}(\mathbf{r}), n_{l}(\mathbf{r}')\right] = \delta_{k,l} \cdot \frac{i\hbar}{m_{k}} n_{k}(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}'}^{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
(6.52)

und

$$\left[H, n_l(\mathbf{r}')\right] = i\hbar\nabla^{\beta}_{\mathbf{r}'} j_l^{\beta}(\mathbf{r}')$$
(6.53)

und erhält unter Beachtung von (3.14) und (6.7)

$$\omega\chi_{j_k^{\alpha}(\mathbf{r}),n_l(\mathbf{r}')}(\omega) = \delta_{k,l} \cdot \frac{i}{m_k} \langle n_k(\mathbf{r}) \rangle \nabla_{\mathbf{r}'}^{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + i \nabla_{\mathbf{r}'}^{\beta} \chi_{j_k^{\alpha}(\mathbf{r}),j_l^{\beta}(\mathbf{r}')}(\omega).$$
(6.54)

Indem man (6.54) in (6.51) einsetzt und die Ableitungen nach \mathbf{r}' durch partielle Integration auf das Potential Φ überwälzt, findet man schließlich

$$\langle J^{\alpha}_{\omega}(\mathbf{r})\rangle = \sum_{k,l=1}^{r} \int d\mathbf{r}^{\prime 3} e_{k} e_{l} \chi_{j^{\alpha}_{k}(\mathbf{r}), j^{\beta}_{l}(\mathbf{r}^{\prime})}(\omega) \cdot \left(\frac{1}{c} A^{\beta}_{\omega}(\mathbf{r}^{\prime}) + \frac{i}{\omega} \nabla^{\beta}_{\mathbf{r}^{\prime}} \Phi_{\omega}(\mathbf{r}^{\prime})\right) - \sum_{k=1}^{r} \frac{e_{k}^{2}}{m_{k}} \langle n_{k}(\mathbf{r}) \rangle \left(\frac{1}{c} A^{\alpha}_{\omega}(\mathbf{r}) + \frac{i}{\omega} \nabla^{\alpha}_{\mathbf{r}} \Phi_{\omega}(\mathbf{r})\right).$$
(6.55)

Die in Klammern stehenden Ausdrücke erweisen sich durch Vergleich mit (6.45) als eichinvariant und sind gleichzusetzen mit $\mathbf{E}_{\omega}/i\omega$. Daher lautet die Formel für den linearen Response

$$\langle \mathbf{J}_{\omega}^{\mathrm{ind}}(\mathbf{r}) \rangle = \int d\mathbf{r}^{\prime 3} \, \mathbf{K}_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{\prime}) \, \mathbf{E}_{\omega}^{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}^{\prime})$$
 (6.56)

mit der tensoriellen Responsefunktion

$$K_{\omega}^{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{k,l=1}^{r} \frac{e_{k}e_{l}}{i\omega} \left[\chi_{j_{k}^{\alpha}(\mathbf{r}),j_{l}^{\beta}(\mathbf{r}')}(\omega) - \frac{\langle n_{k}(\mathbf{r})\rangle}{m_{k}} \delta_{k,l} \,\delta_{\alpha,\beta} \,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \right], \tag{6.57}$$

die wesentlich von der **Stromdichte–Suszeptibilität** bestimmt wird.

Übung 6.10: Man rechne die Gleichungen (6.52-57) nach. \Box

In Gleichung (6.56) haben wir durch Indizierungen betont, dass sie die durch das externe elektrische Feld erzeugte induzierte Stromdichte beschreibt.

Wir beschränkens die weitere Diskussion auf **räumlich homogene Medien**, in denen die Responsefunktion nur von dem Differenzvektor $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ abhängt, und auf Systeme mit nur einer Teilchensorte. Dies bringt durch räumliche Fouriertransformation nach (6.39) und Überflüssigkeit der Indizes für die Teilchensorte die weiteren Vereinfachungen (zur Definition von $\rho_{\mathbf{q}}$ und $\boldsymbol{\iota}_{\mathbf{q}}$ siehe (2.38,44))

$$\langle \mathbf{J}_{\mathbf{q},\omega}^{\mathrm{ind}} \rangle \rangle = \mathbf{K}_{\mathbf{q},\omega} \, \mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\mathrm{ext}}$$

$$(6.58)$$

 mit

$$K_{\mathbf{q},\omega}^{\alpha\beta} = \frac{e^2}{i\omega} \left[\frac{1}{V} \chi_{\iota_{\mathbf{q}}^{\alpha},(\iota_{\mathbf{q}}^{\beta})^{\dagger}}(\omega) - \frac{\langle n \rangle}{m} \delta_{\alpha,\beta} \right].$$
(6.59)

Übung 6.11: Man beweise für den longitudinalen Anteil der Responsefunktion **K** anhand der Relation (3.15) und unter Beachtung von (6.7) das interessante Resultat

$$\frac{1}{q^2}q_{\alpha}K^{\alpha\beta}_{\mathbf{q},\omega}q_{\beta} = \frac{-i\omega e^2}{Vq^2}\chi_{\rho_{\mathbf{q}},(\rho_{\mathbf{q}})^{\dagger}}(\omega), \qquad (6.60)$$

das die longitudinale Responsefunktion auf die **Dichte–Dichte–Suszeptibilität** zurückführt. □

Ein Rückblick auf Gleichung (6.44) erlaubt uns nun, auch das totale elektrische Feld anzugeben,

$$\mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega} = \mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ext}} + \mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ind}} = \left[1 + \frac{4\pi}{i\omega} \frac{(\omega^2 - c^2 \mathbf{q} \circ \mathbf{q})}{(\omega^2 - c^2 q^2)} \mathbf{K}_{\mathbf{q},\omega}\right] \mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ext}}.$$
 (6.61)

An dieser Stelle ist zu betonen, dass die Gültigkeit dieser Beziehung nicht durch die Bedingung $E^{\text{ind}} \ll E^{\text{ext}}$ gegeben ist, sondern durch die Bedingung, dass E^{ind} klein gegen die inneren Coulombfelder in dem betrachteten System ist.

Die dielektrische Funktion ist durch die Relation

$$\mathbf{D}_{\mathbf{q},\omega} \equiv \mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ext}} = \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{q},\omega)\mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}$$
(6.62)

definiert und hängt daher mit der Responsefunktion K durch die Gleichung

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{q},\omega) = \left[1 + \frac{4\pi}{i\omega} \frac{(\omega^2 - c^2 \mathbf{q} \circ \mathbf{q})}{(\omega^2 - c^2 q^2)} \mathbf{K}_{\mathbf{q},\omega}\right]^{-1}$$
(6.63)

zusammen. Das (verallgemeinerte) **Ohmsche Gesetz** beschreibt den Beziehung zwischen dem totalen elektrischen Feld und der elektrischen Stromdichte und lautet somit

$$\mathbf{J}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ind}} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q},\omega)\mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}$$
(6.64)

mit dem Tensor der dynamischen Leitfähigkeit

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q},\omega) = \mathbf{K}_{\mathbf{q},\omega} \,\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{q},\omega). \tag{6.65}$$

Indem man schließlich aus (6.63) und (6.65) das Produkt K ϵ eliminiert, erhält man die bekannte Beziehung

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{q},\omega) = 1 - \frac{4\pi}{i\omega} \frac{(\omega^2 - c^2 \mathbf{q} \circ \mathbf{q})}{(\omega^2 - c^2 q^2)} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q},\omega)$$
(6.66)

zwischen der dielektrischen Funktion und der dynamischen Leitfähigkeit.

In einem **isotropen homogenen System** erzeugt ein longitudinales externes Feld $\mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ext}} = -i\mathbf{q}\Phi_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ext}}$ ein longitudinales totales Feld $\mathbf{E}_{\mathbf{q},\omega} = -i\mathbf{q}\Phi_{\mathbf{q},\omega}$, weil der Vektor **q** die einzige dem System bekannte Richtung anzeigt, und es gilt

$$\Phi_{\mathbf{q},\omega} = \frac{1}{q^2} q_{\alpha} \left(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{q},\omega)^{-1} \right)_{\alpha\beta} q_{\beta} \Phi_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ext}} = \left(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{q},\omega)^{-1} \right)_{\text{long}} \Phi_{\mathbf{q},\omega}^{\text{ext}}.$$
 (6.67)

Dies beschreibt die **Abschirmung** des langreichweitigen Coulombpotentials durch die dielektrische Funktion. Man beachte den Unterschied zwischen $(\epsilon^{-1})_{\text{long}}$ und $(\epsilon_{\text{long}})^{-1}$.

Übung 6.11: Man beweise unter Verwendung von (6.60) die Beziehung

$$\left(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{q},\omega)^{-1}\right)_{\text{long}} = 1 - \frac{4\pi e^2}{Vq^2} \chi_{\rho_{\mathbf{q}},(\rho_{\mathbf{q}})^{\dagger}}(\omega).$$
(6.68)

III. Vielteilchensysteme ohne dynamische Korrelationen

Dieses Kapitel ist einer Klasse von Vielteilchenproblemen gewidmet, deren gemeinsames Merkmal ein in den Erzeugern und Vernichtern quadratischer Hamiltonoperator ist. Solche Systeme sind aus verschiedenen Gründen von Interesse, obwohl sie keine dynamischen Wechselwirkungen zwischen den Teilchen aufweisen. Zum Beispiel führen approximative Beschreibungen realer wechselwirkender Systeme, bei denen die Wechselwirkungen durch ein geeignet gewähltes äußeres Feld imitiert werden ("Molekularfeldnäherungen"), auf Probleme mit quadratischen Hamiltonoperatoren. Die Hartree–Fock–Näherung wäre hierfür das bekannteste Beispiel. Nicht wechselwirkende Systeme sind auch der wichtigste Ausgangspunkt zur Beschreibung von wechselwirkenden Systemen mittels Störungsrechnung.

Wir werden zunächst in Kapitel 7 **Einteilchen–Propagatoren** und **Dichte–Dichte–Propagatoren** von Systemen ohne dynamische Korrelationen betrachten und dann in Kapitel 8 sehen, wie man mit Hilfe des Wickschen Theorems Mehrteilchenpropagatoren auf Einteilchen–Propagatoren zurückführen kann. In Kapitel 9 werden wir Molekularfeldnäherungen diskutieren und in Kapitel 10 die Verallgemeinerung auf nichtkorrelierte Systeme mit Paarerzeugung und – vernichtung, die insbesondere für die BCS–Theorie relevant sind.

7. Zweizeitige Propagatoren nichtkorrelierter Systeme

Wie schon oben angedeutet betrachten wir in diesem Kapitel Vielteilchensysteme, deren Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung die Gestalt

$$H = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'}$$
(7.1)

haben. Mittels der Bewegungsgleichung (3.14) erhalten wir für den Einteilchen-Propagator $G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z)$ (5.1) solcher Systeme das geschlossene lineare Gleichungssystem

$$z G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z) = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{q}''} h_{\mathbf{q},\mathbf{q}''} G_{\mathbf{q}'',\mathbf{q}'}(z).$$
(7.2)

Gleichung (7.2) reflektiert eine Einfachheit unkorrelierter Vielteilchensysteme, die wechselwirkende Systeme natürlich nicht besitzen: Der Einteilchen-Propagator kann durch eine **Matrixinversion** berechnet werden. Wenn wir Matrizen \hat{G} $((\hat{G})_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} = G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'})$ und \hat{h} $((\hat{h})_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} = h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'})$ einführen, erhalten wir

$$\hat{G}(z) = (z - \hat{h})^{-1}.$$
 (7.3)

(z ist hier als $z \times \text{Einheitsmatrix}$ zu interpretieren.) In der Praxis wird die Inversion in (7.3) am einfachsten durchzuführen sein, indem die Matrix \hat{h} diagonalisiert wird. Das gelingt, da \hat{h} hermitesch ist, durch eine Basistransformation (2.20),

$$b_{\mathbf{p}}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} u_{\mathbf{q}\mathbf{p}}, \qquad b_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}\mathbf{p}}^{*} a_{\mathbf{q}}, \tag{7.4}$$

im Hilbertraum der Einteilchenzustände $|\mathbf{q}\rangle.$ Wenn die transformierte Hamiltonmatrix

$$\hat{h}' = \hat{u}^{\dagger} \hat{h} \, \hat{u} \tag{7.5}$$

diagonal ist, hat der Hamiltonoperator (7.1) in der neuen Basis die einfache Gestalt

$$H = \sum_{\mathbf{p}} h'_{\mathbf{p},\mathbf{p}} b^{\dagger}_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} b^{\dagger}_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}.$$
 (7.6)

Übung 7.1: Man rechne nach, dass sich \hat{h} unter der kanonischen Transformation (7.4) wie (7.5) transformiert, sodass sich bei diagonalem \hat{h}' (7.6) ergibt.

Die Propagatoren zur neuen Einteilchenbasis sind die Matrixelemente der Matrix $\hat{G}'(z) = \hat{u}^{\dagger}\hat{G}(z)\,\hat{u} = (z - \hat{h}')^{-1}$ und es gilt

$$G_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(z) = \left(\hat{G}'(z)\right)_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} = \frac{\delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}}{z - \epsilon_{\mathbf{p}}}.$$
(7.7)

Eine alternative Form der Darstellung (7.3) des Einteilchen–Propagators benutzt die **Resolvente** des Hamiltonoperators (7.1),

$$\mathcal{R}(z) = (z - H)^{-1}, \tag{7.8}$$

die ein Operator im Fockraum ist. Wir bilden Matrixelemente des Operators $(z-H)\mathcal{R}(z)$ zwischen Einteilchenzuständen und schließen aus der kurzen Rechnung

$$\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} = \langle \mathbf{q} | (z - H) R(z) | \mathbf{q}' \rangle = \sum_{n} \langle \mathbf{q} | (z - H) | n \rangle \langle n | R(z) | \mathbf{q}' \rangle$$
$$= \sum_{\mathbf{q}''} \langle \mathbf{q} | (z - H) | \mathbf{q}'' \rangle \langle \mathbf{q}'' | R(z) | \mathbf{q}' \rangle = \sum_{\mathbf{q}''} (z \, \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}''} - h_{\mathbf{q},\mathbf{q}''}) \cdot \langle \mathbf{q}'' | \mathcal{R}(z) | \mathbf{q}' \rangle^{'}$$

dass

$$G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z) = \langle \mathbf{q} | \mathcal{R}(z) | \mathbf{q}' \rangle.$$
(7.9)

In der obigen Rechnung konnte der vollständige Satz $|n\rangle$ von Fockraumbasiszuständen wegen der Teilchenzahlerhaltung durch H auf den Satz $|\mathbf{q}''\rangle$ von Einteilchenzuständen reduziert werden.

An Gleichungen wie (7.7) oder (7.9) sieht man besonders deutlich, dass die Einteilchen-Propagatoren nichtkorrelierter Systeme eigentlich gar nicht den Vielteilchencharakter des betreffenden Systems reflektieren. Sie hängen insbesondere auch nicht von der Temperatur des Systems ab. Die Abhängigkeit vom chemischen Potential ist trivial: da der Hamiltonoperator H in unserer großkanonischen Beschreibung einen Beitrag $-\mu N = -\mu \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}$ enthält, gilt einfach

$$G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z;\mu) = G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z+\mu;0).$$
(7.10)

Die Einfachheit der Einteilchen–Propagatoren nichtkorrelierter Systeme ist unbedingt als ein Vorteil zu werten. Sobald man Mittelwerte von Observablen berechnet, wird die Temperatur auf sehr transparente Weise durch Formeln wie (5.4) oder (4.13,15) einbezogen. Auch für Systeme wechselwirkender Teilchen kommt ein wesentlicher Teil der Temperaturabhängigkeit auf diese Weise ins Spiel, obschon dann die Propagatoren selbst eine Temperaturabhängigkeit besitzen werden. Als Beispiel betrachten wir für ein System von Fermionen, deren Einteilchen-Propagator die Diagonalgestalt (7.7) hat, die mittlere Besetzungszahl der Teilchen im Einteilchenzustand **p**. Mit (4.17) erhalten wir

$$\langle n_{\mathbf{p}} \rangle = \frac{-1}{2\pi i} \oint_{(\epsilon_{\mathbf{p}})} G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z) f(z) dz = f(\epsilon_{\mathbf{p}}), \tag{7.11}$$

da der Weg C in (4.17) als einzige Singularität des Integranden den Pol von $G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z)$ bei $z = \epsilon_{\mathbf{p}}$ umschließt. Für **Bosonen** ergibt sich analog aus (4.19) die Gleichung

$$\langle n_{\mathbf{p}} \rangle = g(\epsilon_{\mathbf{p}}) - \frac{1}{\beta \epsilon_{\mathbf{p}}} - \frac{1}{\beta} G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}^{(0)}, \qquad (7.*)$$

da hier der Pol von g(z) bei z = 0 hinzutritt. Um den Fourierkoeffizienten $G^{(0)}$ zu berechnen, bemühen wir die Definition der Greenfunktion (4.2): $\mathcal{G}_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(\tau) = -\langle b_{\mathbf{p}}^{\dagger}b_{\mathbf{p}\tau}\rangle = -e^{-\tau\epsilon_{\mathbf{p}}}\langle n_{\mathbf{p}}\rangle \ (-\beta < \tau < 0)$, und finden damit $G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}^{(0)} = \int_{-\beta}^{0} \mathcal{G}_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(\tau)d\tau = -\frac{\langle n_{\mathbf{p}}\rangle}{\epsilon_{\mathbf{p}}\cdot g(\epsilon_{\mathbf{p}})}$. Die obige Gleichung (7.*) kann damit nach $\langle n_{\mathbf{p}}\rangle$ aufgelöst werden. Die Lösung lautet wie erwartet

$$\langle n_{\mathbf{p}} \rangle = g(\epsilon_{\mathbf{p}}),$$
 (7.12)

falls $\beta \epsilon_{\mathbf{p}} \cdot g(\epsilon_{\mathbf{p}}) \neq 1$. Diese Bedingung ist aber immer erfüllt, weil notwendig $\epsilon_{\mathbf{p}} > 0$ gilt, damit die Besetzung des **p**-Niveaus endlich ist. Gleichzeitig lernen wir aus der obigen Betrachtung auch, dass für Bosonen

$$G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}^{(0)} = -\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{p}}} = G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z)\big|_{z\to 0}.$$
(7.13)

Die Ergebnisse (7.11,12) sind aus der statistischen Physik wohlbekannt und können natürlich auf elementarere Weise gewonnen werden. Wir haben sie hier benutzt, um die typische Verwendung des Einteilchen-Propagators zu demonstrieren. Wir betonen insbesondere noch einmal, dass die Beiträge der vorkommenden Integrale vom Pol der Greenfunktion bei $z = \epsilon_{\mathbf{p}}$ herrühren. Dieser Pol der Greenfunktion $G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z)$ gestattet uns, unmittelbar die Energie eines Teilchens im Zustand \mathbf{p} abzulesen, das wir dem System zufügen oder wegnehmen. Natürlich können wir nur in dem hier betrachteten einfachen Fall nichtkorrelierter Teilchen erwarten, dass ein solches Teilchen eine wohldefinierte Energie hat oder, anders ausgedrückt, dass es unendlich lange in seinem Zustand verbleibt. Letzteres sieht man auch an der zeitabhängigen Greenfunktion (3.3), die man im allgemeinen über (4.21), in dem hier vorliegenden einfachen Fall aber auch einfacher direkt aus der Definition (3.3) erhält:

$$\mathcal{G}^{r}_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(t) = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t) \cdot e^{-i\epsilon_{\mathbf{p}}t/\hbar}.$$
(7.14)

Man merke sich, dass die Kommutator-Greenfunktion $G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z)$ nicht von der Temperatur abhängt und auch nicht den Symmetriecharakter der Teilchen wiederspiegelt. Das gilt nicht für die Temperatur-Greenfunktion (4.1,2). Sie ergibt sich für nichtkorrelierte Systeme zu

$$\mathcal{G}_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(\tau-\tau') = -\left(\Theta(\tau-\tau') - s\langle n_{\mathbf{p}}\rangle\right) e^{-\epsilon_{\mathbf{p}}(\tau-\tau')}.$$
(7.15)

Übung 7.2: Man mache sich klar, wie $G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z) = \frac{1}{z-\epsilon_{\mathbf{p}}}$ sich aus der Spektraldarstellung (3.18) ergibt. \Box

Abschließend berechnen wir noch mittels (4.24) die **Spektralfunktion** (4.23) des Einteilchen–Propagators für nichtkorrelierte Systeme:

$$C_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(\omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{p}}). \tag{7.16}$$

Man kann sich anhand der nichtkorrelierten Systeme von der Nützlichkeit der Spektralfunktion überzeugen, indem man sie in die Gleichungen (4.26-33) einsetzt. Auch die Spektralfunktion drückt durch ihre δ -Funktion die Energieschärfe des **p**-Zustandes sehr suggestiv aus.

Wir wollen dies einmal durch eine Spektralfunktion kontrastieren, bei der wir ein Teilchen nicht in einen Eigenzustand setzen. Dazu denken wir uns ein System freier Teilchen in einem Kasten, sodass die Impulse $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ als Quantenzahlen dienen können – wir unterdrücken den Spin der Teilchen – und die Energien $\epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu$ sind. Wir setzen ein Teilchen an einen scharfen Ort \mathbf{r}' und nehmen es zu einer anderen Zeit am Ort \mathbf{r} weg, d.h. wir berechnen die Spektralfunktion zum Einteilchen–Propagator $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ in der Ortsdarstellung. Wir erhalten

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} C(\mathbf{p}, \mathbf{p}')(\omega) e^{i(\mathbf{pr} - \mathbf{p}'\mathbf{r}')\hbar}$$

$$= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} 2\pi \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{p}}) e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\hbar}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^3 \mathbf{k} \, \delta(\omega + \mu - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

$$= \frac{m}{\pi \hbar^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \begin{cases} \sin(\frac{\omega + \mu}{\epsilon_{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}})^{1/2} & (\omega + \mu \ge 0) \\ 0 & (\omega + \mu < 0). \end{cases}$$
(7.17)

Hier wurde eine charakteristische Energie $\epsilon_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} = \frac{\hbar^2}{2m|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2}$ eingeführt. Man sieht, dass ein am Ort $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ zugefügtes Teilchen eine breite Energieverteilung

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega) = \frac{m}{\pi \hbar^3} \sqrt{2m(\omega + \mu)} \quad (\omega + \mu \ge 0)$$
(7.18)

über das ganze Spektrum $-\mu \leq \omega < \infty$ hat und dass das Teilchen nicht an seinem Ort verbleibt, sondern zu anderen Zeiten an allen anderen Orten wiedergefunden werden kann.

Die Gleichungen (5.9) für die **Energie** eines Vielteilchensystems vereinfachen sich im Falle nichtkorrelierter Systeme. Mit der Bewegungsgleichung (7.2) ergibt sich aus (5.9), zunächst für **Fermionen**,

$$E = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{q}} \left(i\omega_{2m+1} G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(i\omega_{2m+1}) - 1 \right) e^{-i\omega_{2m+1} \cdot (-0)}$$

$$= -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathbf{q}} \int_{\mathcal{C}} \left(zG_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z) - 1 \right) f(z) dz$$
(7.19)

oder

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \omega \rho(\omega) f(\omega) d\omega$$
(7.20)

mit der Einteilchenzustandsdichte

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \Im G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(\omega+i0).$$
(7.21)

Für **Bosonen** hat man ähnlich

$$E = -\frac{1}{\beta} \sum_{-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{q}} \left(i\omega_{2m} G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(i\omega_{2m}) - 1 \right) e^{-i\omega_{2m}\cdot(-0)}$$
$$= \sum_{\mathbf{q}} \left[-\frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathbf{q}} \int_{\mathcal{C}} \left(zG_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z) - 1 \right) g(z) dz + \frac{1}{\beta} \right]$$
$$= -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathbf{q}} \int_{\mathcal{C}} zG_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z) g(z) dz$$
(7.22)

und demnach mit einem Hauptwertintegral

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \omega \rho(\omega) g(\omega) d\omega.$$
 (7.23)

Die knappe Bezeichnung $\rho(\omega)$ für die Zustandsdichte ist nur dadurch gerechtfertigt, dass sie nicht von der Wahl der Einteilchenbasis { $|\mathbf{q}\rangle$ } abhängt. Man sieht dies z.B. leicht mithilfe von (7.9), wonach

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \sum_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{q} | (\omega + i0 - H)^{-1} | \mathbf{q} \rangle = \operatorname{Sp}_{N=1} \delta(\omega - H).$$
(7.24)

Die Spur über alle Einteilchenzustände kann dabei mit einer beliebigen Basis gebildet werden. Für eine Diagonalbasis (7.6) erhält man mit (7.16)

$$\rho(\omega) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{p}}).$$
(7.25)

Übung 7.3: Man zeige, dass die Zustandsdichte eines Systems freier Teilchen mit Spin S und Energie $\epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m} - \mu$ durch die Formel

$$\rho(\omega) = \frac{(2S+1)m}{2\pi^2\hbar^3} V \sqrt{2m(\omega+\mu)}$$
(7.26)

gegeben ist. \Box

Analog zur Energie leitet man Formeln für den **Teilchenzahloperator** $N = \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}$ her. Man findet für die mittlere Teilchenzahl

$$\langle N \rangle = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) f(\omega) d\omega & \text{(Fermionen)} \\ f_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) g(\omega) d\omega & \text{(Bosonen).} \end{cases}$$
(7.27)

Die Gleichungen (7.20,23,27) entsprechen dem Bild, das wir uns von einem System ohne dynamische Korrelationen machen: die Einteilchenniveaus mit der Dichte $\rho(\omega)$ werden nach Maßgabe der Fermi– bzw. Boseverteilung aufgefüllt.

Auch die **freie Energie** kann durch die Zustandsdichte ausgedrückt werden. Wir rechnen dazu in einer Diagonaldarstellung

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \operatorname{Spe}^{-\beta \mathrm{H}} = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{\{\mathbf{n}_{\mathbf{p}}\}} e^{-\beta \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{n}_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}}}$$
$$= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}} \ln \sum_{\mathbf{n}} e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{p}} \mathbf{n}}$$
$$= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}} \ln \left\{ \frac{(1+e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{p}}})}{\frac{1}{1-e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{p}}}}} \right\} (\text{Fermionen}) (\text{Bosonen})$$
$$= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{p}}) \ln \left\{ \frac{(1+e^{-\beta \omega})}{\frac{1}{1-e^{-\beta \omega}}} \right\}$$

Übung 7.4: Man rechne die Gleichungen (7.19-27) nach. \Box

8. Wicksches Theorem

Als nächstes werden wir allgemeinere Greenfunktionen für Systeme ohne dynamische Korrelationen studieren. Wir werden sehen, dass sich alle Greenfunktionen, bei denen die Observablen A und B von höherer als erster Ordnung in den Feldoperatoren sein können, auf einfache Weise durch die Einteilchenpropagatoren ausdrücken lassen. Der betreffende Satz, der diesen Zusammenhang erhellt, wird oft "Wicksches Theorem" genannt und stellt eine weitere Manifestation der fehlenden dynamischen Korrelationen dar. Das Wicksche Theorem ist ursprünglich ein Satz aus der mathematischen Theorie der Schiefalgebren und der Name erinnert nur an einen alten Beweis des uns hier interessierenden Satzes (für den Grenzfall $T \rightarrow 0$), der Gebrauch von dem algebraischen Satz machte.

Um das Wicksche Theorem formulieren zu können, führen wir in Analogie zu (4.1,2) eine mehrzeitige Temperatur–Greenfunktion ein, die wir *n*–**Teilchenpropagator** nennen. Sie ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{n}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1},\ldots,\mathbf{q}_{n}\tau_{n};\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime},\ldots,\mathbf{q}_{n}^{\prime}\tau_{n}^{\prime}) \\
&= (-1)^{n} \left\langle \mathcal{T}_{s}(a_{\mathbf{q}_{1}\tau_{1}}\ldots a_{\mathbf{q}_{n}\tau_{n}}a_{\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}}^{\dagger}\ldots a_{\mathbf{q}_{n}^{\prime}\tau_{n}^{\prime}}^{\dagger}) \right\rangle \qquad (0 < \tau_{\nu},\tau_{\nu}^{\prime} < \beta).
\end{aligned}$$
(8.1)

Hierbei ist die τ -Abhängigkeit von $a_{\mathbf{q}\tau}$ im Sinne von (4.3) zu verstehen. Der **Zeitordnungsoperator** \mathcal{T}_s sortiert die 2n Operatoren in der Reihenfolge fallender Zeiten (also die mit dem größten τ_{ν} bzw. τ'_{ν} ganz nach links), wobei für Fermionen (s = +1) ein Vorzeichenwechsel vorgenommen wird, wenn die Umordnung der Operatoren einer ungeraden Permutation entspricht, für Bosonen (s = -1) dagegen nicht. Die beiden Statistiken zusammenfassend wird also nach der Umordnung ein Faktor $(-1)^{\chi_P}$ angebracht, wenn χ_P der Charakter der Permutation ist.

Wir stellen sofort fest, dass \mathcal{G}_1 mit unserem früheren Einteilchenpropagator (4.1) identisch ist:

$$\mathcal{G}_1(\mathbf{q}\,\tau;\mathbf{q}'\tau') \equiv \mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau-\tau'). \tag{8.2}$$

Durch geeignetes Gleichsetzen mehrerer Zeiten und eventuelle Summation über \mathbf{q} -Indizes gelangt man außerdem von \mathcal{G}_n zu Greenfunktionen $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ mit beliebigen A und B. Die in Kapitel 6 betrachteten Responsefunktionen sind so meist Spezialfälle des 2–Teilchenpropagators.

Zur Herleitung des Wickschen Theorems wollen wir auf folgenden Hilfssatz aus der Theorie der Randwertaufgaben bei gewöhnlichen Differentialgleichungssystemen zurückgreifen. Der Hilfssatz lautet:

Das Differentialgleichungssystem

$$-\sum_{\mathbf{q}^{\prime\prime}} \left(\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}^{\prime\prime}} \frac{d}{d\tau} + h_{\mathbf{q},\mathbf{q}^{\prime\prime}} \right) y_{\mathbf{q}^{\prime\prime}}(\tau) = r_{\mathbf{q}}(\tau) \qquad (0 < \tau < \beta)$$
(8.3)

mit den Randbedingungen

$$\lim_{\tau \searrow 0} y_{\mathbf{q}}(\tau) = (-s) \lim_{\tau \nearrow \beta} y_{\mathbf{q}}(\tau)$$
(8.4)

ist für alle rechten Seiten $r_{\mathbf{q}}(\tau)$ eindeutig lösbar genau dann, wenn das homogene Problem ($r_{\mathbf{q}} \equiv 0$) nur die triviale Lösung $y_{\mathbf{q}} \equiv 0$ besitzt. In diesem Falle kann die eindeutige Lösung als

$$y_{\mathbf{q}}(\tau) = \int_{0}^{\beta} \sum_{\mathbf{q}'} \mathcal{G}(\mathbf{q}\tau, \mathbf{q}'\tau') r_{\mathbf{q}'}(\tau') d\tau'$$
(8.5)

geschrieben werden. Dabei hat die **Greensche Funktion** (im mathematischen Sinne) die Eigenschaften $(0 < \tau, \tau' < \beta)$

$$-\sum_{\mathbf{q}^{\prime\prime}} \left(\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}^{\prime\prime}} \frac{\partial}{\partial \tau} + h_{\mathbf{q},\mathbf{q}^{\prime\prime}} \right) \mathcal{G}(\mathbf{q}^{\prime\prime}\tau,\mathbf{q}^{\prime}\tau^{\prime}) = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}^{\prime}} \,\delta(\tau-\tau^{\prime}) \tag{8.6}$$

und

$$\lim_{\tau \searrow 0} \mathcal{G}(\mathbf{q}\tau, \mathbf{q}'\tau') = (-s) \lim_{\tau \nearrow \beta} \mathcal{G}(\mathbf{q}\tau, \mathbf{q}'\tau')$$
(8.7)

und ist durch diese Eigenschaften eindeutig charakterisiert.

Die Bedeutung dieses Satzes für unser Problem erhellt sich zunächst einmal daraus, dass der Einteilchenpropagator (8.2) zum Hamiltonoperator (7.1) die Eigenschaften (8.6,7) der Greenschen Funktion besitzt. Dies ist im Übrigen der Ursprung der Bezeichnung "Greenfunktion" für die in Kapitel 3 und folgenden eingeführten Funktionen. Die Differentialgleichung (8.6) ergibt sich wie die Bewegungsgleichung (3.16) und entspricht in fouriertransformierter Form unserer Gleichung (7.2). Die Randbedingung (8.7) hatten wir schon in (4.5) notiert.

Das Wicksche Theorem folgt nun recht mühelos aus der Beobachtung, dass der n-Teilchenpropagator Lösung einer Randwertaufgabe vom Typ (8.3,4) ist. Es gilt nämlich

$$-\sum_{\mathbf{q}''} \left(\delta_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}''} \frac{\partial}{\partial \tau_{1}} + h_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}''} \right) \mathcal{G}_{n}(\mathbf{q}''\tau_{1},\mathbf{q}_{2}\tau_{2},\ldots;\mathbf{q}_{1}'\tau_{1}',\ldots)$$

$$=\sum_{\nu=1}^{n} (-s)^{n+\nu-2} \delta_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}_{\nu}'} \,\delta(\tau_{1}-\tau_{\nu}')$$

$$\times \mathcal{G}_{n-1}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2},\ldots;\ldots,\mathbf{q}_{\nu-1}'\tau_{\nu-1}',\mathbf{q}_{\nu+1}'\tau_{\nu+1}',\ldots)$$
(8.8)

und

$$\lim_{\tau_1 \searrow 0} \mathcal{G}_n(\mathbf{q}_1 \tau_1, \dots; \dots) = (-s) \lim_{\tau_1 \nearrow \beta} \mathcal{G}_n(\mathbf{q}_1 \tau_1, \dots; \dots).$$
(8.9)

Die **Bewegungsgleichung** (8.8) ergibt sich dabei analog zur Bewegungsgleichung (8.6) für den Einteilchenpropagator, wobei allerdings einige Bemerkungen zum Zustandekommen der rechten Seite angebracht sind. Die *n* Terme entsprechen den *n* Sprüngen, die \mathcal{G}_n hat, wenn die Zeit τ_1 eine der Zeiten τ'_{ν} kreuzt. Der Sprung hat dann die Höhe $\delta_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}'_{\nu}} \cdot \mathcal{G}_{n-1}(\mathbf{q}_2\tau_2,\ldots;\ldots,\mathbf{q}'_{\nu-1}\tau'_{\nu-1},\mathbf{q}'_{\nu+1}\tau'_{\nu+1},\ldots)$ bis auf ein Vorzeichen. Die Bestimmung des Vorzeichens erfordert einige Überlegung. Wir betrachten zuerst den Fall, dass die Zeiten τ_2 bis τ'_n in eben dieser Reihenfolge abfallen. Dann hat man das links stehende $a_{\mathbf{q}_1\tau_1}$ mit $n + \nu - 2$ Operatoren zu vertauschen, um es direkt links neben den Operator $a^{\dagger}_{\mathbf{q}'_{\nu}\tau'_{\nu}}$ zu bringen, wodurch der Faktor $(-s)^{n+\nu-2}$ entsteht. Das Minuszeichen vor der partiellen Ableitung $\partial/\partial \tau_1$ fällt weg, weil \mathcal{G}_n und \mathcal{G}_{n-1} nach (8.1) ein verschiedenes relatives Vorzeichen haben. Für beliebige andere Ordnung der Zeiten τ_2 bis τ'_n erzeugen wir die korrekte Reihenfolge der Operatoren so, dass wir zuerst wieder $a_{\mathbf{q}_1\tau_1}$ links neben $a^{\dagger}_{\mathbf{q}'_{\nu}\tau'_{\nu}}$ bringen. Wenn wir danach die vollständige Zeitordnung herstellen, ist die Permutation irgendeines Operators mit dem Produkt $a_{\mathbf{q}_1\tau_1}a^{\dagger}_{\mathbf{q}'_{\nu}\tau'_{\nu}}$ immer eine gerade Permutation. Daher ist der Charakter der restlichen Permutation derselbe wie der der entsprechenden Permutation in \mathcal{G}_{n-1} und das Vorzeichen $(-s)^{n+\nu-2}$ gilt für alle Zeitordnungen.

