

Anwendungen  
der Viel-Teilchen-Theorie  
in der Festkörperphysik

Literatur:

---

Nolting:

"Viel-Teilchen-Theorie",  
Vieweg

Gross, Runge:

"Veilteilchentheorie",  
Teubner

Dames, Nozieres:

"The Theory of Quantum Liquids",  
Addison-Wesley

Abrikosov, Gorkov, Dzyaloshinski:

"Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics",  
Dover

Zagoskin:

"Quantum Theory of Many-Body Systems",  
Springer

Mattuck:

"A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem",  
Dover

---

Luttinger:

"Analytic Properties of Single-Particle Propagators for  
Many-Fermion Systems",  
Phys. Rev. 121 (1961) 942

Luttinger:

"Fermi Surface and Some Simple Equilibrium Properties of a  
System of Interacting Fermions",  
Phys. Rev. 119 (1960) 1153

Luttinger, Ward:

"Ground-State Energy of a Many-Fermion System II",  
Phys. Rev. 118 (1960) 1417

Baym, Kadanoff

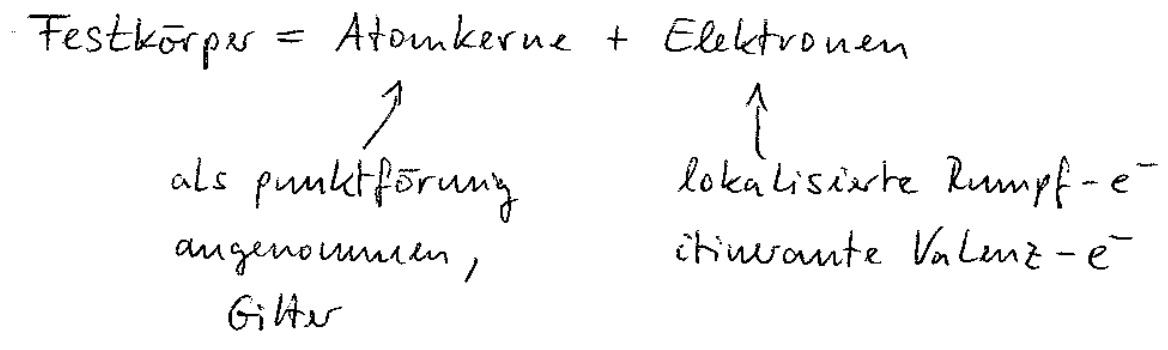
"Conservation Laws and Correlation Functions",  
Phys. Rev. 124 (1961) 287

Baym:

"Self-Consistent Approximations in Many-Body Systems",  
Phys. Rev. 127 (1962) 1391

I Der Festkörper als wechselwirkendes Viel-Elektronen-System

IA Hamilton-Operator



Von den 4 grundlegenden Wechselwirkungen (stark, schwach, elektromagnetisch, Gravitation) ist nur die elektromagnetische WW wesentlich

Entkopplung der Dynamik von Kernen und Elektronen im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung (langsame / schnelle Bewegung der Kerne / Elektronen aufgrund stark unterschiedlicher Massen)

Weitere Vereinfachung durch das Konzept des Gitterions = Atomkern + Rumpfelektronen

Nichtrelativistische Näherung für die Dynamik der Valenzelektronen

# Hamilton-Operator

$$H = H_{kin} + H_{pot} + H_{ec} + H_{ep} + H_{rel} + \dots$$

- $H_{kin} = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\vec{p}_i^2}{2m}$  kinetische Energie der Valenzelektronen

- $N_e$ : Anzahl der Elektronen,  $\vec{p}_i$  Impulsoperator des  $i$ -ten Elektrons,  $m$ : Elektronenmasse
- $H_{kin}$  definiert das nicht-wechselwirkende Elektronengas
- implizit: der fermionische Charakter der Elektronen ( $\Leftrightarrow$  Bose-Gas, klassisches ideales Gas)
- die Einteilung in Rumpf- und Valenzelektronen ist relativ willkürlich und kann nach Bedarf modifiziert werden

- $H_{pot} = \sum_{i=1}^{N_e} V(\vec{r}_i)$  Energie der Valenzelektronen im Coulomb-Potential der Gitterionen

- $H_{kin} + H_{pot}$  definiert das inhomogene nicht-wechselwirkende Elektronengas
- es ist Ausdruck der Born-Oppenheimer-Näherung, dass die Kern-Variablen nur noch als klassische Parameter in die Elektron-Kern-WW eingehen!

$$V(\vec{r}_i) = \sum_k V_{Coulomb}(\vec{r}_i - \vec{R}_k)$$

↑ Operator      ↑ Parameter  
                      (Kern-Position)

③

- wegen der noch nicht berücksichtigten WW ist  $H_{kin} + H_{pot}$  ein wesentliches ein-Ein-Teilchen-Problem; die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein gitterperiodisches Potential ist ein numerisch nicht-triviales Problem, das sich i. allg. aber sehr gut approximativ lösen lässt.

- $$H_{ee} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j}^{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$
 Coulomb-WW der Valenzelektronen

- dieser Paarwechselwirkungsterm verhindert i. allg. endgültig eine exakte Lösung des Problems
- $H_{kin} + H_{ee}$  definiert das homogene System wechselwirkender Elektronen
- $H_{kin} + H_{pot} + H_{ee}$  definiert das allgemeine Gitter-Fermionen-Problem
- $H_{ee}$  ist für eine Vielzahl von Phänomenen verantwortlich, darunter die typischen Korrelationseffekte

Schwer-Fermionen-Verhalten  
Kollektive magnetische Ordnung  
Hochtemperatur-Supraleitung  
Lokalisierungsphänomene  
etc.

- $H_{ep}$  und  $H_{rel}$  stellen wichtige Erweiterungen dar, die hier aber nicht berücksichtigt bleiben:  
Elektron-Phonon-Wechselwirkung  
Relativistische Korrekturen

Zentraler Gegenstand der Vorlesung ist das  
"Gitter-Fermion-Problem"

$$H = \sum_i \left( \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Inbesondere geht es um das Thema

Gleichgewicht und elementare Anregungen

also um Aussagen zu  $H$  in Rahmen der Quantenstatistik

Ziele:

- 1) Die Entwicklung der Quantenfeldtheor.  
Methode als Zugang zum Gitter-Fermion-Problem
- 2) Die Konstruktion von sinnvollen Näherungen  
auf der Grundlage der QFT
- 3) Die Ableitung von nicht-trivialen, exakten  
Aussagen zu  $H$

# IB Zweite Quantisierung

- Umformulierung von  $H$  mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren
- Vereinfachung des Formalismus, da auf die explizite (Anti-) Symmetrisierung von  $N$ -Teilchen-Wellenfunktionen verzichtet werden kann
- Fermi- (Bose-) Statistik drückt sich in den sog. fundamentalen Vertauschungsrelationen aus

Bem. Der Formalismus der QFT wird zunächst sowohl für Fermionen als auch für Bosonen entwickelt. Das Fermion-Problem bleibt aber im Vordergrund

Wiederholung der wichtigsten Begriffe und Zusammenhänge!

## 1) Hilbert-Raum eines $N$ -Teilchen-Systems

$$\mathcal{H}_N = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_1^{(i)}$$

$\mathcal{H}_1^{(i)}$ : Hilbert-Raum des  $i$ -ten Teilchens

Basis von  $\mathcal{H}_1$ : ( $\Rightarrow$  Basis von  $\mathcal{H}_N$ !)

