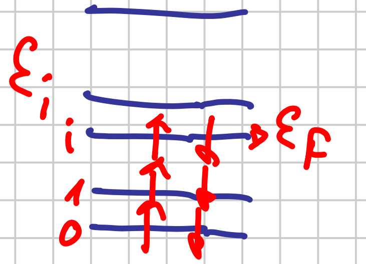
# 1.6 Korrelationsfunktion

## a) Fermionen

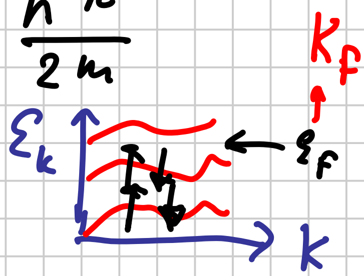
Wir betrachten ein Gas von $N$ (freien; $WW=0$) Fermionen mit $S=\frac{1}{2}$

**Grundzustand:**

die Besetzung der niedrigsten Einteilchenenergiezustände mit zwei Fermionen (↑ und ↓)




**Einteilchenenergien:** $\varepsilon_{\vec k} = \dfrac{\hbar^2 \vec k^2}{2m}$




$\Phi_0$ – Grundzustand

$$\Phi_0 = \prod_{|\vec k|\le k_F}\prod_{\sigma} \hat a^{\dagger}_{\vec k,\sigma}|0\rangle$$

wobei

$$N = \sum_{\vec k,\sigma}{}' \langle\Phi_0|\underbrace{\hat n_{\vec k,\sigma}}_{= a^{\dagger} a}|\Phi_0\rangle = \sum_{\vec k,\sigma} n_{\vec k,\sigma}$$

Der Erwartungswert des Teilchenzahloperators im Impulsraum:

$$n_{\vec k,\sigma} = \langle\Phi_0| a^{\dagger}_{\vec k,\sigma} a_{\vec k,\sigma}|\Phi_0\rangle = \begin{cases} 1, & |\vec k|\le k_F \\ 0, & |\vec k| > k_F \end{cases}$$

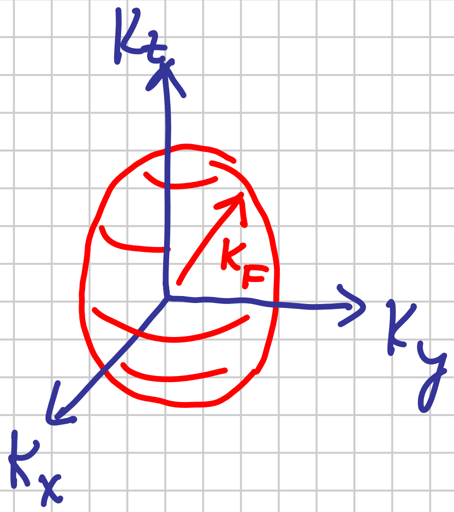
z.B. für $|\vec k| > k_F$: $\longrightarrow |\vec k'| \neq |\vec k|$

$$\hat a_{\vec k,\sigma}|\Phi_0\rangle = \prod_{|\vec k'|\le k_F}\prod_{\sigma'} a_{\vec k\sigma}\underbrace{a^{\dagger}_{\vec k'\sigma'}|0\rangle}_{\Phi_0} = 0$$

Dies definiert $k_F$

$$N = \sum_{\vec{k},\sigma} n_{\vec{k},\sigma} \overset{\sum_\sigma}{=} \frac{2V}{(2\pi)^3} \int\limits_{|\vec{k}|\le k_F} 1 \, d^3k = \frac{2V}{(2\pi)^3} \, \frac{4\pi}{3} k_F^3$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$




Fermi-Kugel

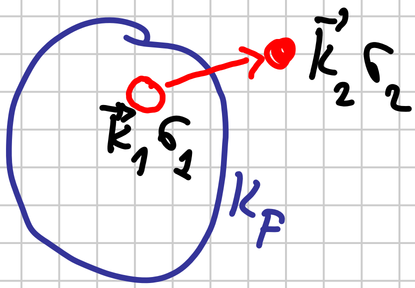
Dichte: $n = \frac{N}{V} = \text{const}$

Die Dichte der Fermionen (WW = 0) ist konstant!

$$\langle \Phi_0 | \hat{\rho}(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle = \sum_\sigma \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+_\sigma(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) | \phi_0 \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\sigma} n_{\vec{k},\sigma} = n$$

Die einfachste Anregung:
ein Teilchen-Loch-Paar

$\Phi$!



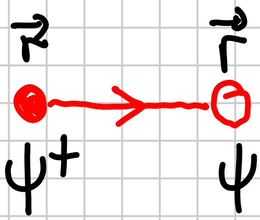

$$|\Phi\rangle = a^+_{\vec{k}_2\sigma_2} a_{\vec{k}_1\sigma_1} |\Phi_0\rangle$$

Einteilchen-Korrelationsfunktion

$$G_\sigma(\vec{r}-\vec{r}\,') = \langle \Phi_0 | \hat{\psi}^+_\sigma(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}\,') | \Phi_0 \rangle = \frac{n}{2} g_\sigma(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