Die **Randbedingung** (8.9) gilt, weil die linke Seite gleich $(-1)^n (-s)^{2n-1}$ $\cdot \langle \mathcal{T}_s(a_{\mathbf{q}_2\tau_2} \dots \dots a_{\mathbf{q}'_n\tau'_n}^{\dagger}) a_{\mathbf{q}_1} \rangle$ ist, während die rechte Seite sich zu $(-1)^n (-s)$ $\cdot \langle \mathcal{T}_s a_{\mathbf{q}_1\beta}(a_{\mathbf{q}_2\tau_2} \dots a_{\mathbf{q}'_n\tau'_n}^{\dagger}) \rangle$ ergibt. Wegen $e^{-\beta H} a_{\mathbf{q}_1\beta} = a_{\mathbf{q}_1} e^{-\beta H}$ folgt die Gleichheit sofort durch zyklisches Vertauschen des Operators $a_{\mathbf{q}_1}$ unter der Spur.

Übung 8.1: Man überprüfe die obigen Argumente zu (8.8,9) im Detail.

Um mittels (8.5) die Lösung unserer Randwertaufgabe für \mathcal{G}_n anzugeben, müssen wir uns noch von der im Hilfssatz geforderten **Eindeutigkeit** der Lösung überzeugen. Dazu studieren wir die Lösung der homogenen Differentialgleichung (8.3), die sich als

$$y_{\mathbf{q}}(\tau) = \sum_{\mathbf{q}'} \left(e^{-\tau \hat{h}} \right)_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} y_{\mathbf{q}'}(0)$$

schreiben lässt. Die homogene Randwertaufgabe verlangt also anhand von (8.4), dass

$$\sum_{\mathbf{q}'} \left(e^{-\beta \hat{h}} \right)_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} y_{\mathbf{q}'}(0) = (-s) y_{\mathbf{q}}(0).$$

Dieses lineare Gleichungssystem ist aber genau dann nichttrivial lösbar, wenn -sEigenwert der Matrix $e^{-\beta \hat{h}}$ ist. Da \hat{h} hermitesch und folglich $e^{-\beta \hat{h}}$ positiv ist, ergibt sich für Fermionen (s = +1) sofort: -s = -1 kann nicht Eigenwert sein. Damit für Bosonen (s = -1) die Matrix $e^{-\beta \hat{h}}$ den Eigenwert -2 = +1 besitzt, müsste die Hamiltonmatrix \hat{h} den Eigenwert 0 haben. Letzteres haben wir jedoch schon früher im Zusammenhang mit Gleichung (7.12) ausgeschlossen, damit die Besetzung des zugehörigen Eigenzustandes endlich bleibt. Die eindeutige Lösbarkeit der Randwertaufgabe (8.3,4) ist somit in allen Fällen gewährleistet und wir dürfen aus (8.6,7) schließen:

$$\mathcal{G}_{n}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1},\ldots,\mathbf{q}_{n}\tau_{n};\mathbf{q}_{1}'\tau_{1}',\ldots,\mathbf{q}_{n}'\tau_{n}') = \sum_{\nu=1}^{n} (-s)^{n+\nu-2} \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1};\mathbf{q}_{\nu}'\tau_{\nu}') \\ \times \mathcal{G}_{n-1}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2},\ldots;\ldots,\mathbf{q}_{\nu-1}'\tau_{\nu-1}',\mathbf{q}_{\nu+1}'\tau_{\nu+1}',\ldots).$$
(8.10)

Der *n*-Teilchenpropagator wird also auf (n-1)-Teilchenpropagatoren zurückgeführt, indem jeweils ein Variablenpaar $(\mathbf{q}_1 \tau_1, \mathbf{q}'_{\nu} \tau'_{\nu})$ herausgezogen wird. Der Exponent des Vorzeichenfaktors $n + \nu - 2$ gibt dabei die Zahl der Transpositionen an, die zur Zusammenführung des Variablenpaars, der sogenannten **Kontrak**tion, benötigt werden. Durch Induktion erhält man nun leicht eine vollständige Reduktion auf Einteilchenpropagatoren. Sie lautet

$$\mathcal{G}_n(\mathbf{q}_1\tau_1,\ldots;\ldots,\mathbf{q}'_n\tau'_n) = \sum_{\mathcal{P}} (-s)^{\mu_{\mathcal{P}}} \prod_{\nu=1}^n \mathcal{G}_1(\mathbf{q}_{\nu}\tau_{\nu};\mathbf{q}'_{\nu_{\mathcal{P}}}\tau'_{\nu_{\mathcal{P}}}).$$
(8.11)

Dies ist das Wicksche Theorem. Die Summation erstreckt sich über alle Permutationen der Zahlen 1 bis $n, \mathcal{P} : \nu \to \nu_{\mathcal{P}}$. Der Exponent $\mu_{\mathcal{P}}$ gibt den Charakter der Permutation an, die von der ursprünglichen Reihenfolge $\mathbf{q}_1 \tau_1, \ldots; \ldots, \mathbf{q}'_n \tau'_n$ der Argumente auf die kontrahierte Reihenfolge führt. Man zeigt leicht, dass $\mu_{\mathcal{P}} = \frac{n(n-1)}{2} + \chi_{\mathcal{P}}$, wo $\chi_{\mathcal{P}}$ der Charakter der Permutation $\mathcal{P} : \nu \to \nu_{\mathcal{P}}$ ist.

Übung 8.2: Man überzeuge sich, dass das Wicksche Theorem für Zweiteilchenpropagatoren impliziert:

$$\mathcal{G}_{2}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1},\mathbf{q}_{2}\tau_{2};\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime},\mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}) = \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1};\mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime})\mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2};\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}) - s\mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1};\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime})\mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2};\mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}).^{\Box}$$

Indem man alle Zeiten in einer geeigneten Reihenfolge, die die gewünschte Ordnung der Erzeuger und Vernichter festlegt, gegen null gehen lässt, erhält man Mittelwerte von Operatoren, für die das Wicksche Theorem sinngemäß direkt angewendet werden kann. Wir demonstrieren das an dem Beispiel $\langle n_{\mathbf{q}}^2 \rangle$, bei dem wir für Fermionen wegen $n_{\mathbf{q}}^2 = n_{\mathbf{q}}$ das Ergebnis kennen:

$$\langle n_{\mathbf{q}}^2 \rangle = \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} \rangle = \langle n_{\mathbf{q}} \rangle \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + \langle n_{\mathbf{q}} \rangle \langle a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle = \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + (1-s) \langle n_{\mathbf{q}} \rangle^2.$$

Für Fermionen ist das tatsächlich das erwartete Resultat $\langle n_{\mathbf{q}}^2 \rangle = \langle n_{\mathbf{q}} \rangle$, für Bosonen finden wir $\langle n_{\mathbf{q}}^2 \rangle = \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + 2 \langle n_{\mathbf{q}} \rangle^2$.

Übung 8.3: Man bestätige das letzte Ergebnis durch direkte Berechnung der großkanonischen Mittelwerte für den Spezialfall eines \mathbf{q} -diagonalen Hamiltonoperators. Zeigt diese Rechnung die Nützlichkeit des Wickschen Theorems?

Der obige **Beweis des Wickschen Theorems** ist durch die Benutzung des Hilfssatzes mathematisch unnötig verbrämt. Für diagonale Hamiltonoperatoren kann man einen direkteren Beweis führen, der sich anschließend angesichts der Multilinearität von (8.11) in allen Erzeugern und Vernichtern durch eine Basistransformation auf den allgemeinen Fall erweitern lässt. Für **p**-diagonale Hamiltonoperatoren (7.6) gilt $e^{-\beta H} a_{\mathbf{p}} = e^{\beta \epsilon_{\mathbf{p}}} a_{\mathbf{p}} e^{-\beta H} a_{\mathbf{p}}$ und man kann mittels der **Methode der zyklischen Vertauschung unter der Spur** das folgende Resultat erzielen:

$$s \langle n_{\mathbf{p}} \rangle = 1 - \frac{1}{Z} \operatorname{Sp}(e^{-\beta H} a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{\dagger}) = 1 - \frac{e^{\beta \epsilon_{\mathbf{p}}}}{Z} \operatorname{Sp}(a_{\mathbf{p}} e^{-\beta H} a_{\mathbf{p}}^{\dagger})$$
$$= 1 - \frac{e^{\beta \epsilon_{\mathbf{p}}}}{Z} \operatorname{Sp}(e^{-\beta H} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}}) = 1 - e^{\beta \epsilon_{\mathbf{p}}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle,$$

d.h. die wohlbekannte Beziehung $\langle n_{\mathbf{p}} \rangle = (e^{\beta \epsilon_{\mathbf{p}}} + s)^{-1}$. Indem man diese Methode auf den *n*-Teilchenpropagator \mathcal{G}_n anwendet, erhält man schnell die Gleichung (8.10).

Übung 8.4: Man führe diese Herleitung von (8.10) explizit durch.

Das Wicksche Theorem (8.11) besagt in Worten, dass der n-Teilchenpropagator für nichtkorrelierte Systeme gleich einer Determinante (für Fermionen) bzw. einer Permanente (für Bosonen) aus 1-Teilchenpropagatoren ist. Dies impliziert, dass die Bewegung von n dem System zugefügten Teilchen in eine nicht dynamisch korrelierte Bewegung der einzelnen Teilchen zerfällt. Jeder einzelne Summand in (8.11) würde eine völlig unkorrelierte Bewegung der einzelnen Teilchen zerfällt. Jeder einzelne beschreiben. Die Summe über die Permutationen rührt daher, dass es sich um identische Teilchen handelt, und ist für die Anwesenheit der (trivialen) statistischen Korrelationen verantwortlich.

9. Molekularfeldnäherungen

Molekularfeldnäherungen, die auch Näherungen des effektiven (selbstkonsistenten) Feldes genannt werden, sind wichtige genäherte Beschreibungen des Verhaltens wechselwirkender Systeme. Für ihre Formulierung im Falle quantenmechanischer Vielteilchensysteme erweist sich das Wicksche Theorem als besonders nützlich.

Wir wählen als Ausgangspunkt für die Einführung der Molekularfeldnäherung das **Minimalprinzip für die freie Energie**. Für die freie Energie eines Systems mit dem Hamiltonoperator H kennen wir die Formel

$$F_H = -\frac{1}{\beta} \ln \operatorname{Sp} e^{-\beta H} = \operatorname{Sp} \left[\rho_H (H + \frac{1}{\beta} \ln \rho_H) \right]$$
(9.1)

mit der kanonischen Dichtematrix

$$\rho_H = \frac{e^{-\beta H}}{\operatorname{Sp} e^{-\beta H}}.\tag{9.2}$$

Es sei daran erinnert, dass wir mit kanonisch in Wirklichkeit immer großkanonisch meinen, der Hamiltonoperator als $H - \mu N$ zu verstehen ist und die Spur sich über den gesamten Fockraum erstreckt.

Man kann nun bei festem H und β das Funktional

$$F[\rho] = \operatorname{Sp}\left[\rho(H + \frac{1}{\beta}\ln\rho)\right]$$
(9.3)

auf der Menge aller Dichteoperatoren betrachten. Dann hat man in der statistischen Physik gelernt, dass der einfache Minimalsatz gilt:

${f F}[ho]$ nimmt sein absolutes Minimum genau bei $ho= ho_{f H}$ an.

Der Beweis dieses Minimalsatzes gelingt analog zum Beweis des Maximalprinzips für die Entropie. Man benutzt die für je zwei Dichteoperatoren ρ und ρ' gültige Ungleichung

$$\operatorname{Sp}\rho\,\ln\,\rho \ge \operatorname{Sp}\rho\,\ln\,\rho',\tag{9.4}$$

wobei das Gleichheitszeichen genau dann gilt, wenn $\rho = \rho'$.

Man findet dann mit $\rho' = \rho_H$

$$F[\rho] \ge \operatorname{Sp}\left[\rho(H + \frac{1}{\beta} \ln \rho_H)\right] = -\frac{1}{\beta} \ln \operatorname{Sp} e^{-\beta H} = F[\rho_H].$$

Die exakte Berechnung der freien Energie wechselwirkender Vielteilchensysteme, d.h. die Berechnung des Funktionals $F[\rho]$ für $\rho = \rho_H$, ist im allgemeinen nicht möglich. Sie ist jedoch möglich für alle korrelationsfreien Dichtematrizen. Damit meinen wir Dichtematrizen ρ_{H_x} , die nach Gleichung (9.2) mit einem hermiteschen Einteilchenoperator

$$H_x = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} x_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \qquad (x_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^* = x_{\mathbf{q}',\mathbf{q}})$$
(9.5)

gebildet sind. Die Molekularfeldnäherung beruht nun auf der Idee, aus der Menge aller korrelationsfreien Dichtematrizen diejenige auszuwählen, die das Funktional der freien Energie (9.3) minimiert. Anstelle der kanonischen Dichtematrix wählt man also die beste korrelationsfreie Dichtematrix. Dadurch wird ein optimaler Einteilchenhamiltonoperator H_x bestimmt, der anstelle von H das System genähert beschreibt.

Es sei gleich der Hinweis angefügt, dass keine allgemeingültige Aussage über die Güte der Molekularfeldnäherung möglich ist. Das Kriterium der Minimierung der freien Energie erlaubt keinerlei Rückschlüsse auf die Qualität, mit der der Ersatz–Hamiltonoperator H_x andere Eigenschaften des Systems als die freie Energie bestmöglich approximiert.

Wir betrachten nun den konkreten Fall eines Systems von wechselwirkenden Fermionen oder Bosonen mit dem Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_1',\mathbf{q}_2'} v_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2;\mathbf{q}_1',\mathbf{q}_2'} a_{\mathbf{q}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_1'}^{\dagger}.$$
 (9.6)

Für die Matrixelemente v des Zweikörperpotentials können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Symmetrieeigenschaften

$$v_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2;\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_2'} = -s \cdot v_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2;\mathbf{q}_2'\mathbf{q}_1'} = -s \cdot v_{\mathbf{q}_2\mathbf{q}_1;\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_2'}$$
(9.7)

annehmen.

Übung 9.1: Warum kann man immer $v_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'_1\mathbf{q}'_2}$ durch den symmetrischen Mittelwert $\frac{1}{4}(v_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'_1\mathbf{q}'_2} - s \cdot v_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'_2\mathbf{q}'_1} - s \cdot v_{\mathbf{q}_2\mathbf{q}_1;\mathbf{q}'_1\mathbf{q}'_2} + v_{\mathbf{q}_2\mathbf{q}_1;\mathbf{q}'_2\mathbf{q}'_1})$ ersetzen? \Box

Das Funktional (9.3) für die Dichtematrix $\rho_x = e^{-\beta H_x}/\text{Sp}\,e^{-\beta H_x}$ lässt sich mittels des Wickschen Theorems auf bilineare Erwartungswerte zurückführen und wir erhalten

$$F[\rho_{x}] = F_{H_{x}} + \langle H - H_{x} \rangle_{x} = F_{H_{x}} + \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} (h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} - x_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}) \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x} + \sum_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{2},\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}'} v_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{2};\mathbf{q}_{1}'\mathbf{q}_{2}'} \langle a_{\mathbf{q}_{1}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{1}'} \rangle_{x} \langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}'} \rangle_{x}.$$
(9.8)

Hier wurden die Symmetrieeigenschaften (9.7) benutzt, um die beiden Terme in $\langle a_{\mathbf{q}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'} a_{\mathbf{q}_1'} \rangle_x = \langle a_{\mathbf{q}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_1'} \rangle_x \langle a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'} \rangle_x - s \langle a_{\mathbf{q}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'} \rangle_x \langle a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_1'} \rangle_x$ zusammenzufassen.

Wir suchen nun die relativen Minima von $F[\rho_x]$ durch Variation der Variablen $x_{{\bf q},{\bf q}'}$ auf. Wegen

$$\frac{\partial F_{H_x}}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} = \left\langle \frac{\partial H_x}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} \right\rangle_x = \langle a_{\mathbf{l}}^{\dagger} a_{\mathbf{l}'} \rangle_x$$

erhalten wir schließlich die notwendigen Bedingungen

$$\frac{\partial F[\rho_x]}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \left[h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} - x_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + 2\sum_{\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_2'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'\mathbf{q}_2'} \langle a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'} \rangle_x \right] \frac{\partial \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_x}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} = 0.$$
(9.9)

Diese Bedingungen werden offensichtlich durch das Gleichungssystem

$$x_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} = h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + 2\sum_{\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_2'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'\mathbf{q}_2'} \langle a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'} \rangle_x$$
(9.10)

gelöst. Wir wollen zeigen, dass (9.10) nicht nur hinreichend für die Gültigkeit von (9.9) ist, sondern notwendig aus (9.9) folgt.

Dazu gehen wir zu einer kompakten Notation über, indem wir die Indizes $\mathbf{qq'}$ als Matrixindizes auffassen. Wir nennen die der eckigen Klammer in (9.9) entsprechende Matrix \hat{X} und die Matrizen aus den partiellen Ableitungen $\hat{A}(\mathbf{ll'})$. Damit lauten die Bedingungen (9.9) knapp Sp $(\hat{X} \cdot \hat{A}(\mathbf{ll'})) = 0$ für alle $\mathbf{ll'}$. Um daraus zu schließen, dass $\hat{X} = 0$ – dies ist äquivalent zu (9.10) – muss man wissen, dass die Matrizen $\hat{A}(\mathbf{ll'})$ eine Basis im linearen Raum der Matrizen bilden. Wir rechnen dazu die Matrixelemente aus (siehe (6.10)):

$$\frac{\partial \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x}}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} = -\int_{0}^{\beta} d\tau \left(\langle a_{\mathbf{l}\tau}^{\dagger} a_{\mathbf{l}'\tau} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x} - \langle a_{\mathbf{l}}^{\dagger} a_{\mathbf{l}'} \rangle_{x} \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x} \right)
= -\int_{0}^{\beta} d\tau \langle a_{\mathbf{l}'\tau} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle_{x} \langle a_{\mathbf{l}\tau}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x}.$$
(9.11)

Nun denken wir uns eine Basistransformation (7.4) durchgeführt, die den Ersatz-Hamiltonoperator H_x diagonalisiert. Für diagonales H_x können wir (9.11) weiter auswerten und erhalten (siehe (7.11,12))

$$\frac{\partial \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x}}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} = -\delta_{\mathbf{l}',\mathbf{q}} \cdot \delta_{\mathbf{l},\mathbf{q}'} \cdot \int_{0}^{\beta} d\tau e^{\tau(\epsilon_{\mathbf{l}}-\epsilon_{\mathbf{l}'})} \begin{cases} f(\epsilon_{\mathbf{l}})(1-f(\epsilon_{\mathbf{l}'})) & (\text{Fermionen}) \\ g(\epsilon_{\mathbf{l}})(1+g(\epsilon_{\mathbf{l}'})) & (\text{Bosonen}) \end{cases} .$$
(9.12)

Die Matrizen $\hat{A}(\mathbf{ll'})$ haben also hier genau ein nicht verschwindendes Matrixelement bei $\mathbf{qq'} = \mathbf{ll'}$ und bilden daher in ihrer Gesamtheit ein vollständiges Basissystem. Diese Vollständigkeitseigenschaft bleibt aber erhalten, wenn man die obige (unitäre) Basistransformation rückgängig macht. Daher ist (9.10) notwendig für die Erfüllung von (9.9). Das Gleichungssystem (9.10) hat eine einfache anschauliche Bedeutung. Offenbar findet man den besten Ersatz-Hamiltonoperator H_x , indem man die Wechselwirkung in H durch ein **effektives Feld** ersetzt. Dieses Feld hängt selbst allerdings über die Mittelwerte $\langle a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'_2} \rangle_x$ von H_x ab und ist aus dem Gleichungssystem (9.10) **selbstkonsistent**, d.h. so zu bestimmen, dass die mit den $x_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ der linken Seite berechnete rechte Seite das Gleichungssystem erfüllt.

Übung 9.2: Man bestimme die Lösung der Hartree–Fock–Gleichung (9.10) für das homogene Elektronengas und die zugehörige Grundzustandsenergie.

Hinweis: Man lese den das Kapitel 16 mindestens bis zur Gleichung (16.8). Gesucht wird der optimale Ersatz-Hamiltonoperator H_x , der die volle Symmetrie des Modells des inhomogenen Elektronengases hat, Translationsinvarianz und Rotationsinvarianz im Spinraum. Damit können H_x dieselben Quantenzahlen wie für H_0 benutzt werden oder mit anderen Worten, $H_x = \sum_{\mathbf{q},\mu} x_{\mathbf{q}} a^{\dagger}_{\mathbf{q},\mu} a_{\mathbf{q},\mu}$ hat die gleiche Diagonalbasis wie H_0 und man hat nur die Eigenwerte

$$x_{\mathbf{q}} = \epsilon_{\mathbf{q}} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}}^{(\mathbf{k}\neq0)} v_{\mathbf{k}} f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) = \epsilon_{\mathbf{q}} - \int_{k < k_{\mathrm{F}}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$$
(9.*)

von H_x zu bestimmen. Hier hat wegen der Ladungsneutralität nur der Austauschterm beigetragen. Bei der Grundzustandsenergie darf man die Wechselwirkungsbeiträge zu $x_{\mathbf{q}}$ nur halb zählen (siehe die Diskussion nach (9.13)) und erhält (hier hat man das chemische Potential in $x_{\mathbf{q}}$ und $\epsilon_{\mathbf{q}}$ wegzulassen, um E und nicht $E - \mu N$ zu berechnen)

$$E = \sum_{\mathbf{q},\mu} \frac{\epsilon_{\mathbf{q}} + x_{\mathbf{q}}}{2} = 2V \int_{q < k_{\rm F}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \epsilon_{\mathbf{q}} - V \int_{q < k_{\rm F}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \int_{k < k_{\rm F}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \cdot \Box \quad (9.**)$$

Die Selbstkonsistenzgleichungen (9.10) bilden ein nichtlineares Gleichungssystem, das bei numerischer Lösung im allgemeinen iterativ gelöst wird.

Die **selbstkonsistente (sk) freie Energie** ergibt sich durch Einsetzen von (9.10) in (9.8) zu

$$\begin{split} F_{\rm sk} &\equiv F[\rho_{x^{\rm sk}}] = F_{H_{x^{\rm sk}}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} (h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - x^{\rm sk}_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}) \langle a^{\dagger}_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x^{\rm sk}} \\ &= F_{H_{x^{\rm sk}}} - \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2, \mathbf{q}'_1, \mathbf{q}'_2} v_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2; \mathbf{q}'_1 \mathbf{q}'_2} \langle a^{\dagger}_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}'_1} \rangle_{x^{\rm sk}} \langle a^{\dagger}_{\mathbf{q}_2} a_{\mathbf{q}'_2} \rangle_{x^{\rm sk}} \\ &= \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \Big[h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{q}_2, \mathbf{q}'_2} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2; \mathbf{q}'\mathbf{q}'_2} \langle a^{\dagger}_{\mathbf{q}_2} a_{\mathbf{q}'_2} \rangle_{x^{\rm sk}} \Big] \langle a^{\dagger}_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x^{\rm sk}} \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \operatorname{Sp}(\rho_{x^{\rm sk}} \ln \rho_{x^{\rm sk}}). \end{split}$$
(9.13)

Beachtenswert ist hier, dass die freie Energie der Molekularfeldnäherung nicht einfach gleich der zum Ersatz–Hamiltonoperator $H_{x^{\rm sk}}$ gehörigen freien Energie, dem jeweils ersten Term in der ersten und zweiten Zeile von (9.13), ist. In der zweiten Zeile wird angesichts der Subtraktion des Wechselwirkungsterms deutlich, dass der Wechselwirkungsanteil der Energie in der freien Energie von $H_{x^{\rm sk}}$ doppelt gezählt wird. Diese **Doppelzählung** resultiert daraus, dass jedes Teilchen das effektive Feld aller anderen Teilchen sieht. Die letzte Darstellung in (9.13) zeigt explizit in der dritten Zeile die mittlere Energie mit einfacher Zählung des Wechselwirkungsanteils und in der vierten Zeile den Entropieterm in der freien Energie zu $H_{x^{\rm sk}}$.

Dass die Entropie der selbstkonsistenten freien Energie $S_{\rm sk}=-\partial F_{\rm sk}/\partial T$ tatsächlich gleich der Entropie des selbstkonsistenten Ersatz–Hamiltonoperators $H_{x^{\rm sk}}$ ist, erscheint zunächst nicht selbstverständlich. Denn wenn wir $S_{\rm sk}$ berechnen wollen, müssen wir unter anderem auch eine mögliche Abhängigkeit des effektiven Feldes $x_{{\bf qq'}}$ von der Temperatur in Betracht ziehen. Wir gehen bei der Rechnung von der Gleichung $F[\rho_{x^{\rm sk}}] = \left[F_{H_x} + \langle H - H_x \rangle_x\right] \big|_{x=x^{\rm sk}}$ aus (siehe (9.8)). Als erstes halten wir fest, dass

$$\frac{\partial F_{H_x}}{\partial T}\Big|_{x\text{fest}} = -S_{H_x} = k_B \text{Sp}(\rho_x \ln \rho_x).$$

Im zweiten Schritt berechnen wir

$$\frac{\partial F[\rho_x]}{\partial T}\big|_{x\text{fest}} = -S_{H_x} + \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \Big[h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} - x_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + 2\sum_{\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_2'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'\mathbf{q}_2'} \langle a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'} \rangle_x \Big] \frac{\partial \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_x}{\partial T}.$$

Hier verschwindet aber der zweite Summand angesichts der Selbstkonsistenz (9.10), wenn man $x = x^{sk}$ setzt. Im dritten Schritt erhalten wir schließlich

$$\frac{\partial F_{\rm sk}}{\partial T} = \frac{\partial F[\rho_x]}{\partial T} \big|_{x=x^{\rm sk}} + \sum_{\mathbf{ll}'} \frac{\partial F[\rho_x]}{\partial x_{\mathbf{ll}'}} \big|_{x=x^{\rm sk}} \cdot \frac{\partial x_{\mathbf{ll}'}^{\rm sk}}{\partial T}.$$

Hier verschwindet der zweite Summand wegen (9.9) und wir erhalten tatsächlich das Resultat

$$S_{\rm sk} \equiv -\frac{\partial F_{\rm sk}}{\partial T} = S_{H_{x^{\rm sk}}} = -k_B {\rm Sp}(\rho_{x^{\rm sk}} \ln \rho_{x^{\rm sk}}).$$
(9.14)

Wir schließen damit aus (9.13), dass die selbstkonsistente innere Energie durch

$$E_{\rm sk} = F_{\rm sk} + TS_{\rm sk} = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \left[h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{q}_2,\mathbf{q}'_2} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'\mathbf{q}'_2} \langle a^{\dagger}_{\mathbf{q}_2} a_{\mathbf{q}'_2} \rangle_{x^{\rm sk}} \right] \langle a^{\dagger}_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x^{\rm sk}} \qquad (9.15)$$

gegeben ist.

Übung 9.3: Man zeige analog, dass die mittlere Teilchenzahl durch

$$N_{\rm sk} \equiv -\frac{\partial F_{\rm sk}}{\partial \mu} = \langle N \rangle_{x^{\rm sk}} \equiv \sum_{\mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} \rangle_{x^{\rm sk}}$$
(9.16)

gegeben ist. Das chemische Potential μ ist in $h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}^0 - \mu \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ enthalten.

Die im effektiven Feld auftretenden Mittelwerte $\langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_x$ können mit Hilfe des zugehörigen Einteilchenpropagators berechnet werden. Entsprechend (7.2) gehorcht dieser der Bewegungsgleichung

$$zG_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}(z) = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{q}''} \left[h_{\mathbf{q},\mathbf{q}''} + 2\sum_{\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_2'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}''\mathbf{q}_2'} \langle a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'} \rangle_{x^{\mathrm{sk}}} \right] G_{\mathbf{q}''\mathbf{q}'}(z).$$
(9.17)

Da die Mittelwerte $\langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}'}\rangle_x$ lineare Ausdrücke in $G_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}(z)$ sind, kann (9.17) als quadratische Gleichung für den Propagator aufgefasst werden. Die Gleichungen (9.10) für x und (9.17) für $G_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}(z)$ sind äquivalent in dem Sinne, dass jeder Lösung der einen eine Lösung der anderen entspricht. Die Lösung von (9.17) ist jedoch wertvoller, weil sich x aus G durch Quadraturen ergibt, G aus x aber nicht.

Durch eine einfache Manipulation, die man **Entkopplung von Bewegungs**gleichungen nennt, kann man die selbstkonsistente Bewegungsgleichung (9.17) auch direkt aus der exakten Bewegungsgleichung gewinnen. Wegen $[a_{\mathbf{q}}, H] = \sum_{\mathbf{q}'} h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}a_{\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{q}'_1\mathbf{q}_2\mathbf{q}'_2} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'_1\mathbf{q}'_2} a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'_2} a_{\mathbf{q}'_1}^{\dagger} - hier wurde wieder (9.7) benutzt – lautet die exakte Bewegungsgleichung$

$$zG_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}(z) = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{q}''} h_{\mathbf{q},\mathbf{q}''}G_{\mathbf{q}''\mathbf{q}'}(z) + \sum_{\mathbf{q}''\mathbf{q}_2\mathbf{q}'_2} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}''\mathbf{q}'_2}G_{a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger}a_{\mathbf{q}'}a_{\mathbf{q}'}a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}a_{\mathbf{q}'}}(z). \quad (9.18)$$

Das Auftreten der höheren Greenfunktion auf der rechten Seite zeigt an, dass die Bewegung des hinzugefügten Teilchens im Zustand \mathbf{q}' aufgrund der Wechselwirkung v dynamisch an die Bewegung der anderen Teilchen gekoppelt ist. Im Geiste der Molekularfeldnäherung liegt es nun nahe, die Korrelationen in dieser Greenfunktion durch **Entkoppeln im Sinne des Wickschen Theorems** zu zerschlagen. Man nimmt dazu die Ersetzung

$$G_{a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_{2}^{\prime}}a_{\mathbf{q}_{2}^{\prime}}a_{\mathbf{q}_{2}^{\prime}}}^{\dagger}(z) \longrightarrow \langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_{2}^{\prime}}\rangle G_{\mathbf{q}^{\prime\prime}\mathbf{q}^{\prime}}(z) - s\langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}^{\prime\prime}}\rangle G_{\mathbf{q}_{2}^{\prime}\mathbf{q}^{\prime}}(z)$$

$$(9.19)$$

vor, die bei abermaliger Beachtung der Symmetrie (9.7) zur Bewegungsgleichung (9.17) führt, wenn man die Mittelwerte im Geiste der Selbstkonsistenz mit $G_{\mathbf{qq}'}(z)$ selbst berechnet. Die Ersetzung (9.19) ist die gängige Vorschrift zur Entkopplung der Bewegungsgleichung mit dem Ziel einer Schließung des Gleichungssystems.

Die Molekularfeldnäherung heißt im Falle von Fermionen auch Hartree–Fock– Näherung. Sie wurde zunächst von Hartree konzipiert, der die Wirkung aller anderen Teilchen durch ein mittleres von ihnen erzeugtes Feld ersetzte. Fock wies darauf hin, dass die Ununterscheidbarkeit der Teilchen zu einem Zusatzfeld, dem Austauschfeld, führt. Wir haben hier das Hartree– und das Fockfeld durch die Symmetrisierung (9.7) des Wechselwirkungspotentials formal vereinigt. Bei konkreten Rechnungen treten beide Felder meist explizit nebeneinander auf.