$\{ |y_\alpha\rangle \}$  sei eine Orthonormalbasis von  $\mathcal{H}_1$

d.h.  $\langle y_\alpha | y_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$  (Orthonormierung)

$$\sum_{\alpha} |y_\alpha\rangle \langle y_\alpha| = \mathbb{1}_{\mathcal{H}_1}$$
 (Vollständigkeit)

(6)  
(Bem.) Der Einfachheit halber wird angenommen, daß die Ein-Teilchen-Basis abzählbar ist. Der Index  $\alpha$  soll also nur diskrete Werte annehmen

(Bsp) a)

$\alpha = (i, m, \sigma)$  Multiindex

$i$ : Gitterplatz,  $m$ : Orbital,  $\sigma$ : Spinprojektion

Basiszustand in Ortsdarstellung

$$\langle \vec{r} | y_\alpha \rangle = \langle \vec{r} | y_{im\sigma} \rangle = y_m(\vec{r} - \vec{R}_i) \cdot \chi_\sigma$$

$\vec{R}_i$ : Ortsvektor zum  $i$ -ten Gitterplatz

$\chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$   $\chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  Pauli-Spinor

$y_m(\vec{r})$ : um  $\vec{r}=0$  zentrierte (quasi atomare)

Wellenfunktion

$m$ : orbitaler Index, analog zum atomaren Problem

unterteilbar in Hauptquantenzahl und

Drehimpulsquantenzahlen:  $n, l, m_l$

b)

$\alpha = (\vec{k}, r, \sigma)$  Multiindex

$\vec{k}$ : Wellenvektor aus der 1. Brillouin-Zone im reziproken Raum

$r$ : Bandindex,  $\sigma$ : Spinprojektion



( $\mathbb{R}$  nimmt nur diskrete Werte an: System innerhalb eines endlichen aber großen Volumens  $V$ , periodische Randbedingungen)

Ortsdarstellung:

$$\langle \mathbb{R} | \psi_{\alpha} \rangle = \langle \mathbb{R} | \psi_{\mathbb{R}r_0} \rangle = \psi_{\mathbb{R}r}(\mathbb{R}) \cdot \mathcal{X}_r$$

$\psi_{\mathbb{R}r}(\mathbb{R})$  erfülle das Bloch-Theorem

$$\psi_{\mathbb{R}r}(\mathbb{R} + \Delta \vec{R}_i) = e^{i\mathbb{R} \Delta \vec{R}_i} \cdot \psi_{\mathbb{R}r}(\mathbb{R})$$

## 2) Prinzip der Ununterscheidbarkeit

Identische Teilchen sind ununterscheidbar

⇒ Permutation der Teilchennummerierung darf nicht zu einer Änderung von Messgrößen führen

Für einen Zustand aus  $N$  identischen Teilchen

$$| \psi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \psi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle = | \psi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle \cdot \dots \cdot | \psi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle \in \mathcal{X}_N$$

$\uparrow$   $\uparrow$   
 $\in \mathcal{X}_1^{(1)}$   $\in \mathcal{X}_1^{(N)}$

und eine beliebige Observable  $A$  muss also gelten:

$$\langle \dots \psi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \psi_{\alpha_j}^{(j)} \dots | A | \dots \psi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \psi_{\alpha_j}^{(j)} \dots \rangle \stackrel{!}{=} \dots$$

$$\langle \dots \psi_{\alpha_j}^{(j)} \dots \psi_{\alpha_i}^{(i)} \dots | A | \dots \psi_{\alpha_j}^{(j)} \dots \psi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \rangle$$

Dies hat Konsequenzen für die physikalisch erlaubten Zustände und Observablen:

Def. Permutationsoperator P

$$P | \varphi_{j_{\alpha_1}}^{(1)} \dots \varphi_{j_{\alpha_N}}^{(N)} \rangle = | \varphi_{j_{\alpha_{i_1}}}^{(1)} \dots \varphi_{j_{\alpha_{i_N}}}^{(N)} \rangle$$

$(i_1 \dots i_N)$  ist eine Permutation von  $(1, \dots, N)$

Vorzeichen der Permutation  $(-1)^P$

$(-1)^P := (-1)^p$  mit  $p =$  Anzahl der Transpositionen, aus denen sich  $P$  aufbaut

Transposition  $T$ ,  $P = T_1 \dots T_p$ ,  $P$  unitär,  $P^{-1} = P^\dagger$

Für ein System aus  $N$  ~~unterscheidbaren~~ identischen Teilchen gilt:

- Jede physikalische Observable A ist invariant unter Permutationen der Teilchen-Indizes:

$$A = P^\dagger A P \quad \text{oder} \quad [A, P] = 0$$

- Jeder physikalische Zustand ist symmetrisch oder antisymmetrisch unter Permutationen der Teilchen-Indizes:

$$P |\psi\rangle = (\pm)^P |\psi\rangle$$

## Spin - Statistik - Theorem

9

Fermionen	Bosonen
$P \psi\rangle = (-1)^p  \psi\rangle$	$P \psi\rangle =  \psi\rangle$
halbzahliger Spin	ganzzahliger Spin

(Def.)  $\varepsilon = -1$  f. System identischer Fermionen  
 $\varepsilon = +1$  f. System identischer Bosonen  
 $\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$ :  $N$ -Teilchen-Hilbert-Raum der physikalisch erlaubten Zustände

$$\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)} \subset \mathcal{H}_N$$

$$\mathcal{H}^{(\varepsilon)} \equiv \bigotimes_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$$

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N$$

### 3) Besetzungszahldarstellung

(Def.) (Anti-) Symmetrisierungsoperator

$$S_{\varepsilon} = c_{\varepsilon} \sum_P \varepsilon^P \cdot P$$

Für beliebiges  $|\psi_N\rangle \in \mathcal{H}_N$  ist  $S_{\varepsilon}|\psi_N\rangle \in \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$   
 $c_{\varepsilon}$  sei so gewählt, daß die (anti-)symmetrisierten Basiszustände des  $\mathcal{H}_N$  normiert sind!

Diese bilden dann eine ONB von  $\mathcal{L}_N^{(\epsilon)}$

$$|y_{\alpha_1} \dots y_{\alpha_N}\rangle^{(\epsilon)} = S_{\epsilon} |y_{\alpha_1}^{(1)} \dots y_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

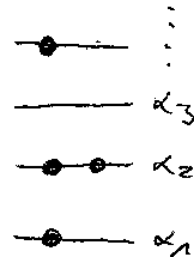
Bef. Besetzungszahl  $n_{\alpha_i}$ : Häufigkeit mit der  $y_{\alpha_i}$  in  $|y_{\alpha_1} \dots y_{\alpha_N}\rangle^{(\epsilon)}$  auftritt

Besetzungszahldarstellung: Darstellung der Basiszustände von  $\mathcal{L}_N^{(\epsilon)}$  durch Besetzungszahlen:

$$|N; n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots n_{\alpha_i} \dots\rangle^{(\epsilon)} = |y_{\alpha_1} \dots y_{\alpha_N}\rangle^{(\epsilon)} \\ = S_{\epsilon} \left( \underbrace{|y_{\alpha_1}^{(1)}\rangle |y_{\alpha_1}^{(2)}\rangle \dots}_{n_{\alpha_1}} \dots \underbrace{|y_{\alpha_i}^{(p)}\rangle |y_{\alpha_i}^{(p+n)}\rangle \dots}_{n_{\alpha_i}} \dots \right)$$

Fermionen:  $n_{\alpha_i} = 0, 1$

Bosonen:  $n_{\alpha_i} = 0, 1, 2, \dots$



Normierungskonstante

$$C_- = \frac{1}{N!} \quad C_+ = \frac{1}{N!} \frac{1}{\sqrt{\prod_i (n_{\alpha_i}!)}}$$