↑ Normierung

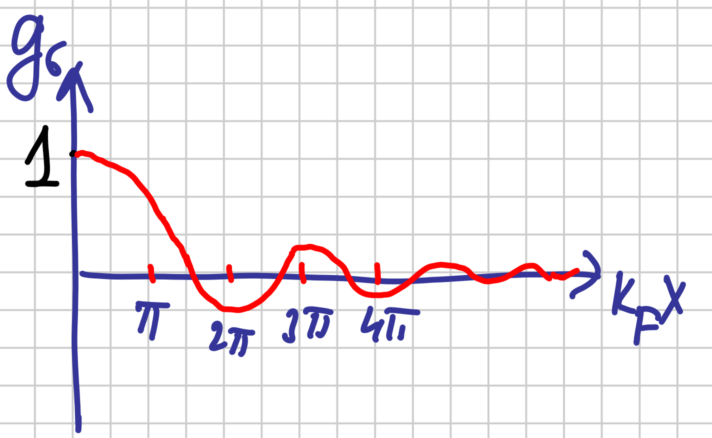
$G =$



Mit:
$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}$$
$$\hat{\psi}^+_\sigma(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}^+_{\vec{k}\sigma}$$

Dann:
$$G_\sigma(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} e^{-i\vec{k}\vec{r}+i\vec{k}'\vec{r}'} \underbrace{\langle \phi_0 | \hat{a}^+_{k\sigma} \hat{a}_{\vec{k}'\sigma} | \phi_0 \rangle}_{= n_{\vec{k}\sigma}\,\delta(\vec{k}-\vec{k}')} =$$
$$= \int_{|\vec{k}|\le k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_{-1}^{1} d\cos\theta \, e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta} =$$
$\int d\varphi = 2\pi$ $\quad x = |\vec{r}-\vec{r}'|$ $\quad$ "$x$" $\quad$ " $\frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{ikx}$
$$= \frac{1}{2\pi^2 |\vec{r}-\vec{r}'|} \int_0^{k_F} dk \; k \sin(k|\vec{r}-\vec{r}'|) =$$
$$= \frac{1}{2\pi^2 x^3} \left( \sin k_F x - k_F x \cos k_F x \right)$$
$$G_\sigma(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{3n}{2} \frac{\sin k_F x - k_F x \cos k_F x}{(k_F x)^3} = \frac{n}{2} g_\sigma(x)$$

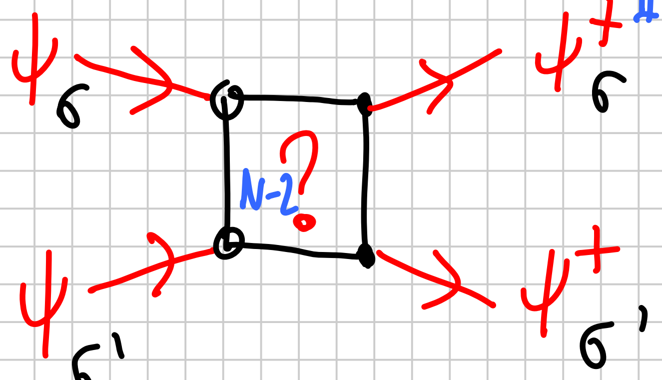
Es gilt: $x = |\vec{r}-\vec{r}'|$
$$G_\sigma(x \to 0) = \frac{n}{2}$$
$$G_\sigma(x \to \infty) = 0$$



# Paarkorrelationsfunktion: ($g_{\sigma\sigma'}$)

Wir definieren die $g_{\sigma\sigma'}$ in folgender Weise:

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\vec r-\vec r') = \langle \Phi_0 | \hat\psi^+_\sigma(\vec r)\,\hat\psi^+_{\sigma'}(\vec r')\,\hat\psi_{\sigma'}(\vec r')\,\hat\psi_\sigma(\vec r) | \Phi_0\rangle$$




Wahrscheinlichkeit

Kommut. $\{\psi_1, \psi_2^+\} = \delta_{12}$ und $\{\psi_1, \psi_2\} = 0$

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\vec r-\vec r') = \langle \phi_0 | \hat n_\sigma(\vec r)\,\hat n_{\sigma'}(\vec r') | \phi_0\rangle - \delta_{\sigma\sigma'}\,\delta(\vec r-\vec r')\,\langle \phi_0 | \hat n_\sigma(\vec r) | \phi_0\rangle$$

$\hat\psi^+_\sigma(\vec r)\,\hat\psi_\sigma(\vec r)$ $\quad$ $\hat\psi^+_{\sigma'}(\vec r')\,\hat\psi_{\sigma'}(\vec r')$

Oder:

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\vec r-\vec r') = \sum_\mu \left| \langle \Phi_\mu(N-2) | \hat\psi_{\sigma'}(\vec r')\,\hat\psi_\sigma(\vec r) | \phi_0(N)\rangle \right|^2$$

wobei die Summe über **alle** um 2 Teilchen reduzierte Zustände läuft $\left(\sum_\mu |\Phi_\mu(N-2)\rangle\langle\Phi_\mu(N-2)| = \hat{\mathbb{1}}\right)$

## Im Impulsraum:

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\vec r-\vec r') = \frac{1}{V^2}\sum_{\substack{\vec k,\vec k'\\ \vec q,\vec q'}} e^{-i(\vec k-\vec k')\vec r - i(\vec q-\vec q')\vec r'} \langle \Phi_0 | \hat a^+_{\vec k\sigma}\,\hat a^+_{\vec q\sigma'}\,\hat a_{\vec q'\sigma'}\,\hat a_{\vec k'\sigma} | \Phi_0\rangle$$

Beachte: dass der Erwartungswert $\langle \phi_0 | \dots | \phi_0 \rangle \neq 0$, wenn wir jedes Teilchen, das wir vernichten, auch wieder erzeugen!