Die Molekularfeldnäherung wird oft in einer anderen Weise als oben formuliert, die wir abschließend darlegen wollen. Man strebt dabei nicht die Bestimmung des selbstkonsistenten Feldes x (9.10) oder des selbstkonsistenten Propagators G(z) (9.17) in der vorgegebenen **q**-Basis an, sondern die Berechnung der Eigenzustände und Eigenwerte des selbstkonsistenten Feldes, d.h. man sucht diejenige Basis, in der das selbstkonsistente Feld x diagonal ist. Dies hat den Vorteil, dass dann die Mittelwerte, die für das selbstkonsistente Feld gebraucht werden, leicht explizit berechnet werden können. Man hat dazu eine unitäre Transformation \hat{u} (siehe (2.20)) zu finden, die $\hat{x}' = \hat{u}^{\dagger} \hat{x} \hat{u}$ diagonal macht, d.h. es soll gelten

$$\hat{u} \cdot \hat{x}' = \hat{x} \cdot \hat{u}, \qquad x'_{\mathbf{pp}'} = \epsilon_{\mathbf{p}} \cdot \delta_{\mathbf{pp}'}.$$
(9.20)

Diese Transformation diagonalisiert nach (7.7) auch die Greenfunktion und es gilt

$$\hat{G}'(z) = \hat{u}^{\dagger} \hat{G}(z) \hat{u}, \qquad G_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(z) = \frac{\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}}{z - \epsilon_{\mathbf{p}}}.$$
(9.21)

Die Mittelwerte berechnen sich dann zu

$$\langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_{2}'}\rangle_{x} = \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} u_{\mathbf{q}_{2}\mathbf{p}}^{*} u_{\mathbf{q}_{2}'\mathbf{p}'} \langle b_{\mathbf{p}}^{\dagger}b_{\mathbf{p}'}\rangle_{x} = \sum_{\mathbf{p}'} u_{\mathbf{q}_{2}\mathbf{p}'}^{*} u_{\mathbf{q}_{2}'\mathbf{p}'} \langle n_{\mathbf{p}'}\rangle_{x}$$
(9.22)

 mit

$$\langle n_{\mathbf{p}'} \rangle_x = \begin{cases} f(\epsilon_{\mathbf{p}'}) & (\text{Fermionen}) \\ g(\epsilon_{\mathbf{p}'}) & (\text{Bosonen}). \end{cases}$$
(9.23)

Indem wir nun (9.10) in (9.20) einsetzen, erhalten wir für die Matrixelemente der unitaüren Transformation die Selbstkonsistenzgleichungen

$$u_{\mathbf{q}\mathbf{p}} \cdot \epsilon_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{q}'} \left[h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + 2\sum_{\mathbf{q}_{2}\mathbf{q}_{2}'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_{2};\mathbf{q}'\mathbf{q}_{2}'} \sum_{\mathbf{p}'} u_{\mathbf{q}_{2}\mathbf{p}'}^{*} \langle n_{\mathbf{p}'} \rangle_{x} u_{\mathbf{q}_{2}'\mathbf{p}'} \right] u_{\mathbf{q}'\mathbf{p}}.$$
(9.24)

Die Matrixelemente $u_{\mathbf{qp}} = \langle \mathbf{q} | \mathbf{p} \rangle$ sind nach (2.19) die Wellenfunktion der Eigenfunktion zum Eigenwert $\epsilon_{\mathbf{p}}$ in der \mathbf{q} -Darstellung. Das Gleichungssystem (9.24) ist ein nichtlineares Gleichungssystem zur Bestimmung dieser Wellenfunktionen.

10. Systeme mit allgemeinstem quadratischen Hamiltonoperator

Man könnte annehmen, dass die korrelationsfreien Systeme mit bilinearen Hamiltonoperatoren (7.1) die einzigen sind, die die in den Kapiteln 7 bis 9 diskutierten einfachen Eigenschaften besitzen. Tatsächlich zeigen alle quadratischen Hamiltonoperatoren, auch solche, die **Paarerzeugungs– und Paarvernich**tungsprozesse enthalten, dieselbe Einfachheit. Solche Hamiltonoperatoren spielen eine wichtige Rolle in der Theorie der Supraleitung (für Fermionen) und des Magnetismus (für Bosonen).

Der allgemeinste in den Feldoperatoren quadratische Hamiltonoperator für eine Teilchensorte kann in der Form

$$H = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \left[h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'}^{\dagger} + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}^{*} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'} \right]$$
(10.1)

geschrieben werden. Hierbei muss h hermitesch sein – mit dem Stern * bezeichnen wir die komplexe Konjugation,

$$h^*_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = h_{\mathbf{q}'\mathbf{q}},\tag{10.2}$$

und $\Delta_{\bf qq'}$ ist beliebig. Man kann jedoch analog zu (9.7) ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Symmetrieeigenschaft

$$\Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = -s \cdot \Delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} \tag{10.3}$$

annehmen. Eine zu (7.2) analoge Bewegungsgleichung für Einteilchenpropagatoren erhält man, indem man Vernichter und Erzeuger mittels einer zusätzlichen Quantenzahl $\sigma = \pm 1$ parametrisiert. Damit erzeugt man eine Notation, in der die Zahl der Quantenzustände verdoppelt ist. Für Fermionen nennt man die sich daraus ergebende Schreibweise **Nambu–Formalismus**. Wir führen dementsprechend die Notation

$$a_{\mathbf{q}\sigma} = \begin{cases} a_{\mathbf{q}} & (\sigma = +1) \\ a_{\mathbf{q}}^{\dagger} & (\sigma = -1) \end{cases}$$
(10.4)

ein und definieren damit die Propagatoren

$$G_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{q}'\sigma'}(z) = G_{a_{\mathbf{q}\sigma},(a_{\mathbf{q}'\sigma'})^{\dagger}}(z).$$
(10.5)

Nach Berechnung der Kommutatoren

$$\begin{split} & [a_{\mathbf{q}}, H] = \sum_{\mathbf{q}'} [h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}a_{\mathbf{q}'} + \Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] \\ & [a_{\mathbf{q}}^{\dagger}, H] = \sum_{\mathbf{q}'} [s\Delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}^{*}a_{\mathbf{q}'} - h_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] \end{split}$$
ergibt sich unter Verwendung der Symmetrien (10.2,3) mit der um die σ -Quantenzahl erweiterten Matrix

$$\hat{n}_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \begin{pmatrix} h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} & \Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \\ -\Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}^* & -h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}^* \end{pmatrix}$$
(10.6)

 $(\hat{n}_{\bf qq'}|_{\sigma\sigma'}=n_{{\bf q}\sigma,{\bf q}'\sigma'})$ das geschlossene zu (7.2) analoge Bewegungsgleichungssystem

$$z G_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{q}'\sigma'}(z) = \sigma^{(1-s)/2} \cdot \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \cdot \delta_{\sigma\sigma'} + \sum_{\mathbf{q}''\sigma''} n_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{q}''\sigma''} G_{\mathbf{q}''\sigma'',\mathbf{q}'\sigma'}(z).$$
(10.7)

Hier ist der Faktor $\sigma^{(1-s)/2}$ gleich 1 für Fermionen und gleich σ für Bosonen. Wir werden im folgenden oft Matrizen im q σ -Raum verwenden, die wir durch ein $\hat{r}_{3} = (\sigma \cdot \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \cdot \delta_{\sigma\sigma'})$ und $\hat{n} = (n_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{q}'\sigma'})$ sowie der Matrix

$$\hat{h} = \tau_3^{(1-s)/2} \,\hat{n} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -s\Delta^* & -sh^* \end{pmatrix}$$
(10.8)

hat das Gleichungssystem (10.7) die zu (7.3) analoge (formale) Lösung

$$\hat{G}(z) = (z\hat{\tau}_3^{(1-s)2} - \hat{h})^{-1} = \begin{cases} (z - \hat{h})^{-1} & (\text{Fermionen}) \\ (z\hat{\tau}_3 - \hat{h})^{-1} & (\text{Bosonen}). \end{cases}$$
(10.9)

Die Matrix \hat{h} ist für Fermionen und Bosonen hermitesch, während die Matrix \hat{n} für Bosonen nicht hermitesch ist.

Übung 10.1: Man vollziehe die Herleitung von (10.9) aus (10.7) nach und überzeuge sich unter Benutzung von (10.2,3) von der Richtigkeit des letzten Satzes. \Box

Die Bedeutung der Matrix \hat{h} wird ersichtlich, wenn man den Hamiltonoperator (10.1) in die Matrixnotation überführt mit dem Ergebnis

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}\sigma\mathbf{q}'\sigma'} \left[a_{\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} h_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{q}'\sigma'} a_{\mathbf{q}'\sigma'} \right] + \frac{s}{2} \operatorname{Sp} h.$$
(10.10)

Die Matrix \hat{h} hat also in $q\sigma$ -Notation die Bedeutung der **Hamiltonmatrix**.

Ubung 10.2: Man rechne das Ergebnis (10.10) nach. Dazu sollte man die Hälfte des ersten Summanden in (10.1) mittels $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}'} = s(\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - a_{\mathbf{q}'}a_{\mathbf{q}}^{\dagger})$ umformen und wieder (10.2,3) benutzen.

Ziel der weiteren Betrachtung soll nun sein, mittels einer kanonischen Transformation die Gleichungen (10.7) und die Operatoren (10.1) bzw. (10.10) zu diagonalisieren. Eine lineare Transformation der Erzeuger und Vernichter nennt man kanonisch, wenn sie die Vertauschungsrelationen

$$\{a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}\}_{s} = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \quad \{a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}'}\}_{s} = \{a_{\mathbf{q}}^{\dagger}, a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}\}_{s} = 0$$
(10.11)

(siehe (2.3)) invariant lässt. Anders als in (2.20) und (7.4) reichen hier nicht einfache unitäre Transformationen, die auf die Erzeuger und Vernichter getrennt wirken, sondern wir müssen Erzeuger mit Vernichtern mischen, um das hier gestellte Diagonalisierungsproblem zu lösen. Derartige kanonische Transformationen nennt man auch **Bogoljubov–Transformationen**. Zur Formulierung ist die oben eingeführte Notation im $q\sigma$ –Raum ideal geeignet. In dieser Notation lauten die Vertauschungsrelationen (10.11)

$$\{a_{\mathbf{q}\sigma}, (a_{\mathbf{q}'\sigma'})^{\dagger}\}_{s} = \sigma^{(1-s)/2} \cdot \delta_{\mathbf{q}\sigma} \delta_{\mathbf{q}'\sigma'}.$$
 (10.12)

Als kanonische Transformationen betrachten wir lineare Transformationen der Form

$$a_{\mathbf{q}\sigma} = \sum_{\mathbf{p}\mu} T_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{p}\mu} b_{\mathbf{p}\mu}, \qquad (10.13)$$

die **invertierbar** sind, sodass wir in Kurznotation

$$a = \hat{T}b, \qquad b = \hat{T}^{-1}a \tag{10.14}$$

schreiben können. Diese Transformation ist genau dann kanonisch, wenn

$$\hat{T}\hat{\tau}_3^{(1-s)/2}\,\hat{T}^{\dagger} = \hat{\tau}_3^{(1-s)/2} \tag{10.15}$$

gilt. Für Fermionen sind daher **unitäre Transformationen** $\hat{T}\hat{T}^{\dagger} = \mathbf{1}$ im $\mathbf{q}\sigma$ -Raum kanonisch. Für Bosonen sind dagegen **symplektische Transformationen** $\hat{T}\hat{\tau}_3\hat{T}^{\dagger} = \hat{\tau}_3$ kanonisch.

Übung 10.3: Man vollziehe die Herleitung der Bedingung (10.15) nach. Sodann leite man für Bosonen die daraus folgenden Beziehungen her,

$$\hat{T}^{-1} = \hat{\tau}_3 \,\hat{T}^{\dagger} \hat{\tau}_3, \ (\hat{\tau}_3 \,\hat{T})^{-1} = \hat{\tau}_3 \,\hat{T}^{\dagger}; \quad (\hat{T}^{\dagger})^{-1} = \hat{\tau}_3 \,\hat{T} \hat{\tau}_3, \ (\hat{\tau}_3 \,\hat{T}^{\dagger})^{-1} = \hat{\tau}_3 \,\hat{T}, \ (10.16)$$

und zeige die Äquivalenz der Beziehungen

$$\hat{T}^{\dagger}\hat{\tau}_{3}\hat{T} = \hat{\tau}_{3} \quad \text{und} \quad \hat{T}\hat{\tau}_{3}\hat{T}^{\dagger} = \hat{\tau}_{3}. \ \Box \tag{10.17}$$

Für die weitere Behandlung des Diagonalisierungsproblems erweist sich der durch

$$\hat{J}\begin{pmatrix} u\\v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v^*\\u^* \end{pmatrix}$$
(10.18)

definierte antilineare Operator im $q\sigma$ -Raum als sehr nützlich.

Übung 10.4: Man beweise, dass der Operator \hat{J} mit der in (10.6) definierten Matrix \hat{n} antivertauscht:

$$\{\hat{n},\hat{J}\}_{+} = 0.$$
 \Box (10.19)

Aus (10.19) folgt sofort die interessante Eigenschaft, dass jede Eigenwertgleichung zu \hat{n}

$$\hat{n}\begin{pmatrix} u\\v \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u\\v \end{pmatrix} \tag{10.20}$$

durch Anwendung des Operators \hat{J} in die Eigenwertgleichung

$$\hat{n} \begin{pmatrix} v^* \\ u^* \end{pmatrix} = -\epsilon \begin{pmatrix} v^* \\ u^* \end{pmatrix}$$
(10.21)

übergeht. Die Eigenvektoren der Matrix \hat{n} mit nicht verschwindenden Eigenwerten treten daher paarweise mit Eigenwerten auf, die sich um das Vorzeichen unterscheiden. Man kann dann der kanonischen Transformation, falls eine solche existiert, die Gestalt

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & \hat{J}x \end{pmatrix}$$
(10.22)

geben, wobei U und V **q**-Raummatrizen sind und x die Spalten von \hat{T} mit $\mu = +1$ und $\hat{J}x$ diejenigen mit $\mu = -1$ bezeichnet. (Wir haben hier mögliche Probleme mit verschwindenden Eigenwerten ignoriert.)

Im folgenden werden wir zunächst den fermionischen und dann den bosonischen Fall nacheinander behandeln.

Der fermionische Fall:

Im fermionischen Fall (s = +1) haben wir gelernt, dass die kanonischen Transformationen \hat{T} unitäre Matrizen im $\mathbf{q}\sigma$ -Raum sind. Wir können daher die hermitesche Matrix $\hat{n} = \hat{h}$ unitär auf Diagonalgestalt bringen und diagonalisieren damit sowohl den Hamiltonoperator (10.10) als auch die Bewegungsgleichung (10.7) und deren Lösung (10.9). Dabei haben wir die Freiheit, die Reihenfolge der Eigenzustände mit den Quantenzahlen $\mathbf{p}\mu$ nach Belieben festzulegen. Angesichts der mit dem Operator \hat{J} verbundenen Symmetrie (10.20,21) kann man die nicht verschwindenden Eigenwerte $\epsilon_{\mathbf{p}\mu} \neq 0$ so anordnen, dass $\epsilon_{\mathbf{p}+1} > 0$ und $\epsilon_{\mathbf{p}-1} = -\epsilon_{\mathbf{p}+1} < 0$ ist und erzielt damit die Diagonalgestalt

$$\hat{T}^{\dagger}\hat{n}\,\hat{T} = \hat{T}^{\dagger}\hat{h}\,\hat{T} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0\\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix}$$
(10.23)

mit der diagonalen **p**-Matrix $\epsilon = (\epsilon_{\mathbf{p}} \cdot \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}) > 0.$

Die transformierten Feldoperatoren $b_{\mathbf{p}+1}$ werden mit den neuen Vernichtern $b_{\mathbf{p}}$ und die Feldoperatoren $b_{\mathbf{p}-1}$ mit den neuen Erzeugern $b_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ identifiziert. Damit erhalten wir schließlich für den Hamiltonoperator (10.10) die Diagonalgestalt

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} (b_{\mathbf{p}}^{\dagger} b_{\mathbf{p}} - b_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^{\dagger}) + \frac{1}{2} \operatorname{Sp} h = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^{\dagger} b_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \operatorname{Sp} h - \frac{1}{2} \operatorname{Sp} \epsilon.$$
(10.24)

Mit der oben getroffenen Wahl der Erzeuger und Vernichter ist der Grundzustand von H offensichtlich das Vakuum $|0\rangle_b$ der *b*-Operatoren, das durch die Eigenschaft

$$b_{\mathbf{p}}|0\rangle_{b} = 0$$
 für alle \mathbf{p} (10.25)

charakterisiert ist.

Die diagonaliserten Propagatoren (10.9) ergeben sich zu

$$\left(\hat{T}^{\dagger}\hat{G}(z)\,\hat{T}\right)_{\mathbf{p}\mu,\mathbf{p}'\mu'} = \frac{\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\delta_{\mu\mu'}}{z-\mu\epsilon_{\mathbf{p}}},\tag{10.26}$$

sodass die ursprünglichen Propagatoren durch die Formel

$$G_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{q}'\sigma'}(z) = \sum_{\mathbf{p},\mu} \frac{T_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{p}\mu} T^*_{\mathbf{q}'\sigma',\mathbf{p}\mu}}{z - \mu\epsilon_{\mathbf{p}}}$$
(10.27)

gegeben sind.

Damit ist der fermionische Fall abgeschlossen.

Der bosonische Fall:

Im **bosonischen Fall** steht man vor dem Problem, die Hamiltonmatrix \hat{h} in (10.10) und in (10.9) mittels einer (symplektischen) kanonischen Transformation zu diagonalisieren. Dies gelingt durch geschickte Nutzung der Eigenschaften der beiden Matrizen \hat{h} und \hat{n} . [Siehe dazu z.B.: J.L. van Hemmen, Z. Physik B - Condensed Matter **38**, 271 (1980)]

Unter Beachtung der Antivertauschung

$$\{\hat{\tau}_3, \hat{J}\}_+ = 0 \tag{10.28}$$

der beiden Operatoren $\hat{\tau}_3$ und \hat{J} ergibt sich aus und im Kontrast zu (10.19) die wichtige Eigenschaft

$$\{\hat{h}, \hat{J}\}_{-} = [\hat{h}, \hat{J}] = 0$$
 (10.29)

der Hamiltonmatrix.

Wir wollen nun zunächst einmal annehmen, dass eine kanonische Transformation \hat{T} existiert, die \hat{h} diagonalisiert. Dann gilt wegen (10.29) anders als im fermionischen Fall in (10.23)

$$\hat{D} = \hat{T}^{\dagger} \hat{h} \, \hat{T} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0\\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}, \qquad (10.30)$$

womit der Hamiltonoperator in Diagonalgestalt sich ähnlich wie in (10.24) zu

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} (b_{\mathbf{p}}^{\dagger} b_{\mathbf{p}} + b_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^{\dagger}) - \frac{1}{2} \operatorname{Sp} h = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^{\dagger} b_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \operatorname{Sp} \epsilon - \frac{1}{2} \operatorname{Sp} h \qquad (10.31)$$

ergibt. Angesichts dieses Ergebnisses muss man nunmehr aus Gründen der **Stabilität** die Forderung der Beschränktheit von H nach unten erheben, die nur positive Eigenwerte $\epsilon_{\mathbf{p}}$ und damit nur positiv definite Matrizen ϵ zulässt. Damit ist auch für die Hamiltonmatrix \hat{h} die Einschränkung der **positiven Definitheit** verbunden.

Unter wesentlicher Nutzung dieser wichtigen Einschränkung wollen wir uns jetzt dem Nachweis der Existenz einer kanonischen diagonalisierenden Transformation \hat{T} zuwenden. Indem wir (10.30) unter Benutzung von (10.8,16) in

$$\hat{n}\,\hat{T} = \hat{T}\hat{\tau}_3\,\hat{D}\tag{10.32}$$

umformen, sehen wir, dass \hat{n} Eigenwertpaare $\pm \epsilon$ besitzt und dass die Spaltenvektoren von \hat{T} die Eigenvektoren von \hat{n} sind. Angesichts ihrer Definitheit besitzt die Hamiltonmatrix \hat{h} eine eindeutige positive Wurzel $\hat{h}^{1/2}$. Mithilfe dieser Wurzel formen wir die Eigenwertgleichung (10.32) um in

$$\hat{h}^{1/2}\hat{\tau}_3\,\hat{h}^{1/2}\hat{S} = \hat{S}\,\hat{\tau}_3\,\hat{D}$$
 mit $\hat{S} = \hat{h}^{1/2}\,\hat{T}.$ (10.33)

Dies ist eine Eigenwertgleichung für die hermitesche Matrix $\hat{h}^{1/2}\hat{\tau}_3 \hat{h}^{1/2}$, wobei die Spalten von \hat{S} die Eigenvektoren dieser Matrix sind. Da hermitesche Matrizen immer ein vollständiges System von Eigenvektoren besitzen, erhalten wir hiermit einen Einstieg in die Konstruktion der gesuchten kanonischen Transformation \hat{T} : Mit einer Eigenmatrix \hat{S} von $\hat{h}^{1/2}\hat{\tau}_3 \hat{h}^{1/2}$ bilden wir die Matrix $\hat{T} = \hat{h}^{-1/2}\hat{S}$. Die Spaltenvektoren dieser Matrix \hat{T} sind wegen der Äquivalenz von (10.32) und (10.33) Eigenvektoren von \hat{n} . Da die Normierung der Spalten von \hat{S} beliebig war, können wir allerdings nicht erwarten, dass die so gebildete Matrix \hat{T} auch schon symplektisch ist. Durch eine geeignete Normierung der Spalten der Matrix \hat{T} werden wir sie jedoch im folgenden symplektisch machen. Dazu wird es reichen, die Gültigkeit des ersten Kriteriums in (10.17) nachzuweisen, das sich in den Spaltenvektoren x_i von \hat{T} in Dirac–Schreibweise in der Form

$$\langle x_i \,|\, \hat{\tau}_3 \,x_j \rangle = \operatorname{sign} \epsilon_i \cdot \delta_{ij}. \tag{10.34}$$

darstellt. Anhand der kurzen Rechnung

$$\epsilon_i \langle x_i \, | \, \hat{\tau}_3 \, x_j \rangle = \langle \hat{n} x_i \, | \, \hat{\tau}_3 \, x_j \rangle = \langle \hat{\tau}_3 \, \hat{h} x_i \, | \, \hat{\tau}_3 \, x_j \rangle = \langle x_i \, | \, \hat{\tau}_3 \, \hat{n} \, x_j \rangle = \epsilon_j \langle x_i \, | \, \hat{\tau}_3 \, x_j \rangle \quad (10.35)$$

folgert man das Verschwinden von $\langle x_i | \hat{\tau}_3 x_j \rangle$, falls $\epsilon_i \neq \epsilon_j$. Eine weitere kurze Rechnung ergibt für die *i*-Werte mit positivem Eigenwert $\epsilon_i > 0$

$$\epsilon_i \langle x_i \, | \, \hat{\tau}_3 \, x_i \rangle = \langle \hat{n} \, x_i \, | \, \hat{\tau}_3 \, x_i \rangle = \langle x_i \, | \, h \, x_i \rangle > 0, \tag{10.36}$$

sodass wir durch Skalierung von x_i die gewünschte Normierung $\langle x_i | \hat{\tau}_3 x_i \rangle = 1$ erzielen können. Wegen (10.28) impliziert dies dann auch $\langle \hat{J}x_i | \hat{\tau}_3 \hat{J}x_i \rangle = -1$, womit die Erfüllung von (10.34) vollständig erreicht ist, wenn keine entarteten Eigenwerte vorliegen. Bei entarteten Eigenwerten führt jedoch eine zusätzliche Gram-Schmidt-Orthonormierung des Eigenraums bezüglich des Skalarproduktes $\langle x_i | \hat{\tau}_3 x_j \rangle$ zum Ziel.

Damit ist für positiv definite \hat{h} die Existenz einer (symplektischen) kanonischen Transformation \hat{T} (10.17) zur Diagonalisierung (10.32) der nichthermiteschen Matrix \hat{n} und damit auch die Diagonalisierung (10.31) des Hamiltonoperators gezeigt. Wir fassen die Schritte zur Konstruktion von \hat{T} noch einmal zusammen:

- 1. Man berechne eine Eigenbasis \hat{S} der hermiteschen Matrix $\hat{h}^{1/2} \hat{\tau}_3 \hat{h}^{1/2}$. 2. Man berechne daraus die Matrix $\hat{T} = \hat{h}^{-1/2} \hat{S}$. Damit ist (10.32) schon erfüllt.
- 3. Die Skalarprodukte $\langle x_i | \hat{\tau}_3 x_i \rangle$ sind alle reell und ihr Vorzeichen ist gleich dem Vorzeichen des zugehörigen Eigenwerts ϵ_i . Man skaliere die Spalten x_i von \hat{T} nach der Vorschrift $|\langle x_i | \hat{\tau}_3 x_i \rangle| = 1.$
- 4. Auf die Unterräume entarteter Eigenwerte wende man eine Gram-Schmidt-Orthogonalisierung bezüglich des Skalarproduktes $\langle x_i | \hat{\tau}_3 x_j \rangle$ an. Damit ist in jedem Falle auch (10.17) erfüllt.

Zur Berechnung der Greenfunktion (10.9) finden wir mit (10.14,16,17,30)

$$\hat{T}^{-1}\hat{G}(z)(\hat{T}^{\dagger})^{-1} = \left(\hat{T}^{\dagger}(z\hat{\tau}_{3}-\hat{h})\hat{T}\right)^{-1} = (z\hat{\tau}_{3}-\hat{D})^{-1} = \left(\frac{\mu\cdot\delta_{\mathbf{pp}'}\cdot\delta_{\mu\mu'}}{z-\mu\epsilon_{\mathbf{p}}}\right), \quad (10.37)$$

sodass die Matrixelemente der Greenfunktion sich sehr ähnlich wie (10.26) ergeben als

$$G_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{q}'\sigma'}(z) = \sum_{\mathbf{p},\mu} \frac{\mu T_{\mathbf{q}\sigma,\mathbf{p}\mu} T^*_{\mathbf{q}'\sigma',\mathbf{p}\mu}}{z - \mu\epsilon_{\mathbf{p}}}.$$
(10.38)

Übung 10.5: Als Übungsaufgabe betrachten wir den allereinfachsten Fall eines einzigen Bosons mit dem Hamiltonoperator

$$H = h a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \Delta (a^{\dagger} a^{\dagger} + aa).$$

Zunächst wollen wir die obige allgemeine Vorschrift zur Lösung des bosonischen Falles an diesem Beispiel nachvollziehen. Man leite dazu die folgenden Ergebnisse ab. Die Hamiltonmatrix (10.8) ist

$$\hat{h} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ \Delta & h \end{pmatrix}.$$

Zur Berechnung ihrer Wurzel muss sie diagonalisiert werden, wozu die unitäre Matrix

$$\hat{u} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

dient und man erhält

$$\hat{u}^{\dagger}\hat{h}\hat{u} = \begin{pmatrix} h+\Delta & 0\\ 0 & h-\Delta \end{pmatrix},$$

woran man erkennt, dass $h>|\Delta|>0$ gelten muss, damit \hat{h} positiv definit ist. Man berechnet dann weiter

$$\hat{h}^{1/2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{h+\Delta} + \sqrt{h-\Delta} & \sqrt{h+\Delta} - \sqrt{h-\Delta} \\ \sqrt{h+\Delta} - \sqrt{h-\Delta} & \sqrt{h+\Delta} + \sqrt{h-\Delta} \end{pmatrix}$$

und formt die Matrix

$$\hat{h}^{1/2} \hat{\tau}_3 \, \hat{h}^{1/2} = \begin{pmatrix} \sqrt{h^2 - \Delta^2} & 0 \\ 0 & -\sqrt{h^2 - \Delta^2} \end{pmatrix}.$$

Deren Eigenmatrix \hat{S} ist die Einheitsmatrix und man findet mit dem richtigen Normierungsfaktor die symplektische Transformationsmatrix

$$\hat{T} = (h^2 - \Delta^2)^{1/4} \cdot \hat{h}^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{2(h^2 - \Delta^2)^{1/4}} \begin{pmatrix} \sqrt{h + \Delta} + \sqrt{h - \Delta} & \sqrt{h - \Delta} - \sqrt{h + \Delta} \\ \sqrt{h - \Delta} - \sqrt{h + \Delta} & \sqrt{h + \Delta} + \sqrt{h - \Delta} \end{pmatrix},$$

die \hat{h} diagonalisiert zu

$$\hat{D} = \hat{T}^{\dagger} \hat{h} \, \hat{T} = \begin{pmatrix} \sqrt{h^2 - \Delta^2} & 0\\ 0 & \sqrt{h^2 - \Delta^2} \end{pmatrix}$$

und resultiert in dem Hamiltonoperator

$$H = \sqrt{h^2 - \Delta^2} \left(b^{\dagger} b + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}h.$$

Die Transformationsmatrix \hat{T} hängt nur von dem Verhältnis Δ/h ab und kann deshalb durch eine einzige Variable parametrisiert werden. Mit

$$\operatorname{Tanh} 2\alpha = -\frac{\Delta}{h} \tag{10.*}$$

schreibt sich \hat{T} viel einfacher als

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \cosh \alpha & \sinh \alpha \\ \sinh \alpha & \cosh \alpha \end{pmatrix}.$$
(10. **)

Der diagonalisierte Propagator (10.37) ist

$$\hat{T}^{-1}\hat{G}(z)(\hat{T}^{\dagger})^{-1} = (z\hat{\tau}_3 - \hat{D})^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{z - \sqrt{h^2 - \Delta^2}} & 0\\ 0 & \frac{-1}{z + \sqrt{h^2 - \Delta^2}} \end{pmatrix}$$

und damit folgt schließlich

$$\hat{G}(z) = (\hat{T}^{\dagger})^{-1} (z\hat{\tau}_3 - \hat{D})^{-1} \hat{T}^{-1} = \frac{1}{z^2 - h^2 + \Delta^2} \begin{pmatrix} z + \sqrt{h^2 - \Delta^2} \cosh 2\alpha & \sqrt{h^2 - \Delta^2} \sinh 2\alpha \\ \sqrt{h^2 - \Delta^2} \sinh 2\alpha & z - \sqrt{h^2 - \Delta^2} \cosh 2\alpha \end{pmatrix}.$$

Die obige Bestimmung der kanonischen Transformation \hat{T} ist für diesen einfachen Fall natürlich sehr umständlich. Macht man stattdessen den offensichtlich symplektischen Ansatz

$$b = a \operatorname{Cosh} \alpha + a^{\dagger} \operatorname{Sinh} \alpha$$

und fordert, dass der Hamiltonoperator in der *b*-Darstellung verschwindende Anteile proportional $b^{\dagger}b^{\dagger}$ hat, so wird man sofort nach kurzer Rechnung auf (10.*) und (10.**) geführt.[□]

Damit ist der bosonische Fall abgeschlossen.

Das Wicksche Theorem aus Kapitel 8 lässt sich leicht auf Systeme mit allgemeinen quadratischen Hamiltonoperatoren (10.1) verallgemeinern. Wir definieren dazu einen n-Teilchenpropagator im $\mathbf{q}\sigma$ -Raum durch

$$\mathcal{G}_{n}(\mathbf{q}_{1}\sigma_{1}\tau_{1},..,\mathbf{q}_{2n}\sigma_{2n}\tau_{2n}) = (-1)^{n} \left\langle T_{s}(a_{\mathbf{q}_{1}\sigma_{1}\tau_{1}}..a_{\mathbf{q}_{2n}\sigma_{2n}\tau_{2n}}) \right\rangle \quad (0 < \tau_{\nu} < \beta). \quad (10.39)$$

Die Bewegungsgleichung (8.8) geht hier über in

$$-\sum_{\mathbf{q}'\sigma'} \left(\delta_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}'} \delta_{\sigma_{1},\sigma'} \frac{\partial}{\partial \tau_{1}} + n_{\mathbf{q}_{1}\sigma_{1},\mathbf{q}'\sigma'} \right) \mathcal{G}_{n}(\mathbf{q}'\sigma'\tau_{1},\mathbf{q}_{2}\sigma_{2}\tau_{2},\ldots)$$

$$= \sum_{\nu=2}^{2n} (-s)^{\nu-2} \sigma_{1}^{(1-s)/2} \delta_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}_{\nu}} \delta_{\sigma_{1},-\sigma_{\nu}} \delta(\tau_{1}-\tau_{\nu})$$

$$\times \mathcal{G}_{n-1}(\mathbf{q}_{2}\sigma_{2}\tau_{2},\ldots,\mathbf{q}_{\nu-1}\sigma_{\nu-1}\tau_{\nu-1},\mathbf{q}_{\nu+1}\sigma_{\nu+1}\tau_{\nu+1},\ldots).$$
(10.40)

Der zusätzliche Faktor σ_1 auf der rechten Seite im Fall von Bosonen ändert nichts an der verwendeten Randwertaufgabe, da er auch für n = 1 anwesend ist. Die Randbedingung (8.9) überträgt sich sinngemäß ohne Veränderung. Damit ergibt sich als Lösung der Randwertaufgabe anstelle von (8.10)

$$\mathcal{G}_{n}(\mathbf{q}_{1}\sigma_{1}\tau_{1},\ldots,\mathbf{q}_{2n}\sigma_{2n}\tau_{2n}) = \sum_{\nu=2}^{2n} (-s)^{\nu-2} \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{1}\sigma_{1}\tau_{1},\mathbf{q}_{\nu}\sigma_{\nu}\tau_{\nu}) \times \mathcal{G}_{n-1}(\mathbf{q}_{2}\sigma_{2}\tau_{2},\ldots,\mathbf{q}_{\nu-1}\sigma_{\nu-1}\tau_{\nu-1},\mathbf{q}_{\nu+1}\sigma_{\nu+1}\tau_{\nu+1},\ldots).$$
(10.41)

Die **Eindeutigkeitsüberlegungen** aus Kapitel 8 übertragen sich unmittelbar im fermionischen Fall, weil die Matrix \hat{n} hermitesch ist und daher $e^{-\beta \hat{n}}$ nicht den Eigenwert –1 besitzen kann. Den bosonischen Fall erledigt man unter Rückgriff auf (10.32), indem man anstelle der Bedingung $e^{-\beta \hat{n}}y(0) = y(0)$ die äquivalente Bedingung $e^{-\beta \hat{\tau}_3 \hat{D}} (\hat{T}^{-1}y(0)) = (\hat{T}^{-1}y(0))$ betrachtet. Hier kann die Matrix $e^{-\beta \hat{\tau}_3 \hat{D}}$ wegen der Positivität von \hat{D} und der Hermitizität von $\hat{\tau}_3 \hat{D}$ nicht den Eigenwert 1 haben.