Orthogonalität

$$\langle N; \dots n_{\alpha_i} \dots | N'; \dots n'_{\alpha_i} \dots \rangle^{(\epsilon)} = \delta_{NN'} \prod_i \delta_{n_{\alpha_i} n'_{\alpha_i}}$$

Vollständigkeit

$$\sum_{n_{\alpha_1}} \sum_{n_{\alpha_2}} \dots |N; n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots\rangle^{(\epsilon)} \langle N; n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots|^{(\epsilon)} = \mathbb{1}_{\mathcal{L}^{(\epsilon)}}$$

↑  
(alle N)  
 $N = \sum_i n_{\alpha_i}$

#### 4) Konstruktionsoperatoren

(11)

Def. Erzeugungsoperator  $c_{\alpha i}^+$

$$\begin{aligned} c_{\alpha i}^+ |n_{\alpha 1} n_{\alpha 2} \dots n_{\alpha i} \dots\rangle^{(\varepsilon)} &= c_{\alpha i}^+ |y_{\alpha 1} \dots y_{\alpha i} \dots\rangle^{(\varepsilon)} \\ &\equiv \sqrt{n_{\alpha i} + 1} |y_{\alpha i} \underbrace{y_{\alpha 1} y_{\alpha 1} \dots}_{n_{\alpha 1}} \dots \underbrace{y_{\alpha i} y_{\alpha i} \dots}_{n_{\alpha i}} \dots\rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \varepsilon^{N_{\alpha i}} \sqrt{n_{\alpha i} + 1} |n_{\alpha 1} n_{\alpha 2} \dots (n_{\alpha i} + 1) \dots\rangle^{(\varepsilon)} \end{aligned}$$

mit  $N_{\alpha i} = \sum_{j=1}^{i-1} n_{\alpha j}$

Vernichtungsoperator  $c_{\alpha i}$

$$c_{\alpha i} = (c_{\alpha i}^+)^{\dagger}$$

$$c_{\alpha i} |n_{\alpha 1} n_{\alpha 2} \dots n_{\alpha i} \dots\rangle^{(\varepsilon)} \equiv \varepsilon^{N_{\alpha i}} \sqrt{n_{\alpha i}} |n_{\alpha 1} n_{\alpha 2} \dots n_{\alpha i} - 1 \dots\rangle^{(\varepsilon)}$$

Daraus folgen die fundamentalen Vertauschungsrelationen:

$$[c_{\alpha}, c_{\beta}^{\dagger}]_{-\varepsilon} = \delta_{\alpha\beta}$$

$$[c_{\alpha}, c_{\beta}]_{-\varepsilon} = 0$$

$$[c_{\alpha}^{\dagger}, c_{\beta}^{\dagger}]_{-\varepsilon} = 0$$

Für eine beliebige physikalische Observable  $A$  ( $[A, P]_{-} = 0$ )  
der Form

$$A = \sum_{i=1}^N A_1^{(i)} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \neq j \\ i, j}} A_2^{(ij)}$$

gilt:

$$A = \sum_{\alpha\beta} \langle y_\alpha | A_1 | y_\beta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle y_\alpha^{(1)} y_\beta^{(2)} | A_2 | y_\delta^{(1)} y_\gamma^{(2)} \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta$$

Hamilton-Operator

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v(\alpha\beta\delta\gamma) c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta$$

mit

$$t_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) | \beta \rangle$$

$$v(\alpha\beta\delta\gamma) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \alpha^{(1)} | \langle \beta^{(2)} | \frac{1}{|\vec{r}^{(1)} - \vec{r}^{(2)}|} | \delta^{(1)} \rangle | \gamma^{(2)} \rangle$$

Besetzungszahloperator  $\hat{n}_\alpha = c_\alpha^\dagger c_\alpha$

Teilchenzahloperator  $\hat{N} = \sum_\alpha \hat{n}_\alpha$

Es gilt  $[c_\alpha, \hat{n}_\beta]_- = \delta_{\alpha\beta} c_\alpha$  für Fermionen und Bosonen!

### 5) Unitäre Transformation der Ein-Teilchen-Basis

$$|\alpha'\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} |\alpha\rangle$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{\alpha'} U_{\alpha'\alpha}^{-1} |\alpha'\rangle$$

$U$  unitär

$\{|\alpha\rangle\}$  ONB von  $\mathcal{H}_1 \Rightarrow \{|\alpha'\rangle\}$  ONB von  $\mathcal{H}_1$   
 Wie transformieren sich die Konstruktionsoperatoren?

$$c_{\alpha'}^{\dagger} |0\rangle = |\alpha'\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} |\alpha\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} c_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle$$

$\Rightarrow$  (direkt und durch Adjungieren)

$c_{\alpha'}^{\dagger} = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} c_{\alpha}^{\dagger}$	$c_{\alpha}^{\dagger} = \sum_{\alpha'} U_{\alpha'\alpha}^{-1} c_{\alpha'}^{\dagger}$
$c_{\alpha'} = \sum_{\alpha} \underbrace{U_{\alpha\alpha'}^*}_{U_{\alpha'\alpha}^{-1}} c_{\alpha}$	$c_{\alpha} = \sum_{\alpha'} \underbrace{U_{\alpha'\alpha}^{-1*}}_{U_{\alpha\alpha'}} c_{\alpha'}$

Betrachte

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle c_{\alpha} = \sum_{\alpha} \left( \sum_{\alpha'} U_{\alpha'\alpha}^{-1} |\alpha'\rangle \right) \left( \sum_{\alpha''} U_{\alpha\alpha''} c_{\alpha''} \right)$$

$$= \sum_{\alpha'\alpha''} \left( \sum_{\alpha} U_{\alpha'\alpha}^{-1} U_{\alpha\alpha''} \right) |\alpha'\rangle c_{\alpha''} = \sum_{\alpha'} |\alpha'\rangle c_{\alpha'}$$

analog  $\sum_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} \langle\alpha| = \sum_{\alpha'} c_{\alpha'}^{\dagger} \langle\alpha'|$

Damit folgt:

$$A = \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} \langle \alpha | A_1 | \beta \rangle c_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} \langle \alpha\beta | A_2 | \gamma\delta \rangle c_{\gamma} c_{\delta}$$

$$= \sum_{\alpha\beta'} c_{\alpha}^{\dagger} \langle \alpha | A | \beta' \rangle c_{\beta'} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta'} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} \langle \alpha\beta | A_2 | \gamma\delta' \rangle c_{\gamma} c_{\delta'}$$

Fundamentale Vertauschungsrelationen

$$[c_{\alpha}, c_{\beta'}^{\dagger}]_{-} = \sum_{\alpha} U_{\alpha'\alpha}^{-1} \sum_{\beta} U_{\beta\beta'} [c_{\alpha}, c_{\beta}^{\dagger}]_{-}$$

$$= \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha'\alpha}^{-1} U_{\beta\beta'} \delta_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha'\beta'}$$

analog für  $[c_{\alpha}, c_{\beta}]_{-}$  und  $[c_{\alpha'}^{\dagger}, c_{\beta'}^{\dagger}]_{-}$

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \sum_{\beta} U_{\beta\alpha} | \beta \rangle = \sum_{\beta} U_{\beta\alpha} \delta_{\alpha\beta} = U_{\alpha\alpha}$$

$\{ \text{Bsp.} \} \{ |i_{m, \sigma} \rangle \}$  (lokalisierte, "atomare" Orbitale)

↓ unitäre Transformation  $U$

$\{ |k, r, \sigma \rangle \}$  (Basis aus Eigenzuständen von  $H_1$ )  
 $H_1 = \sum_{\vec{r}} \left( \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right)$

$$c_{kmc}^{\dagger} = \sum_{im} U_{im, kr} c_{imc}^{\dagger}$$

$$U_{im, kr} = \langle imc | krc \rangle = \int d^3r \psi_m^*(\vec{r} - \vec{r}_i) \psi_{kr}(\vec{r})$$

Die Zustände  $|krc \rangle$  seien Eigenzustände von  $H_1$

$$\left( \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi_{kr}(\vec{r}) = \epsilon_r(\vec{k}) \psi_{kr}(\vec{r})$$

↑  
nichtwechselwirkende Bandstruktur



bew.

$$H_n |k r_0\rangle = \epsilon_r(\mathbb{R}) |k r_0\rangle$$

Die ONB  $\{|c_m\rangle\}$  ist als quasi-atomare Basis meist gegeben,  $t_{mm'}$  =  $\langle c_m | H_n |c_{m'}\rangle$  ist bekannt.