## 2 Fälle:

### 1) $\sigma \neq \sigma'$

dann ergibt sich sofort, dass: $\vec{k} = \vec{k}'$ und $\vec{q} = \vec{q}'$

$$\left(\frac{n}{2}\right) g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k},\vec{q}} \langle \phi_0 | \hat{n}_{\vec{k}\sigma} \hat{n}_{\vec{q}\sigma'} | \phi_0 \rangle =$$

$$= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k},\vec{q}} n_{\vec{k}\sigma} n_{\vec{q}\sigma'} = \frac{1}{V^2} N_\sigma N_{\sigma'} = \frac{1}{V^2} \frac{N}{2} \frac{N}{2} = \left(\frac{n}{2}\right)^2$$

$n = \frac{N}{V}$

d.h.
$$g_{\sigma\sigma'}(\vec{r}-\vec{r}') = 1$$

Unabhängig vom Abstand

Fermionen (WW=0) mit ungleichem Spin sind völlig unkorreliert.

### b) $\sigma = \sigma'$

Wegen $\hat{a}^2_{\vec{k}\sigma} = 0 \Rightarrow \vec{k} \neq \vec{q}$ !

$$\langle \phi_0 | \hat{a}^+_{k\sigma} \hat{a}^+_{q\sigma} \hat{a}_{q'\sigma} \hat{a}_{k'\sigma} | \phi_0 \rangle = \left\{ \begin{array}{ll} \multicolumn{2}{l}{2 \text{ mögl.}} \\ k = k' & k = q' \\ q = q' \text{ oder} & q = k' \end{array} \right\}$$

$$= \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\vec{q},\vec{q}'} \langle \phi_0 | \hat{a}^+_{\vec{k}\sigma} \hat{a}^+_{\vec{q}\sigma} \hat{a}_{\vec{q}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} | \phi_0 \rangle +$$

$\vec{k} \neq \vec{q}$

$$+ \delta_{\vec{k},\vec{q}'} \delta_{\vec{q},\vec{k}'} \langle \phi_0 | \hat{a}^+_{\vec{k}\sigma} \hat{a}^+_{\vec{q}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{q}\sigma} | \phi_0 \rangle =$$

$$= (\delta_{\vec k \vec k'}\delta_{\vec q \vec q'} - \delta_{\vec k \vec q'}\delta_{\vec q \vec k'}) \langle \phi_0 | \underbrace{\hat a^\dagger_{\vec k\sigma}\hat a_{\vec k\sigma}}_{\hat n} \underbrace{\hat a^\dagger_{\vec q\sigma}\hat a_{\vec q\sigma}}_{\hat n} | \phi_0 \rangle =$$

$$= (\delta_{\vec k \vec k'}\delta_{\vec q \vec q'} - \delta_{\vec k \vec q'}\delta_{\vec q \vec k'})\, n_{\vec k\sigma}\, n_{\vec q\sigma}$$

damit:

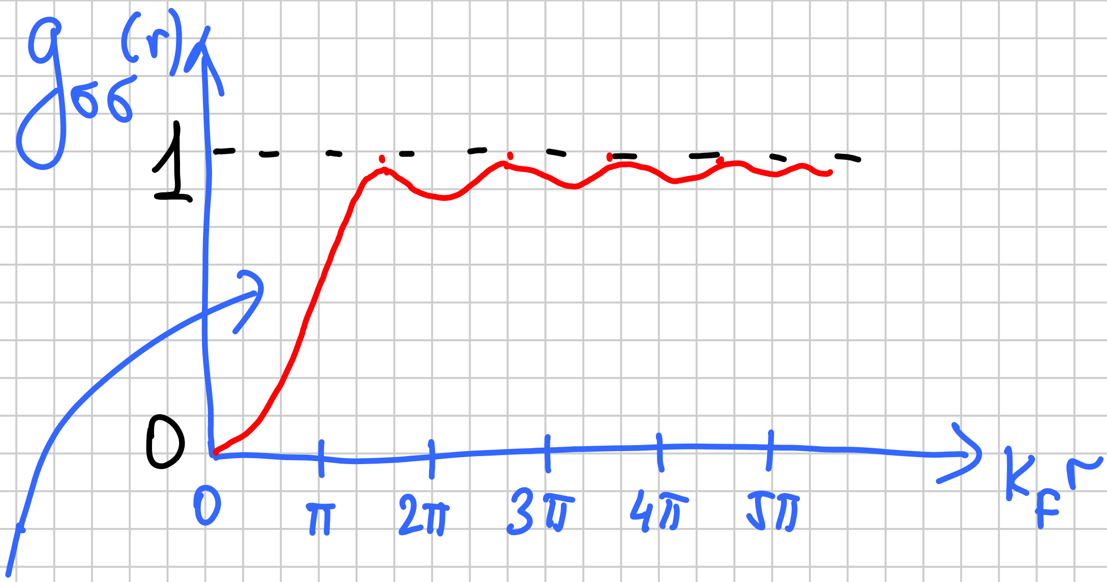
$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\vec r-\vec r') = \frac{1}{V^2}\sum_{\vec k,\vec q}\left(1-e^{-i(\vec k-\vec q)(\vec r-\vec r')}\right) n_{\vec k\sigma}\, n_{\vec q\sigma} =$$

$$= \left(\frac{n}{2}\right)^2 \left[1 - g_\sigma^2(\vec r-\vec r')\right]$$

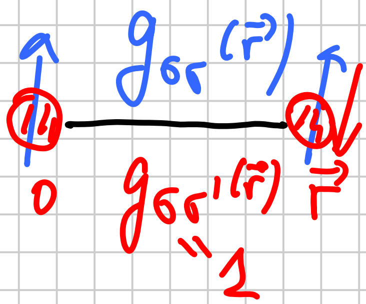
1-Teilchen

Dann:

$$g_{\sigma\sigma'}(\vec r-\vec r') = 1 - \frac{9}{x^6}(\sin x - x\cos x)^2 \Big|_{x=k_F|\vec r-\vec r'|}$$




Austauschloch – für Fermionen mit $\sigma=\sigma'$ (Pauli-Prinzip!)