Aus (10.41) folgt das Wicksche Theorem durch iterative Anwendung. Man muss auf alle verschiedenen $((2n-1)!! = (2n)!/2^n n!)$ Arten die 2n Feldoperatoren zu Paaren kontrahieren und findet damit

$$\mathcal{G}_{n}(1,\ldots,2n) = \frac{1}{2^{n}n!} \sum_{\mathcal{P}} (-s)^{\chi_{\mathcal{P}}} \prod_{\nu=1}^{n} \mathcal{G}_{1}((2\nu-1)_{\mathcal{P}},(2\nu)_{\mathcal{P}}).$$
(10.42)

Hier erstreckt sich die Summe über alle (2n)! Permutationen der Zahlen 1 bis 2nund der Vorfaktor $1/2^n n$! gleicht die dabei erhaltene Vielfachzählung aus. Als Beispiel, das sich aus einem Limes gleicher Zeiten zur eindeutigen Festlegung der Reihenfolge der Operatoren ergibt, notieren wir

$$\langle a_1^{\dagger} a_2^{\dagger} a_3 a_4 \rangle = \langle a_1^{\dagger} a_2^{\dagger} \rangle \langle a_3 a_4 \rangle - s \langle a_1^{\dagger} a_3 \rangle \langle a_2^{\dagger} a_4 \rangle + \langle a_1^{\dagger} a_4 \rangle \langle a_2^{\dagger} a_3 \rangle.$$
(10.43)

Die in Kapitel 9 diskutierten Molekularfeldnäherungen kann man auch verallgemeinern, indem man anstelle der Hamiltonoperatoren (7.1) die erweiterte Klasse von Hamiltonoperatoren (10.1) beim Variationsverfahren zulässt. Derartige Molekularfeldnäherungen nennt man auch **Hartree–Bogoljubov–Näherungen**. Wir notieren hier diese Näherung für den Hamiltonoperator (9.6) mit der erweiterten Schar

$$H_{x} = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \left[h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{x} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{x} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'}^{\dagger} + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}^{x*} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'}^{\dagger} \right].$$
(10.44)

Indem man die Wechselwirkung in (9.6) nach (10.43) entkoppelt, erhält man für das Funktional der freien Energie in Verallgemeinerung von (9.8)

$$\begin{split} F[\rho_{x}] = & F_{H_{x}} + \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \left[(h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} - h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{x}) \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x} - \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{x} \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'}^{\dagger} \rangle_{x} - \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}^{x*} \langle a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x} - \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}^{x*} \langle a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'} \rangle_{x} \right] \\ & + \sum_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{2},\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}'} v_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{2};\mathbf{q}_{1}'\mathbf{q}_{2}'} \left[\langle a_{\mathbf{q}_{1}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{1}'}^{\dagger} \rangle_{x} \langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}'}^{\dagger} \rangle_{x} + \frac{1}{2} \langle a_{\mathbf{q}_{1}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} \rangle_{x} \langle a_{\mathbf{q}_{2}'}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{1}'} \rangle_{x} \right] \end{split}$$

$$(10.45)$$

und in Verallgemeinerung von (9.9) die Stationaritätsbedingungen

$$\frac{\partial F[\rho_x]}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \left[\left(h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} - h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^x + 2\sum_{\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_2'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'\mathbf{q}_2'} \langle a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'} \rangle_x \right) \frac{\partial \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_x}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} - \frac{1}{2} \left(\Delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}^x - \sum_{\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_2'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}';\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_2'} \langle a_{\mathbf{q}_2'} a_{\mathbf{q}_1'} \rangle_x \right) \frac{\partial \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'}^{\dagger} \rangle_x}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} - \frac{1}{2} \left(\Delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}^{x*} - \sum_{\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_2'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}';\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_2'} \langle a_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} \rangle_x \right) \frac{\partial \langle a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \rangle_x}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} - \frac{1}{2} \left(\Delta_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}^{x*} - \sum_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2} v_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2;\mathbf{q}'\mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} \rangle_x \right) \frac{\partial \langle a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}'} \rangle_x}{\partial x_{\mathbf{l},\mathbf{l}'}} \right] = 0.$$

$$(10.46)$$

Hier stehen die Variblen $x_{\mathbf{ll}'}$ symbolisch für alle Variablen $h^x_{\mathbf{ll}'}$, $\Delta^x_{\mathbf{ll}'}$ und $\Delta^{x*}_{\mathbf{ll}'}$. Wir verzichten hier auf den Nachweis der Eindeutigkeit der folgenden offensichtlichen Lösung zu (10.46):

$$\begin{array}{ll}
h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{x} &= h_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + 2\sum_{\mathbf{q}_{2},\mathbf{q}_{2}'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_{2};\mathbf{q}'\mathbf{q}_{2}'} \langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}'} \rangle_{x} \\
\Delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{x} &= \sum_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}'} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}';\mathbf{q}_{1}'\mathbf{q}_{2}'} \langle a_{\mathbf{q}_{2}'} a_{\mathbf{q}_{1}'} \rangle_{x}.
\end{array}$$
(10.47)

11. Responsefunktionen nichtkorrelierter Systeme

Zum Abschluss dieses Anschnitts diskutieren wir **verallgemeinerte Suszeptibilitäten** in Systemen (7.1) ohne dynamische Korrelationen. Die Suszeptibilität $\chi_{A,B}(\omega)$ hängt nach Gleichung (6.7) mit der Greenfunktion $G_{A,B}(z)$ zusammen. Wir nehmen den Fall an, dass A und B Einteilchenoperatoren sind, z.B. Teilchendichten oder Stromdichten. Dann sind A und B lineare Ausdrücke in Teilchen-Loch-Operatoren und wir benutzen für die folgende Darstellung die einfache Identifikation $A = a_{\mathbf{q}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_1'}$ und $B = a_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2'}$. Das Wicksche Theorem liefert uns damit die Gleichung

$$0 < \tau < \beta : \ \mathcal{G}_{A,B}(\tau) = -\langle a_{\mathbf{q}_{1}\tau}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{1}'\tau}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}'} \rangle$$
$$= -\langle a_{\mathbf{q}_{1}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{1}'} \rangle \langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}'} \rangle - \langle a_{\mathbf{q}_{1}\tau}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}'} \rangle \langle a_{\mathbf{q}_{1}'\tau}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} \rangle$$
$$= s \cdot \mathcal{G}_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(\tau) \cdot \mathcal{G}_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(-\tau) - \langle a_{\mathbf{q}_{1}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{1}'} \rangle \langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}'} \rangle.$$
(11.1)

Für die Fourierkoeffizienten dieser Greenfunktion erhält man nach (4.6), indem man (4.7,8) für die Einteilchen-Propagatoren in (11.1) einsetzt,

$$\begin{split} G_{A,B}^{(2m)} &= \int_{0}^{\beta} \mathcal{G}_{A,B}(\tau) \, e^{i\omega_{2m}\tau} d\tau = -\beta \cdot \delta_{m,0} \cdot \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &+ \frac{1}{\beta^{2}} \sum_{n,n'} \int_{0}^{\beta} d\tau \begin{cases} G_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}^{(2n'+1)} \cdot G_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}^{(2n+1)} \cdot e^{i\tau(\omega_{2m}-\omega_{2n'+1}+\omega_{2n+1})} & (\mathbf{F}) \\ -G_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}^{(2n')} \cdot G_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}^{(2n)} \cdot e^{i\tau(\omega_{2m}-\omega_{2n'}+\omega_{2n})} & (\mathbf{B}) \end{cases} (11.2) \\ &= -\beta \, \delta_{m,0} \langle A \rangle \langle B \rangle + \frac{1}{\beta} \sum_{n} \begin{cases} G_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}^{(2n+2n+1)} \cdot G_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}^{(2n+2n+1)} & (\mathbf{F}) \\ -G_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}^{(2m+2n+1)} \cdot G_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}^{(2n+2n)} & (\mathbf{B}). \end{cases} \end{split}$$

Für $\chi_{A,B}(\omega)$ brauchen wir nun die **analytische Fortsetzung** der Koeffizienten $G_{A,B}^{(2m)}$, von deren Existenz und Eindeutigkeit wir nach Kapitel 4 wissen. Diese Fortsetzung lässt sich allerdings aus (11.2) nicht unmittelbar ablesen, da der Versuch, die Summanden einzeln fortzusetzen, scheitert. Die Greenfunktion $G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z'+i\omega_{2n(+1)})$ hat nämlich Singularitäten für $\Im z' = -\omega_{2n(+1)}$. Die Fortsetzung gelingt jedoch, wenn wir zunächst die *n*-Summationen in der aus Kapitel 4 bekannten Weise in Integrale umformen. Im Produkt der Propagatoren in der dritten Zeile von (11.2) hat der erste Faktor einen Schnitt in der z'-Ebene bei $\Im z' = -i\omega_{2m}$ und der zweite Faktor bei $\Im z' = 0$. Diese Schnitte bestimmen die Wahl der Integrationswege in der folgenden Formel, die wir für $m \neq 0$ erhalten:

$$G_{A,B}^{(2m)} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{D}_m} dz' \, G_{\mathbf{q}_1',\mathbf{q}_2}(z'+i\omega_{2m}) \, G_{\mathbf{q}_2',\mathbf{q}_1}(z') \\ \times \begin{cases} f(z') & (F) \\ g(z') - \frac{1}{\beta} \Big(G_{\mathbf{q}_1',\mathbf{q}_2}^{(2m)} \cdot G_{\mathbf{q}_2',\mathbf{q}_1}^{(0)} + G_{\mathbf{q}_1',\mathbf{q}_2}^{(0)} \cdot G_{\mathbf{q}_2',\mathbf{q}_1}^{(-2m)} \Big) \end{cases}$$
(B).

Im bosonischen Fall berücksichtigen die beiden Summanden hinter dem Integral, dass der Integrationsweg \mathcal{D}_m die Werte n = 0 und n = -m aus der Summe in (11.2) nicht einschließt. Die Integrationswege \mathcal{D}_m in (11.3) und \mathcal{C} in (11.4) in der z'-Ebene werden durch die folgende Figur illustriert.



Den m-abhängigen Anteil des Weges \mathcal{D}_m kann man nun durch eine Variablentranslation $z' \to z' - i\omega_{2m}$ auf den Weg \mathcal{C} verschieben, wobei die Periodizität der Fermiund Bosefunktion benutzt wird. Danach kann man die analytische Fortsetzung durchführen, indem man einfach den Parameter $i\omega_{2m}$ durch die komplexe Variable z ersetzt und erhält

$$G_{A,B}(z) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} dz' \Big[G_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(z'+z) G_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(z') + G_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(z') G_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(z'-z) \Big] \\ \times \begin{cases} f(z') & (F) \\ g(z') - \frac{1}{\beta} \Big(G_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(z) G_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(0) + G_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(0) G_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(-z) \Big) (B). \end{cases}$$
(11.4)

Wenn man schließlich die beiden Teile des Weges C auf die reelle Achse zusammenzieht und die Definition der Spektralfunktion (4.23) beachtet, findet man die kompaktere Darstellung

$$G_{A,B}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[G_{\mathbf{q}_{1}^{\prime},\mathbf{q}_{2}}(\omega+z) C_{\mathbf{q}_{2}^{\prime},\mathbf{q}_{1}}(\omega) + C_{\mathbf{q}_{1}^{\prime},\mathbf{q}_{2}}(\omega) G_{\mathbf{q}_{2}^{\prime},\mathbf{q}_{1}}(\omega-z) \right] \begin{cases} f(\omega) (\mathbf{F}) \\ g(\omega) (\mathbf{B}). \end{cases}$$
(11.5)

Hier wurden die beiden Extrasummanden im bosonischen Fall durch das Hauptwertintegral zum Verschwinden gebracht. Für die Spektralfunktion der Greenfunktion $G_{A,B}(z)$ erhält man die Formel

$$C_{A,B}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \Big[C_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(\omega'+\omega) C_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(\omega') - C_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(\omega') C_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(\omega'-\omega) \Big] \\ \times \begin{cases} f(\omega') (\mathbf{F}) \\ g(\omega') (\mathbf{B}) \end{cases} \\ = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' C_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(\omega'+\omega) C_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(\omega') \begin{cases} (f(\omega')-f(\omega'+\omega)) (\mathbf{F}) \\ (g(\omega')-g(\omega'+\omega)) (\mathbf{B}). \end{cases} \end{cases}$$
(11.6)

Mittels der Gleichung (4.26) ergibt sich schließlich die folgende nützliche Spektraldarstellung:

$$\begin{aligned} G_{A,B}(z) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{z - \omega} \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \, C_{\mathbf{q}_{1}',\mathbf{q}_{2}}(\omega' + \omega) \, C_{\mathbf{q}_{2}',\mathbf{q}_{1}}(\omega') \\ &\times \begin{cases} \left(f(\omega') - f(\omega' + \omega)\right) & (\mathbf{F}) \\ \left(g(\omega') - g(\omega' + \omega)\right) & (\mathbf{B}). \end{cases} \end{aligned}$$
(11.7)

Übung 11.1: Man leite (11.7) direkt aus (11.2) ab, indem man dort in der dritten Zeile in die Faktoren $G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{(\mu)}$ die Spektraldarstellung (4.26) einsetzt.□

In der folgenden umfangreichen Übung berechnen wir als Anwendungsbeispiel den **Stromdichte–Propagator** sowie den **Ladungsdichte–Propagator** eines nichtkorrelierten Fermionensystems in der Impulsdarstellung.

Ubung 11.2: Man betrachte ein System nichtwechselwirkender Fermionen mit Spin $\frac{1}{2}$, das in der Impulsdarstellung durch den Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\mathbf{q},\sigma} \epsilon_{\mathbf{q},\sigma} n_{\mathbf{q},\sigma} \quad \text{mit} \quad \epsilon_{\mathbf{q},\sigma} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \epsilon_{\sigma} - \mu \tag{11.8}$$

beschrieben wird. Für dieses System zeige man,

- (a) durch direkte Berechnung aus den Definitionen (3.3,9,11)
- (b) mittels der Formel (11.5) unter Benutzung von (7.16),

dass der Stromdichte–Propagator durch die Formel (wir betonen hier durch den oberen Index 0, dass es sich um Propagatoren von nichtkorrelierten Systemen handelt)

$$G^{0}_{\iota^{\alpha}_{\mathbf{k}},(\iota^{\beta}_{\mathbf{k}})^{\dagger}}(z) = \sum_{\mathbf{q},\sigma} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^{2} q^{\alpha} q^{\beta} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2},\sigma}) - f(\epsilon_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2},\sigma})}{z + \epsilon_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2}} - \epsilon_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2}}}$$
(11.9)

gegeben ist. Analog berechne man den Teilchendichte-Propagator

$$G^{0}_{\rho_{\mathbf{k}},\rho_{\mathbf{k}}^{\dagger}}(z) = \sum_{\mathbf{q},\sigma} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2},\sigma}) - f(\epsilon_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2},\sigma})}{z + \epsilon_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2}} - \epsilon_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2}}}$$
(11.10)

- (c) durch direkte Berechnung aus den Definitionen (3.3,9,11)
- (d) aus (11.9) unter Benutzung von (3.15). Hierzu nutze man die Identitäten

$$\left(\frac{\hbar^2}{m}\mathbf{q}\mathbf{k}\right)^2 = \left(\frac{\hbar^2}{m}\mathbf{q}\mathbf{k} - z\right)^2 + 2z\left(\frac{\hbar^2}{m}\mathbf{q}\mathbf{k} - z\right) + z^2$$

und

$$\sum_{\mathbf{q},\sigma} \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{q} \mathbf{k} \Big[f(\epsilon_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2},\sigma}) - f(\epsilon_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2},\sigma}) \Big] = \frac{\hbar^2 k^2}{m} \sum_{\mathbf{q},\sigma} f(\epsilon_{\mathbf{q},\sigma}) = \frac{\hbar^2 k^2}{m} N.$$

(e) Man bestätige die zu (11.10) gehörige Spektralfunktion (siehe (4.23,24)) als

$$C^{0}_{\rho_{\mathbf{k}},\rho_{\mathbf{k}}^{\dagger}}(\omega) = 2\pi \sum_{\mathbf{q},\sigma} \left[f(\epsilon_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2},\sigma}) - f(\epsilon_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2},\sigma}) \right] \delta(\omega + \epsilon_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2}} - \epsilon_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2}}).$$
(11.11)

(e) Schließlich ergibt sich der für die Beschreibung von Streuprozessen wichtige **dynamische Formfaktor** (6.24) anhand der Identität

$$[f(\epsilon_1) - f(\epsilon_2)] \delta(\omega + \epsilon_1 - \epsilon_2) / (1 - e^{-\beta\omega}) = f(\epsilon_1) (1 - f(\epsilon_2)) \delta(\omega + \epsilon_1 - \epsilon_2)$$
als
$$S^0(\mathbf{k}, \omega) = C^0_{\rho_{\mathbf{k}}, \rho_{\mathbf{k}}^{\dagger}}(\omega) / (1 - e^{-\beta\omega})$$

$$= 2\pi \sum_{\mathbf{q}, \sigma} f(\epsilon_{\mathbf{q} - \frac{\mathbf{k}}{2}, \sigma}) (1 - f(\epsilon_{\mathbf{q} + \frac{\mathbf{k}}{2}, \sigma})) \delta(\omega + \epsilon_{\mathbf{q} - \frac{\mathbf{k}}{2}} - \epsilon_{\mathbf{q} + \frac{\mathbf{k}}{2}}).$$

$$(11.12)$$

Ohne den Faktor 2π hat der dynamische Formfaktor die anschauliche Bedeutung der **Zustandsdichte** für Teilchen–Loch–Anregungen mit Impuls **k**, Energie ω und Spin 0.

(f) Man berechne den Formfaktor explizit für T = 0 und $\epsilon_{\sigma} = 0$ mit dem Ergebnis

$$S^{0}(\mathbf{k},\omega) = \pi \rho_{\mathrm{F}} \begin{cases} 0 & \left(\left| \frac{m\omega}{\hbar^{2}k} - \frac{k}{2} \right| > k_{\mathrm{F}}, \mathrm{Gebiet} a \right) \\ \frac{\left[1 - \left(\frac{\omega/\epsilon_{\mathrm{F}}}{2k/k_{\mathrm{F}}} - \frac{k/k_{\mathrm{F}}}{2} \right)^{2} \right]}{2k/k_{\mathrm{F}}} & \left(k_{\mathrm{F}} > \left| \frac{m\omega}{\hbar^{2}k} - \frac{k}{2} \right| \\ > k_{\mathrm{F}} \sqrt{1 - \frac{\omega}{\epsilon_{\mathrm{F}}}}, \mathrm{Gebiet} b \right) & (11.13) \\ \frac{\omega/\epsilon_{\mathrm{F}}}{2k/k_{\mathrm{F}}} & \left(k_{\mathrm{F}} \sqrt{1 - \frac{\omega}{\epsilon_{\mathrm{F}}}} > \left| \frac{m\omega}{\hbar^{2}k} - \frac{k}{2} \right|, \\ \mathrm{Gebiet} c \right) \end{cases}$$

für $\omega > 0$, wobei $k_{\rm F}$ und $\epsilon_{\rm F}$ Fermiwellenzahl und –energie, $\rho_{\rm F} = mVk_{\rm F}/(\pi\hbar)^2$ (siehe Gleichung (7.26)) die Einteilchenzustandsdichte an der Fermikante und und V das Systemvolumen sind. Die Gebiete a, b und c in der (k, ω) –Ebene sind in der folgenden Figur dargestellt. Für $\omega < 0$ gilt nach (11.12) offenbar $S(\mathbf{k}, \omega) = 0$.



Hinweis zu (f):

Bei T = 0 erfolgen die Teilchen-Loch-Anregungen, indem ein Teilchen aus dem Inneren der **Fermikugel** auf einen Platz außerhalb der Fermikugel gesetzt wird. In der folgenden Figur sind für die beiden Fälle $k < 2k_{\rm F}$ und $k > 2k_{\rm F}$ Teilchen-Loch-Paare mit minimaler und maximaler Energie aufgezeigt.



(g) Man zeige, dass die Fermiwellenzahl $k_{\rm F}$ des hier betrachteten idealen Fermigases mit Spin $\frac{1}{2}$, die den Radius $p_{\rm F} = \hbar k_{\rm F}$ der Fermikugel im Impulsraum bei T = 0 bestimmt, mit der Teilchendichte N/V durch die Formel

$$\frac{N}{V} = \frac{k_{\rm F}^3}{3\pi^2} \tag{11.14}$$

verknüpft ist und dass die Grundzustandsenergie durch die Formel

$$E_0 = \frac{3}{5} N \epsilon_{\rm F} \qquad (\epsilon_{\rm F} = \frac{\hbar^2 k_{\rm F}^2}{2m}) \tag{11.15}$$

beschrieben wird.

Teilchen–Loch–Anregungen existieren in einem durch $\omega = \frac{\hbar^2}{m} (\frac{k^2}{2} \pm kk_{\rm F})$ begrenzten Streifen der (k, ω) –Ebene. Die folgende Figur zeigt anhand vertikaler Schnitte durch die (k, ω) –Ebene Anregungsspektren für 5 feste Werte von k.



Die Teilchen-Loch-Zustandsdichte ohne Beachtung des Impulses

$$N_{\rm TL}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} S^0(\mathbf{k}, \omega) = 2 \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} f(\epsilon_{\mathbf{q}}) \left(1 - f(\epsilon_{\mathbf{q}'})\right) \delta(\omega + \epsilon_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{q}'}) \qquad (11.16)$$

berechnet man am besten durch direkte Ausführung der in (11.16) gezeigten Doppelsumme über \mathbf{q} und \mathbf{q}' .

(h) Man berechne für T = 0

$$N_{\rm TL}(\omega) = \epsilon_{\rm F} \rho_{\rm F}^2 \cdot f_{\rm TL}(\frac{\omega}{\epsilon_{\rm F}}) \quad \text{mit}$$

$$f_{\rm TL}(x) = \frac{1}{8} \begin{cases} (2+x)\sqrt{1+x} - (2-x)\sqrt{1-x} + x^2 \ln \frac{1+\sqrt{1-x}}{1+\sqrt{1+x}} & (0 < x < 1) \\ (2+x)\sqrt{1+x} + x^2 \ln \frac{\sqrt{x}}{1+\sqrt{1+x}} & (1 < x). \end{cases}$$

$$(11.17)$$

Den **Teilchendichte–Propagator** (11.10) berechnet man am besten aus (11.17) unter Verwendung von (4.26) und (6.29). Da $S(\mathbf{k}, \omega)$ stückweise polynomial in ω ist, ist die ω –Integration in (4.26) elementar durchzuführen.

(i) Man berechne für T = 0

$$G_{\rho_{\mathbf{k}},(\rho_{\mathbf{k}})^{\dagger}}^{0}(z) = \rho_{\mathbf{F}} \cdot g(\frac{k}{k_{\mathbf{F}}},\frac{z}{\epsilon_{\mathbf{F}}}) \quad \text{mit}$$

$$g(\kappa,\xi) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{4\kappa} \Big[\Big(\frac{\xi-\kappa^{2}}{2\kappa}\Big)^{2} - 1 \Big] \ln \frac{\kappa^{2}+2\kappa-\xi}{|\kappa^{2}-2\kappa|-\xi} \qquad (11.18)$$

$$+ \frac{1}{4\kappa} \Big[\Big(\frac{\xi+\kappa^{2}}{2\kappa}\Big)^{2} - 1 \Big] \ln \frac{\kappa^{2}+2\kappa+\xi}{|\kappa^{2}-2\kappa|+\xi} + \frac{\xi}{4\kappa} \ln \frac{|\kappa^{2}-2\kappa|+\xi}{\kappa^{2}-2\kappa+\xi}.$$

Interessant sind die **Singularitäten** des Propagators auf der rellen z-Achse. Ihre Positionen sind durch die Stellen gegeben, an denen die Spektralfunktion (11.13) aus analytischen Stücken zusammengefügt ist. Diese Stellen, an denen die Ableitung der Spektralfunktion unstetig ist, werden im Propagator zu logarithmischen **Verzweigungspunkten**. Die folgende Figur zeigt die sich daraus ergebenden Verzweigungsschnitte. Für $k < 2k_{\rm F}$ hat man die beiden roten Schnitte und den blauen Schnitt, während für $k > 2k_{\rm F}$ der blaue Schnitt entfällt, da die Spektralfunktion im Intervall $(-\omega_1, \omega_1)$ verschwindet.



Da die Verzweigungspunkte von k abhängen, überträgt sich die nichtanalytische Energieabhängigkeit des Propagators auch auf die Impulsabhängigkeit. Daher zeigt der statische Propagator



eine Divergenz in der Ableitung $\partial g/\partial \kappa$ bei $k = 2k_{\rm F}$ ($\kappa = 2$), die über die dielektrische Funktion interessante Implikationen für Metalle hat (**Friedel-Oszillationen**, Kohn-Effekt).

IV. Diagrammatische Störungsrechnung

12. Formale Störungsentwicklung für Greenfunktionen

In diesem Kapitel behandeln wir eine Methode, systematische **Störungsrechnung beliebig hoher Ordnung** nach einem Anteil des Hamiltonoperators durchzuführen. Dazu stellen wir uns vor, der Hamiltonoperator sei nach

$$H = H_0 + H'$$
 (12.1)

in einen ungestörten Anteil H_0 und eine **zeitunabhängige Störung** H' zerlegt. Mit Hilfe von geeigneten Greenfunktionen wollen wir die Eigenschaften des durch H beschriebenen Systems berechnen. Für $H = H_0$ liege diese Aufgabe im-Rahmen unserer Fähigkeiten, der Zusatz H' aber sprenge den Rahmen unserer Möglichkeiten.

Der Hamiltonoperator geht in die Greenfunktionen ausschließlich in exponentieller Form ein, etwa wie $e^{-H\tau}$ bei Temperatur–Greenfunktionen. Der Übergang von H_0 nach H wird, wie wir sogleich sehen werden, durch den Operator

$$S(\tau, \tau') = e^{H_0 \tau} e^{-H(\tau - \tau')} e^{-H_0 \tau'}$$
(12.2)

geleistet. Er hat die transitive Eigenschaft

$$S(\tau, \tau')S(\tau', \tau'') = S(\tau, \tau'')$$
(12.3)

und gehorcht der Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial \tau} S(\tau, \tau') = -H'_{\rm W}(\tau) S(\tau, \tau') \tag{12.4}$$

mit der Anfangsbedingung

$$S(\tau,\tau) = 1. \tag{12.5}$$

Hier und im folgenden bezeichnen wir Operatoren im Wechselwirkungsbild mit

$$X_{\rm W}(\tau) = e^{H_0 \tau} X e^{-H_0 \tau}.$$
 (12.6)

Die Anfangswertaufgabe (12.4,5) ist äquivalent zur Integralgleichung

$$S(\tau, \tau') = 1 - \int_{\tau'}^{\tau} d\tau^{(1)} H'_{\rm W}(\tau^{(1)}) S(\tau^{(1)}, \tau').$$
(12.7)

Die iterative Lösung dieser Integralgleichung lautet

$$S(\tau,\tau') = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_{\tau' < \tau^{(n)} < \ldots < \tau^{(1)} < \tau} d\tau^{(n)} H'_{W}(\tau^{(1)}) \ldots H'_{W}(\tau^{(n)}).$$
(12.8)

Damit besitzen wir eine explizite Entwicklung nach bliebigen Potenzen von H'.

Um Greenfunktionen, z.B. den *n*-**Teilchenpropagator** (8.1), auf $S(\tau, \tau')$ und Operatoren im Wechselwirkungsbild zurückzuführen, betrachten wir nun, zunächst für die Zeitordnung

$$\beta > \tau_1 > \tau_2 > \ldots > \tau_k > 0, \tag{12.*}$$

mit Operatoren $A_{\kappa\tau_{\kappa}}$ im Heisenberg
bild die Gleichung

$$e^{-\beta H} A_{1\tau_1} A_{2\tau_2} \dots A_{k\tau_k}$$

$$= e^{-\beta H_0} \cdot S(\beta, \tau_1) A_{1W}(\tau_1) S(\tau_1, \tau_2) A_{2W}(\tau_2) \dots A_{kW}(\tau_k) S(\tau_k, 0).$$
(12.9)

Tatsächlich erscheint die Störung H' auf der rechten Zeite nur in den Operatoren S und man kann nun für alle diese Operatoren die Entwicklung (12.8) einsetzen. Sammelt man dann alle Beiträge, die in H' von der Ordnung nsind, so erhält man n-fache Integrale, deren Integrand sich immer als $(-1)^n \cdot T_s(A_{1W}(\tau_1) \dots A_{kW}(\tau_k) H'_W(\tau^{(1)}) \dots H'_W(\tau^{(n)}))$ schreiben lässt, wobei die Zeitordnung sich auf alle Zeiten $(\tau_1, \dots, \tau_k, \tau^{(1)}, \dots, \tau^{(n)})$ bezieht. Hierbei wurde angenommen, dass H' nur Produkte mit einer geraden Anzahl von Fermioperatoren enthält, sodass seine Vertauschnung mit einem anderen Operator kein Minuszeichen zum T_s -Produkt liefert. Schließlich fügen sich die Integrationsbereiche für die Zeiten $\tau^{(1)}$ bis $\tau^{(n)}$ gerade so zusammen, dass ohne Beachtung der Zeiten τ_1 bis τ_k zu integrieren ist. Man erhält damit die Formel

$$e^{-\beta H} \cdot T_s \left(A_{1\tau_1} A_{2\tau_2} \dots A_{k\tau_k} \right) = e^{-\beta H_0} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_{0 < \tau^{(n)} < \dots < \tau^{(1)} < \beta} d\tau^{(1)} \dots d\tau^{(n)} \times T_s \left(A_{1W}(\tau_1) \dots A_{1W}(\tau_k) H'_W(\tau^{(1)}) \dots H'_W(\tau^{(n)}) \right).$$
(12.10)

Diese Gleichung gilt nun trivialerweise nicht nur für die bisher betrachtete Zeitordnung (12.*), sondern für alle Ordnungen der Zeiten τ_1 bis τ_k , weil deren Umordnung einer Umbenennung dieser Zeiten äquivalent ist. Eine Aufhebung der Integrationsbeschränkung in (12.10) würde den betreffendenAusdruck ver-n!-fachen, sodass wir als endgültiges Ergebnis notieren können:

$$e^{-\beta H} \cdot T_s \left(A_{1\tau_1} A_{2\tau_2} \dots A_{k\tau_k} \right) = e^{-\beta H_0} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau^{(1)} \dots d\tau^{(n)} \times T_s \left(A_{1W}(\tau_1) \dots A_{1W}(\tau_k) H'_W(\tau^{(1)}) \dots H'_W(\tau^{(n)}) \right).$$
(12.11)

Angesichts der Ähnlichkeit der Summe in (12.11) mit einer Exponentialfunktion kann man (12.11) auch symbolisch folgendermaßen schreiben:

$$S(\beta, 0) T_s(A_{1\tau_1} \dots A_{k\tau_k}) = T_s \Big(S(\beta, 0) A_{1W}(\tau_1) \dots A_{1W}(\tau_k) \Big).$$
(12.12)

Hier ist die rechte Seite so zu verstehen, dass man für $S(\beta, 0)$ die Störungsreihe (12.8) einzusetzen hat und dass die Zeitordnung sich auch auf die dabei auftretenden zusätzlichen Zeiten erstrecken muss. In diesem Sinne können wir nun die Störungsentwicklung für eine zweizeitige Greenfunktion (4.1) symbolisch in der Form

$$\mathcal{G}_{A,B}(\tau - \tau') = -\left\langle T_s \left(S(\beta, 0) A_{\mathrm{W}}(\tau) B_{\mathrm{W}}(\tau') \right) \right\rangle_{H_0} / \left\langle S(\beta, 0) \right\rangle_{H_0}$$
(12.13)

notieren. Für Mehrteilchenpropagatoren gelten analoge Formeln.

Gleichung (12.13) führt Greenfunktionen zu H auf solche zurück, die mit H_0 gebildet sind, dabei allerdings beliebig viele Zeiten und Feldoperatoren enthalten. Um diese höheren Greenfunktionen weiter in systematischer Weise behandeln zu können, muss man spezifische Annahmen über H_0 und H' machen. Falls H_0 keine dynamischen Korrelationen enthält, also etwa vom Typ (7.1) ist, haben wir mit dem Wickschen Theorem ein Mittel in der Hand, die Gleichung (12.13) und entsprechende Gleichungen für mehrzeitige Greenfunktionen weiter auszuwerten.

Wir weisen darauf hin, dass Gleichung (12.13) für makroskopische Systeme unbrauchbar für eine direkte Auswertung von Zähler und Nenner ist. Es gilt nämlich

$$\left\langle S(\beta,0)\right\rangle_{H_0} = \operatorname{Sp} e^{-\beta H} / \operatorname{Sp} e^{-\beta H_0} = e^{-\beta(F-F_0)},$$
 (12.14)

wo F die **freie Energie** ist. Hier tritt also die Größe des Systems, z.B. in Form der makroskopischen Teilchenzahl, im Exponenten auf. Die Störungsreihe von $S(\beta, 0)$ nach H' enthält beliebig hohe Potenzen der Teilchenzahl, die im thermodynamischen Limes zu unbehandelbaren Divergenzen führen würde. Es muss für die weitere Auswertung den Formel (12.13) daher gelingen, die höheren Potenzen der Systemgröße zu eliminieren, indem ein expliziter Ausdruck für $F - F_0$ in (12.14) gefunden wird und indem der Nenner in (12.13) gegen gewisse Anteile des Zählers gekürzt wird.

13. Feynmandiagramme

Wir diskutieren im folgenden den exemplarischen Fall eines wechselwirkenden Systems von Fermionen oder Bosonen mit dem ungestörten Einteilchen–Hamiltonoperator

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} \tag{13.1}$$

und der Zweikörperwechselwirkung

$$H' = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}'_1, \mathbf{q}'_2} v_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; \mathbf{q}'_1, \mathbf{q}'_2} a^{\dagger}_{\mathbf{q}_1} a^{\dagger}_{\mathbf{q}_2} a_{\mathbf{q}'_2} a_{\mathbf{q}'_1}.$$
 (13.2)

Dabei wollen wir zunächst keine Symmetrie eigenschaften wie (9.7) für die Matrixelemente v voraussetzen.

In diesem Kapitel behandeln wir die Störungsentwicklung (12.13) des Einteilchenpropagators

$$\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau-\tau') = -\frac{\left\langle T_s \left(a_{\mathbf{q}W}(\tau) a_{\mathbf{q}'W}^{\dagger}(\tau') \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 ... d\tau_n H'_W(\tau_1) ... H'_W(\tau_n) \right) \right\rangle_{H_0}}{\left\langle T_s \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 ... d\tau_n H'_W(\tau_1) ... H'_W(\tau_n) \right\rangle_{H_0}}.$$
(13.3)

Die n-te Ordnung besteht im Zähler aus einem (2n + 1)-Teilchenpropagator und im Nenner aus einem 2n-Teilchenpropagator, die man nach dem Wickschen Theorem in (2n + 1)! bzw. (2n)! Terme aufspalten kann, indem man auf alle verschiedenen Arten Erzeuger-Vernichter-Paare kontrahiert. Um die Vielzahl der Terme geschickt handhaben zu können, bedient man sich einer graphischen (diagrammatischen) Darstellung der einzelnen Terme. Man nennt diese Darstellungen auch **Feymandiagramme**. Der ν -te Störoperator $H'_W(\tau_{\nu})$ wird durch einen entsprechend **numerierten Vertex** wie in der folgenden Figur gezeigt dargestellt. Er besteht aus einer gewellten **Wechselwirkungslinie** mit Richtungspfeil (in der Figur in blau) und vier **Beinen**. Die Beine sind gleichfalls mit Richtungspfeilen versehene Linien, die in der angedeuteten Weise die vier Feldoperatoren in H'symbolisieren. Einlaufende Pfeile entsprechen dabei Erzeugern, auslaufende Vernichtern. Der erste und vierte Feldoperator in H' sitzt am hinteren, der zweite und dritte am vorderen Ende der Wechselwirkungslinie.