Wie konstruiert man die Bandstruktur  $\epsilon_r(\mathbb{R})$ ?

Definiere Blochwellenbasis  $\{|k m_0\rangle\}$

$$|k m_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbb{R}i} |c_m\rangle$$

$N$ : Anzahl der Gitterplätze ( $N \rightarrow \infty$ )

Normierung:

$$\langle k m_0 | k m_0 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i,i'} e^{i\mathbb{R}(\mathbb{R}i' - \mathbb{R}i)} \underbrace{\langle c_m | c_m \rangle}_{\delta_{ii'}} = \frac{1}{N} \sum_i 1 = 1$$

$H_n$  in der Blochwellenbasis:

$$\langle k m_0 | H_n |k' m'_0\rangle = \delta_{kk'} \delta_{mm'} H_{mm'}(\mathbb{R})$$

Sei  $R_{mm'}(\mathbb{R})$  unitär  $\forall \mathbb{R}$ , mit:  $\uparrow$  hermitesch  $\forall \mathbb{R}$

$$\sum_{mm'} R_{mm'}^{-1}(\mathbb{R}) H_{mm'}(\mathbb{R}) R_{mm'}(\mathbb{R}) = \epsilon_r(\mathbb{R})$$

Definiere jetzt

$$|k r_0\rangle = \sum_m R_{mr}(\mathbb{R}) |k m_0\rangle$$

Dann ist  $H_n$  in der Tat diagonal in  $\{|k r_0\rangle\}$ :

$$\langle E' r c | H_1 | E' r c' \rangle =$$

$$= \sum_{mm'} \langle R m c | H_1 | E' m' c' \rangle R_{rm}^{-1}(E) R_{mr'}(E')$$

$$= \delta_{EE'} \delta_{cc'} \sum_{mm'} R_{rm}^{-1}(E) H_{mm'}(E) R_{mr'}(E)$$

$$= \delta_{EE'} \delta_{cc'} \delta_{rr'} E_r(E)$$

In der abstrakten Schreibweise mit Multiindizes bezeichne

$$\{ |k\rangle \} \quad k \triangleq (E, r, c)$$

die Ein-Teilchen-ONS, in der  $H_1$  diagonal ist

Wir schreiben:

$$H = \sum_k \epsilon(k) c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \sum_{k, l, p, q} v(k, l, p, q) c_k^\dagger c_l^\dagger c_p c_q$$

$U_{\alpha k} = \langle \alpha | k \rangle$  vermittelt die unitäre Transformation  
zwischen der ONS  $\{ |\alpha\rangle \}$  ( $H_1$  nicht-diagonal)  
und  $\{ |k\rangle \}$  ( $H_1$  diagonal)

(Bsp.)  $\{ |i m c\rangle \} \Leftrightarrow \{ |k r c\rangle \}$

$$U_{i m c, k r c} = \langle i m c | k r c \rangle$$

$$= \langle i m c | \sum_m R_{mr}(E) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i E_j} |j m c\rangle$$

$$= \sum_{mj} R_{mr}(E) \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i E_j} \underbrace{\langle i m c | j m c \rangle}_{\delta_{ij} \delta_{mm}}$$

$$U_{i m c, k r c} = R_{mr}(E) \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot e^{i E_c}$$

## G) Hubbard-Modell

(17)

Betrachte den allgemeineren Hamilton-Operator, wobei der Spinindex explizit auftritt: ( $\alpha = (\sigma, m)$ )

$$H = \sum_{\alpha \neq \beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{\sigma\sigma'} v(\alpha\beta\sigma\sigma') c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma'}^\dagger c_{\beta\sigma} c_{\alpha\sigma}$$

(stark) vereinfachende Annahme

$$v(\alpha\beta\sigma\sigma') = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\sigma\sigma'} v \quad \Rightarrow (\sigma' \neq \sigma !)$$

$$H = \sum_{\alpha \neq \beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha\sigma}^\dagger c_{\beta\sigma} + \frac{1}{2} v \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha-\sigma}$$

( $\sigma = \uparrow, \downarrow \Rightarrow (-\sigma) = \downarrow, \uparrow$ )  $v$ : Hubbard-Wechselwirkung

Wird auch noch der orbitale Freiheitsgrad vernachlässigt,

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}$$

so erhält man das eigentliche Hubbard-Modell mit der Hubbard-Wechselwirkung  $U = v$

- effektive "Ein-Band-Systeme" mit stark abgeschränkter Coulomb-Wechselwirkung
- Demonstrationsmodell der QFT

## IC Quantenstatistik des wechselwirkungsfreien Systems

Wir betrachten den Hamilton-Operator

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N_c} \left( \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right)$$

bzw. in 2. Quantisierung

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$$

( $H$  ist diagonal in der Ein-Teilchen-Basis  $\{|k\sigma\rangle\}$  mit  $\mathbf{k} = (\vec{k}, \sigma)$ . Der Spinindex wird explizit dargestellt)

Es sollen solche Größen hier berechnet werden, die später auch im wechselwirkenden System untersucht werden.

Damit wird später ein Vergleich möglich, der zur Beantwortung der folgenden Frage beiträgt:

Gibt es nur graduelle oder gibt es auch prinzipielle Unterschiede zwischen einem nicht-wechselwirkenden und einem wechselwirkenden System von  $N_c$  Fermionen?

### 1) Quantenstatistische Beschreibung

In beiden Fällen wird hier von den Methoden der Quantenstatistik Gebrauch gemacht. Von Interesse sind die Eigenschaften des Systems im thermodynamischen Gleichgewicht sowie die elementaren Anregungen des Systems aus dem Gleichgewicht

Wir verwenden die großkanonische Gesamtheit

- Dichteoperator

$$\rho = e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} = e^{-\beta \mathcal{Z}}$$

$$\mathcal{Z} \equiv H - \mu \hat{N}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \text{ (inverse Temp.)}$$

- Zustandssumme

$$\Xi = \text{Sp}(\rho) = \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{Z}}$$

- großkanonisches Potential

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi$$

- natürliche Variablen

- T Temperatur
- V Volumen
- $\mu$  chemisches Potential
- $\mathcal{B}$  äußeres (homogenes, statisches) Magnetfeld in z-Richtung ( $\mathcal{B} = \mu_0 H$ ,  $\mathcal{B}$ : magn. Ind.,  $H$ : Magnetfeld)

- Erster Hauptsatz

$$d\Omega = -S dT - p dV - \langle \hat{N} \rangle d\mu - M d\mathcal{B}$$

$\uparrow$   
 Entropie

$\uparrow$   
 Druck

$\uparrow$   
 Teilchenzahl

$\uparrow$   
 magn. Gesamtmoment

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \quad p = -\frac{\partial \Omega}{\partial V} \quad \langle \hat{N} \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \quad M = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{B}}$$

Erwartungswerte von Observablen berechnen sich als

$$\langle A \rangle = \text{Sp}(\rho \cdot A) / \text{Sp}(\rho)$$

Bem.