Die gesamte Wahrscheinlichkeit, ein anderes Fermion im Abstand $\vec{r}$ eines Fermions zu finden, ist:

$$g(\vec{r}) = \frac{1}{2}\Big[\underbrace{g_{\uparrow\uparrow}(\vec{r}) + g_{\uparrow\downarrow}(\vec{r})}_{g_{\sigma\sigma'}}\Big]$$

Die totale Dichtereduktion um ein Fermion:

$$n\int d^3r\,\big[\underset{\text{2-Teilchen}}{g(\vec{r})}-1\big] = -\frac{n}{2}\int d^3r\,\big[\underset{\text{1-Teilchen!}}{g_\sigma(\vec{r})}\big]^2 =$$

$$= -\frac{2}{n}\int d^3r\,\frac{1}{V^2}\sum_{\sigma\vec{k}\vec{k}'} n_{\vec{k}\sigma}n_{\vec{k}'\sigma}\,e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} =$$

$$= -\frac{2}{nV}\underbrace{\sum_{\sigma\vec{k}}}_{2}\underbrace{n_{k\sigma}}_{N=nV} = -1$$

d.h. das Austauschloch beinhaltet gerade ein einzelnes Fermion, "per Radius" - den ein Fermion einnimmt:

$$n = \frac{3}{4\pi R^3} \Longleftrightarrow r_s = \frac{R}{a_0} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{me^2}{\hbar^2 k_F}$$

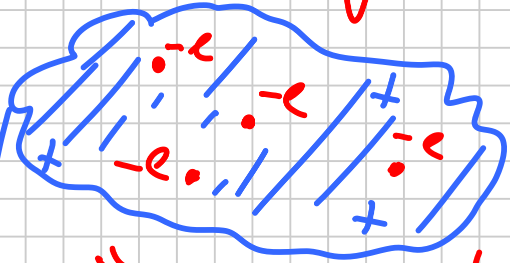
wobei $r_s$ - dimensionsloser Parameter.

$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ - Bohr-Radius, $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$

## 1.7 Grundzustandsenergie des Elektronengases

N-Elektron- Ladung $(-e)$

$+$ gleichmäßiger (positiver) Hintergrund
mit Ladungsdichte $= e \cdot n$




„Jellium-Model“

Die Näherung – Hartree-Fock-Methode:

Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{H}_{ion} + \hat{H}_{int}$$

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}$$

$$\hat{H}_{ion} = \frac{1}{2}\int d\vec{r} \int d\vec{r}\,' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \qquad \rho = n_e + n_{+e}$$

$$\hat{H}_{int} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}\neq 0\\ \sigma,\sigma'}} \frac{4\pi}{q^2} \hat{a}^{+}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \hat{a}^{+}_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'} \hat{a}_{\vec{k},\sigma'} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}$$

$$U_c(\vec{r}-\vec{r}\,') = \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \overset{FT}{\longleftrightarrow} U_c(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

$$\left( \text{Yukawa-Potential: } \frac{e^{-\alpha r}}{r} \overset{FT}{\longleftrightarrow} \frac{4\pi}{\alpha^2+q^2} \right)$$

$\exp(-\alpha r)$

$\vec{q} = 0$ Betrag $\rightarrow$ Kompensiert vom $H_{ion}$!

$$U_c(\vec{q}) = \frac{1}{V}\int d\vec{r}\, \frac{e^2}{|\vec{r}|} e^{-i\vec{q}\vec{r}} = \frac{4\pi e^2}{V q^2}$$

Die Näherung für $E_0$ (exakt – im QMC) besteht darin, dass wir die Energie durch den Erwartungswert von $\hat{H}$ mit dem Grundzustand des freien Elektronengases $|\phi_0\rangle$ abschätzen:

$$E_{HF} = \langle \phi_0 | \hat{H} | \phi_0 \rangle$$

$$\text{mit} \quad |\phi_0\rangle = \prod_{\substack{k<k_F \\ \sigma}} a^\dagger_{\vec{k}\sigma} |0\rangle \quad \text{– freien Elektro[nen]}$$

Kinetische Energie

$$E_{kin} = \langle \phi_0 | \hat{T} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \underbrace{n_{\vec{k}\sigma}}_{=\theta(k_F - k)} =$$

$$= \frac{2V}{(2\pi)^3} \int\limits_{|\vec{k}| \le k_F} d^3k \, \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{=\frac{\hbar}{2m} 4\pi \frac{k_F^5}{5}} = N \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = N \frac{3}{5} E_F \equiv N \varepsilon_{kin}$$

$\sum_\sigma \to 2$

wobei $E_F = \dfrac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ und $k_F = \left[ \dfrac{3\pi^2 N}{V} \right]^{1/3}$

WW - Energie: $\left( g^{(2)}_{\sigma\sigma'} = 1 - \delta_{\sigma\sigma'} g^{(1)}_\sigma \right)$

$$E_{int} = \langle \phi_0 | \hat{H}_{int} | \phi_0 \rangle =$$

$$= \frac{1}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}\,' \, U_c(\vec{r} - \vec{r}\,') \sum_{\sigma\sigma'} \langle \phi_0 | \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(\vec{r}\,') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}\,') \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) | \phi_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}\,' \, U(\vec{r} - \vec{r}\,') \underbrace{\sum_{\sigma\sigma'} \left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\vec{r} - \vec{r}\,')}_{\text{Hartree} \to n^2 \; - \; \sum_\sigma G_\sigma^2(\vec{r} - \vec{r}\,') \; \leftarrow \text{Fock-Term}}$$