Die übrigen Operatoren im Zähler von (13.3) werden durch **äußere oder externe Punkte** mit entsprechenden Beinen dargestellt. Im Falle eines Einteilchenpropagators (13.3) gibt es einen **Quellpunkt** mit auslaufendem Pfeil für $a_{\mathbf{q}}$ und einen **Senkpunkt** mit einlaufendem Pfeil für $a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}$, die in der folgenden Figur gezeigt sind. Wir denken hierbei nicht an Teilchenquellen und –senken – dies würde umgekehrte Pfeilrichtungen nahelegen, sondern an Quellen und Senken der Propagation.



Um nun alle Terme n-ter Ordnung der Störungsentwicklung von (13.3) graphisch zu symbolisieren, hat man offenbar n Vertizes und für den Zähler zusätzlich die beiden äußeren Punkte aufzuzeichnen und dann auf alle verschiedenen Arten die auslaufenden mit den einlaufenden Beinen zu verbinden. Jede solche Verbindung symbolisiert eine Kontraktion der entsprechenden Feldoperatoren zu einem Paar. Diese Vorschrift lässt sich auch so ausdrücken, dass die 2n Endpunkte der n Vertizes und eventuell vorhandene äußere Punkte auf alle Arten durch gerichtete Linienzüge zu verbinden sind. Damit man wirklich alle gegebenen Möglichkeiten des Verbindens ausschöpft, und zwar jede genau einmal, muss man zweierlei beachten:

- 1. Die 2*n* Vertexpunkte sind aufgrund der Numerierung und Bepfeilung ihrer Wellenlinien wohlunterscheidbar, wie auch die äußeren Punkte.
- 2. Die Verschiedenheit von Graphen ist daran zu messen, ob diese unterscheidbaren Punkte auf **topologisch verschiedene Art** verknüpft sind. Verschiedene geometrische Anordnungen bei topologisch identischer Verknüpfung repräsentieren ein und denselben Graphen, der nur einmal zu zählen ist.

Die folgende Figur erläutert diese Bemerkungen exemplarisch. (Für Züge von Teilchenlinien reicht es, an einer Linie die Pfeilrichtung anzugeben.)



Man macht sich nun leicht klar, dass der analytische Beitrag eines numerierten Graphen gemäß folgender Regeln aufgeschrieben werden kann.

Regeln für numerierte Graphen:

- (a) Man versehe wie in den obigen Figuren jeden Vertex mit einer Zeit und seine Beine mit Quantenzahlen und verfahre analog mit äußeren Punkten.
- (b) Man schreibe für jeden Vertex einen Faktor

$$-\frac{1}{2}v_{\mathbf{q}_{1,\nu}\mathbf{q}_{2,\nu};\mathbf{q}_{1,\nu}'\mathbf{q}_{2,\nu}'},\qquad\qquad\qquad \begin{array}{c} a_{\mathbf{q}_{1,\nu}}^{\dagger}\\ a_{\mathbf{q}_{1,\nu}}^{\dagger}\\ a_{\mathbf{q}_{1,\nu}}^{\dagger}\\ \end{array}$$

(c) Man schreibe für jede Verbindungslinie, die die Zeiten τ_x und τ_y verbindet, und Beine mit Quantenzahlen \mathbf{q}_x und \mathbf{q}_y verknüpft, einen Faktor

$$\mathcal{G}_{\mathbf{q}_x,\mathbf{q}_y}^0(\tau_x-\tau_y), \qquad \qquad \underbrace{\tau_x \qquad \tau_y}_{\mathbf{q}_x,\mathbf{q}_y} \underbrace{\tau_y}_{\mathbf{q}_y}$$

wo \mathcal{G}^0 der mit H_0 gebildete Propagator ist. Falls die Beine mit demselben Vertex verbunden sind, sodass $\tau_x \equiv \tau_y$, ist dieser Faktor wie

zu verstehen.

- (d) Man summiere über alle inneren (d.h. an den Vertexbeinen stehenden) Quantenzahlen und integriere alle Vertexzeiten von 0 bis β .
- (e) Man füge einen Faktor

$$\frac{(-s)^{\lambda}}{n!} \tag{13.4}$$

hinzu, won die Zahl der Vertizes und λ die Zahl der geschlossenen Linienzüge (Fermionenloops) ist.

Eräuterungen zu (c): Für $\tau_x \equiv \tau_y$ stammen die Feldoperatoren $a_{\mathbf{q}_x \mathbf{W}}(\tau_x)$ und $a^{\dagger}_{\mathbf{q}_y \mathbf{W}}(\tau_y)$ aus demselben Störoperator $H'_{\mathbf{W}}(\tau_x)$. Dort hatten sie jedoch die Reihenfolge $a^{\dagger}a$, die im Zeitordnungsprodukt T_s dem Limes $\tau_x = \tau_y - 0$ entspricht.

Eräuterungen zu (e): Das Vorzeichen hängt für Fermionen (s = +1) vom Charakter der Permutation ab, die man beim Kontrahieren ausführt. Um diese Permutation in Relation zur topologischen Struktur des zugehörigen Graphen zu setzen, ordnen wir die Feldoperatoren so um, wie sie längs der gerichteten Linienzüge des Graphen angeordnet sind. Für alle Graphen ohne geschlossenen Linienzug, d.h. für solche mit nur einem offenen Linienzug zwischen den beiden externen Punkten, steht dann ganz links der Operator $a_{\mathbf{q}W}(\tau)$, es folgen in irgendeiner Reigenfolge die 2n Paare $a_{\mathbf{q}'_{i\nu}W}^{\dagger}(\tau_{\nu}) a_{\mathbf{q}_{i\nu}W}(\tau_{\nu})$ $(i = 1, 2; \nu = 1, \ldots, n)$ und ganz rechts der Operator $a_{\mathbf{q}'W}^{\dagger}(\tau')$. Alle diese Anordnungen gehen aus $a_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}(H')^{n}$ durch gerade Permutationen hervor. Um nun einen geschlossenen Linienzug zu erzeugen, nimmt man aus der gerade beschriebenen Anordnung von Feldoperatoren eine bestimmte Anzahl von Paaren $(a_{\mathbf{q}'_{i\nu}W}^{\dagger}(\tau_{\nu}) a_{\mathbf{q}_{i\nu}W}(\tau_{\nu}))$ heraus (das entspricht einer geraden Permutation) und kontrahiert diese untereinander. Dabei muss man, um den Zyklus zu schließen, den vordersten Erzeuger ganz nach hinten bringen,

$$(\mathbf{a}^{\dagger}a)\ldots(a^{\dagger}a)\longrightarrow(a\,a^{\dagger})\ldots(a\,\mathbf{a}^{\dagger}),$$

und das erfordert eine ungerade Permutation. Folglich muss man für jeden geschlossenen Linienzug einen Faktor -s hinzufügen.

Zur Illustrierung stellen wir die Graphen nullter und erster Ordnung zusammen. Die nullte Ordnung des Zählers ist einfach



Im Nenner haben wir in nullter Ordnung einen Beitrag 1, dem wir den leeren Graphen zuordnen. In erster Ordnung gibt es für den Zähler 3! = 6 Graphen,



Übung 13.1: Man schreibe für jeden der obigen Graphen den analytischen Ausdruck auf.

Von der zweiten Ordnung an fällt auf, dass verschiedene Graphen durchaus identische analytische Beiträge liefern können. Das gilt nämlich für solche Graphen, die sich nur durch die Numerierung ihrer Vertizes unterscheiden. Ein Beispiel dafür geben die beiden folgenden Graphen



die verschieden und daher beide aufzuführen sind, deren Beiträge sich aber nur durch verschiedene Benennung der Integrationsvarialen unterscheiden. Da man nVertizes auf n! Arten mit Zeiten τ_1 bi τ_n versehen kann, könnte man meinen, zu jedem Graphen n-ter Ordnung gäbe es n! äquivalente mit dem gleichen analytischen Beitrag. Dass dies nicht richtig ist, zeigen die beiden folgenden Beispiele



bei denen eine Vertauschung von 1 mit 2 nicht zu topologisch verschiedenen numerierten Graphen führt. Es gibt zu jedem numerierten Graphen eine Gruppe von Permutationen der Numerierung, die ihn topologisch invariant lässt. Man nennt die Ordnung dieser Gruppe die **Symmetriezahl** S des Graphen.

Man macht sich nun leicht klar, dass die Zahl der äquivalenten Graphen, die sich nur in der Numerierung der Vertizes unterscheiden, gleich n!/S ist. Wir

reduzieren die Zahl der Graphen, indem wir alle äquivalenten Graphen zu einem unnumerierten Graphen zusammenfassen und erhalten anstelle von (e) als Rechenvorschrift für unnumerierte Graphen eine

Regel für unnumerierte Graphen:

(e') Man füge einen Faktor

$$\frac{(-s)^{\lambda}}{S} \tag{13.5}$$

hinzu, wo S die Symmetriezahl des Graphen (mit gerichteten Vertizes) ist.

Nunmehr sind wir in der Lage, eine wichtige Umsortierung der Reihe aller Graphen vorzunehmen. Dazu führen wir den **Begriff des Zusammenhangs für Ver-**tizes und externe **Punkte** ein. Wir nennen Vertizes und äußere Punkte eines Graphen zusammenhängend genau dann, wenn sie durch Teilchenlinien verknüpft sind. Dies definiert eine Äquivalenzrelation, deren Klassen die topologisch zusammenhängenden Stücke eines Graphen sind. Die oben dargestellten 6 Zählergraphen erster Ordnung sind zusammenhängend bis auf die beiden ersten. Jeder Zählergraph zu Gleichung (13.3) hat nun genau ein Stück, das mit den beiden externen Punkten zusammenhängt. Dieses Stück nennt man den verbundenen Stücke den unverbundenen Anteil nennt. Die Nützlichkeit dieser Begriffsbildung ergibt sich aus folgendem Sachverhalt:

Der analytische Beitrag eines Graphen ist gleich dem Produkt der Beiträge des verbundenen und des unverbundenen Anteils.

Zum Beweis genügen zwei Bemerkungen: (1) Die Integrale nicht zusammenhängender Teile eines Graphen faktorisieren immer, da der Integrand aus Faktoren v und \mathcal{G}^0 nur Variable innerhalb solcher Teile verknüpft. (2) Der Vorfaktor faktorisiert ebenfalls, weil die Zahl der geschlossenen Linienzüge sich natürlich additiv zusammensetzt und weil die Symmetriezahl des verbundenen Anteils gleich 1 ist; die Symmetriepermutationen eines Graphen sind genau diejenigen des unverbundenen Anteils.

Wir ordnen die Menge aller Zählergraphen jetzt so, dass wir alle Graphen mit demselben verbundenen Anteil zusammenfassen. Offenbar kommt jeder verbundene Anteil genau einmal mit jedem unverbundenen Graphen einschließlich des leeren als unverbundenem Anteil vor. Da die Summe aller unverbundenen Graphen aber gleich dem Nenner $\langle S(\beta, 0) \rangle_{H_0}$ ist, liefert die Summe aller Graphen mit demselben verbundenen Anteil als Beitrag den Beitrag des unverbundenen Anteils multipliziert mit $\langle S(\beta, 0) \rangle_{H_0}$ und man kann den Nenner in (13.3) wegkürzen. Damit haben wir den **Satz von den verbundenen Graphen** gefunden:

Der Einteilchenpropagator (13.3) ist gleich der Summe aller verbundenen Graphen.

Damit ist das anhand von Gleichung (12.14) diskutierte Problem gelöst. Die Beiträge der verbundenen Graphen sind nämlich unabhängig von der Größe des Systems, wie es bei Propagatoren sein soll. Man kann das verstehen, indem man sich die Beiträge der Graphen in Ortsdarstellung ausgewertet vorstellt. In dieser Darstellung tragen die Enden der Vertizes für lokale Wechselwirkungen (13.2) und die externen Punkte Ortsvariablen. Die Integrationen über alle inneren Variablen werden durch die Reichweite der Wechselwirkung v und der Greenfunktionen \mathcal{G}^0 abgeschnitten. Da alle inneren Punkte für verbundene Graphen an den externen Punkten festhängen, liefern die inneren Integrationen einen von der Systemgröße unabhängigen Beitrag.

Im Gegensatz dazu kann der Mittelpunkt jedes zusammenhängenden unverbundenen Graphen über das gesamte Volumen des Systems laufen, sodass die Beiträge solcher Graphen volumenproportional sind. Unverbundene Graphen, die aus r zusammenhängenden Teilen bestehen, haben Beiträge proportional zur r-ten Potenz des Systemvolumens.

Wir können jetzt auch leicht eine lineare Graphenreihe für die freie Energie in (12.14) herleiten. Nach der obigen Analyse ist $e^{-\beta(F-F_0)}$ gleich der Summe aller unverbundenen Graphen einschließlich des leeren Graphen. Unter diesen gibt es die Teilmenge der zusammenhängenden, die wir uns durchnumeriert denken wollen. Wir nennen den Beitrag des ν -ten solchen Graphen Γ_{ν} ($\nu = 1, 2, ...$). Nun kann man jeden unverbundenen Graphen durch die Häufigkeit n_{ν} ($n_{\nu} = 0, 1, 2, ...$) eindeutig charakterisieren, mit der er den ν -ten zusammenhängenden Graphen enthält. Nach der obigen Diskussion ist klar, dass der Beitrag des unverbundenen Graphen sich durch Multiplikation der Beiträge der zusammenhängenden Teile ergibt, bis auf die Symmetriezahl S. Die Symmetriepermutationen eines Graphen setzen sich zusammen aus den Symmetriepermutationen jedes zusammenhängenden Teilgraphen und den Permutationen identischer Teilgraphen untereinander. Daher gilt für die Symmetriezahl eines Graphen mit n_{ν} ν -ten Teilen

$$S(\{n_{\nu}\}) = \prod_{\nu=1}^{\infty} S_{\nu}^{n_{\nu}} \cdot n_{\nu}!.$$
(13.6)

Folglich ist der Beitrag des betreffenden unverbundenen Graphen

$$\Gamma(\{n_{\nu}\}) = \prod_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{n_{\nu}!} (\Gamma_{\nu})^{n_{\nu}}.$$
(13.7)

Summation über alle $\{n_{\nu}\}$ liefert also

$$\left\langle S(\beta,0) \right\rangle_{H_0} = e^{-\beta(F-F_0)} = \sum_{\{n_\nu\}} \Gamma(\{n_\nu\}) = e^{\sum_{\nu=1}^{\infty} \Gamma_{\nu}}$$
(13.8)

und damit

$$-\beta(F - F_0) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \Gamma_{\nu}.$$
 (13.9)

Dieses Ergebnis nennt man den Cumulantensatz:

Die Summe aller unverbundenen zusammenhängenden Graphen ist gleich $-\beta(\mathbf{F}-\mathbf{F}_0)$.

Übung 13.2: Man gebe die Potenz des Systemvolumens an, zu der das folgende Diagramm proportional ist. [In memoriam Shang–Keng Ma (1940-1983)]



Im folgenden werden wir den Übergang von der zeitabhängigen Darstellung zur **Energiedarstellung** für verbundene und zusammenhängende unverbundene Graphen beschreiben. Im ersten Schritt ersetzen wir alle Greenfunktionen $\mathcal{G}^0(\tau - \tau')$, das sind 2n + 1 in einem verbundenen Graphen und 2n in einem unverbundenen Graphen *n*-ter Ordnung, durch ihre Fourierreihen (4.7,8). Dadurch wird jeder Teilchenlinie eine Energie ω zugeordnet, über die laut (4.7,8) mittels $\frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty}$ summiert wird. Jede innere Zeit kommt in vier Greenfunktionen \mathcal{G}^0 vor und ist daher mit vier Energien verknüpft. Wir nennen die Energien der einlaufenden Linien ω_{e1} und ω_{e2} und die der auslaufenden Linien ω_{a1} und ω_{a2} , wie in der folgenden Figur gezeigt.



Dann liefert das nach Regel (d) zu bildende Zeitintegral über τ_{ν} den Faktor

$$\int_{0}^{\beta} d\tau_{\nu} \, e^{i\tau_{\nu}(\omega_{e1}+\omega_{e2}-\omega_{a1}-\omega_{a2})} = \beta \cdot \delta_{\omega_{e1}+\omega_{e2},\omega_{a1}+\omega_{a2}}.$$
 (13.10)

Die Zeitintegration führt also dazu, dass an jedem Vertex **Energieerhaltung** herrscht:

An jedem Vertex ist die Summe der einlaufenden ist gleich der Summe der auslaufenden Energien.

In verbundenen Graphen tragen die mit den Quellpunkten verbundenen Teilchenlinien aufgrund der Energieerhaltung die gleichen Energien ω_{ex} und wenn wir bezüglich der externen Zeiten τ und τ' den Fourierkoeffizienten bilden, indem wir mit $\omega = \omega_{2m+1}$ für s = +1 bzw. mit $\omega = \omega_{2m}$ für s = -1 nach (4.6) das Integral

$$\int_{0}^{\beta} d\tau \, e^{(\omega - \omega_{\rm ex})(\tau - \tau')} = \beta \cdot \delta_{\omega, \omega_{\rm ex}} \tag{13.11}$$

berechnen, wird $\omega_{\text{ex}} = \omega$ gesetzt. Letztendlich sind noch die β -Faktoren abzuzählen. Jede der Fouriereihen, 2n + 1 für verbundene Graphen und 2n für unverbundene Graphen, brachte ein $1/\beta$ und die n + 1 bzw. n Zeitintegrationen je ein β . Also bleiben in jedem Fall genau n Faktoren $1/\beta$. Wir notieren die

Regeln für unnumerierte Graphen in der Energiedarstellung:

(a') Man versehe wie in Regel (a) die Beine aller Vertizes und, falls vorhanden, der externen Punkte mit Quantenzahlen q. Jeder Teilchenlinie gebe man eine Energie so, dass an jedem Vertex die Energie erhalten ist (siehe das Beispiel in der folgenden Figur).



- (b) Man schreibe für jeden Vertex einen Faktor $-\frac{1}{2}v_{\mathbf{q}_{1,\nu}\mathbf{q}_{2,\nu};\mathbf{q}_{1,\nu}'\mathbf{q}_{2,\nu}'}$.
- (c') Man schreibe für jede Teilchenlinie

•
$$\mathbf{q}_{\mathbf{x}}$$
 $\mathbf{q}_{\mathbf{y}}$ einen Faktor $G^{0}_{\mathbf{q}_{x},\mathbf{q}_{y}}(i\omega_{z}).$

Falls beide Enden der Linie an demselben Vertex hängen, füge man einen Faktor $e^{i\omega_z \cdot \eta}$ hinzu (hinsichtlich η siehe (d')).

(d') Man summiere über alle inneren Quantenzahlen. Man setze die Energien der an den beiden externen Punkten hängenden Linien, falls vorhanden, gleich der externen Energie ω_{2m+1} (s = +1) bzw. ω_{2m} (s = -1). (Erstere sind aufgrund der Energieerhaltung ja schon identisch.) Alle weiteren Energievariablen summiere man und füge einen Faktor $1/\beta^n$ hinzu (n = Zahl der Vertizes), für Fermionen über die Werte $\omega_{2\nu+1}$, für Bosonen über $\omega_{2\nu}$ ($\nu =$ $0, \pm 1, \pm 2, \ldots$). Dann bilde man den Limes $\eta \to 0+$. (e') Man füge einen Faktor $\frac{(-s)^{\lambda}}{S}$ hinzu (siehe (13.5)).

Übung 13.3: Warum braucht man in (c', d') den zusätzlichen Faktor $e^{i\omega_z\eta}$ mit $\eta>0?^{\square}$

Symmetrien der Wechselwirkungs–Matrixelemente ermöglichen eine Vereinfachung der Graphen und gleichzeitig eine Reduktion der Anzahl der Graphen in jeder Ordnung. Man kann immer die Symmetrie

$$v_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2;\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_2'} = v_{\mathbf{q}_2\mathbf{q}_1;\mathbf{q}_2'\mathbf{q}_1'} \tag{13.12}$$

annehmen.

Übung 13.4: Man erinnere sich an die Übungsaufgabe nach Gleichung (9.7) und begründe, dass man für lokale Potentiale in der Impulsdarstellung (2.33) $v_{\mathbf{q}}$ durch $\frac{1}{2}(v_{\mathbf{q}} + v_{-\mathbf{q}})$ ersetzen muss, um die Symmetrie (13.12) zu gewährleisten. Wieso gilt $v_{\mathbf{q}} = v_{-\mathbf{q}}$ für Potentiale mit Inversionssymmetrie $v(\mathbf{r}) = v(-\mathbf{r})$?

Die Symmetrie (13.12) hat zur Folge, dass der Beitrag der Graphen nicht von der Richtung der Pfeile an den Vertizes abhängt. Wir können daher diese Pfeile weglassen, wenn wir den Beitrag jedes Graphen mit einem geeigneten Vielfachheitsfaktor versehen. Für verbundene Graphen führt jede Umkehr eines Wechselwirkungspfeils zu einem verschiedenen Graphen und man erhält zu jedem Vertex einen Faktor 2. Dies gilt jedoch nicht für unverbundene Graphen, wie die Beispiele in der folgenden Figur zeigen.



Diese beiden Graphen gehen bei simultaner Umkehr beider Pfeile in sich über. Außerdem haben sie verschiedene Symmetriezahlen, der linke S = 1 und der rechte S = 2. Aus diesem Grunde ist es ratsam, zu numerierten Graphen zurückzukehren, dort zunächst die Pfeile und erst dann die Numerierung wieder zu entfernen. Wir starten also wieder mit den Regeln (a) bis (e) für numerierte Graphen.

Die meisten numerierten unverbundenen Graphen (es reicht, zusammenhängende zu betrachten) sind tatsächlich auch unter keiner Pfeilrichtungsänderung invariant. Invariant können sie unter einer simultanen Umkehr aller Pfeilrichtungen sein. Diese Invarianz besitzen nur die beiden Graphen erster Ordnung und die aus ihnen in höherer Ordnung hervorgehenden unendlichen Serien von Leitergraphen, die in der folgenden Figur gezeigt sind, natürlich mit beliebiger Reihenfolge der Vertizes 1, 2, ..., n. Wir nennen alle diese Graphen im momentanen Kontext die Leitergraphen.



Die unverbundenen Graphen erhalten also beim Übergang zu nichtgerichteten Vertizes einen Faktor 2^n bis auf die Leitergraphen, die einen Faktor 2^{n-1} erhalten. Wir werden die Faktoren 2^n in das Wechselwirkuungs-Matrixelement integrieren.

Nachdem man sich so der Pfeile an den Vertizes entledigt hat, kann man wieder zu unnumerierten Graphen übergehen. Dies liefert einen Faktor n!/S, wo S hier die **Symmetriezahl für Graphen mit nichtgerichteten Vertizes** ist, d.h. die Zahl der Permutationen der Numerierung, die solche Graphen in topologisch äquivalente überführen. Insgesamt werden die Regeln für numerierte Graphen wie folgt verändert.

Regeln für unnumerierte Graphen mit nichtgerichteten Vertizes: (b') Man schreibe für jeden Vertex einen Faktor

$$-v_{\mathbf{q}_{1,\nu}\mathbf{q}_{2,\nu};\mathbf{q}_{1,\nu}'\mathbf{q}_{2,\nu}'}$$

(e") Man füge einen Faktor

$$\frac{(-1)^{\lambda}}{S} \tag{13.13}$$

hinzu, wo S hier (im Unterschied zu S in (e')) die Symmetriezahl der Graphen mit nichtgerichteten Vertizes ist. Für die Leitergraphen, deren Symmetriezahl S = n ist, verdopple man S auf 2n.

Es sei noch angemerkt, dass die verdoppelte Symmetriezahl für die unverbundenen Graphen erster Ordnung die Doppelzählung der Energie verhindert, deren Problematik uns bei der Näherung des effektiven Feldes mit Gleichung (9.13) begegnet ist.

Nach Gleichung (9.7) kann immer eine über (13.12) hinausgehende Symmetrie der Wechselwirkungs–Matrixelemente angenommen werden. Ihre Verwendung ist allerdings nicht in jeder Hinsicht vorteilhaft.

Ubung 13.5: Man zeige, dass man für lokale inversionssymmetrische Potentiale das Matrixelement in (2.33) durch $\frac{1}{2}(v_{\mathbf{q}} - s v_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}-\mathbf{q}_2})$ ersetzen muss, wenn man die volle Symmetrie (9.7) nutzen will.

Falls die Symmetrie (9.7) vorliegt, kann man durch ähnliche Überlegungen wie oben die Zahl der Graphen weiter reduzieren, indem man jeweils zwei Vertizes wie in der folgenden Figur gezeigt zu einem punktförmigen Vertex zusammenfasst.



Für Fermionen ist mit dieser Zusammenfassung die Subtilität verbunden, dass die Zahlen λ der Fermionenloops der beiden zusammengefassten Graphen sich um 1 unterscheiden.

Übung 13.6: Man zeige, dass es für lokale Potentiale wie in der letzten Übungsaufgabe richtig ist, dem Punktvertex diejenige Zahl λ von Fermionenloops zuzuordnen, die sich aus dem Graphen ergibt, der die linken Vertizes in der obigen Figur enthält. Die geänderte Loopzahl bei anderer Vertexwahl wird durch die Formel in Übung 13.4 korrekt berücksichtigt. \Box

Wir verzichten hinsichtlich der vollen Symmetrie (9.7) auf die Diskussion weiterer Einzelheiten.

14. Dysongleichung und Selbstenergie

Eine grundlegende Begriffsbildung für die systematische Summation von Graphen ist die der **Reduzibilität**. In diesem Kapitel behandeln wir den Begriff der **Einteilchen–Reduzibilität**.

Man nennt einen Graphen **einteilchen-reduzibel**, wenn man ihn durch Zerschneiden einer einzigen Teilchenlinie in zwei unzusammenhängende Graphen teilen kann, die beide mindestens einen Vertex enthalten. Alle anderen Graphen nennt man **einteilchen-irreduzibel**. Offenbar sind unverbundene Graphen niemals einteilchen-reduzibel.

Die verbundenen Graphen für den Einteilchenpropagator lassen sich in lauter irreduzible Teile zerschneiden wie das Beispiel in der nebenstehenden Figur andeutet. Wir nennen jeden solchen Teil einen Selbstenergiegraphen, wobei die ein- und auslaufenden Teilchenlinien und die Summationen über deren Quantenzahlen nicht zu dem Selbstenergiegraphen gehören sollen. Wegen der Energieerhaltung stimmen die ein- und auslaufende Energie eines Selbstenergiegraphen immer mit der äußeren Energie z überein. Der Beitrag eines Selbstenergiegraphen hängt daher von dieser Energie z und von den Quantenzahlen \mathbf{q} und \mathbf{q}' der ein- und auslaufenden abgeschnittenen Beine ab. Die Summe der Beiträge aller Selbstenergiegraphen nennen wir die Selbstenergie $\Sigma_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z)$ und stellen sie graphisch in der Energiedarstellung durch das nebenstehende Diagramm dar.



Während die Regeln zur Aufstellung der analytischen Ausdrücke für die Selbstenergie in der Energiedarstellung keiner Erläuterung bedürfen, gibt es zur Definition der Selbstenergie $\Sigma_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau - \tau')$ in der Zeitdarstellung Erklärungsbedarf hinsichtlich der Zeitabhängigkeit. Hier müssen die Integrationen über die beiden Zeiten, deren Vertizes auf der offenen Teilchenlinie als erste und letzte anschließen, weggelassen werden. Für die beiden Selbstenergiegraphen erster Ordnung, die nur einen Vertex besitzen, impliziert dies einen Faktor $\delta(\tau - \tau')$. Im laufenden Kapitel werden wir wegen ihrer Einfachheit bis auf Gleichung (14.2) nur die Energiedarstellung verwenden. Auf die Zeitdarstellung werden wir jedoch im nächsten Kapitel zurückkommen.

Die Graphen des Einteilchenpropagators entstehen durch Einschub einer beliebigen Anzahl n = 0, 1, 2... von irreduziblen Selbstenergiegraphen in die Teilchenlinie, die die äußeren Punkte verbindet. Dabei kann man an jeder Stelle jeden irreduziblen Selbstenergiegraphen einsetzen, sodass die Summe über alle Graphen an jeder Stelle die gesamte Selbstenergie $\Sigma(z)$ erhält. Die Struktur eines solchen Graphen mit n Selbstenergieeinschüben ist in der folgenden Figur gezeigt.



Der exakte Einteilchenpropagator wird üblicherweise durch eine doppelte Teilchenlinie zwischen den äußeren Punkten dargestellt. Wir können damit die folgende symbolische Rechnung durchführen:

$$\begin{array}{c} & & & \\ &$$

Hier wurde benutzt, dass der Beitrag eines Graphen linear von allem abhängt, was hinter dem ersten Selbstenergiegraphen steht. Die Summe der Graphen, die rechts vom ersten Selbstenergiegraphen stehen, ist offenbar wieder der gesamte Propagator. Man hat damit eine interessante Integralgleichung gefunden, die den Propagator exakt durch seine Selbstenergie ausdrückt. Diese Gleichung nennt man die **Dysongleichung** und sie lautet in der Energiedarstellung

$$G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(z) = G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{0}(z) + \sum_{\mathbf{q}'',\mathbf{q}'''} G_{\mathbf{q},\mathbf{q}''}^{0}(z) \Sigma_{\mathbf{q}'',\mathbf{q}'''}(z) G_{\mathbf{q}''',\mathbf{q}'}(z)$$
(14.1)

und in der Zeitdarstellung

$$G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau-\tau') = G_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{0}(\tau-\tau') + \int_{0}^{\beta} d\tau_{1} d\tau'_{1} \sum_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}'_{1}} G_{\mathbf{q},\mathbf{q}_{1}}^{0}(\tau-\tau_{1}) \times \Sigma_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}'_{1}}(\tau_{1}-\tau'_{1}) G_{\mathbf{q}'_{1},\mathbf{q}'}(\tau'_{1}-\tau').$$
(14.2)

Übung 14.1: Man zeige, dass die Gleichung (5.12) sich mittels der Dysongleichung auch wie

$$\langle H_2 \rangle_{\lambda} = \sum_{m,\mathbf{q},\mathbf{q}'} \begin{cases} \frac{1}{2\beta} \Big[\Sigma_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}(-i\omega_{2m+1}) G_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}(-i\omega_{2m+1}) \Big] e^{-i\omega_{2m+1}\cdot(-0)} & (s=+1) \\ \frac{-1}{2\beta} \Big[\Sigma_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}(-i\omega_{2m}) G_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}(-i\omega_{2m}) \Big] e^{-i\omega_{2m}\cdot(-0)} & (s=-1) \end{cases}$$
(14.3)

schreiben lässt. \Box

In dem praktisch wichtigen Fall, in dem die Quantenzahlen \mathbf{q} Erhaltungsgrößen von H und H_0 sind, werden alle obigen Größen diagonal in \mathbf{q} und die Dysongleichung ist eine einfache algebraische Gleichung. Man schreibt ihre Lösung dann oft als

$$\left(G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z)\right)^{-1} = \left(G_{\mathbf{q},\mathbf{q}}^{0}(z)\right)^{-1} - \Sigma_{\mathbf{q},\mathbf{q}}(z).$$
(14.4)

Hat zusätzlich der ungestörte Propagator die Form (7.7), so erhält man

$$G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z) = \frac{1}{(G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}^{0})^{-1}(z) - \Sigma_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z)} = \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{p}} - \Sigma(\mathbf{p},z)}.$$
 (14.5)

Wir haben damit eine explizite Störungsentwicklung für den Massenoperator (5.16) gewonnen. Die physikalische Bedeutung der Selbstenergie wird durch Gleichung (14.5) am besten beleuchtet. Die Selbstenergie stellt einen allerdings z-abhängigen Beitrag zur Energie der Teilchen dar. Der Pol des ungestörten Propagators bei $z = \epsilon_{\mathbf{p}}$ verschiebt sich durch die Wechselwirkung nach $z = E_{\mathbf{p}}$, wo $E_{\mathbf{p}}$ die Lösung der impliziten Gleichung

$$E_{\mathbf{p}} = \epsilon_{\mathbf{p}} + \Sigma(\mathbf{p}, E_{\mathbf{p}}) \tag{14.6}$$

ist. Der Realteil von $\Sigma(\mathbf{p}, E_{\mathbf{p}})$ beschreibt die Verschiebung der Energie eines Teilchens mit Impuls \mathbf{p} aufgrund seiner Wechselwirkung mit den anderen Teilchen und der Imaginärteil von $\Sigma(\mathbf{p}, E_{\mathbf{p}})$ seinen Zerfall während der Propagation. Die Entwicklung von $\Sigma(\mathbf{p}, z)$ um $z = E_{\mathbf{p}}$ liefert in erster Ordnung

$$\Sigma(\mathbf{p}, z) = \Sigma(\mathbf{p}, E_{\mathbf{p}}) + \frac{\partial \Sigma(\mathbf{p}, z)}{\partial z}|_{z=E_{\mathbf{p}}} \cdot (z - E_{\mathbf{p}}),$$

womit der Propagator sich in der Nähe des Pols wie

$$G_{\mathbf{p},\mathbf{p}}(z) = \frac{1/(1+\delta)}{z-E_{\mathbf{p}}} \quad \text{mit} \quad \delta = -\frac{\partial \Sigma(\mathbf{p},z)}{\partial z}|_{z=E_{\mathbf{p}}}$$
(14.7)

verhält. Das Residuum $1/(1+\delta)$ reduziert das Spektralgewicht des Einteilchenpols bei $E_{\mathbf{p}}$ zugunsten inkohärenter Anteile des Spektrums, die sich über einen breiteren Spektralbereich ausbreiten.

Die Berechnung des Propagators wird durch die Dysongleichung auf die Berechnung der Selbstenergie zurückgeführt, die sich aus weit weniger Graphen zusammensetzt als der Propagator selbst. Die Zahl der Selbstenergiegraphen lässt sich mit einem zweiten Reduzibilitätsbegriff weiter reduzieren. Wir nennen (einteilchen-irreduzible) Selbstenergiegraphen zweiteilchen-reduzible, wenn sie sich durch Zerschneiden zweier Teilchenlinien in zwei Teile zerlegen lassen, die beide mindestens einen Vertex enthalten. Die nebenstehende Figur zeigt ein Beispiel. Alle anderen Selbstenergiegraphen heißen zweiteilchenirreduzibel oder Skelettgraphen.