Ein äußeres Magnetfeld koppelt gemäß

$$H \rightarrow H - g \mu_B \vec{B} \cdot \vec{S} = H - g \mu_B B S_z$$

$\uparrow$   
 $\vec{B} = (0, 0, B)$

an das System.

$g \approx 2$  g-Faktor des Elektrons

$\mu_B$  Bohrsches Magneton

z-Komponente des Gesamtspins

$$S_z = \frac{1}{2} (\hat{N}_\uparrow - \hat{N}_\downarrow) \quad \hat{N}_\sigma = \sum_{\vec{r}} n_{\vec{r}\sigma}$$

mit

$$p = \frac{1}{2} g \mu_B \approx \mu_B \quad z_\uparrow = +1 \quad z_\downarrow = -1$$

ist

$$H \rightarrow H - \sum_{\sigma} z_{\sigma} p \hat{N}_{\sigma} B$$

## 2) Gleichgewichts - Erwartungswerte

Wir beginnen mit der Berechnung von  $\langle \hat{O}(\tau, \mu, B) \rangle$

Die (Fock-) Basiszustände sind Eigenzustände zu  $\mathcal{H}_0$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 |N_i, n_{k_1}, n_{k_2}, \dots\rangle^{(e)} &= \left( \sum_{k_0} (\epsilon(k) - \mu - z_0 p B) \hat{n}_{k_0} \right) |N_i, n_{k_1}, \dots\rangle^{(e)} \\ &= \left( \sum_{k_0} (\epsilon(k) - \mu - z_0 p B) n_{k_0} \right) |N_i, n_{k_1}, \dots\rangle^{(e)} \end{aligned}$$

Dannit folgt:

$$\begin{aligned}
 \Omega_0 &= \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \sum_{N, n_{k_1}, \dots}^{(\mathcal{E})} \langle N, n_{k_1}, \dots | e^{-\beta \mathcal{H}_0} | N, n_{k_1}, \dots \rangle^{(\mathcal{E})} \\
 &= \sum_{n_{k_1}, n_{k_2}, \dots} e^{-\beta \sum_{k \in G} (\epsilon(k) - \mu - z_0 \beta) n_{k_1}} \\
 &\quad \prod_{k \in G} e^{-\beta (\epsilon(k) - \mu - z_0 \beta) n_{k_1}} \\
 &\quad e^{-\beta (\epsilon(k_1) - \mu - z_0 \beta) n_{k_1}} \cdot e^{-\beta (\epsilon(k_2) - \mu - z_0 \beta) n_{k_2}} \dots \\
 &= \left( \sum_{n_{k_1}} e^{-\beta (\epsilon(k_1) - \mu - z_0 \beta) n_{k_1}} \right) \cdot \left( \sum_{n_{k_2}} e^{-\beta (\dots) n_{k_2}} \right) \dots \\
 &= \prod_{k \in G} \left( \sum_{n_{k_1}} e^{-\beta (\epsilon(k) - \mu - z_0 \beta) n_{k_1}} \right)
 \end{aligned}$$

Fermionen:  $n_{k_1} = 0, 1$

$$\Omega_0 = \prod_{k \in G} (1 + e^{-\beta (\epsilon(k) - \mu - z_0 \beta)})$$

$$\Rightarrow (\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \Omega_0)$$

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_{k \in G} \ln (1 + e^{-\beta (\epsilon(k) - \mu - z_0 \beta)})$$

$$= \sum_{k \in G} \Omega_{0, k_1} \quad , \quad \Omega_{0, k_1} = -\frac{1}{\beta} \ln (1 + e^{-\beta (\epsilon(k) - \mu - z_0 \beta)})$$

- mittlere Teilchenzahl

$$\langle N \rangle_0 = - \frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} = \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \frac{e^{-\beta(\epsilon(k) - \mu - p z_\sigma B)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon(k) - \mu - p z_\sigma B)}} \cdot \beta$$

$$\langle N \rangle_0 = \sum_{k\sigma} f(\epsilon(k) - \mu - p z_\sigma B)$$

mit  $f(x) = \frac{1}{e^{\beta x} + 1}$  Fermi-Funktion

- mittlere, spinabhängige Teilchenzahl

$$\langle N_\sigma \rangle_0 = \sum_k \left( - \frac{\partial}{\partial \mu} \Omega_{0, k\sigma} \right) = \sum_k f(\epsilon(k) - \mu - p z_\sigma B)$$

- mittlere Besetzungszahl

$$\langle n_{k\sigma} \rangle_0 = - \frac{\partial}{\partial \mu} \Omega_{0, k\sigma} = f(\epsilon(k) - \mu - p z_\sigma B)$$

- Magnetisches Gesamtmoment

$$M_0 = - \frac{\partial \Omega_0}{\partial B} = \frac{1}{\beta} \sum_{k\sigma} \frac{e^{\beta(\dots)} \beta p z_\sigma}{1 + e^{-\beta(\dots)}} =$$

$$= \sum_c p z_c \sum_k f(\dots) = \sum_c p z_c \langle N_c \rangle_0 = p (\langle N_\uparrow \rangle_0 - \langle N_\downarrow \rangle_0)$$

- Innere Energie

$$U_0 = \langle H_0 \rangle = \langle \mathcal{H}_0 \rangle + \mu \langle N \rangle_0 = \frac{1}{\beta} \text{Sp}(\mathcal{H}_0 e^{-\beta \mathcal{H}_0}) + \mu \langle N \rangle_0$$

$$= \mu \langle N \rangle_0 - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Omega_0 = \mu \langle N \rangle_0 + \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \Omega_0)$$

$$= \mu \langle N \rangle_0 - \sum_{k\sigma} \frac{e^{-\beta(\dots)} (\dots)}{1 + e^{-\beta(\dots)}} = \mu \langle N \rangle_0 + \sum_{k\sigma} (\dots) f(\dots)$$

$$= \sum_{k\sigma} (\epsilon(k) - p z_\sigma B) f(\epsilon(k) - \mu - p z_\sigma B)$$



- Entropie

$$S_0 = - \frac{\partial R_0}{\partial T} \quad T \cdot S_0 = - R_0 + U_0 - \mu \langle N \rangle_0 - \beta \mathcal{H}_0$$

Von besonderem Interesse sind die sogenannten  
Response-Größen:

- Wärmekapazität

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N, V, \beta} = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{N, V, \beta}$$

- Kompressibilität

$$\kappa = \frac{V}{\langle N \rangle^2} \cdot \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu} \Big|_{T, V, \beta}$$

- Suszeptibilität

$$\chi = \mu_0 \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial B} \Big|_{T, V, \mu}$$

$$\frac{M}{V} = \text{Magnetisierung}, \quad B = \mu_0 H$$

(s. D3)

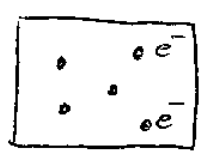
# ID Elementare Anregungen

## 1) Spektroskopien

Neben der Frage, inwieweit sogenannte statische Größen, wie z.B.  $\chi, \kappa, C_V$  durch die Elektron-Elektron-WW modifiziert werden, sind insbesondere auch die elementaren Anregungen aus dem Gleichgewichtszustand von Interesse (dynamische Größen).

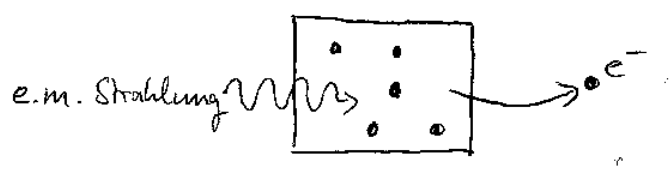
Das Anregungsspektrum ist mehr oder weniger direkt dem Experiment zugänglich. Je nach Art der Spektroskopie werden unterschiedliche elementare Anregungen des Systems untersucht.