$g_{\sigma\sigma'} = 1 - g_\sigma^2 \cdot \delta_{\sigma\sigma'}$

$G_\sigma = \frac{n}{2} g^{(1)}_\sigma$

## Hartree (direkt) - Term

$$E_H = \frac{n^2}{2}\underbrace{\int d\vec{r}}_{= V}\int d\vec{r}\,' U(\underbrace{\vec{r}-\vec{r}\,'}_{\vec{x}=\vec{r}-\vec{r}\,'}) = \frac{n^2 V U_0}{2} = N\underbrace{\frac{n U_0}{2}}_{=\varepsilon_H} \equiv N\varepsilon_H$$

$n = \frac{N}{V}$

mit $\quad U_0 = \int d\vec{r}\, U(\vec{r})$

## Fock-(Austausch-)-Term. $\left(G_\sigma = \frac{3n}{2}\,\frac{\sin x - x\cos x}{x^3}\right)$

$$E_F = -\frac{1}{2}\int d\vec{r}\int d\vec{r}\,' \sum_\sigma G_\sigma^2(\vec{r}-\vec{r}\,')\,U(\vec{r}-\vec{r}\,') =$$

$\vec{x} \to \vec{r} \leftarrow \vec{x}$

$\sum_\sigma = 2$

$$= -\underbrace{N\frac{9n}{4}}_{\int d\vec{r}\,' = V\cdot\left(\frac{3n}{2}\right)^2}\int d\vec{r}\, U(\vec{r})\left[\frac{\sin k_F r - k_F r\cos k_F r}{(k_F r)^3}\right]^2 \equiv N\varepsilon_x$$

(eXchange)

mit $\quad U_c(\vec{r}) = \frac{e^2}{r}$

$$\varepsilon_x = -\frac{9ne^2}{4}\underbrace{4\pi}_{\int d\Omega}\int_0^\infty \frac{r^2 dr}{r}\left[\frac{\sin \overbrace{k_F r}^{x} - k_F r\cos k_F r}{(k_F r)^3}\right]^2 =$$

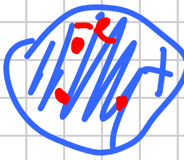
$$= -\frac{9\pi n e^2}{k_F^2}\int_0^\infty dx\,\underbrace{\frac{(\sin x - x\cos x)^2}{x^5}}_{=\frac{1}{4}} = -\frac{3e^2}{4\pi}k_F$$

$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$

Die Energie pro Elektron ist:

$$\frac{E}{N} = \varepsilon_k + \frac{nU_0}{2} + \varepsilon_x$$

Beachte: für $U_c(r) = \frac{e^2}{r} \longrightarrow U_0 = \infty$ !

Positiver Hintergrund (Jellium-Modell  ion.)

$$E_{ion-el} = -n\int d\vec{r}\int d\vec{r}\,'\, U(\vec{r}-\vec{r}\,')\langle\phi_0|\hat{\rho}|\phi_0\rangle = -NnU_0$$

Electrostatische Selbstenergie $\rho_+(\vec{r}) = +e\frac{n}{2}$

$$E_{ion} = \left(\frac{n}{2}\right)^2\int d\vec{r}\int d\vec{r}\,'\, U(\vec{r}-\vec{r}\,') = N\frac{nU_0}{2}$$

Dann:

$$\frac{1}{N}\left(E_H + E_{ion} + E_{ion-el}\right) = \frac{nU_0}{2} + \frac{nU_0}{2} - nU_0 = 0$$

## Energie pro Elektron (HF-Näherung)

$$\frac{1}{N}E = \varepsilon_K + \varepsilon_X = \left[\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s}\right]\cdot Ry$$

mit: $r_s = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{me^2}{\hbar^2 k_F} \equiv \frac{r}{a_0}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$, $Ry = \frac{e^2}{2a_0} \approx 13,6\,eV$

HF-Näherung ist vernünftig für $r_s < 1$

| Minimale Energie: | | Na-exp. |
|---|---|---|
| $E_{min}/N$ | $= -1,29\,eV$ | $-1,13\,eV$ |
| $r_s$ | $= 4,83$ | $3,96$ |

Korrelationseffekte (in RPA)

$$r_s \ll 1: \quad \frac{E}{N\cdot R_y} = \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + \underbrace{0,062\ln r_s - 0,096 + \cdots}_{\text{Korr. (Gell-Mann, 1957)}}$$

**Bemerkung:**

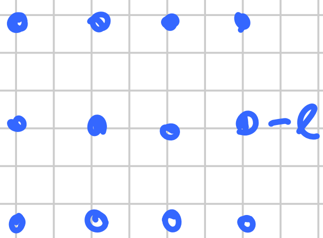
Für $r_s \to \infty$ ? $E_K \ll E_{H+X}$

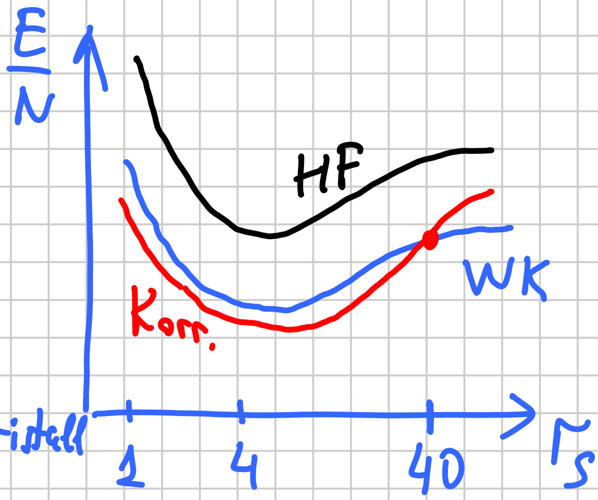
Kin $\ll$ Coulomb.