Man macht sich leicht klar, dass beim Zerschneiden eines reduziblen Graphen einer der Teile die beiden äußeren Beine des Selbstenergiegraphen enthält. Durch Verbinden der Schnittstellen dieses Teils erhält man einen **amputierten Selbst**energiegraphen mit denselben äußeren Variablen wie vorher. Der andere, herausgetrennte Teil ist ein eventuell einteilchen-reduzibler Selbstenergiegraph, der von gewissen inneren Variablen abhängt. Er wird ein Selbstenergie-Einschluss genannt. Durch Abtrennen endlich vieler Selbstenergie-Einschlüsse wird jeder Selbstenergiegraph zum Skelettgraphen. Umgekehrt erhält man alle Selbstenergiegraphen, indem man in alle Sketettgraphen alle möglichen Selbstenergie-Einschlüsse, auch reduzible, einbaut. Das ist aber gleichbedeutend damit, in allen Skelettgraphen die Teilchenlinien durch Doppellinien, also G^0 durch G zu ersetzen. Die Selbstenergie ist einfach die Summe aller Skelettgraphen, wenn man nur in den Sketettgraphen alle ungestörten Propagatoren durch die exakten ersetzt.

Die Skelettgraphen erster und zweiter Ordnung sind in der folgenden Figur zusammengestellt.



Übung 14.2: Man zeichne die 10 Skelettgraphen dritter Ordnung.

Da man die Summe aller Graphen wie auch die Summe aller Skelettgraphen nicht exakt ausrechnen kann, zieht man sich auf Näherungsverfahren zurück. Auf der Basis des oben dargestellten besteht ein einfaches Näherungskonzept darin, eine handhabbare Teilmenge der Skelettgraphen zu berücksichtigen. Wenn wir diese Teilsumme von Skelettgraphen, in die die exakte Greenfunktion G für alle Teilchenlinien eingesetzt ist, $\Sigma_{approx}(G)$ nennen, erhalten wir die (hinsichtlich der Quantenzahlen **q** formale) Dysongleichung

$$G = G^0 + G^0 \Sigma_{\text{approx}}(G) G, \qquad (14.8)$$

die zur selbstkonsistenten Bestimmung von G im allgemeinen numerisch iterativ zu lösen ist. Die einfachste Näherung dieses Typs besteht darin, nur die beiden Skelettgraphen erster Ordnung mitzunehmen. Die dementsprechende Selbstenergie ist in der folgenden Figur dargestellt.



Diese beiden Skelettgraphen entsprechen nach den Regeln für unnumerierte Graphen in der Energiedarstellung der Selbstenergie

$$\Sigma_{\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}_{1}'}^{(1)}(z) = \sum_{\mathbf{q}_{2}\mathbf{q}_{2}'} (v_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{2};\mathbf{q}_{1}'\mathbf{q}_{2}'} - s \, v_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{2};\mathbf{q}_{2}'\mathbf{q}_{1}'}) \langle a_{\mathbf{q}_{2}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_{2}'}^{\dagger} \rangle_{G}.$$
(14.9)

Übung 14.3: Man zeige durch einen Vergleich mit Gleichung (9.17), dass diese Näherung mit der Molekularfeldnäherung identisch ist.□

15. Zweiteilchen–Propagatoren und Parquettgleichungen

In diesem Kapitel werden wir die diagrammatische **Störungsentwicklung für** Zweiteilchen–Propagatoren

$$\mathcal{G}_{2}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}'\tau_{1}', \mathbf{q}_{2}'\tau_{2}') = \left\langle T_{s}(a_{\mathbf{q}_{1}\tau_{1}}a_{\mathbf{q}_{2}\tau_{2}}a_{\mathbf{q}_{1}'\tau_{1}'}^{\dagger}a_{\mathbf{q}_{2}'\tau_{2}'}^{\dagger}) \right\rangle,$$
(15.1)

einem Spezialfall der n-Teilchenpropagatoren (8.1), diskutieren. Der Zweiteilchen-Propagator hat per Definition die Symmetrien

$$\mathcal{G}_{2}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}'\tau_{1}', \mathbf{q}_{2}'\tau_{2}') = -s \,\mathcal{G}_{2}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2}, \mathbf{q}_{1}\tau_{1}; \mathbf{q}_{1}'\tau_{1}', \mathbf{q}_{2}'\tau_{2}')
= -s \,\mathcal{G}_{2}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{2}'\tau_{2}', \mathbf{q}_{1}'\tau_{1}')
= \mathcal{G}_{2}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2}, \mathbf{q}_{1}\tau_{1}; \mathbf{q}_{2}'\tau_{2}', \mathbf{q}_{1}'\tau_{1}').$$
(15.2)

Es ist offensichtlich, dass sich die Gleichungen in Kapitel 12, insbesondere die Gleichung (12.13), analog auf \mathcal{G}_2 übertragen. Damit gelten auch in analoger Weise die Überlegungen in Kapitel 13. Es gibt jetzt je zwei Quell– und Senkpunkte:



Verbundene Graphen sind solche, die mit mindestens einem der externen Punkte verbunden sind. Es gibt jetzt zwei offene Teilchenlinienzüge, die Quellpunkte mit Senkpunkten verbinden. Dabei entstehen zwei Alternativen der Verbindung, nämlich (12')(21') oder (11')(22'). Die verbundenen Anteile der Graphen sind hier nicht notwendig zusammenhängend. Die unverbundenen Anteile der Zählergraphen kürzen sich wie in Kapitel 13 gegen den Nenner in Gleichung (12.13) weg, sodass die Störungsreihe für \mathcal{G}_2 wie beim Einteilchen–Propagator aus allen verbundenen Graphen besteht.

Die Regeln für die Beiträge der Graphen können ebenfalls aus Kapitel 13 übernommen werden. Beachtet werden muss nur, dass die Kontraktion (11')(22')offenbar einen zusätzlichen Faktor -s erforderlich macht. Wir fügen daher eine zusätzliche **Regel für Zweiteilchen-Propagatoren** ein:

(f) Falls die offenen Teilchenlinien vom Typ (11')(22') sind, ist der Faktor -s hinzuzufügen.

Die verbundenen Graphen für \mathcal{G}_2 kann man in drei Teilmengen einteilen. Die erste bzw. zweite Teilmenge besteht aus den nicht zusammenhängenden Graphen vom Typ (12')(21') bzw. vom Typ (11')(22'). Da diese Graphen in den Teilchenlinienzügen zwischen den externen Punkten beliebige Selbstenergie-Einschlüsse haben kann, sind diese Linienzüge durch die vollen Einteilchen-Propagatoren \mathcal{G}_1 zu ersetzen. Die dritte Teilmenge besteht aus allen zusammenhängenden verbundenen Graphen. Sie bestehen aus dem einteilchen-irreduziblen Zweiteilchenvertex Γ_2 der mit allen vier externen Punkten durch Teilchenlinienzüge verbunden ist, die ebenfalls durch das volle \mathcal{G}_1 zu ersetzen sind. Diese Klassifikation der Graphen für \mathcal{G}_2 ist in der folgenden Figur dargestellt.



Die gestrichelte Linie ist im Hinblick auf die Regel (f) eingezeichnet, die zu beachten ist, wenn die mit den externen Punkten verbundenen Teilchenlinienzüge diese Linie überschreiten. Dies gilt auch für die Beiträge des Vertex Γ_2 . In Formeln lautet die oben graphisch dargestellte Gleichung

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{2}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1},\mathbf{q}_{2}\tau_{2};\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime},\mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}) &= \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1};\mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime})\mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2};\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}) \\
&+ (-s)\mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1};\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime})\mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2};\mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}) \\
&+ \int_{0}^{\infty} d\tau_{a} d\tau_{b} d\tau_{c} d\tau_{d} \sum_{\mathbf{q}_{a}...\mathbf{q}_{d}} \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1};\mathbf{q}_{a}\tau_{a})\mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{2}\tau_{2};\mathbf{q}_{b}\tau_{b}) \\
&\times \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{c}\tau_{c};\mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime})\mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{d}\tau_{d};\mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime})\Gamma_{2}(\mathbf{q}_{a}\tau_{a},\mathbf{q}_{b}\tau_{b};\mathbf{q}_{c}\tau_{c},\mathbf{q}_{d}\tau_{d}).
\end{aligned}$$

$$(15.3)$$

Das Konzept des **Skelettdiagramms** ist natürlich auch auf Γ_2 anwendbar. Das volle Γ_2 entsteht aus seinen Skelettdiagrammen durch Einsetzen aller möglichen **Selbstenergie–Einschlüsse**, d.h. durch Ersetzen aller internen Teilchenlinien durch volle Propagatoren \mathcal{G}_1 .

Der Zweiteilchenvertex Γ_2 kann benutzt werden, um alle Graphen der Selbstenergie aus Kapitel 14 jenseits der ersten Ordnung in geschlossener Form zu schreiben. Die entsprechende Gleichung ist in der folgenden Figur graphisch dargestellt.



Die gestrichelte Linie in der obigen Figur sorgt mittels der Regel (f) dafür, dass die Fermionenloops immer richtig gezählt werden. Die Figur entspricht der Formel

$$\Sigma_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau-\tau') = \delta(\tau-\tau') \sum_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_1'} \left(s \, v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_1;\mathbf{q}_1'} - v_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_1;\mathbf{q}_1'\mathbf{q}_1'} \right) \mathcal{G}_1(\mathbf{q}_1,-0;\mathbf{q}_1',0) - \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_a d\tau_b d\tau_c d\tau_d \sum_{\mathbf{q}_a \mathbf{q}_b \mathbf{q}_c;\mathbf{q}_d} v_{\mathbf{q}\mathbf{q}_2;\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2'} \Gamma_2(\mathbf{q}_a \tau_a,\mathbf{q}_b \tau_b;\mathbf{q}_c \tau_c,\mathbf{q}_d \tau_d) \times \mathcal{G}_1(\mathbf{q}_1\tau_1;\mathbf{q}_a \tau_a) \mathcal{G}_1(\mathbf{q}_d \tau_d;\mathbf{q}_2\tau_1) \mathcal{G}_1(\mathbf{q}_2'\tau_1;\mathbf{q}_b \tau_b).$$
(15.4)

Übung 15.1: Man überzeuge sich von der Richtigkeit der oben dargestellten Beziehung zwischen Σ und Γ_2 .

Die obige Beziehung zwischen Σ und Γ_2 erhellt sich auch aus einem Vergleich der Dysongleichung (14.1), die in Matrixschreibweise $(\mathcal{G}_1^0)^{-1}\mathcal{G}_1 = 1 + \Sigma \mathcal{G}_1$ lautet, mit
der Bewegungsgleichung (9.18), die in analoger Darstellung $(\mathcal{G}_1^0)^{-1}\mathcal{G}_1 = 1 + V \mathcal{G}_2$ lautet. Hierbei sind in \mathcal{G}_2 drei Zeiten in einem geeigneten Limes gleichzusetzen, damit die richtige zweizeitige Greenfunktion in (9.18) entsteht. Der Vergleich ergibt folglich die Beziehung

$$\Sigma \mathcal{G}_1 = V \mathcal{G}_2, \tag{15.5}$$

die sich diagrammatisch angesichts von Gleichung (15.4) wie folgt darstellt.



Man beachte auch hier die wichtige Rolle der gestrichelten Linie. Aus der Figur vor Gleichung (15.3) geht die rechte Seite der letzten Figur durch Drehung der Diagramme um 90 Grad und Vertauschung der ersten beiden Diagramme hervor.

Übung 15.2: Man überprüfe die Herleitung der letzten Figur.

Skelettgraphen des Zweiteilchenvertex Γ_2 können durch Zerschneiden zweier Teilchenlinien in zwei verbundene Graphen zerfallen. Solche Skelettgraphen nennt man **zweiteilchen-reduzibel**. Jeder der beiden Teilgraphen ist mit genau zweien der externen Beine verbunden und man kann **drei Kanäle** für das Zerfallen unterscheiden. Die getrennten Paare der externen Beine können sein:

(12') und $(21')$	(erster Teilchen–Loch–Kanal TL1)
(11') und $(22')$	(zweiter Teilchen–Loch–Kanal TL2 $)$
(12) und $(1'2')$	(Teilchen–Teilchen–Kanal TT) .

Beispiele für die drei Zerfallskanäle sind in der folgenden Figur gezeigt, wobei überkreuzende Wechselwirkungslinien der Deutlichkeit halber verschieden gefärbt sind.



Die Summe aller Vertexgraphen aus Γ_2 , die in einem der Kanäle irreduzibel sind, d.h. für die die oben genannten beiden Beinpaare durch Zerschneiden zweier Teilchenlinien voneinander getrennt werden können, bezeichnen wir mit einem kleinen γ . In diesem Sinne ist γ_{TL1} der im TL1–Kanal irreduzible Vertex, γ_{TL2} der im TL2–Kanal irreduzible Vertex und γ_{TT} der im TT–Kanal irreduzible Vertex. Wir stellen diese **irreduziblen Vertexfunktionen** wie in der folgenden Figur gezeigt dar. Dabei sollen die schmalen Kanten des Vertexrechtecks jeweils die Nichttrennbarkeit der beiden anliegenden Beine suggerieren.



In erster Ordnung sind diese drei Vertexfunktionen in der folgenden Figur angegeben,



die der Gleichung

$$\gamma_{\text{TL1}}^{(1)} = \gamma_{\text{TL2}}^{(1)} = \gamma_{\text{TT}}^{(1)} = (v_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2; \mathbf{q}'_1 \mathbf{q}'_2} - s \, v_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2; \mathbf{q}'_2 \mathbf{q}'_1}) \\ \times \, \delta(\tau_1 - \tau_2) \, \delta(\tau_1 - \tau'_1) \, \delta(\tau_1 - \tau'_2)$$
(15.6)

entspricht.

Aus jeder der drei irreduziblen Vertexfunktionen kann der gesamte Zweiteilchenvertex Γ_2 durch beliebig häufige Wiederholung der irreduziblen Vertexfunktion gewonnen werden, woraus man ähnlich wie bei der Dysongleichung (14.1) die in den folgenden Figuren und Gleichungen dargestellten **Bethe–Salpeter– Gleichungen** erhält. Zunächst im **TL1–Kanal**,



mit der zugehörigen Gleichung, wobei der Faktor -s beim zweiten Term rechts den zusätzlichen Teilchenloop berücksichtigt,

$$\Gamma_{2}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}'\tau_{1}', \mathbf{q}_{2}'\tau_{2}') = \gamma_{\mathrm{TL1}}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}'\tau_{1}', \mathbf{q}_{2}'\tau_{2}')
-s \int_{0}^{\beta} d\tau_{a} d\tau_{b} d\tau_{c} d\tau_{d} \sum_{\mathbf{q}_{a}\mathbf{q}_{b}\mathbf{q}_{c}\mathbf{q}_{d}} \gamma_{\mathrm{TL1}}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{d}\tau_{d}; \mathbf{q}_{c}\tau_{c}, \mathbf{q}_{2}'\tau_{2}')
\times \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{c}\tau_{c}; \mathbf{q}_{a}\tau_{a}) \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{b}\tau_{b}; \mathbf{q}_{d}\tau_{d}) \Gamma_{2}(\mathbf{q}_{a}\tau_{a}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}'\tau_{1}', \mathbf{q}_{b}\tau_{b}),$$
(15.7)

dann im TL2–Kanal,



mit der zugehörigen Gleichung

$$\Gamma_{2}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}, \mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}) = \gamma_{\mathrm{TL2}}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}, \mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}) + \int_{0}^{\beta} d\tau_{a} d\tau_{b} d\tau_{c} d\tau_{d} \sum_{\mathbf{q}_{a}\mathbf{q}_{b}\mathbf{q}_{c}\mathbf{q}_{d}} \gamma_{\mathrm{TL2}}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{d}\tau_{d}; \mathbf{q}_{c}\tau_{c}, \mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}) \times \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{c}\tau_{c}; \mathbf{q}_{a}\tau_{a}) \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{b}\tau_{b}; \mathbf{q}_{d}\tau_{d}) \Gamma_{2}(\mathbf{q}_{a}\tau_{a}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}, \mathbf{q}_{b}\tau_{b})$$

$$(15.8)$$

und schließlich im **TT–Kanal**,



mit der zugehörigen Gleichung

$$\Gamma_{2}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}, \mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}) = \gamma_{\mathrm{TT}}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}, \mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}) + \int_{0}^{\beta} d\tau_{a} d\tau_{b} d\tau_{c} d\tau_{d} \sum_{\mathbf{q}_{a}\mathbf{q}_{b}\mathbf{q}_{c}\mathbf{q}_{d}} \gamma_{\mathrm{TT}}(\mathbf{q}_{1}\tau_{1}, \mathbf{q}_{2}\tau_{2}; \mathbf{q}_{d}\tau_{d}, \mathbf{q}_{c}\tau_{c}) \times \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{c}\tau_{c}; \mathbf{q}_{a}\tau_{a}) \mathcal{G}_{1}(\mathbf{q}_{d}\tau_{d}; \mathbf{q}_{b}\tau_{b}) \Gamma_{2}(\mathbf{q}_{a}\tau_{a}, \mathbf{q}_{b}\tau_{b}; \mathbf{q}_{1}^{\prime}\tau_{1}^{\prime}, \mathbf{q}_{2}^{\prime}\tau_{2}^{\prime}).$$

$$(15.9)$$

Schließlich gibt es auch Vertexgraphen, die in keinem der drei Kanäle reduzibel sind und die man daher **total zweiteilchen-irreduzibel** nennt. Wir bezeichnen die Summe aller dieser Graphen mit γ_{irr} . In erster Ordnung stimmt γ_{irr} mit den in nur einem Kanal irreduziblen Vertexfunktionen (15.6) überein. Die ersten Korrekturen zu dieser führenden Ordnung von γ_{irr} ergeben sich erst in vierter Ordnung. Die folgende Figur zeigt ein Beispiel für einen total zweiteilchen-irreduziblen Skelettgraphen vierter Ordnung.



Für das folgende ist es wichtig zu wissen, dass ein in einem Kanal zweiteilchenreduzibler Skelettgraph in den beiden anderen Kanälen zweiteilchen-irreduzibel sein muss. Um sich davon zu überzeugen, muss man sich alle Möglichkeiten des Zerschneidens von Skelettgraphen vergegenwärtigen. In den oben gezeigten Beispielen für die drei Kanäle sind immer die beiden offenen Linienzüge zerschnitten worden. Es gibt jedoch zwei weitere Möglichkeiten des Zerschneidens, die in der folgenden Figur verdeutlicht sind.



Das Zerschneiden kann also auch zweimal einen der offenen Linienzüge oder zweimal einen geschlossenen Linienzug betreffen. Werde nun, wie in dem obigen Beispiel gezeigt, durch zwei Schnitte S_1 das Beinpaar (ab) vom Beinpaar (cd) getrennt. Wir wollen annehmen, dass der Skelettgraph auch in einem der anderen Kanäle reduzibel wäre. Dann müsste es möglich sein, durch zwei andere Schnitte S_2 a von b und c von d zu trennen. Dies müsste dann erst recht nach Anwendung des Schnitts S_1 möglich sein. Die beiden durch den Schnitt S_1 entstandenen Teilgraphen enthalten jeder zwei offene Linienzüge, von denen jeweils einer a mit b bzw. c mit d verbinden muss, damit die Teilgraphen durch je einen Schnitt aus S_2 in je zwei Teile zerfallen können. Genau einer dieser zwei Teile enthält dann aber den zweiten durch S_1 entstandenen Linienzug, der andere nicht. Folglich kann der andere nur ein offener Linienzug mit Selbstenergie–Einschlüssen sein. Solche Teile konnten aber ohne die Schnitte S_1 nicht mit den anderen Teilen verbunden gewesen sein. Damit haben wir einen Wiederspruch zur Annahme der Reduzibilität in einem zweiten Kanal gefunden gefunden. Wir halten das Fazit fest:

Jeder Skelettgraph aus Γ_2 ist in höchstens einem der drei Kanäle reduzibel.

Auf der Grundlage der damit gewonnenen Erkenntnis wissen wir jetzt, dass jeder Graph aus Γ_2 entweder total zweiteilchen-irreduzibel ist oder zweiteilchenreduzibel in genau einem der drei Kanäle. Wir stellen daher die Bilanz

$$\Gamma_2 = \gamma_{\rm irr} + (\Gamma_2 - \gamma_{\rm TL1}) + (\Gamma_2 - \gamma_{\rm TL2}) + (\Gamma_2 - \gamma_{\rm TT})$$

auf und gewinnen durch Auflösen nach Γ_2 die Bilanzgleichung

$$\Gamma_2 = \frac{1}{2} (\gamma_{\text{TL1}} + \gamma_{\text{TL2}} + \gamma_{\text{TT}} - \gamma_{\text{irr}}).$$
(15.10)

Die Bilanzgleichung (15.10) und die drei Bethe–Salpeter–Gleichungen (15.7-9) führen die vier Funktionen Γ_2 , γ_{TL1} , γ_{TL2} und γ_{TT} auf den total irreduziblen Vertex γ_{irr} zurück. Gleichzeitig wird mittels Gleichung (15.4) die Selbstenergie Σ und

mittels der Dysongleichung (14.2) der Einteilchen-Propagator \mathcal{G}_1 aus Γ_2 berechnet, der in den anderen Gleichungen benötigt wird. Schließlich liefert Gleichung (15.3) den Zweiteilchen-Propagator. Die oben zusammengestellten Gleichungen nennt man die **Parquettgleichungen**.

Die einfachste Anwendung der Parquettgleichungen geht von der Annahme aus, dass $\gamma_{\rm irr}$ gut durch die Beiträge erster Ordnung (15.6) genähert wird. Wie schon oben angemerkt, würden erste Korrekturen dazu von vierter Ordnung sein.

Um die Parquettgleichungen bei vorgegebenem total irreduziblem Vertex γ_{irr} zu lösen, kann man wie folgt vorgehen. Man setzt alle vier Vertexfunktionen Γ_2 , γ_{TL1} , γ_{TL2} und γ_{TT} auf den Anfangswert γ_{irr} . Dann verbessert man diese Anfangswerte, indem man die alten Werte in die rechten Seiten der drei Bethe– Salpeter–Gleichungen (15.7-9) in der Form $\gamma = \Gamma_2 - \gamma \mathcal{G}_1 \mathcal{G}_1 \Gamma_2$, in die Bilanzgleichung (15.10) sowie in die Selbstenergiegleichung (15.4) und die Dysongleichung (14.2) iterativ einsetzt. Mit iterativ ist hier gemeint, dass man die rechten Seiten mit den alten Werten ausrechnet und die neuen Werte an den linken Seiten abliest.

Wir betrachten abschließend als einen Spezialfall des Zweiteilchen-Propagators den zweizeitigen **Dichte-Dichte-Propagator**. Dabei beschränken wir uns auf ein translationsinvariantes System unter Benutzung der Impulsdarstellung, auf dessen Spektralfunktion wir uns schon im Kapitel 6 bezogen haben (siehe (6.24)) und den wir für nichtwechselwirkende Systeme in Kapitel 11 berechnet haben (siehe (11.10,18)). Mit dem Dichteoperator (2.39) ist er durch

$$\mathcal{G}_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\tau-\tau') = -\left\langle T_{-1}(\rho_{\mathbf{q}\tau},\rho_{\mathbf{q}\tau'}^{\dagger})\right\rangle$$
$$= s \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k'}\atop\mu,\mu'} \mathcal{G}_{2}\left((\mathbf{k}+\mathbf{q},\mu,\tau),(\mathbf{k'},\mu',\tau');(\mathbf{k'}+\mathbf{q},\mu',\tau'+0),(\mathbf{k},\mu,\tau+0)\right) \quad (15.11)$$

gegeben. Hier wurde die richtige Reihenfolge der Operatoren durch eine geeignete Spezifizierung der Zeiten sichergestellt. Man beachte den sich dadurch ergebenden Faktor s vor \mathcal{G}_2 . Die Diagramme für diesen Propagator enthalten zwei externe Vertizes, die in der folgenden Figur dargestellt sind.



Für die Störungsentwicklung von (15.11) gibt es zusammenhängende und nicht zusammenhängende Diagramme. Die folgende Figur zeigt die Summe aller Diagramme in der Energiedarstellung unter Benutzung des vollen Einteilchenpropagators und einer Vertexfunktion Γ .



Diese Diagramme entstehen aus den Diagrammen vor Gleichung (15.3) durch Zusammenführen der externen Vertexpaare (1, 1') und (2, 2') zu jeweils einem roten Vertex. Dabei ist das erste Diagramm als aus dem dortigen ersten und dritten Diagramm und das zweite, nicht zusammenhängende aus dem dortigen zweiten entstanden. Offensichtlich tragen die nicht zusammenhängenden Diagramme aufgrund der Impulserhaltung nur für den trivialen Fall $\mathbf{q} = 0$ bei. Daher brauchen wir im folgenden nur die **zusammenhängenden Graphen** zu betrachten.

Die Regeln für die Beiträge der Graphen können auch hier aus Kapitel 13 übernommen werden. Die Quantenzahlen \mathbf{k} , \mathbf{k}' , μ und μ' sind als innere Quantenzahlen zu interpretieren und daher zu summieren. Teilchenloops, die die externen Vertizes enthalten, sind hinsichtlich der Vorzeichenregel (e') (siehe (13.5)) als Loops mitzuzählen. Wegen des oben erwähnten Faktors +s in der Gleichung (15.11) ist die Regel (f) vom Anfang dieses Kapitels daher hier zu modifizieren:

(f') Für die zusammenhängenden Graphen ist der Faktor –1 hinzuzufügen.

Der Vertex Γ enthält einen Beitrag nullter Ordnung $\Gamma = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\mu,\mu'}\delta_{\omega_1,\omega'_1}$, der den ungestörten Propagator ergibt, der in Kapitel 11 für Elektronen bei T = 0 schon berechnet wurde (siehe Gleichung (11.18)). Der bosonische Fall ist wegen der Bosekondensation im Grundzustand nicht interessant.

Wie wir im folgenden Kapitel sehen werden, enthält die Störungsentwicklung des Propagators (15.11) Terme, die für $\mathbf{q} \to 0$ beliebig stark anwachsen, wenn die Wechselwirkung des Systems die **Coulombwechselwirkung** (siehe (2.51) für $\kappa = 0$) ist. Wir definieren dazu den Begriff der **Vertexreduzibilität**. Ein Diagramm des Propagators (15.11) heißt Vertexreduzibel, wenn es durch Zerschneiden einer einzigen Wechselwirkungslinie in zwei nicht zusammenhängende Teile zerfällt. Wenn wir die Summe aller irreduziblen Diagramme, die man auch **Polarisationsdiagramme** nennt, mit $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ bezeichnen, **wobei** Π **nicht das Minuszeichen der Regel (f') tragen soll**, erhalten wir die graphische Gleichung

$$\overset{\omega}{q} \longleftrightarrow \overset{\omega}{q} = -\overset{\omega}{q} \longleftrightarrow \overset{\omega}{q} - \overset{\omega}{q} \longleftrightarrow \overset{\omega}{q}$$

die in Formeln der Gleichung

$$G_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega) = -\Pi(\mathbf{q},\omega) + \Pi(\mathbf{q},\omega) \frac{4\pi e^2}{Vq^2} \Pi(\mathbf{q},\omega) - \dots$$

$$= -\Pi(\mathbf{q},\omega) \left[1 + \frac{4\pi e^2}{Vq^2} G_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega)\right]$$
(15.12)

entspricht und die nach dem Propagator aufgelöst

$$G_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(\omega) = -\frac{\Pi(\mathbf{q},\omega)}{1 + \frac{4\pi e^2}{Vq^2}\Pi(\mathbf{q},\omega)}.$$
(15.13)

ergibt. Für die longitudinale dielektrische Funktion (6.68) bedeutet dies die Formel

$$\epsilon(\mathbf{q},\omega)_{\text{long}} \equiv \frac{1}{\left(\epsilon(\mathbf{q},\omega)^{-1}\right)_{\text{long}}} = 1 + \frac{4\pi e^2}{Vq^2}\Pi(\mathbf{q},\omega).$$
(15.14)

16. Das homogene Elektronengas

In diesem Kapitel sollen einige Anwendungen der diagrammatischen Störungsrechnung auf das Modell des homogenen Elektronengases vorgestellt werden. Im Modell des homogenen Elektronengases betrachtet man auf einem **positiv geladenen Hintergrund** mit fest vorgegebener homogener Ladungsdichte $n_{\rm ex}$ ein System von negativ geladenen Elektronen. Bekanntlich erzwingt die lange Reichweite der Coulombwechselwirkung im Mittel **Landungsneutralität**, sodass die mittlere Zahl der Elektronen durch die **Neutralitätsbedingung**

$$\left\langle \int_{V} d^{3}\mathbf{r} \left(n(\mathbf{r}) - n_{\mathrm{ex}} \right) \right\rangle = \langle N \rangle - N_{\mathrm{ex}} = 0$$
 (16.1)

gegeben ist. Indem man im Wechselwirkungsterm H^\prime des Hamilton
operators alle Coulomb
potentiale

$$v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$
(16.2)

zwischen den beteiligten Ladungen berücksichtigt, erhält man in offensichtlicher Verallgemeinerung von Gleichung (2.55)

$$H' = \frac{1}{2} \int_{V} d^{3}\mathbf{r} \int_{V} d^{3}\mathbf{r}' (n(\mathbf{r}) - n_{\mathrm{ex}}) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (n(\mathbf{r}') - n_{\mathrm{ex}}) - \frac{1}{2} v(\mathbf{0}) \int_{V} d^{3}\mathbf{r} (n(\mathbf{r}) - n_{\mathrm{ex}}).$$
(16.3)

Hier kann man den Term der Selbstwechselwirkung streichen, wenn man die Bedingung der Ladungsneutralität (16.1) bei der Behandlung des Systems als nicht nur im Mittel, sondern als strikt gültig betrachtet, $N - N_{\text{ex}} = \rho_0 - \rho_{\text{ex},0} = 0$. Damit besteht beim Übergang in die Impulsdarstellung nach Gleichung (2.53) die einzige Wirkung des positiven Hintergrundes in der Unterdrückung des Terms mit Impulsübertrag $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ und der Hamiltonoperator des homogenen Elektronengases lautet insgesamt

$$H = H_0 + H' (16.4)$$

 mit

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q},\mu} \epsilon_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}, \qquad \epsilon_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \mu$$
(16.5)

und (siehe auch (2.51))

$$H' = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}(\neq \mathbf{0})} \frac{4\pi e^2}{q^2} (\rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} - \rho_{\mathbf{0}})$$

$$= \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q} \\ \mu, \mu'}}^{\mathbf{q}\neq \mathbf{0}} \frac{4\pi e^2}{q^2} a_{\mathbf{q}_1, \mu}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2, \mu'}^{\dagger} a_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}, \mu'} a_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}, \mu}.$$
 (16.6)

Das Modell des Elektronengases kennt **zwei Längen**, den Bohrschen Radius $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529177 \cdot 10^{-8}$ cm und den mittleren Abstand zwischen zwei Elektronen. Indem man zu **atomaren Einheiten** übergeht, d.h. indem man alle **Längen in Bohrschen Radien** und alle **Energien in Einheiten von 2Ry**, $2Ry = me^4/\hbar^2 = 0.436 \cdot 10^{-10}$ erg= 27,2114 eV, misst, kann man alle Naturkonstanten im Modell eliminieren und das so skalierte Modell hat als einzigen Parameter das Verhältnis der beiden Längen. Es ist üblich, als diesen Parameter den dimensionslosen Radius r_s einer Kugel zu wählen, deren Volumen das spezifische Volumen V/N des Elektronengases ist. In Formeln bedeutet das (siehe (11.14))

$$\frac{4\pi}{3}r_s^3 = \frac{V}{N} = \frac{3\pi^2}{k_{\rm F}^3} \quad \Rightarrow \quad r_s = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \cdot \frac{1}{k_{\rm F}} = \frac{1,919158}{k_{\rm F}}.$$
 (16.7)

Übung 16.1: Man vollziehe den oben angegebenen Übergang zu atomaren Einheiten nach und zeige, dass er die Naturkonstanten auf den Wert $m = \hbar = e^2 = 1$ setzt. Damit werden die kinetische Energie eines Teilchens und das Coulombpotential zweier Teilchen im Abstand r durch die Operatoren $-\Delta/2$ und 1/r gegeben. Für die in der Literatur verbreitete Messung der Energie in Einheiten von 1Rysind diese Operatoren $-\Delta$ und 2/r. □

Das Verhalten des Gases wird durch das Wechselspiel zwischen kinetischer Energie H_0 und potentieller Energie H' bestimmt. Die kinetische Energie ist von der Größenordnung $k_{\rm F}^2 \propto 1/r_s^2$, während die potentielle Energie mit der Dimension 1/Länge proportional zu $1/r_s$ ist. Deshalb dominiert bei hoher Dichte, $r_s \ll 1$, vielleicht auf den ersten Blick kontraintuitiv, die kinetische Energie und die Coulombwechselwirkung kann im **Limes hoher Dichte** als kleine Störung betrachtet werden. Man überzeugt sich durch ein **Skalierungsargument** leicht davon, (siehe Anhang C) dass die Störungsrechnung nach der Coulombwechselwirkung formal eine Entwicklung nach Potenzen von r_s ist.

Wir betrachten zunächst die **Grundzustandsenergie** der homogenen Elektronengases. Die kinetische Energie pro Elektron im Grundzustand des idealen Gases (in atomaren Einheiten) ist durch die Formel (siehe dazu (11.15))

$$E_0/N = \frac{3}{5} \frac{k_{\rm F}^2}{2} = \frac{3}{10} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \cdot \frac{1}{r_s^2} = \frac{1,104951}{r_s^2}$$
(16.8)

gegeben. In der Hartree-Fock-Näherung (siehe die Gleichungen (9.*,**) in der Übung 9.2) verschwindet der Coulombbeitrag, der durch das linke Diagramm der folgenden Figur repräsentiert wird, wegen der Ladungsneutralität und die **Austauschenergie** (rechtes Diagramm) ist der einzige Beitrag erster Ordnung zur Grundzustandsenergie,



der nach den Regeln aus Kapitel 13 für die Formel

$$E_{1} = \frac{1}{V\beta^{2}} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mu\\m,n}}^{\mathbf{k}-\mathbf{k}'\neq0} \frac{\frac{1}{2}v_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}}{(i\omega_{2m+1}-\epsilon_{\mathbf{k}})(i\omega_{2n+1}-\epsilon_{\mathbf{k}'})} e^{i(\omega_{2m+1}+\omega_{2n+1})\eta}$$

$$= -V \int \frac{d^{3}\mathbf{k}}{(2\pi)^{3}} \int \frac{d^{3}\mathbf{k}'}{(2\pi)^{3}} v_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} f(\epsilon_{\mathbf{k}}) f(\epsilon_{\mathbf{k}'}) \qquad (v_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi}{q^{2}})$$
(16.9)

steht. Bei der Herleitung der zweiten Zeile wurde hier $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}(-0) = f(\epsilon_{\mathbf{k}})$ benutzt. Die in Anhang C erläuterte Berechnung der Integrale in (16.9) liefert für die Austauschenergie das Ergebnis

$$E_1/N = -\frac{V}{N} \frac{k_{\rm F}^4}{4\pi^3} = -\frac{3k_{\rm F}}{4\pi} = -\frac{3}{4\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \cdot \frac{1}{r_s} = -\frac{0.458165}{r_s}.$$
 (16.10)

Die Beiträge aller Diagramme höherer Ordnung nennt man Korrelationsenergie. Die Diagramme zweiter Ordnung, die formal von der Ordnung $r_s^0 = O(1)$ sind, sind in der folgenden Figur zusammengestellt.