System der (wechselseitig wirkenden)  
Valenzelektronen im  
Gleichgewicht bei  $T=0$ :



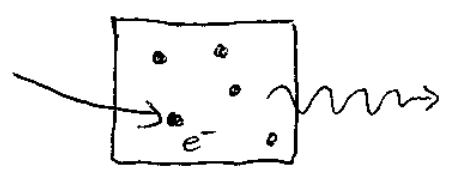
Grundzustand:  $|E_0\rangle$ , "Anfangszustand"

### (Valenzband-) Photoemission



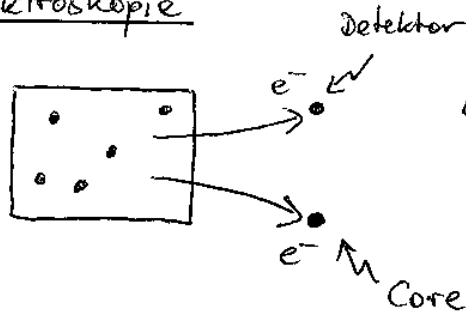
Endzustand:  
 $c_\alpha |E_\alpha\rangle$

### inverse Photoemission



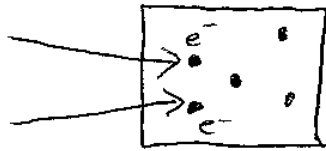
Endzustand:  
 $c_\alpha^\dagger |E_\alpha\rangle$

(CW-) Inger-Spektroskopie



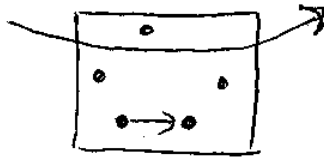
Endzustand:  
 $c_\alpha c_p |E_n\rangle$

Appearance-Potential-Spektroskopie



Endzustand:  
 $c_\alpha^\dagger c_p^\dagger |E_n\rangle$

(Neutronen-) Streuung



Endzustand:  
 $c_\alpha^\dagger c_p |E_n\rangle$

Stark schematisierend lässt sich jede Spektroskopie durch einen Übergangsoperator  $Z$  beschreiben (z.B.  $Z = c_\alpha = Z_\alpha$  f. d. Photoemission).

Wie sieht das jeweilige Anregungsspektrum aus?

Wir betrachten den allgemeinen Fall  $T=0$  oder  $T \neq 0$ .

Mit der Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{\Omega} e^{-\beta E_n}$  befindet sich das System anfangs im Eigenzustand  $|E_n\rangle$  von  $\mathcal{H} = H - \mu \hat{N}$

Bem.  $|E_n\rangle$  bezeichnet gemeinsamen Eigenzustand von  $H$  und  $\hat{N}$  ( $[\hat{N}, H] = 0$  !)

$$H |E_n\rangle = E_n(N) |E_n\rangle$$

$$\hat{N} |E_n\rangle = N |E_n\rangle \quad \text{also}$$

$$\mathcal{H} |E_n\rangle = (H - \mu \hat{N}) |E_n\rangle = (E_n(N) - \mu N) |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$$

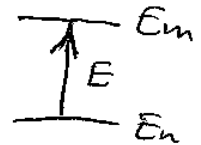
Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang  $|E_n\rangle \rightarrow |E_m\rangle$ , vermittelt durch  $Z$ , ist:

$$\frac{1}{\Omega} e^{-\beta E_n} |\langle E_m | Z | E_n \rangle|^2$$

Die Anregungsenergie ist gegeben durch  $E = E_m - E_n$ . Die Gesamtzahl der Übergänge mit Anregungsenergien zwischen  $E$  und  $E+dE$  (Intensität) ergibt sich dann als:

$$I_Z(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} |\langle E_m | Z | E_n \rangle|^2 \delta(E - (E_m - E_n))$$

Durch Annahmen der Energieerhaltung  $E_n = E_m - E$  gilt auch:



$$I_Z(E) = e^{\beta E} \frac{1}{\Omega} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} |\langle E_m | Z | E_n \rangle|^2 \delta(E - (E_m - E_n))$$

$$\stackrel{m \leftrightarrow n}{=} e^{\beta E} \frac{1}{\Omega} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} |\langle E_n | Z | E_m \rangle|^2 \delta(E - (E_n - E_m))$$

$$= e^{\beta E} \frac{1}{\Omega} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} |\langle E_m | Z^\dagger | E_n \rangle|^2 \delta((-E) - (E_m - E_n))$$

Also:

$$I_Z(E) = e^{\beta E} I_{Z^\dagger}(-E)$$

wodurch eine Spektroskopie mit ihrer "komplementären" Spektroskopie verknüpft wird. (z.B. Photoemission und inverse Photoemission).

Wir betrachten die folgende Größe (Spektraldichte)

(Def.)  $A_{z\pm}(E) \equiv I_{z\pm}(E) \pm I_z(-E)$

$$= e^{\beta E} I_z(-E) \pm I_z(-E)$$

$$= (e^{\beta E} \pm 1) I_z(-E)$$

$$A_{z\pm}(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} (e^{\beta E} \pm 1) |\langle E_m | z | E_n \rangle|^2 \underbrace{\delta(E - (E_n - E_m))}_{(=\delta(-E - (E_m - E_n)))}$$

Die Spektraldichte beschreibt beide Spektroskopien:

$$I_z(E) = \frac{1}{e^{-\beta E} \pm 1} A_{z\pm}(-E)$$

$$I_{z\pm}(E) = \frac{e^{\beta E}}{e^{\beta E} \pm 1} A_{z\pm}(E)$$

Durch Fourier-Transformation in die Zeitdarstellung,

$$X(E) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} X(t) dt$$

$$X(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iEt} X(E) dE,$$

findet man einen formal sehr einfachen Ausdruck für die Spektraldichte. Zunächst der erste Term:

$$\frac{1}{2\pi} \int e^{-iEt} I_{z+}(E) dE$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int e^{-iEt} \frac{1}{\Omega} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} |\langle E_m | z^+ | E_n \rangle|^2 \delta(E - (E_n - E_m)) dE$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\Omega} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} e^{-iE_n t} e^{iE_n t} \langle E_n | z^+ | E_m \rangle \langle E_m | z^+ | E_n \rangle$$

$$=$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{i} \sum_{mn} e^{-\lambda E_n} \underbrace{\langle E_n | e^{i\mathcal{H}t} z e^{-i\mathcal{H}t} | E_m \rangle}_{z(t) \quad (*)} \langle E_m | \overset{\uparrow}{z^\dagger(0)} | E_n \rangle$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{i} \text{Sp} (e^{-\beta \mathcal{H}} z(t) z^\dagger(0))$$

$$= \frac{1}{2\pi} \langle z(t) z^\dagger(0) \rangle$$

Analog der 2. Term

$$\frac{1}{2\pi} \int e^{-iEt} I_z(-E) dE = \frac{1}{2\pi} \langle z^\dagger(0) z(t) \rangle$$

Zusammen:

$$A_{zz^\dagger}(t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-iEt} A_{zz^\dagger}(E) dE = \frac{1}{2\pi} \langle [z(t), z^\dagger(0)]_+ \rangle$$

Allgemein definieren wir für beliebige Operatoren A und B die (zeitabhängige) Spektraldichte

Def.  $A_{AB}(t) = \frac{1}{2\pi} \langle [A(t), B(0)]_\pm \rangle$

- + : Antikommutator - Spektraldichte
- : Kommutator - Spektraldichte

(\*) Bem. Für einen nicht explizit zeitabhängigen Hamilton-Operator  $\mathcal{H} = H - \mu \hat{N}$  und eine nicht explizit zeitabhängige Observable X ist  $X(t) = e^{i\mathcal{H}t} X e^{-i\mathcal{H}t}$  die entsprechende Observable im Heisenberg-Bild.  $X(t)$  löst die Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$i \frac{d}{dt} X(t) = [X(t), \mathcal{H}]_-$$

Wir halten fest:

Das Spektrum elementarer Anregungen, bzw. dynamische Größen werden durch zeitabhängige Korrelationsfunktionen

$$\langle A(t) B(0) \rangle$$

beschrieben. Ihre Bestimmung ist eine der Hauptaufgaben der QFT.