Entwicklung für $r_s \gg 1$ (ohne Beweis)

$$\frac{E}{N \cdot R_y} = -\frac{1{,}79}{r_s} + \frac{2{,}64}{r_s^{3/2}} + \dots$$

WK:




$r_s \gtrsim 40 \to$ Wigner-Kristall

(QMC – Ceperley)

Der WK ist bisher in 3-d-Systemen nicht beobachtet worden

## b) Korrelationsfunktion für Bosonen

Wir betrachten einen Zustand von $N$ freien spinlosen Bosonen der Form:

$$|\Phi\rangle = |n_{\vec k,0}, n_{\vec k,1}, \dots\rangle = \dots \frac{(\hat a^\dagger_{\vec k,1})^{n_{\vec k,1}}}{\sqrt{n_{\vec k,1}!}} \cdot \frac{(\hat a^\dagger_{\vec k,0})^{n_{\vec k,0}}}{\sqrt{n_{\vec k,0}!}} |0\rangle$$

Der Erwartungswert der Teilchendichte ist dann:

$$\langle\phi|\hat\psi^\dagger(\vec r)\hat\psi(\vec r)|\phi\rangle = \frac{1}{V}\sum_{\vec k,\vec k'} e^{-i(\vec k-\vec k')\vec r}\underbrace{\langle\phi|\hat a^\dagger_{\vec k}\,\hat a_{\vec k'}|\phi\rangle}_{n_{\vec k}\delta_{\vec k\vec k'}} =$$

$$= \frac{1}{V}\sum_{\vec k} n_{\vec k} = \frac{N}{V} = n$$ – Konstant überall

Die Paarkorrelationsfunktion:

$$n^2 g(\vec r-\vec r') \overset{\text{def.}}{=} \langle\phi|\,\hat\psi^+(\vec r)\,\hat\psi^+(\vec r')\,\hat\psi(\vec r')\,\hat\psi(\vec r)\,|\phi\rangle =$$

$$= \frac{1}{V^2}\sum_{\substack{\vec k,\vec k'\\ \vec q,\vec q'}} e^{-i(\vec k-\vec k')\vec r-i(\vec q-\vec q')\vec r'}\langle\phi|\,\hat a^+_{\vec k}\,\hat a^+_{\vec q}\,\hat a_{\vec q'}\,\hat a_{\vec q}\,|\phi\rangle$$

Die Erwartungswert $\langle\phi|\hat a^+_{\vec k}\hat a^+_{\vec q}\hat a_{\vec q'}\hat a_{\vec k'}|\phi\rangle \neq 0$ NUR dann, wenn:

$$\begin{cases}\vec k=\vec k'\\ \vec q=\vec q'\end{cases} \quad \text{oder} \quad \begin{cases}\vec k=\vec q'\\ \vec q=\vec k\end{cases}$$

Dabei müssen wir den Fall $\vec k=\vec q$, der im Unterschied zu Fermionen hier bei Bosonen möglich ist, gesondert betrachten.

Somit folgt:

$$\langle\phi|\,\hat a^+_{\vec k}\,\hat a^+_{\vec q}\,\hat a_{\vec q'}\hat a_{\vec k'}|\phi\rangle =$$

$$= (1-\delta_{\vec k\vec q})\left\{\delta_{\vec k\vec k'}\delta_{\vec q\vec q'}+\delta_{\vec k\vec q'}\delta_{\vec q\vec k'}\right\}\underbrace{\langle\phi|\hat a^+_{\vec k}\hat a^+_{\vec q}\hat a_{\vec q}\hat a_{\vec k}|\phi\rangle}_{n_{\vec k}n_{\vec q}} +$$

$$+\ \delta_{\vec k\vec q}\delta_{\vec k\vec k'}\delta_{\vec q\vec q'}\underbrace{\langle\phi|\hat a^+_{\vec k}\overbrace{\hat a^+_{\vec k}\hat a_{\vec k}}^{=a^+a-1}\hat a_{\vec k}|\phi\rangle}_{n_{\vec k}(n_{\vec k}-1)}$$

woraus folgt, dass:

$$n^2 g(\vec r-\vec r') = \frac{1}{V^2}\left\{\sum_{\vec k,\vec q}(1-\delta_{\vec k\vec q})\left(1+e^{-i(\vec k-\vec q)(\vec r-\vec r')}\right)n_{\vec k}n_{\vec q}+\sum_{\vec k}n_{\vec k}(n_{\vec k}-1)\right\}=$$

$$=\frac{1}{V^2}\left\{\sum_{\vec k,\vec q}n_{\vec k}n_{\vec q}-\sum_{\vec k}n_k^2+\left|\sum_{\vec k}e^{-i\vec k(\vec r-\vec r')}n_{\vec k}\right|^2-\cancel{\sum_{\vec k}n_{\vec k}^2}+\cancel{\sum_{\vec k}n_{\vec k}^2}-\sum_{k}n_{\vec k}\right\}=$$

$$= n^2+\left|\frac{1}{V}\sum_{\vec k}e^{-i\vec k(\vec r-\vec r')}n_{\vec k}\right|^2-\frac{1}{V^2}\sum_{\vec k}n_{\vec k}(n_{\vec k}+1)$$

Nun betrachten wir zwei Fälle:

1) $n_{\vec{k}} = N \delta_{\vec{k},\vec{k}_0}$

d.h. alle Bosonen belegen den gleichen Zustand $\vec{k}_0$, dann:

$$n^2 g(\vec{r}-\vec{r}\,') = n^2 + n^2 - \frac{1}{V^2} N(N+1) = \frac{N(N-1)}{V^2}$$

– so dass keine Korrelation vorliegt:
$g(\vec{r}-\vec{r}\,')$ ist unabhängig vom Ort.