Hier würden die beiden linken Diagramme wieder nur für $\mathbf{q} = 0$ beitragen und geben daher verschwindende Beiträge. Die beiden rechten Diagramme sind nicht nur formal, sondern auch faktisch von der Ordnung O(1). Beim mittleren Diagramm tragen jedoch beide Vertizes denselben internen Impuls \mathbf{q} . Dies führt zu einer **Divergenz** des Beitrags dieses Diagramms, wie wir gleich sehen werden.

Man erkennt nun leicht, dass analoge Diagramme in n-ter Ordnung n Vertizes mit identischen Impulsen **q** haben und entsprechend schlimmere Divergenzen zeigen. Gemeint sind die sogenannten **Ringdiagramme**, deren Struktur in der folgenden Figur gezeigt ist.



Nach den Diagrammregeln entspricht ein Vertex–Loop–Paar in einem Ringdiagramm



dem Ausdruck

$$\frac{v_{\mathbf{q}}}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{n} G^{0}_{\mathbf{k}}(i\omega_{2n+1}) G^{0}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(i\omega_{2m+2n+1}) = \frac{v_{\mathbf{q}}}{V} G^{0}_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(i\omega_{2m}), \quad (16.11)$$

der das Vertex–Loop–Paar auf den Dichte–Dichte–Propagator (11.10) des wechselwirkungsfreien Systems zurückführt.

Trotz der diagrammweisen Divergenz der Störungsreihe kann man der Summe der Ringdiagramme einen endlichen Wert zuordnen. Zur Begründung denken wir uns das Coulombpotential zu einem Yukawa–Potential (2.51) regularisiert, wodurch die Divergenz verschwindet. Man kann dann die Summe der Ringdiagramme berechnen und es zeigt sich, dass man nach Entfernung der Regularisierung einen endlichen Wert erhält. Die Summe der Ringdiagramme ergibt einen Beitrag zur Grundzustandsenergie

$$E_{\text{Ring}} = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{2n} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\frac{4\pi}{Vq^2} G_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(i\omega_{2m}) \right)^n$$

$$= \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\ln\left(1 - \frac{4\pi}{Vq^2} G_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(i\omega_{2m})\right) + \frac{4\pi}{Vq^2} G_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(i\omega_{2m}) \right] \quad (16.12)$$

$$= -\frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^1 dr \, \frac{r\left(\frac{4\pi}{Vq^2} G_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(i\omega_{2m})\right)^2}{1 - r\frac{4\pi}{Vq^2} G_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(i\omega_{2m})}.$$

Hier wurden die Symmetriezahlen der Ringdiagramme verwendet, die sich zu S = 1/2n ergeben. Für n > 2 ist hierfür zusätzlich zu den zyklischen Permutationen die Inversion verantwortlich, während man für n = 2 die Vorschrift (13.12) beachten muss. In der Darstellung der letzten Zeile von (16.12) erkennt man besonders deutlich, dass die Divergenz aufgrund der Summation auch ohne die gedachte Regularisierung beseitigt ist.

Laut Gleichung (11.18) ist der Dichte–Dichte–Propagator proportional zu $\rho_{\rm F} \propto k_{\rm F}$ (siehe dazu (7.26)) und schneidet die **q**–Integration in (16.12) daher bei $q^2 \propto k_{\rm F}$, d.h. bei $q \propto \sqrt{k_{\rm F}} \propto \sqrt{1/r_s}$ ab. Diese Abschneidung, die physikalisch Ausdruck der **Abschirmung** ist, erzeugt einen Energiebeitrag proportional zu ln $k_{\rm F}$, den wir im folgenden berechnen wollen.

Um den Vorfaktor des ln $k_{\rm F}$ -Beitrags zu bestimmen, reicht eine Betrachtung des divergenten Diagramms zweiter Ordnung mit der genannten Abschneidung. Der

entsprechende Beitrag zur Grundzustandsenergie

$$E_{\rm Ring} \sim -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q}}^{q > \sqrt{k_{\rm F}}} \left(\frac{4\pi}{Vq^2}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left(G^0_{\rho_{\mathbf{q}},\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(i\omega)\right)^2 \qquad (r_s \to 0) \tag{16.13}$$

wird in Anhang C berechnet und verhält sich im Grenzfall $r_s \to 0$ nach Gleichung (C.6) wie

$$E_{\text{Ring}}/N = \frac{1-\ln 2}{\pi^2} \ln r_s + O(1) = 0.031091 \ln r_s + O(1) \qquad (r_s \to 0).$$
(16.14)

Weitere Terme der Hochdichteentwicklung konnten mit einigem Aufwand berechnet werden. Wir erwähnen hier nur ein leicht zu erreichendes Ergebnis mit der folgenden

Übung 16.2: Man überprüfe dass Resultat

$$E_2^{\rm oben}/N = -\frac{3}{2\pi^2}$$
 (16.15)

für den Beitrag des Diagramms zweiter Ordnung, das oben rechts in der Figur nach Gleichung (16.10) steht. Die Rechnung sollte mit Propagatoren in der Zeitdarstellung durchgeführt werden. Man benutze dabei die Formeln

$$\beta f(\epsilon) (1 - f(\epsilon)) = -\frac{df(\epsilon)}{d\epsilon} \to \delta(\epsilon - \mu) \qquad (\beta \to \infty)$$

und

$$\int_{q < k_{\rm F}} dq^3 \frac{1}{|\mathbf{k}_{\rm F} - \mathbf{q}|^2} = 2\pi k_{\rm F},$$

wo \mathbf{k}_{F} ein Wellenvektor der Länge k_{F} ist, dessen Richtung bei der Berechnung des Integrals in Kugelkoordinaten als Polarachse zu wählen ist. \Box

Im Limes geringer Dichten $r_s \to \infty$ dominiert im homogenen Elektronengas die Coulombenergie über die kinetische Energie. Dies ergibt in führender Ordnung einen klassischen Grundzustand, in dem die Elektronen als punktförmige Massenpunkte möglichst große Abstände voneinander anstreben und sich daher auf einem Kristallgitter anordnen. Man spricht hier von einem Wignerkristall. Die Berechnung der entsprechenden Gittersummen über die Coulombpotentiale gelingt mit einer Methode, die man Ewaldsummation nennt. Man findet die Behandlung dieses Problems im Anhang A meines Vorlesungsmanuskripts "Theoretische Festkörperphysik I". Es zeigt sich, dass die Energien verschiedener naheliegender Kristallstrukturen erstaunlich nahe beieinanderliegen. Die tiefste Energie erreicht man in der kubisch raumzentrierten Kristallstruktur mit dem Wert (wieder in Einheiten von 2Ry)

$$E_{\text{Wigner}}/N = -\frac{0.895929}{r_s} + \frac{1.325}{r_s^{-3/2}} - \frac{0.365}{r_s^2} + \dots \quad (r_s \to \infty),$$
(16.16)

wobei die Konstante für das nächstbeste kubisch flächenzentrierte Gitter den Wert 0,895874 hat.

Die in Gleichung (16.16) angegebene Korrektur nächster Ordnung ist wie angedeutet proportional zu $r_s^{-3/2}$ und geht auf die von der kinetischen Energie erzeugten **Nullpunktsschwankungen** der Elektronen zurück. Die qualitative Abschätzung dieser Korrektur gelingt leicht durch Betrachtung der Energie eines Elektrons als harmonischem Oszillator

$$E_{\rm Osz} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{\langle x^2 \rangle}{2r_s^3}$$

aus der man mit der Unschärferelation $\langle p^2 \rangle \langle x^2 \rangle = O(1)$ und dem Virialsatz $\langle p^2 \rangle = \langle x^2 \rangle / r_s^3$ sofort auf $\langle x^2 \rangle \sim 1 / \langle p^2 \rangle \sim r_s^{3/2}$ schließt. Man erkennt, dass die mittlere Auslenkung klein gegen den mittleren Abstand der Elektronen ist, $\langle x^2 \rangle / r_s^2 \sim r_s^{-1}$. Deshalb ist der Wignerkristall ein Isolator und das Modell des homogenen Elektronengases zeigt einen **Phasenübergang** zwischen einem homogenen metallischen Zustand bei hoher Dichte und einem kristallinen isolierenden Zustand bei geringer Dichte.

Seit 1980 ist es gelungen, mittels **Quanten-Monte-Carlo-Methoden** die Grundzustandsenergie des homogenen Elektonengases für beliebige Dichten mit hoher Präzision numerisch zu berechnen [D.M. Ceperley und B.J Alder, Phys. Rev. Letters **45**, 566 (1980)]. Die Ergebnisse dieser Rechnungen werden durch **Interpolationsformeln von Perdew und Zunger** zusammengefasst [J.P. Perdew und A. Zunger, Phys. Rev. B **23**, 5048 (1981)]. Die folgenden Figuren zeigen in blau das interpolierte Verhalten und mit roten Punkten diskrete berechnete Werte der Grundzustandsenergie (siehe auch Anhang C).



Die Formeln lauten für hohe Dichten

$$E/N = \frac{1,104951}{r_s^2} - \frac{0,458165}{r_s} + 0,03109 \ln r_s - 0,048032 + 0,0020r_s \ln r_s - 0,0116r_s + \dots \qquad (0 < r_s \le 1)$$
(16.17)

und für niedrige Dichten

$$E/N = \frac{1,104951}{r_s^2} - \frac{0,458165}{r_s} - \frac{0,1423}{1+1,0529\sqrt{r_s}+0,3334r_s} \quad (r_s > 1).$$
(16.18)

Diese beiden Formeln schließen bei $r_s = 1$ stetig differenzierbar aneinander an.

Wir machen noch einmal darauf aufmerksam, dass unsere Formeln eine halb so große Energie im Vergleich mit der Literatur angeben, weil wir alle Energien in Einheiten von 2Ry anstelle von Ry gemessen haben.

Der Spin der Elektronen führt im kristallinen Grundzustand zu einer makroskopischen Entartung. Diese Entartung wird durch eine **Austauschwechselwirkung** aufgehoben, deren Berechnung sich als subtil erwies. Nach den Ergebnissen von Ceperley und Alder geht das Elektrongas bei $r_s = 75 \pm 5$ über in einen spinpolarisierten Zustand und bei $r_s = 100 \pm 20$ in einen kristallinen, der dann auch ferromagnetisch spinpolarisiert bleibt.

Als zweite Problemstellung beim homogenen Elektronengas betrachten wir den **Einteilchenpropagator**. Die Modifikation der Einteilchenenergie $\epsilon_{\mathbf{q}}$ wird in erster Ordnung durch die Hartree–Fock–Formel (9.*) in der Übung 9.2 als

$$x_{\mathbf{q}} = \epsilon_{\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathrm{ex}}(\mathbf{q}) = \frac{q^2}{2} - \int_{k < k_{\mathrm{F}}} \frac{dk^3}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{|\mathbf{k} - \mathbf{q}|^2} = \frac{q^2}{2} - \frac{k_{\mathrm{F}}}{2\pi} \Big[2 + \frac{k_{\mathrm{F}}^2 - q^2}{k_{\mathrm{F}}q} \ln \Big| \frac{k_{\mathrm{F}} + q}{k_{\mathrm{F}} - q} \Big| \Big] - \mu \qquad (\mu = \frac{k_{\mathrm{F}}^2}{2} - \frac{k_{\mathrm{F}}}{2\pi}).$$
(16.19)

beschrieben. Die Berechnung des **k**-Integrals für die **Austauschenergie** $\epsilon_{\text{ex}}(\mathbf{q})$ geschieht in leichter Verallgemeinerung des Integrals in Übung 16.1. Man beachte die Verschiebung des chemischen Potentials mit dem Ziel $x_{\mathbf{q}}|_{q=k_{\text{F}}} = 0$.

Der Ausdruck für die Austauschenergie zeigt eine zufällige Verwandtschaft mit der Funktion (11.19), $\epsilon_{\rm ex}(\mathbf{q}) = (2k_{\rm F}/\pi)g(2q/k_{\rm F},0)$. Bemerkenswert und unphysikalisch ist die logarithmische Divergenz der Ableitung der Austauschenergie bei $q = k_{\rm F}$, die eine **unendliche Fermigeschwindigkeit** $v_{\rm F} = d\epsilon_{\rm ex}(q)/dq|_{q=k_{\rm F}} =$ ∞ zur Folge hat. Eine Inspektion des Integrals in (16.19) ergibt das Zusammenspiel der langen Reichweite der Coulombwechselwirkung mit der Schärfe der Fermikante als Ursache der Divergenz. Da die Schärfe der Fermikante bei Metallen experimentell als realistisch abgesichert ist, muss die lange Reichweite der Coulombwechselwirkung als ein Artefakt der Hartree-Fock–Näherung für das unphysikalische Ergebnis verantwortlich gemacht wer-Tatsächlich führen Korrelationseffekte, wie wir am Ende von Kapitel 6 den. schon gesehen haben, zu einer Abschirmung der Coulombwechselwirkung. Die Fortentwicklung der Hartree–Fock–Näherung in eine abgeschirmte Hartree– Fock–Näherung sollte das Problem daher lösen.

Um die Abschirmung in die Hartree-Fock-Näherung einzubauen, muss man in die Wechselwirkungslinie im rechten Selbstenergiediagramm vor Gleichung (14.9) beliebig viele Polarisationsdiagramme einschließen. Damit ersetzt man die nackte durch eine **abgeschirmte Wechselwirkung**, deren Bestimmungsgleichung in der folgenden Figur gezeigt ist.

Die Lösung dieser Gleichung, die die durch die dicke blaue Wellenlinie dargestellte abgeschirmte Wechselwirkung für die Diagrammregeln angibt, steht für (siehe (15.14))

$$-\frac{1}{V}u(\mathbf{q},\omega) = -\frac{4\pi}{Vq^2} \frac{1}{1 + \frac{4\pi}{Vq^2}\Pi(\mathbf{q},\omega)} = -\frac{4\pi}{Vq^2\,\epsilon(\mathbf{q},\omega)_{\text{long}}}.$$
(16.20)

Für die **abgeschirmte Selbstenergie erster Ordnung** reicht es, in der abgeschirmten Coulombwechselwirkung (16.20) das ungestörte Polarisationsdiagramm $\Pi(\mathbf{q}, \omega) = -G^0_{\rho_{\mathbf{q}}, \rho^{\dagger}_{\mathbf{q}}}(\omega)$ aus (11.18) zu benutzen. Damit lautet die Formel für die abgeschirmte Selbstenergie

$$\Sigma_{\mathrm{ex}}(\mathbf{q}, i\omega_{2m+1}) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{m'=-\infty}^{\infty} \frac{u(\mathbf{q} - \mathbf{k}, i\omega_{2m'})}{i\omega_{2(m'-m)+1} - \epsilon_{\mathbf{k}}} e^{i\eta \,\omega_{2(m'-m)+1}}, \qquad (16.21)$$

die dem folgenden Diagramm entspricht.



Die Berechnung dieses Diagramms im Anhang C
 ergibt für die analytische Fortsetzung in die z–Ebene

$$\Sigma_{\rm ex}(\mathbf{q},z) = -\int \frac{dk^3}{(2\pi)^3} \Big[u(\mathbf{q} - \mathbf{k}, z - \epsilon_{\mathbf{k}}) \Theta(k_{\rm F} - k) + \int_0^{k(k_{\rm F} + k/2)} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\Im u(\mathbf{k}, \omega + i0)}{z - \omega - \epsilon_{\mathbf{q} - \mathbf{k}}} \Big],$$
(16.22)

wobei der erste Summand (siehe (C.8)) vom Pol des Einteilchenpropagators und der zweite Summand (siehe (C.9)) vom Schnitt des Polarisationsdiagramms herrührt. Die Auswertung der Impulsableitung des Polbeitrags an der Fermikante ergibt eine endliche Korrektur (siehe (C.10)) zur **Fermigeschwindigkeit**, die damit durch die Formel

$$v_{\rm F} = k_{\rm F} - \frac{\ln r_s}{2\pi} + O(1) \qquad (r_s \to 0)$$
 (16.23)

gegeben ist. Eine **Interpolationsformel** für die abgeschirmte Version der Einteilchenenergie (16.19) für beliebige Wellenzahlen hat die Gestalt

$$x_{\mathbf{q}} = \frac{q^2}{2} - \frac{k_{\mathrm{F}}}{2\pi} \left[2 + \frac{k_{\mathrm{F}}^2 - q^2}{k_{\mathrm{F}}q} \ln \left| \frac{k_{\mathrm{F}} + q}{k_{\mathrm{F}} - q + c\sqrt{k_{\mathrm{F}}}} \right| \right] - \mu,$$
(16.24)

wobei die positive Konstantecbei ge
eigneter Anpassung den ${\cal O}(1)-{\rm Term}$ in (16.23) reproduziert.

Der zweite Beitrag in (16.22) trägt auch zur Fermigeschwindigkeit bei. In Anhang C wird jedoch gezeigt, dass dieser Beitrag um einen Faktor $1/k_{\rm F}$ kleiner als der Beitrag (16.23) ist.

17. Elektron–Phonon–Systeme

In diesem Kapitel betrachten wir ein **zweikomponentiges System**, das aus Elektronen (fermionische Teilchen mit Feldoperatoren a) und Phononen (bosonische Teilchen mit Feldoperatoren b) mit dem ungestörten Hamiltonoperator

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \omega_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} b_{\mathbf{p}}^{\dagger} b_{\mathbf{p}'}$$
(17.1)

besteht und als Störung die lineare Elektron–Phonon–Wechselwirkung

$$H' = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q'}\mathbf{p}} \left(V_{\mathbf{q}\mathbf{q'}\mathbf{p}} \, a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{p}} + V_{\mathbf{q'}\mathbf{q}\mathbf{p}}^{*} \, a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{p}}^{\dagger} \right) \tag{17.2}$$

besitzt. Wir werden fermionische Teilchen durch schwarze durchgezogene Linien wie bisher und bosonische Teilchen durch blaue gestrichelte Linien und den Vertex durch einen roten Punkt darstellen. Wegen der beiden Komponenten des hier betrachteten Systems gibt es zwei Typen von externen Vertizes, die wir in schwarz für fermionische und in blau für bosonische Teilchen wie in der folgenden Figur gezeigt darstellen.



Es gibt auch zwei Typen von Vertizes, die in der folgenden Figur analog zum Vertex in Kapitel 13 definiert sind



und die den beiden Summanden in H' entsprechen. Da die Zahl der Phononen in H_0 erhalten ist, sich in H' aber um 1 verändert, tragen in den Störungsreihen für Einteilchen-Propagatoren wie in Gleichung (13.3) im Zähler wie im Nenner nur gerade Ordnungen bei, wobei in der Ordnung 2n die beiden Vertextypen je nmal auftreten müssen. Die Kontraktion nach dem Wickschen Theorem erzeugt hier fermionische und bosonische Einteilchen-Propagatoren. Wir werden die ungestörten fermionischen Einteilchen-Propagatoren $\mathcal{G}^0_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau-\tau')$ und die bosonischen $\mathcal{B}^0_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau-\tau')$ nennen und die entsprechenden gestörten vollen Propagatoren $\mathcal{G}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau-\tau')$ bzw. $\mathcal{B}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\tau-\tau')$. Die diagrammatische Störungsentwicklung für die Propagatoren verläuft weitgehend wie in Kapitel 13, sodass wir die Einzelheiten der Argumentation hier nicht zu wiederholen haben. Wir geben im folgenden eine Liste der

Regeln für Graphen mit unnumerierten Vertizes:

Die Regel (a) aus Kapitel 13 lautet hier unverändert

(a) Man versehe jeden Vertex mit einer Zeit und seine Beine mit Quantenzahlen und verfahre analog mit externen Punkten.

Jedes kontrahierte Paar (V, V^*) von Vertizes erzeugt einen bosonischen Propagator \mathcal{B}^0 und hat zusammen mit diesem Propagator große Analogie zu den gerichteten Zweiteilchenvertizes aus Kapitel 13, wie die folgende Figur zeigt.



Ein Unterschied besteht in der Zeitabhängigkeit von \mathcal{B}^0 , die physikalisch eine **Re**tardierung der Wechselwirkung zum Ausdruck bringt. Beachten muss man hier das Minuszeichen in der Definition (4.1) der Einteilchen-Propagatoren. Dasselbe Minuszeichen hat man für den zusätzlichen bosonischen Propagator zu beachten für die beiden Vertizes, die mit zwei bosonischen externen Punkten verbunden sind, wie in der folgenden Figur gezeigt.



Die Regel (b) lautet daher

(b) Man schreibe für jedes intern verbundene Vertexpaar einen Faktor

$$-V_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{1}'\mathbf{p}_{1}}V_{\mathbf{q}_{2}'\mathbf{q}_{2}\mathbf{p}_{2}}^{*}\mathcal{B}_{\mathbf{p}_{1},\mathbf{p}_{2}}^{0}(\tau_{1}-\tau_{2}).$$
(17.3)

und für die obige extern verbundene Konfiguration den Faktor

$$-V_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{1}'\mathbf{p}_{1}}V_{\mathbf{q}_{2}'\mathbf{q}_{2}\mathbf{p}_{2}}^{*}\mathcal{B}_{\mathbf{k},\mathbf{p}_{2}}^{0}(\tau-\tau_{2})\mathcal{B}_{\mathbf{p}_{1},\mathbf{k}'}^{0}(\tau_{1}-\tau').$$
(17.4)

Die Regeln (c) und (d) sind im wesentlichen identisch mit den entsprechenden Regeln in Kapitel 13 und lauten

(c) Man schreibe für jede interne oder mit einem externen fermionischen Punkt verbundene Fermionenlinie, die die Zeiten τ_x und τ_y verbindet und Beine mit Quantenzahlen \mathbf{q}_x und \mathbf{q}_y verknüpft, einen Faktor

$$\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{q}_{x},\mathbf{q}_{y}}(\tau_{x}-\tau_{y}) \qquad \qquad \underbrace{\tau_{x}}_{\mathbf{q}_{x}} \underbrace{\tau_{y}}_{\mathbf{q}_{y}}$$

Falls die Beine mit demselben Vertex verbunden sind, ist dieser Faktor wie $\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{q}_{x},\mathbf{q}_{y}}(-0)$ zu verstehen.

(d) Man summiere über alle inneren (d.h. an den Vertexbeinen stehenden) Quantenzahlen und integriere alle Vertexzeiten von 0 bis β .

In der Regel (e') zählen hier nur die Elektronenloops und sie lautet deshalb

(e') Man füge einen Faktor

$$\frac{(-1)^{\lambda}}{S} \tag{17.5}$$

hinzu, wo λ die Zahl der Fermionenloops und S die Symmetriezahl des Graphen ist.

Der Übergang von der Zeitdarstellung in die **Energiedarstellung** verläuft ähnlich wie in Kapitel 13. Man muss hier nur auch die Phononpropagatoren \mathcal{B} fourier-transformieren. Auch hier ergibt sich **Energieerhaltung** an jedem Vertex, wie am folgenden Beispiel eines verbundenen Graphen des fermionischen Einteilchen-Propagators demonstriert.



Es folgt eine Liste der

Regeln für die Energiedarstellung:

- (a') Man versehe die Beine aller Vertizes und, falls vorhanden, der externen Punkte mit Quantenzahlen q. Jeder fermionischen und jeder bosonischen Teilchenlinie gebe man eine Energie so, dass an jedem Vertex die Energie erhalten ist.
- (b') Man schreibe für jeden internen bosonischen Propagator (siehe (17.3)) einen Faktor

$$-V_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{1}'\mathbf{p}_{1}}V_{\mathbf{q}_{2}'\mathbf{q}_{2}\mathbf{p}_{2}}^{*}B_{\mathbf{p}_{1},\mathbf{p}_{2}}^{0}(i\omega_{2\nu})$$
(17.6)

und für die (17.4) entsprechende Konfiguration mit der externen Energie $i\omega_{2m}$ den Faktor

$$-V_{\mathbf{q}_{1}\mathbf{q}_{1}'\mathbf{p}_{1}}V_{\mathbf{q}_{2}'\mathbf{q}_{2}\mathbf{p}_{2}}^{*}B_{\mathbf{k},\mathbf{p}_{2}}^{0}(i\omega_{2m})B_{\mathbf{p}_{1},\mathbf{k}'}^{0}(i\omega_{2m}).$$
(17.7)

(c) Man schreibe für jede fermionische Teilchenlinie



einen Faktor $G^0_{\mathbf{q}_x,\mathbf{q}_y}(i\omega_z)$. Falls beide Enden einer fermionischen Linie an demselben Vertex hängen, füge man einen Faktor $e^{i\omega_z\cdot\eta}$ hinzu.

- (d') Man summiere über alle inneren Quantenzahlen. Man setze die Energien der an den beiden externen Punkten hängenden Linien, falls vorhanden, gleich der externen Energie ω_{2m+1} (für fermionische externe Punkte) bzw. ω_{2m} (für bosonische externe Punkte). Alle weiteren Energievariablen summiere man mit einem Faktor $1/\beta$, für Fermionen über die Werte $\omega_{2\nu+1}$, für Bosonen über $\omega_{2\nu}$ ($\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$). Dann bilde man den Limes $\eta \to 0+$.
- (e') Man füge einen Faktor $\frac{(-1)^{\lambda}}{S}$ hinzu (siehe (17.5)).

Eine Diagrammatik, bei der die Pfeile an den Bosonpropagatoren sich erübrigen, wollen wir anhand einer konkreteren Modellierung des Elektron–Phonon– Systems vorstellen. Wir nehmen ein Metall mit Bravaisstruktur an, dessen Leitungsband mit dem longitudinal–akustischen Phononenzweig wechselwirkt. Als Quantenzahlen **q** haben wir dann den (modulo reziprokem Gittervektor) erhaltenen Quasi–Impuls **k** in der Brillouinzone BZ und eine Spinkomponente $\mu = \pm \frac{1}{2}$ der Elektronen. Der ungestörte Hamiltonoperator lautet

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} \sum_{\mu} a_{\mathbf{k},\mu}^{\dagger} a_{\mathbf{k},\mu} + \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} \right)$$
(17.8)

und die Störung ist gegeben durch

$$H' = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mu} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}, \mu}^{\dagger} a_{\mathbf{k}', \mu} (b_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}}^{\dagger} + b_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'})$$
(17.9)

mit hermiteschem Matrixelement $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = V^*_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$. (Wir ignorieren in (17.9) Umklappprozesse.) Die in (17.9) auftretende Kombination

$$x_{\mathbf{q}} = (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \tag{17.10}$$

ist generisch für Elektron–Phonon–Kopplungen, weil sie proportional zu einer Fourierkomponente der **Auslenkung** der Ionen aus ihrer Gleichgewichtslage ist.

Bei dieser Art von Modell ergibt sich zu jeder Kontraktion eines Vertexpaars ein sehr ähnliches Paar mit vertauschten Vertizes. Diese beiden Kontraktionen sind in der folgenden Figur dargestellt.



Wie man sieht, unterscheiden sich die Beiträge dieser beiden Kontraktionen nur durch die Pfeilrichtung und durch die Vorzeichen von Energie ω und Impuls **q** des

Phonons. Der ungestörte Phononpropagator des Modells (17.8) ist nach Gleichung (7.7)

$$B^{0}_{\mathbf{q}}(z) = \frac{1}{z - \omega_{\mathbf{q}}}.$$
(17.11)

Da aus Gründen der Bewegungsumkehrinvarianz für die Phononenergien immer $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{-\mathbf{q}}$ gilt, braucht man für die Zusammenfassung der beiden Kontraktionen den Propagator

$$D^{0}_{\mathbf{q}}(z) = B^{0}_{\mathbf{q}}(z) + B^{0}_{-\mathbf{q}}(-z) = \frac{1}{z - \omega_{\mathbf{q}}} + \frac{1}{-z - \omega_{-\mathbf{q}}} = \frac{2\omega_{\mathbf{q}}}{z^{2} - \omega_{\mathbf{q}}^{2}}.$$
 (17.12)

Übung 17.1: Man beweise durch zweifache Anwendung der Bewegungsgleichungen (3.14) die Gleichung

$$G^{0}_{x_{\mathbf{q}},x^{\dagger}_{\mathbf{q}}}(z) = D^{0}_{\mathbf{q}}(z) = \frac{2\omega_{\mathbf{q}}}{z^{2} - \omega_{\mathbf{q}}^{2}},$$
(17.13)

wobei $G^0(z)$ ein nach (3.9,11) mit dem Hamiltonoperator (17.8) gebildeter Propagator ist. Gleichung (17.13) verleiht dem Propagator (17.12) die anschauliche physikalische Bedeutung des **Auslenkungs–Propagators**.

Man kann auch für mit externen bosonischen Vertizes verbundene Teilchenlinien den Richtungspfeil entfernen, wenn man anstelle der bisher verwendeten andere externe Vertizes benutzt, die als Quellpunkt dem Operator $x_{\mathbf{q}}$ und als Senkpunkt dem Operator $x_{\mathbf{q}}^{\dagger} = x_{-\mathbf{q}}$ entsprechen. Wir zeigen in der folgenden Figur, wie wir diese externen Punkte hier graphisch darstellen werden.



Mit der oben beschriebenen Zusammenfassung von Graphen gibt es für das Modell (17.8,9) nur noch einen Typ von Vertex und keinen Richtungspfeil an den Phononpropagatoren. Die Vorzeichen von Energie und Impuls an den internen Phononpropagatoren können beliebig gewählt werden. Wir notieren in der Notation der obigen Figur die zu ändernde

Regel für das Elektron–Phonon–Modell (17.8,9):

(b') Man schreibe für jeden internen bosonischen Propagator und seine beiden Vertizes (siehe (17.6)) den Faktor

$$-V_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_1-\mathbf{q}}V_{\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}D^0_{\mathbf{q}}(i\omega_{2\nu}) \tag{17.14}$$

und für ein Paar von externen (x_q, x_{-q}) -Vertizes mit seinen beiden internen Vertizes (siehe (17.7)) den Faktor

$$-V_{\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{1}-\mathbf{q}}V_{\mathbf{k}_{2},\mathbf{k}_{2}+\mathbf{q}}D_{\mathbf{q}}^{0}(i\omega_{2m})D_{-\mathbf{q}}^{0}(i\omega_{2m}).$$
(17.15)

Die Struktur der diagrammatischen Entwicklung des Einteilchen–Propagators der Elektronen $G_{\mathbf{q}}(z)$ ist völlig analog zu der in Kapitel 14 geschildeten Entwicklung. Für Einteilchen–Propagatoren der Phononen führt man den Begriff der **Einteilchen–Reduzibilität** hinsichtlich des Zerschneidens von (gestrichelten) Linien des Phonon–Propagators $D^0(z)$ ein. Damit ergeben sich Selbstenergieeinschlüsse für den Phononpropagator

$$D_{\mathbf{q}}(z) = G_{x_{\mathbf{q}}, x_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(z) \tag{17.16}$$

wie in der folgenden Figur gezeigt.



Den hier dargestellten Selbstenergie
einschluss zweiter Ordnung, der auch Teilchen– Loch–Blase genannt wird, haben wir in Kapitel 11 berechnet. Die sich aus der
Reduziblilitätsanalyse ergebende Dysongleichung mit der Selbstenergi
e $\Pi_{\mathbf{q}}(z)$, in deren Definition die Minuszeichen aus (17.14,15) implementiert sein sollen, hat die
 graphische Gestalt

die in Formeln

$$D_{\mathbf{q}}(z) = D_{\mathbf{q}}^{0}(z) + D_{\mathbf{q}}^{0}(z) \Pi_{\mathbf{q}}(z) D_{\mathbf{q}}(z)$$
(17.17)

lautet und mit $\left(D_{\bf q}(z)\right)^{-1}=\left(D_{\bf q}^0(z)\right)^{-1}\!\!-\Pi_{\bf q}(z)$ die Lösung

$$D_{\mathbf{q}}(z) = \frac{2\,\omega_{\mathbf{q}}}{z^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - 2\,\omega_{\mathbf{q}}\Pi_{\mathbf{q}}(z)} \tag{17.18}$$

hat.