Beim. Für einen nicht explizit von der Zeit abhängigen Hamilton-Operator gilt

$$\langle A(t) B(t') \rangle = \langle A(t-t') B(0) \rangle = \langle A(0) B(t-t') \rangle$$

(zyklische Invarianz der Spur !)

## 2) Spektraldichte des freien Systems

Def. (Zeitabhängige) Ein-Teilchen-Spektraldichte

$$A_k(t) = \frac{1}{2\pi} \langle [c_k(t), c_k^\dagger(0)]_{-\varepsilon} \rangle$$

(Fermionen:  $\varepsilon = -1$ , Bosonen:  $\varepsilon = +1$ ) 1-T-ONB:  $\{|k\rangle\}$

Wir berechnen  $A_k(t)$  im freien System  $H_0$ .

$$A_k^{(0)}(t) = \frac{1}{2\pi} \langle [c_k(t), c_k^\dagger(0)]_{-\varepsilon} \rangle^{(0)}$$

Zeitabhängigkeit  
bestimmt durch

$$\mathcal{H}_0: c_k(t) = e^{i\epsilon_k t} c_k e^{-i\epsilon_k t}$$

↑  
Berechnung im  
freiem System  $\mathcal{H}_0$

Zur Berechnung von  $c_k(t)$  beweisen wir zunächst:

$$c_k \mathcal{H}_0^n = (\epsilon(k) - \mu + \mathcal{H}_0)^n c_k$$

$n=1$ :  $c_k \mathcal{H}_0 \stackrel{!}{=} (\epsilon(k) - \mu + \mathcal{H}_0) c_k$  bzw.  $[c_k, \mathcal{H}_0]_- = (\epsilon(k) - \mu) c_k$

$$\begin{aligned} [c_k, \mathcal{H}_0]_- &= [c_k, \sum_{k'} (\epsilon(k') - \mu) c_{k'}^\dagger c_{k'}]_- \\ &= \sum_{k'} (\epsilon(k') - \mu) [c_k, n_{k'}]_- = \sum_{k'} (\epsilon(k') - \mu) \delta_{kk'} c_k \\ &= (\epsilon(k) - \mu) c_k \quad \checkmark \quad (\text{Fermionen und Bosonen!}) \end{aligned}$$

$n \rightarrow n+1$ :  $c_k \mathcal{H}_0^{n+1} = c_k \mathcal{H}_0^n \mathcal{H}_0 = (\epsilon(k) - \mu + \mathcal{H}_0)^n c_k \mathcal{H}_0$   
 $= (\epsilon(k) - \mu + \mathcal{H}_0)^n (\epsilon(k) - \mu + \mathcal{H}_0) c_k$   
 $= (\epsilon(k) - \mu + \mathcal{H}_0)^{n+1} c_k \quad \checkmark$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} c_k(t) &= e^{i\mathcal{H}_0 t} c_k e^{-i\mathcal{H}_0 t} = e^{i\mathcal{H}_0 t} c_k \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-it)^n \mathcal{H}_0^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-it)^n e^{i\mathcal{H}_0 t} c_k \mathcal{H}_0^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-it)^n e^{i\mathcal{H}_0 t} (\epsilon(k) - \mu + \mathcal{H}_0)^n c_k \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-it)^n (\epsilon(k) - \mu + \mathcal{H}_0)^n e^{i\mathcal{H}_0 t} c_k \\ &\stackrel{\Delta}{=} e^{-i(\epsilon(k) - \mu)t} e^{-i\mathcal{H}_0 t} e^{i\mathcal{H}_0 t} c_k \\ &= e^{-i(\epsilon(k) - \mu)t} \cdot c_k \end{aligned}$$

$c_k(t) = e^{-i(\epsilon(k) - \mu)t} \cdot c_k \quad (\text{freies System})$



Also:  $A_k^{(0)}(t) = \frac{1}{2\pi} \underbrace{\langle [c_k, c_k^\dagger]_{-E} \rangle}_{1} \cdot e^{-i(\epsilon(k)-\mu)t}$   
 (daher f.-Fermi / Bos. unterschiedl. Def. der zeitabh. Sp.dichte gültig!)

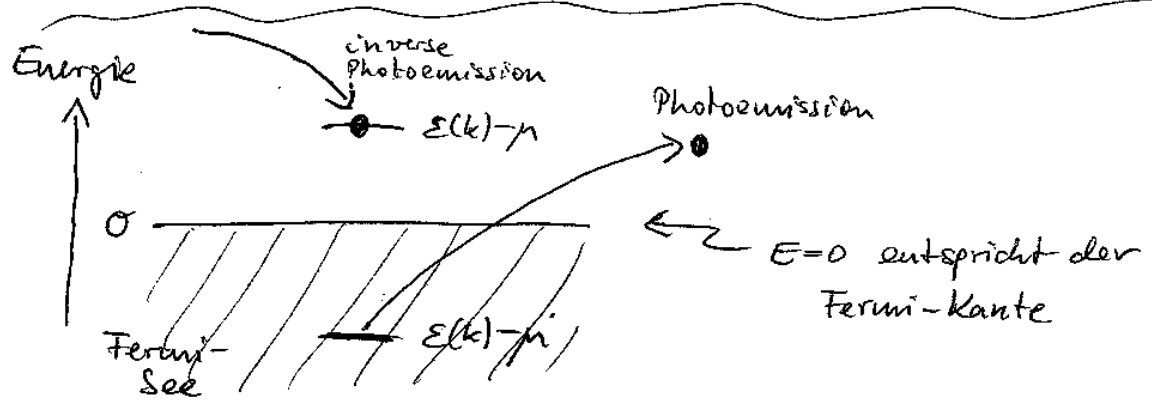
und für die energieabhängige Spektraldichte:

$$A_k^{(0)}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iEt} A_k^{(0)}(t) dt = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i(E - (\epsilon(k)-\mu))t}$$

$$A_k^{(0)}(E) = \delta(E - (\epsilon(k)-\mu))$$

**Bem.** Wegen  $[c_k, c_{k'}^\dagger]_{-E} = \delta_{kk'}$  ist die Spektraldichte in der 1-Teilchen ORB  $\{|k\rangle\}$  diagonal:

$$A_{kk'}^{(0)}(t) = \frac{1}{2\pi} \langle [c_k(t), c_{k'}^\dagger(0)]_{-E} \rangle = \delta_{kk'} \cdot A_k^{(0)}(t)$$



Anregungsenergie  $\epsilon(k)-\mu$       negativ: PE  
 positiv: IPE

Unitäre Transformation der Ein-Teilchen-Basis

$$\{|\alpha\rangle\} \rightarrow \{|\kappa\rangle\}$$

$$c_\alpha^\dagger = \sum_{\kappa} U_{\alpha\kappa}^{-1} c_\kappa^\dagger \quad c_\alpha = \sum_{\kappa} U_{\alpha\kappa} c_\kappa$$