Die rechte Seite bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit, das erste Teilchen bei $\vec{r}$ zu finden, $\frac{N}{V}$ ist , und das zweite $(N-1)/V$.

2) Gaußsche Verteilung:

$$n_{\vec{k}} = \frac{(2\pi)^3 n}{(\sqrt{\pi}\,\Delta)^3} e^{-(\vec{k}-\vec{k}_0)^2/\Delta^2}$$

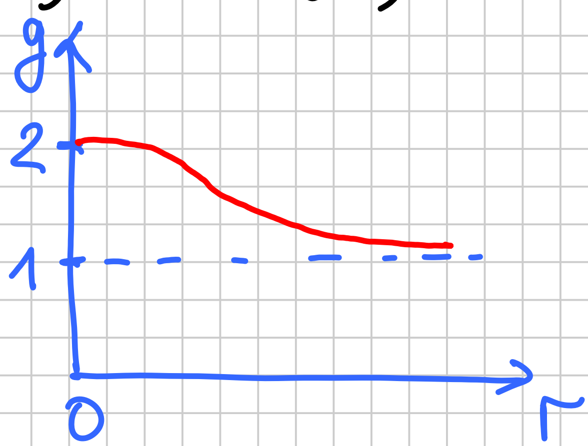
mit Normierung: $\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} n_{\vec{k}} = 1$

Dann folgt:

$$n^2 g(\vec{r}-\vec{r}\,') = n^2 + \left| \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}\,')} n_{\vec{k}} \right|^2 + O\left(\frac{1}{V}\right) =$$

$$= n^2 \left(1 + e^{-\frac{\Delta^2}{2}(\vec{r}-\vec{r}\,')^2}\right) + O\left(\frac{1}{V}\right)$$

d.h. dass die Wahrscheinlichkeit, zwei Bosonen am selben Ort zu finden ($\vec{r}=0$), zweimal größer ist, als die beiden sehr weit voneinander anzutreffen ($\vec{r} \to \infty$).



# 1.8 Bewegunsgleichung für die Feldoperatoren

Die Zeitabhängigkeit der Feldoperatoren $\hat{\psi}(\vec{r},t)$ in der Heisenberg-Darstellung:

$$\hat{\psi}(\vec{r},t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\,\hat{\psi}(\vec{r})\,e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

Damit können wir die Bewegungsgleichung herleiten:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\vec{r},t) = -\left[\hat{H},\hat{\psi}(\vec{r},t)\right] = -\,e^{i\hat{H}t/\hbar}\left[\hat{H},\hat{\psi}(\vec{r})\right]e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

Unter Benützung von

$$\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right]_- = \hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]_\pm \mp \left[\hat{A},\hat{C}\right]_\pm \hat{B} \quad \begin{matrix}\leftarrow F\\ \leftarrow B\end{matrix}$$

ergibt sich für die Kommutatoren mit der Kinetischen Energie:

$$\int d\vec{r}'\,\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\vec{\nabla}'\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\right)\cdot\left(\vec{\nabla}'\hat{\psi}(\vec{r}')\right),\ \hat{\psi}(\vec{r})\right] =$$

$$= \int d\vec{r}'\,\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\vec{\nabla}'\delta(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{\nabla}'\hat{\psi}(\vec{r}')\right) \overset{\text{part.}\int}{=} \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\hat{\psi}(\vec{r})$$

und die Wechselwirkung:

$$\frac{1}{2}\left[\int d\vec{r}'\int d\vec{r}''\,\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}'')\,U(\vec{r}'-\vec{r}'')\,\hat{\psi}(\vec{r}'')\hat{\psi}(\vec{r}'),\ \hat{\psi}(\vec{r})\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\int d\vec{r}'\int d\vec{r}''\left[\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}''),\ \hat{\psi}(\vec{r})\right]U(\vec{r}'-\vec{r}'')\,\hat{\psi}(\vec{r}'')\hat{\psi}(\vec{r}') =$$

$$= \frac{1}{2}\int d\vec{r}'\int d\vec{r}''\left(\pm\,\delta(\vec{r}''-\vec{r})\,\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') - \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}'')\,\delta(\vec{r}'-\vec{r})\right)U(\vec{r}'-\vec{r}'')\,\hat{\psi}(\vec{r}'')\hat{\psi}(\vec{r}') =$$

$$= -\int d\vec{r}'\,\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\,U(\vec{r}-\vec{r}')\,\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r})$$

da: $\hat{\psi}(\vec{r}')\hat{\psi}(\vec{r}'') = \pm\,\hat{\psi}(\vec{r}'')\hat{\psi}(\vec{r}')$ und $U(\vec{r},\vec{r}') = U(\vec{r}',\vec{r})$

Daraus ergibt sich die Bewegungsgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 \hat{\psi}(\vec{r},t) + \int d\vec{r}\,' \, \hat{\psi}^+(\vec{r}\,',t)\, U(\vec{r}-\vec{r}\,')\, \hat{\psi}(\vec{r}\,',t)\, \hat{\psi}(\vec{r},t)$$