Man kann natürlich auch den ursprünglichen Einteilchen-Propagator

$$B_{\mathbf{q}}(z) = G_{b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(z) \tag{17.19}$$

berechnen. Die in der folgenden Figur gezeigte diagrammatische Reihe

ergibt in Formeln unter Benutzung von (17.18) das Ergebnis

$$B_{\mathbf{q}}(z) = \frac{z + \omega_{\mathbf{q}} + \Pi_{\mathbf{q}}(z)}{z^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - 2\,\omega_{\mathbf{q}}\Pi_{\mathbf{q}}(z)}.$$
(17.20)

Übung 17.2: Man zeige, dass man für einen weiteren in $D_{\bf q}(z)$ enthaltenen Propagator die Formel

$$G_{b^{\dagger}_{-\mathbf{q}},b_{-\mathbf{q}}}(z) = -\frac{z - \omega_{\mathbf{q}} - \Pi_{\mathbf{q}}(z)}{z^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - 2\,\omega_{\mathbf{q}}\Pi_{\mathbf{q}}(z)}$$
(17.21)

erhält. Schließlich gibt es zwei weitere in $D_{\mathbf{q}}(z)$ enthaltene Propagatoren, deren ungestörte Anteile wegen der Erhaltung der Bosonenzahl verschwinden, für die man analog erhält

$$G_{b_{\mathbf{q}},b_{-\mathbf{q}}}(z) = G_{b_{-\mathbf{q}}^{\dagger},b_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(z) = \frac{-\Pi_{\mathbf{q}}(z)}{z^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - 2\,\omega_{\mathbf{q}}\Pi_{\mathbf{q}}(z)}.$$
(17.22)

Man überprüfe die Konsistenz der Formeln (17.20-22), indem man die Summenregel $D_{\mathbf{q}}(z) = G_{b_{\mathbf{q}},b_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(z) + G_{b_{\mathbf{q}},b_{-\mathbf{q}}}(z) + G_{b_{-\mathbf{q}}^{\dagger},b_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(z) + G_{b_{\mathbf{q}}^{\dagger},b_{\mathbf{q}}}(z)$ kontrolliert. \Box

Übung 17.3: Die Kombination

$$p_{\mathbf{q}} = (b_{\mathbf{q}} - b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \tag{17.23}$$

ist proportional zu einer Fourierkomponente des Impulses der Ionen. Man leite mittels der Bewegungsgleichungen (3.14) die Beziehung

$$z^{2} D_{\mathbf{q}}(z) = 2 \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}^{2} G_{p_{\mathbf{q}}, p_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(z)$$
(17.24)

her, in der die Störung (17.7) nicht explizit auftritt, weil $x_{\bf q}$ mit ihr vertauscht. Sodann beweise man auf analoge Weise die Beziehung

$$G_{p_{\mathbf{q}},p_{\mathbf{q}}^{\dagger}}(z) = D_{\mathbf{q}}^{0} + \frac{4z^{2}}{(z^{2} - \omega_{\mathbf{q}})^{2}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'-\mathbf{q}} G_{a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}},a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}}(z)$$
(17.25)

und erhält mit (17.24)

$$D_{\mathbf{q}}(z) = D_{\mathbf{q}}^{0}(z) + D_{\mathbf{q}}^{0}(z) \left(\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'-\mathbf{q}} G_{a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}},a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}}(z) \right) D_{\mathbf{q}}^{0}(z).$$
(17.26)

Durch Vergleich dieser Formel mit (17.17) schließe man auf die Beziehung

$$\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'-\mathbf{q}} G_{a_{\mathbf{k}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}},a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}}(z) = \frac{\Pi_{\mathbf{q}}(z)}{1 - D_{\mathbf{q}}^{0}(z)\Pi_{\mathbf{q}}(z)}.$$

$$(17.27)$$

In den hier diskutierten zweikomponentigen Systemen gibt es eine Vielzahl interessanter Prozesse, für die die folgende Figur einige Diagramme in führender Ordnung zeigt. Von links nach rechts sieht man den Zerfall eines Phonons in zwei Phononen, den Zerfall eines Phonons in ein elektronisches Teilchen–Loch–Paar und die Streuung zweier Phonen aneinander.



A. Zum Satz von Blaschke

Die eindeutige Charakterisierung einer in einer Halbebene $\Im z > 0$ holomorphen und beschränkten Funktion durch eine unendliche Folge von Funktionswerten ergibt sich aus dem folgenden

Satz von Blaschke:

Sei f(z) holomorph und beschränkt in der Halbebene $\Im z > 0$. Für eine wachsende Zahlenfolge $0 < a_1 < a_2 < \ldots$ mit der Eigenschaft $\sum_{n=1}^{\infty} 1/a_n = \infty$ gelte $f(ia_n) = 0$. Dann gilt $f(z) \equiv 0$ in der ganzen Halbebene.

Zum Beweis dieses Satzes betrachtet man die Funktionen

$$g_N(z) = f(z) \prod_{n=1}^N \frac{ia_n + z}{ia_n - z},$$
 (A.1)

die ebenfalls holomorph in der oberen Halbebene und auf dem Rande der oberen Halbebene durch dieselbe Konstante M wie die Funktion f(z) beschränkt sind. Wegen des Maximumsprinzips für holomorphe Funktionen gilt dann $|g_N(z)| \leq M$ in der ganzen oberen Halbebene und daher folgt für alle z in der oberen Halbebene

$$|f(z)| \le M \prod_{n=1}^{N} \left| \frac{ia_n - z}{ia_n + z} \right| = M \prod_{n=1}^{N} \left| 1 - \frac{2z}{ia_n + z} \right| \to 0 \quad (N \to \infty). \square$$
(A.2)

Falls es nun zwei in einer Halbebene $\Im z > \epsilon > 0$ mit $\epsilon < a_1$ beschränkte holomorphe Funktionen $G_{A,B}(z - i\epsilon)$ mit der Eigenschaft (4.10) bzw. (4.11) gäbe, so würde deren Differenz die Voraussetzungen des Theorems von Blaschke erfüllen und wäre identisch 0. Dies beweist die behauptete Charakterisierung.

Bemerkung: Zur eindeutigen Festlegung von $G_{A,B}(z)$ braucht man nicht die Werte an allen Stellen $i\omega_{2m+1}$ bzw. $i\omega_{2m}$, sondern es reicht nach dem obigen Satz offenbar jede Teilfolge, für die die Summe der reziproken ω divergiert. Durch die Werte für eine solche Teilfolge sind dann aber die Werte an allen nicht in der Teilfolge enthaltenen Stellen auch schon eindeutig bestimmt. Dies hat interessante Implikationen. So folgt z.B., dass schon ein einziger mit einem noch so kleinen Fehler behafteter Fourierkoeffizient die analytische Fortsetzung in eine beschränkte holomorphe Funktion ausschließt. Dies wirft Licht auf die bekannte Problematik einer Gewinnung der analytischen Fortsetzung aus numerischen Werten der Fourierkoeffizienten.

Übungsaufgabe: Die Funktion $e^{\beta z} + 1$ verschwindet an den Stellen $z = i\omega_{2m+1}$ und die Funktion $e^{\beta z} - 1$ an den Stellen $z = i\omega_{2m}$. Warum widerspricht dies nicht dem Satz von Blaschke?

B. Zur Herleitung von (4.13) und (4.15)

In diesem Anhang soll die Herleitung der Formeln (4.13) und (4.15) aus den Fourierreihen (4.7,8) mittels Residuenmethoden näher erläutert werden. Wir betrachten zunächst den Fall s = +1 und wandeln eine endliche Fouriersumme mit Hilfe der Fermifunktion (4.12) und des Residuensatzes um in

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-N-1}^{N} G_{A,B}^{(2m+1)} e^{-i\omega_{2m+1}\tau} = \frac{1}{2\pi i} \begin{cases} \int_{\mathcal{C}_N} G_{A,B}(z) \left(-f(z)\right) e^{-z\tau} dz & (-\beta < \tau < 0) \\ \int_{\mathcal{C}_N} G_{A,B}(z) \left(1 - f(z)\right) e^{-z\tau} dz & (0 < \tau < \beta). \end{cases}$$
(B.1)

Hier haben wir die Summanden als Residuenintegrale um die 2(N + 1) in der Summe vorkommenden Matsubara-Frequenzen geschrieben. Die in der folgenden Figur links gezeigten blauen Integrationswege können dann in die beiden roten rechteckigen Wege C_N deformiert werden. Im Grenzfall $N \to \infty$ sollen gleichzeitig die vertikalen Teile der Wege ins Unendliche geschoben werden. Damit deren Beitrag mit diesem Prozess für reelle τ verschwindet, benutzt man für $\tau < 0$ die Fermifunktion -f(z) und für $\tau > 0$ die Funktion 1 - f(z), die beide die Residuen $1/\beta$ haben und zusammen mit dem Faktor $e^{-z\tau}$ für einen exponentiellen Abfall der Integranden für $z \to \pm \infty$ sorgen. Die ins Unendliche geschobenen horizontalen Anteile der Wege tragen für $N \to \infty$ wegen der Eigenschaft (3.18) nicht bei.



Im Grenzfall $N \to \infty$ schiebt man schließlich die verbleibenden horizontalen Wege infinitesimal dicht an die reelle z-Achse heran. Das Integral über den Weg \mathcal{C} in der zweiten Zeile von (4.13) ist dann als die Summe der beiden Integrale $\int_{-\infty+i0}^{\infty+i0}$

und $\int_{\infty-i0}^{-\infty-i0} zu$ verstehen. In der dritten Zeile sind die beiden Integrale unter Verwendung der Notation $z_{\pm} = z \pm i0$ schließlich zu einem einzigen über die reelle z-Achse zusammengefasst. Nachdem man die Wege so festgelegt hat, kann man der Variablen τ einen Imaginärteil geben und die Formel (4.13) beschreibt die analytische Fortsetzung von $\mathcal{G}_{A,B}(\tau)$ in den entsprechenden Streifen in der komplexen τ -Ebene.

Die zu (B.1) analoge Gleichung im Fall s = -1 lautet

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-N}^{N} G_{A,B}^{(2m)} e^{-i\omega_{2m}\tau} = \frac{G_{A,B}^{(0)}}{\beta} + \frac{1}{2\pi i} \begin{cases} \int_{\mathcal{C}_N} G_{A,B}(z) g(z) e^{-z\tau} dz & (-\beta < \tau < 0) \\ \int_{\mathcal{C}_N} G_{A,B}(z) (1+g(z)) e^{-z\tau} dz & (0 < \tau < \beta). \end{cases}$$
(B.3)

Die Umwandlung der Summe in das Residuenintegral unterscheidet sich, wie auch dem rechten Bild in der Figur auf der vorigen Seite zu entnehmen ist, dadurch, dass der Summand mit m = 0, dessen Matsubara-Frequenz auf der reellen z-Achse auf dem Rand des Analytiziätsbereichs der Greenfunktion liegt, nicht als Residuenintegral geschrieben werden kann und daher explizit auf der rechten Seite von (B.3) erscheint. Das Verschwinden der Beiträge der vertikalen Wege wird hier durch die beiden Funktionen g(z) und 1 + g(z) für die beiden Vorzeichen von τ garantiert. Im weiteren besteht völlige Analogie zum Fall s = +1 und es folgt die Gültigkeit der Gleichung (4.15) in den genannten komplexen Streifen der τ -Ebene.

C. Einige Rechnungen zu Kapitel 16

Das Skalierungsargument reskaliert Wellenzahlen so, dass die Fermiwellenzahl und damit der Radius der Fermikugel dichteunabhängig wird: $k \to \tilde{k}/r_s$. Damit muss man Energien wie $\omega \to \tilde{\omega}/r_s^2$ skalieren und folglich skalieren Einteilchenpropagatoren wie $G_{\mathbf{k}}(\omega) \to r_s^2 G_{\tilde{\mathbf{k}}}(\tilde{\omega})$. Die Coulombwechselwirkung in der Impulsdarstellung skaliert wie $v_{\mathbf{q}} \to r_s^2 v_{\tilde{\mathbf{q}}}$, Impulssummen wie $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \to r_s^{-3} \int \frac{d^3 \tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3}$ und Energiesummen wie $\frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \to \int d\omega \to r_s^{-2} \int d\tilde{\omega}$. Nach den Regeln für die Beiträge der Feynmangraphen bringt jede Wechselwirkung zwei Propagatoren, einen Faktor v und je eine Impuls– und Energiesumme, insgesamt also einen Faktor r_s .

Zur Aufstellung der ersten Zeile von **Gleichung (16.9)** hat man zu beachten, dass Gleichung (13.9) in der Form

$$F - F_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_{\nu=1}^{\infty} \Gamma_{\nu} \tag{C.1}$$

einen extra Faktor $-1/\beta$ zu dem Beitrag der Graphen impliziert. Zur Berechnung der Integrale in der zweiten Zeile führt man am besten die Variablensubstitution $\mathbf{k} = \mathbf{p} + \mathbf{q}/2$, $\mathbf{k}' = \mathbf{p} - \mathbf{q}/2$ auf die neuen Variablen \mathbf{p} und \mathbf{q} durch und erhält die Formel

$$E_{1} = -V \underbrace{\int \frac{d^{3}\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \int \frac{d^{3}\mathbf{q}}{(2\pi)^{3}}}_{|\mathbf{p} \pm \mathbf{q}/2| < k_{\mathrm{F}}} \frac{4\pi}{q^{2}}, \qquad (C.2)$$

die man mit Blick auf die folgende Figur, in der die Definition aller benutzten Symbole angezeigt ist, leicht auswerten kann.



Da der Integrand nicht von **p** abhängt, liefert die zuerst ausgeführte **p**–Integration das Volumen der links gezeigten doppelten Kugelkalotte, deren Berechnung in Zylinderkoordinaten (ρ, z) die rechte Figur erläutert:

$$\int_{\text{Kalotte}} d^3 \mathbf{p} = 2 \int_0^{k_{\text{F}}(1-x)} \pi \rho^2 dz = \frac{4\pi k_{\text{F}}^3}{3} (1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3) \quad (0 < x < 1).$$
(C.3)

Das in Kugelkoordinaten berechnete \mathbf{q} -Integral ist dann trivial, weil der Radialintegrand polynomial ist und man erhält schließlich das Ergebnis (16.10).

Als nächstes bestimmen wir das Verhalten des Ausdrucks in **Gleichung (16.13)** im Limes $k_{\rm F} \to \infty$. Wir verwenden unser früheres Ergebnis in Gleichung (11.18) für den Dichte–Dichte–Propagator. Der Beitrag des **q**–Integrals für $q > k_{\rm F}$ ist konvergent und daher von der Ordnung O(1) und wir können zur Bestimmung des ln r_s –Terms die **q**–Integration auf den Bereich $\sqrt{k_{\rm F}} < q < k_{\rm F}$ einschränken. Die untere Abschneidung des **q**–Integrals bedeutet für den Wert der Variablen $\kappa = q/k_{\rm F}$ in Gleichung (11.18) die Einschränkung $\kappa \ll 1$. Die sorgfältige Entwicklung der Funktion $g(\kappa, i\xi)$ für kleine κ bei festem ξ/κ ergibt

$$g(\kappa, i\xi) = \frac{i\xi}{2\kappa} \ln \frac{i\xi + 2\kappa}{i\xi - 2\kappa} - 1 + O(\kappa^2) = \frac{\xi}{2\kappa} \operatorname{arctg} \frac{2\kappa}{\xi} - 1 + O(\kappa^2).$$
(C.4)

Damit berechnet sich das ω -Integral zu

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[\frac{\omega/\epsilon_{\rm F}}{2q/k_{\rm F}} \operatorname{arctg} \frac{2q/k_{\rm F}}{\omega/\epsilon_{\rm F}} - 1 \right]^2 = \frac{q \, k_{\rm F}}{3} (1 - \ln 2). \tag{C.5}$$

Indem man dies in (16.13) einsetzt, $\rho_{\rm F} = V k_{\rm F} / \pi^2$ (in atomaren Einheiten) benutzt und mittels Gleichung (11.14) das Volumen V durch die Teilchenzahl N ersetzt, erhält man schließlich das Endergebnis

$$E_{\rm Ring}/N \sim -2\frac{1-\ln 2}{\pi^2} \int_{\sqrt{k_{\rm F}}}^{k_{\rm F}} \frac{dq}{q} \sim \frac{1-\ln 2}{\pi^2} \ln r_s = 0.031091 \ln r_s.$$
(C.6)

Die diskreten Werte der Grundzustands- und Korrelationsenergie aus der Arbeit von Perdew und Zunger, die in die Figuren vor den Interpolatiopnsformeln (16.16,17) eingezeichnet sind, zeigt die folgende Tabelle.

r_s	E/N	Korrelationsenergie
$0,\!5$	$3,\!42740$	-0,07607
1	0,587251	-0,059534
2	0,001953	-0,045201
3	-0,067066	-0,037117
4	-0,077454	-0,031972
5	-0,075732	-0,028297
6	-0,071025	-0,025357
10	-0,053509	-0,018742
20	-0,031538	-0,011392
50	-0,014601	-0,005880
100	-0,007779	-0,003307

Grundzustands– und Korrelationsenergie E/N in Einheiten von 2Ry

Für die Berechnung der abgeschirmten Selbstenergie erster Ordnung (16.21) ist die analytische Fortsetzung der Matsubara-Energien $i\omega_{2m+1}$ auf beliebige komplexe Energien z erforderlich, die mit den in Kapitel 4 vorgestellten

Methoden durchgeführt wird. Die folgende Figur soll bei der Umformung der m'-Summe in ein z'-Integral zwecks analytischer Fortsetzung der Energie $i\omega_{2m+1}$ in die komplexe Variable z helfen. Der Parameter k' steht dabei für $|\mathbf{q} - \mathbf{k}|$.



Angesichts der geraden Werte 2m' und der Konvergenzhilfe $\eta \to 0+$ hat man die m'-Summe über die Pole der Bosefunktion mit dem Faktor 1 + g(z') in ein z'-Integral umzuwandeln und erhält

$$\Sigma_{\mathrm{ex}}(\mathbf{q}, i\omega_{2m+1}) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \int_{\mathcal{D}} \frac{dz'}{2\pi i} \frac{\left(1 + g(z')\right) u(\mathbf{q} - \mathbf{k}, z')}{i\omega_{2m+1} - z' - \epsilon_{\mathbf{k}}} e^{-\eta z'}.$$
 (C.7)

Die Faktoren 1 + g(z') und $e^{-\eta z'}$ erlauben die Deformation des Integrationsweges \mathcal{D} in den Weg \mathcal{C} , der einen Pol des Integranden bei $z' = i\omega_{2m+1} - \epsilon_{\mathbf{k}}$ und die Verzweigungsschnitte des Polarisationsdiagramms auf der reellen z'-Achse umschließt. Für die Auswertung des Polbeitrags beachte man die Beziehung $1 + g(i\omega_{2m+1} - \epsilon_{\mathbf{k}}) = f(\epsilon_{\mathbf{k}})$ und erhält

$$\Sigma_{\rm ex}^{\rm Pol}(\mathbf{q}, z) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}}^{k < k_{\rm F}} u(\mathbf{q} - \mathbf{k}, z - \epsilon_{\mathbf{k}}).$$
(C.8)

Für den Beitrag des Schnittes muss man wissen, dass die Logarithmen in der Formel (11.18) für $z' = \omega \pm i0$ identische Realteile und vorzeichenumgekehrte Imaginärteile $u(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \omega \pm i0) = \Re u(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \omega) \pm i\Im u(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \omega + i0)$ erzeugen, sodass die Imaginärteile bei der Integration über den Weg \mathcal{C} alleine beitragen. Wegen $1 + g(\omega) \rightarrow \Theta(\omega) \quad (\beta \rightarrow \infty)$ erhält man daher, wenn man noch die Summationsvariable \mathbf{k} durch $\mathbf{q} - \mathbf{k}$ substituiert,

$$\Sigma_{\rm ex}^{\rm Schnitt}(\mathbf{q}, z) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \int_0^{k(k_{\rm F} + k/2)} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\Im u(\mathbf{k}, \omega + i0)}{z - \omega - \epsilon_{\mathbf{q} - \mathbf{k}}}.$$
 (C.9)

Um die **Korrektur zur Fermigeschwindigkeit** zu berechnen, hat man die Ableitung

$$\delta v_{\rm F}^{\rm Pol} = \frac{d \Sigma_{\rm ex}^{\rm Pol}(q,0)}{dq} |_{q=k_{\rm F}} = -\int_{k < k_{\rm F}} \frac{dk^3}{(2\pi)^3} \mathbf{n}_{\mathbf{q}} \nabla_{\mathbf{q}} u(\mathbf{q} - \mathbf{k}, -\epsilon_{\mathbf{k}}) |_{q=k_{\rm F}} = \frac{1}{\pi} \int_0^{1-\sqrt{r_s}} k^2 dk \int_{-1}^1 dx \frac{2(1-kx)}{\left[1+k^2-2kx\right]^2} \sim \frac{-1}{2\pi} \ln r_s + O(1) \ (r_s \to 0).$$
(C.10)

zu bilden, wo $n_{\mathbf{q}}$ der Einheitsvektor in Richtung **q** ist. In der letzten Zeile wurde die Variable k durch $k_{\mathrm{F}} k$ substituiert und nach Einführung der Abschneidung die abgeschirmte durch die nackte Coulombwechselwirkung ersetzt. Die ohne Abschirmung unendliche Fermigeschwindigkeit wird durch die Abschirmung also auf einen endlichen Wert proportional zu $\ln k_{\mathrm{F}}$ reduziert, dessen Proportionalitätskonstante wir mit (C.10) bestimmt haben..

Um sicher zu sein, dass die obere Abschneidung der k-Integration den Abschirmeffekt korrekt wiedergibt, muss man sich von der Gleichmäßigkeit der Abschätzung $g(\kappa,\xi) = O(1)$ der Funktion (C.4) im hier vorliegenden Fall vergewissern. Da man hier die Funktion $g(|\mathbf{k}_{\rm F} - \mathbf{k}|/\epsilon_F, -\epsilon_{\mathbf{k}}/\epsilon_F)$ zu betrachten hat, reicht die Abschätzung $0 \le \xi/2\kappa \le (k_{\rm F} - k)/\sqrt{k_{\rm F}^2 + k^2 - 2k_{\rm F}kx} \le 1$, die $1 \ge -g(\kappa,\xi) \ge 1 - \pi/4 > 0$ zur Folge hat.

Nicht übersehen sollte man, dass die effektive Wechselwirkung u für $\xi/2\kappa < 1$ auch einen Imaginärteil hat, der aber bei $\xi = 0$ verschwindet und daher für die Fermigeschwindigketi nicht relevant ist. Dieser Imaginärteil spielt offenbar eine Rolle für den zweiten Term in Gleichung (16.22). Er ergibt sich aus dem Imaginärteil der Funktion $g(\xi, \kappa)$, der durch die Formel

$$\Im g(\xi \pm i0,\kappa) = \frac{\mp 1}{4\kappa} \begin{cases} \left[1 - \left(\frac{\xi - \kappa^2}{2\kappa}\right)^2\right] & \left(-2\kappa - \kappa^2 < \xi < -2\kappa + \kappa^2\right) \\ \xi & \left(-2\kappa + \kappa^2 < \xi < 2\kappa - \kappa^2\right) \\ \left[\left(\frac{\xi + \kappa^2}{2\kappa}\right)^2 - 1\right] & \left(2\kappa - \kappa^2 < \xi < 2\kappa + \kappa^2\right) \end{cases}$$
(C.11)

beschrieben wird. Das Verhalten dieses Imaginärteils ist in der folgenden Figur für $\kappa = 1$ gezeigt.



Mit dem Imaginärteil (C.11) und einem entsprechenden Realteil der Funktion glautet die Formel für $\Im u$

$$\Im u(\mathbf{k}, \omega + i0) = \frac{16k_{\rm F}\Im g\left(\frac{k}{k_{\rm F}}, \frac{\omega + i0}{\epsilon_{\rm F}}\right)}{\left(k^2 - \frac{4k_{\rm F}}{\pi}\Re g\left(\frac{k}{k_{\rm F}}, \frac{\omega}{\epsilon_{\rm F}}\right)\right)^2 + \left(\frac{4k_{\rm F}}{\pi}\Im g\left(\frac{k}{k_{\rm F}}, \frac{\omega + i0}{\epsilon_{\rm F}}\right)\right)^2}.$$
 (C.12)

Die Integrationen in Gleichung (C.9) divergieren bei k = 0 ohne die Abschneidung im Nenner von Gleichung (C.12). Für $k \ll k_{\rm F}$ kann man die ω -Integration in (C.9) auf den linearen Teil des Imaginärteils in der obigen Figur beschränken und erhält so das einfache Integral

$$\int_0^{kk_{\rm F}} \omega d\omega = \frac{(kk_{\rm F})^2}{2}.$$
 (C.13)

Indem man die Abschneidung wieder durch eine Einschränkung der **k**-Integration auf $k > \sqrt{k_{\rm F}}$ berücksichtigt, erhält man schließlich einen Beitrag zur Fermigeschwindigkeit

$$\delta v_{\rm F}^{\rm Schnitt} = \frac{16\pi}{k_{\rm F}} (\ln k_{\rm F} + O(1)),$$
 (C.14)

der um einen Faktor $1/k_{\rm F}$ kleiner als der Polbeitrag (C.10) und daher hier als irrelevant zu betrachten ist.

Stichwortverzeichnis

A bschirmung 53,119
abgeschirmte Hartree–Fock–Näherung 122
abgeschirmte Selbstenergie 123,136
abgeschirmte Wechselwirkung 122
absolutes Minimum
Absorptionswahrscheinlichkeit
absorptiver Anteil
adiabatische statische Suszeptibilität
adjungiert 13
amputierte Selbstenergiegraphen 105
analytische Fortsetzung
analytische Funktion
Anhang A 31,32,132
Anhang A FKP1 122
Anhang B 32,133
Anhang C 117,118,120,122,135
Antikommutator
antilinearer Operator
antivertauschen
atomare Einheiten
äußere Punkte
Auslenkung
Auslenkungs–Propagator 129
Austauschauswahlregel
Austauschbeitrag 117
Austauschenergie 118,121
Austauschentartung
Austauschfeld
Austauschterm
Austauschwechselwirkung
avancierte Greenfunktion
Barvonenoktett 10
Basis 7.11
Basiswechsel
Beine
Besetzungszahlen
Bethe–Salpeter–Gleichungen 110
Bilanzgleichung
Bogoljubov–Transformation
Bohrscher Radius 117
Bosefunktion
beste korrelationsfreie Dichtematrix
Bewegungsgleichungen 26,61,70,73

Bornsche Näherung Boson bosonischer Fall	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
Charakter einer Permutation	
Coulombpotential	
Coulombwechselwirkung	114,122
Cumulantensatz	
Deuteron	
diagonale Einteilchen–Propagatoren	
diagrammatische Störungsrechnung	89
Dichte–Dichte–Korrelationsfunktion	
Dichte–Dichte–Propagatoren	54,113
Dichte–Dichte–Suszeptibilität	
Dichtekorrelation	
Dichtematrizen	65
dielektrische Funktion	
differentieller Wirkungsquerschnitt	45
dissipativer Anteil	43
Divergenz	118
Doppelzählung	69
dynamische Korrelation	54
dynamische Leitfähigkeit	53
dynamischer Formfaktor	45,85
dynamische Suszeptibilität	41
Dysongleichung	103,104
effektives Feld	65,68
eichinvariant	
Eindeutigkeit	62,80
eindeutig losbar	
eindimensionale Darstellungen	
Eintellenen–Greenfunktion	
Einteilchen Dress seteren	14,30
cintellenen–Propagatoren	. 50,54,90,122
einteilehen reduzibel	
Fintellehengugtendadiehte	105,150
elektromagnotische Felder	
Flektronongas	
Elektron-Phonon-System	110
Elektron-Phonon-Wechselwirkung	125
Energie	120 58
Energiedarstellung	98 127
Energieerhaltung	99,127
	, -

Entkopplung	
Erzeugung	
Ewaldsummation	120
externe Felder	49,52
externe potentielle Energie	
externe Punkte	
Farhe	10
Feldoperatoren	18.36
Fermifunktion	
Fermigeschwindigkeit	122.123.137
Fermikante	122
Fermikugel	
Fermion	10,11,14,56,58
Fermionenloops	
fermionischer Fall	
flavor	
Fockraum	13,14
Fockraumdarstellung	
formale Störungsentwicklung	
Formfaktor	45,46
Fourierkoeffizient	
Fourierreihe	
Fouriertransformation	19,20,21,22
Fouriertransformierte	
freie Energie	$38,\!59,\!65,\!68,\!91,\!97$
Friedel–Oszillationen	
f–Summenregel	
Feynman–Diagramme	
ganzzahliger Spin	10
geladene Teilchen	
geschlossenes lineares Gleichungssystem	54
Geschmack	10
gestrichelte Linie	108
gewöhnliche Differentialgleichungen	60
Gleichgewichtsbedingung	
Greenfunktion	24.89
Greensche Funktion	2 1,00 61
großkanonische Gesamtheit	24
Grundzustandsenergie	117
halbzahliger Spin	10
Hamiltonmatrix	
Hartree–Bogoljubov–Naherung	
Hartree–Fock—Naherung	
Heisenbergbild	

Hilfssatz		$60 \\ 62 \\ 116$
identische Teilchen Impulsdarstellung induzierte Felder induzierte Ströme Interpolationsformel involutorisch irreduzible Vertexfunktion Isospin isotherme Suszeptibilität isotropes homogenes System	7,8,9,10,	$\begin{array}{ccccccc} 12,64 \\ . & 19 \\ . & 49 \\ 49,52 \\ 21,123 \\ . & 9 \\ 109 \\ . & 10 \\ . & 10 \\ . & 42 \\ . & 53 \end{array}$
Kanäle kanonisch kanonische Transformation kanonische Vertauschungsrelationen kinetische Energie Klasse Kohn-Effekt Kommutator Kommutator-Greenfunktion konkrete Modellierung kontraktion Korrektur zur Fermigeschwindigkeit Korrelationsfnei Korrelationsfunktion Konvention Konvention Konvention		$109 \\ 17 \\ 73 \\ 13 \\ 14 \\ 8 \\ 88 \\ 14 \\ 24 \\ 7 \\ 48 \\ 128 \\ 17 \\ 63 \\ 138 \\ 118 \\ 65,66 \\ 33,35 \\ 17 \\ 43 \\ 123 \\ 120 \\ 120 \\ 121 \\ 120 \\ 121 \\ 121 \\ 120 \\ 121 $
Ladungsdichte–Propagator Ladungsneutralität lange Reichweite Laplace–Transformation leerer Graph Leitergraphen Lie–Algebra Limes geringer Dichten Limes hoher Dichte		84 116 21,122 25 95 100 21 120 117

lineare Elektron–Phonon–Wechselwirkung 1	25
linearer Response	41
lineares Gleichungssystem	54
Massanananatan	20
Material gleichungen	39 40
Materiargierchungen	49
	94 90
Matsubara–Frequenzen	30
Matsubara–Greenfunktion	29
Maxweligieichungen	49
Menrfachbesetzung	12
	65
Minuszeichen 1	14
Mittelwerte	55
mittlere Energie	37
Molekularfeldnäherungen	06
Momente	35
Nambu-Formalismus	72
Nernstsches Theorem	38
Neutralitätsbedingung 1	16
Neutron	10
nichtgerichtete Vertizes	01
nichtkorrelierte Systeme 54	82
n-Teilchenpropagator 60	90
Nullpunktsschwankungen 1	90 91
numerierter Vertex	<u>9</u> 21
	52
Observablenalgebra	7
Ohmsches Gesetz	52
Orthonormierung	11
Ortsdarstellung	57
	70
	12
Paarvernichtung	10 19
Parquettgleichungen 107,1	13
	10
Pauliverbot	11
Perdew und Zunger	21
Periodizitatsbeziehung	30
Permanente	12
Permutationsgruppe	´,8
Permutationsoperator	8
Phase	14
Phasenübergang	21
Phonon 1	25
Polarisationsdiagramme 1	14
positive Definitheitpositiv geladener HintergrundPotenialepotentielle EnergieProjektionsoperatorProton	$\begin{array}{cccc} & 77 \\ . & 116 \\ & 50 \\ & 14 \\ & 10 \\ & 10 \end{array}$
--	---
quadratischer HamiltonoperatorQuanten-Monte-Carlo-MethodenQuantenzahlenQuarksQuellpunkt	$\begin{array}{cccc} & 72 \\ . & 121 \\ & 7 \\ & 10 \\ & 93 \end{array}$
Randbedingung Randwertaufgaben reaktiver Anteil Reduzibilität Regeln für Elektron–Phonon–Modell Regeln für numerierte Graphen Regeln für unnumerierte Graphen Regeln für unnumerierte Graphen Regeln für unnumerierte Graphen in der Energiedarstellung Regeln für unnumerierte Graphen mit nichtgerichteten Vertizes Regeln für Zweiteilchen–Propagatoren Reihenfolge Response Response Response Retardierte Greenfunktion Retardierung Ringdiagramme	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
Satz von Blaschke Satz von den verbundenen Graphen Schärfe der Fermikante Selbstenergie Selbstenergie-Einschluss Selbstenergiegraphen selbstkonsistent Selbstwechselwirkung Senkpunkt simultane Eigenzustände Skalierungsargument Skelettdiagramm Skelettgraphen Spektraldarstellung	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$

Spektralfunktion	$34,\!57$
Spin–Statistik–Theorem	. 10
Spur	. 63
Stabilität	. 77
Standarddarstellung	$18,\!19$
statischer Formfaktor	. 46
statische Suszeptibilität	. 41
statistische Korrelationen	. 64
Störungsrechnung	. 89
Streuung	. 43
Stromdichte–Propagator	. 84
Stromdichte–Suszeptibilität	. 51
Summationskonvention	. 51
Summenregeln	35,46
Suszeptibilitäten	35,41
Symmetrien der Wechselwirkungs–Matrixelemente	100
Symmetrieparameter	. 13
Symmetriezahl	95,101
symplektische Transformation	. 74
Teilchendichte	19,23
Teilchendichte–Propagator	. 87
Teilchenstromdichte	. 20
Teilchenzahloperator	. 59
Temperatur–Greenfunktion	. 29
Tensorprodukt	7
thermische Mittelwerte	. 36
TL1–Kanal	110
TL2–Kanal	111
TT–Kanal	111
topologisch verschieden	. 93
totalantisymmetrisch	9
totale Felder	. 49
totalsymmetrisch	9
total zweiteilchen-irreduzibel	111
Transpositionen	9
- 	100
it is a linear Desetal	122
unitare lineare Darstellung	1774
unitare Iransformation	11,14
unterscneidbar	7
ununterscheidbar	8
unverbundener Anteil	. 96
Vakuum	. 13
verallgemeinerte Suszeptibilität	,41.82
verbundener Anteil	. 96

Vergleich mit Literatur	122
Vernichtung	13
verschränkt	12
vertauschbar	. 7
vertauschen	14
Vertexpunkt	93
Vertexreduzibilität	114
Verzweigungspunkte	87
vollständiges orthonormiertes System	. 7
Vollständigkeitsrelation	14
Wechselwirkungsbild	89
Wechselwirkungslinie	92
Wellenfunktion	18
Wicksches Theorem 60.63.7	0.80
Wignerkristall	120
Wirkungsquerschnitt	45
wohlunterscheidbar	93
Yukawapotential	21
zeitliche Korrelationsfunktionen	35
Zeitordnungsoperation	29
Zeitordnungsoperator	60
zeitumkehrinvariante Targesysteme	46
zeitunabhängige Störung	89
zusammenhängende Graphen	114
Zusammenhang von Vertizes und externen Punkten	96
Zusammenspiel	122
Zustandsdichte	85
zweikomponentiges System	125
Zweikörperwechselwirkungen	16
zwei Längen	117
Zweiteilchenoperatoren	16
zweiteilchen-irreduzibel	105
Zweiteilchen–Propagatoren	107
zweiteilchen-reduzibel	5,109
Zweiteilchenvertex	107
Zweiteilchenwechselwirkung	19
zweite Quantisierung	2,13
zweizeitige Greenfunktionen	23
zyklische Vertauschung	63