Im Impulsraum: (mit Spin $-\sigma$)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}(t) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k},\sigma}(t) + \frac{1}{V} \sum_{\substack{\vec{k}',\vec{q}\neq 0\\ \sigma'}} \underbrace{\hat{U}_{\vec{q}}}_{} \hat{a}^+_{\vec{k}'+\vec{q},\sigma'}(t)\, \hat{a}_{\vec{k}',\sigma'}(t)\, \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}(t)$$

$\hat{U}_{\vec{q}} = 4\pi e^2/q^2$

## 1.8.1 Änderung der elektronischen Energieniveaus durch die Coulomb-Wechselwirkung:

$$\varepsilon_0(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} \qquad (U_{\vec{q}} = 0)$$

Definieren wir die Korrelationsfunktion: (dynamisch!)

$$G_{\vec{k}\sigma}(t) \overset{t>0}{=} \langle \phi_0 | \hat{a}_{\vec{k}\sigma}(t)\, \hat{a}^+_{\vec{k}\sigma}(0) | \phi_0 \rangle$$

$a_t \leftarrow a_0^+$

GF!

Multipliziert man die Bewegungsgleichung mit $\hat{a}_{\vec{k}\sigma}(0)$, erhält man für $\hat{G}$:

$$\frac{d}{dt} G_{\vec{k}\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar}\left( \varepsilon_0(\vec{k})\, G_{\vec{k}\sigma}(t) + \frac{1}{V} \sum_{\substack{\vec{k}',\vec{q}\neq 0\\ \sigma'}} U_{\vec{q}} \langle \hat{a}^+_{\vec{k}'+\vec{q},\sigma'}(t)\, \hat{a}_{\vec{k}'\sigma'}(t)\, \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}(t)\, \hat{a}^+_{\vec{k}\sigma}(0) \rangle \right.$$

$$\langle \ldots \rangle \overset{\text{def.}}{=} \langle \phi_0 | \ldots | \phi_0 \rangle$$

Nun tritt auf der rechten Seiten **nicht** nur $G_{\vec{k}\sigma}(t)$, sondern auch eine **höhere** Korrelationsfunktion auf!

HF-Näherung $\left( \langle AB \rangle \approx \langle A \rangle \langle B \rangle \right)$

$$\langle \hat a^+_{\vec k'+\vec q,\sigma'}(t)\, \hat a_{\vec k',\sigma'}(t)\, \hat a_{\vec k+\vec q,\sigma}(t)\, \hat a^+_{\vec k\sigma}(0)\rangle \approx$$

$\vec q \neq 0$

$$\approx \underbrace{\langle \hat a^+_{\vec k'+\vec q,\sigma'}\, \hat a_{\vec k',\sigma'}(t)\rangle}_{0} \langle \hat a_{\vec k+\vec q,\sigma}(t)\, \hat a^+_{\vec k,\sigma}(0)\rangle -$$

$$- \langle \hat a^+_{\vec k'+\vec q\,\sigma'}\, \hat a_{\vec k+\vec q,\sigma}(t)\rangle \langle \hat a_{\vec k',\sigma'}(t)\, \hat a^+_{\vec k,\sigma}(0)\rangle =$$

$\ominus$ $\quad \langle a^+ a\rangle \neq 0$

$$= -\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\vec k\vec k'} \underbrace{\langle \hat a^+_{\vec k+\vec q,\sigma}(t)\, \hat a_{\vec k+\vec q,\sigma}(t)\rangle}_{=n} \underbrace{\langle \hat a_{\vec k,\sigma}(t)\, a^+_{\vec k,\sigma}(0)\rangle}_{=G(t)}$$

Somit lauten die Bewegungsgleichungen $\left(U_{\vec q} = \frac{4\pi e^2}{q^2},\ \vec q \neq 0\right)$

$$\frac{d}{dt} G_{\vec k,\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar}\Big(\underbrace{\varepsilon_0(\vec k) - \frac{1}{V}\sum_{\vec q\neq 0}\frac{4\pi e^2}{q^2}\, n_{\vec k+\vec q,\sigma}}_{\varepsilon(\vec k)}\Big) G_{\vec k,\sigma}(t)$$

$\vec k + \vec q = \vec k'$

$$\varepsilon(\vec k) = \varepsilon_0(\vec k) + \Delta\varepsilon(\vec k) = \frac{\hbar^2 \vec k^2}{2m} - \frac{1}{V}\sum_{\vec k'} \frac{4\pi e^2}{|\vec k-\vec k'|^2}\, \underbrace{n_{\vec k',\sigma}}_{=\theta(k_F-k')}$$

Die Änderung von $\varepsilon(\vec k)$ (HF): $\sum_{k} \to \frac{V}{(2\pi)^3}\int d\vec k$

$$\Delta\varepsilon(\vec k) = -\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\frac{4\pi e^2}{|\vec k-\vec k'|^2}\,\theta(k_F-k') =$$

$$= -\frac{e^2}{\pi}\int_0^{k_F} k'^2 dk' \int_{-1}^{1} d\underbrace{\eta}_{=\cos\theta} \frac{1}{k^2+k'^2-2kk'\eta} = -\frac{e^2}{\pi k}\int_0^{k_F} k' \ln\left|\frac{k+k'}{k-k'}\right| dk' =$$

$$= -\frac{2e^2 k_F}{\pi}\Big(\underbrace{\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|}_{F(x)}\Big) \quad \text{mit } x = \frac{k}{k_F}$$