(Anregung eines Photoelektrons aus dem / in das Orbital  $|\alpha\rangle = |cm\sigma\rangle$ )

$$A_{\alpha\beta}^{(0)}(t) = \frac{1}{2\pi} \langle [c_\alpha(t), c_\beta^\dagger(0)]_{-E} \rangle^{(0)}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{\kappa\kappa'} U_{\alpha\kappa} U_{\kappa'\beta}^{-1} \langle [c_\kappa(t), c_{\kappa'}^\dagger(0)]_{-E} \rangle^{(0)}$$

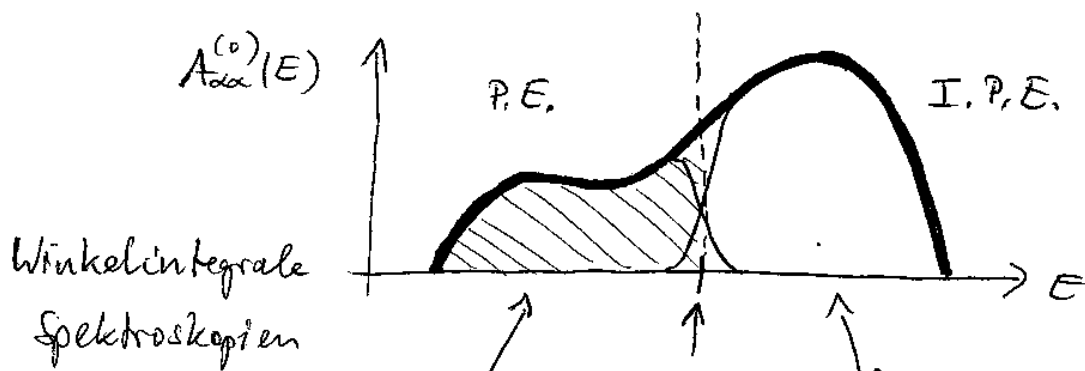
$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{\kappa\kappa'} U_{\alpha\kappa} U_{\kappa'\beta}^{-1} \delta_{\kappa\kappa'} A_\kappa^{(0)}(t)$$

$$A_{\alpha\beta}^{(0)}(E) = \sum_{\kappa} U_{\alpha\kappa} U_{\kappa\beta}^{-1} \cdot \delta(E - (E(\kappa) - \mu))$$

(nach Fourier-Transformation)

$A_{\alpha\beta}^{(0)}(E)$  ist (wegen  $\sum_{\kappa}$ ) v. allg. stetig bis auf wenige  $E$

z.B.  $\alpha = \beta$ ,  $E = -1$ ,  $A_{\alpha\alpha}^{(0)}(E) \geq 0$ !



$$I_Z(E) = \frac{1}{e^{\beta E} + 1} A_{\alpha\alpha}(-E)$$

$$I_{Z^+}(E) = \frac{e^{\beta E}}{e^{\beta E} + 1} A_{\alpha\alpha}(E)$$

### 3) Ableitung statischer Größen aus der Spektraldichte

33

Die Spektraldichte gibt nicht nur das Anregungsspektrum wieder, sondern bestimmt auch statische Größen, d.h. zeitunabhängige thermodynamische Erwartungswerte. Dies soll für das freie System anhand von einigen Beispielen demonstriert werden. Zunächst:

(Def.)

Totale (spinabhängige) Zustandsdichte

$$\rho_G(E) \equiv \sum_k A_{kG}(E-\mu) \quad \rho(E) = \sum_G \rho_G(E)$$

(  $k = (\vec{k}, \sigma)$ , ONB von  $\mathcal{X}_1 = \{ |k, \sigma\rangle \}$  )

$$\begin{aligned} \text{Wegen } \sum_k A_{kG}(E-\mu) &= \sum_k \sum_{\alpha\beta} U_{k\alpha, G}^{-1} U_{\beta k, G} A_{\alpha\beta G}(E-\mu) \\ &= \sum_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta G}(E-\mu) = \sum_k A_{\alpha\alpha G}(E-\mu) \end{aligned}$$

$$\rho_G(E) = \sum_k A_{\alpha\alpha G}(E-\mu)$$

Wir betrachten jetzt das freie System:

$$\mathcal{X}_0 = \sum_{k\sigma} (\varepsilon(k) - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

$$A_{k\sigma}^{(0)}(E) = \delta(E - (\varepsilon(k) - \mu))$$

$$\mathcal{X}_0 = \sum_{k\sigma} (\varepsilon(k) - \mu - p z_\sigma B) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

$$A_{k\sigma}^{(0)}(E) = \delta(E - (\varepsilon(k) - \mu - p z_\sigma B))$$

↑

mit äußerem Magnetfeld

Mit Hilfe der totalen Zustandsdichte des freien Systems

$$\rho_G^{(0)}(E) = \sum_k A_{kG}^{(0)}(E-\mu) = \sum_k \delta(E - \varepsilon(k) + p z_G \beta)$$

können wir schreiben:

$$\langle \hat{N} \rangle_0 = \sum_{kG} f(\varepsilon(k) - \mu - p z_G \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E - \mu) \rho_G^{(0)}(E)$$

$$\langle \hat{N}_G \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} f(E - \mu) \rho_G^{(0)}(E) dE$$

$$M_0 = \sum_G p z_G \langle \hat{N}_G \rangle_0 = \sum_G p z_G \int_{-\infty}^{\infty} f(E - \mu) \rho_G^{(0)}(E) dE$$

$$\begin{aligned} U_0 &= \sum_{kG} (\varepsilon(k) - p z_G \beta) f(\varepsilon(k) - \mu - p z_G \beta) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(E - \mu) \cdot E \cdot \rho(E) dE \end{aligned}$$

Auch die Response-Größen werden durch die Spektraldichte (bzw. durch die Zustandsdichte) festgelegt. Wir benötigen dazu die

### Sommerfeld-Entwicklung

Sei  $X(E)$  eine hinreichend reguläre,  $T$ -unabhängige Funktion mit  $X(E) \rightarrow 0$  f.  $E \rightarrow \infty$  und  $X(E) \sim E^n$  ( $n$  beliebig) f.  $E \rightarrow \infty$ . Dann gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(E - \mu) X(E) dE = \int_{-\infty}^{\infty} X(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 X'(\mu) + O(T^4)$$

• Kompressibilität  $\kappa_0 = \frac{V}{\langle N \rangle_0^2} \left. \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} \right|_{T, V, B}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} &= \frac{\partial}{\partial \mu} \int_{-\infty}^{\infty} f(E-\mu) \rho^{(0)}(E) dE = \int_{-\infty}^{\infty} \rho^{(0)}(E) \frac{\partial}{\partial \mu} f(E-\mu) dE \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \rho^{(0)}(E) \frac{\partial}{\partial E} f(E-\mu) dE = \int_{-\infty}^{\infty} f(E-\mu) \rho^{(0)'}(E) dE \end{aligned}$$

$$= \int_{-\infty}^{\mu} \rho^{(0)'}(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho^{(0)}(\mu) + \mathcal{O}(T^4)$$

kleine T

$$\approx \rho^{(0)}(\mu) \left( 1 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \right)$$

Halten wir  $\langle N \rangle_0$  anstelle von  $\mu$  fest, so ist dies noch nicht die korrekte Tieftemperaturentwicklung, da  $\mu$  noch  $T$ -abhängig ist.

Sei  $\varepsilon_F \equiv \mu|_{T=0}$  (Fermi-Energie)

und  $\delta\mu \equiv \mu - \varepsilon_F$

$$\langle N \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} f(E-\mu) \rho^{(0)}(E) dE$$

$$= \int_{-\infty}^{\mu} \rho^{(0)}(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho^{(0)'}(\mu) + \mathcal{O}(T^4)$$

$$\approx \underbrace{\int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \rho^{(0)}(E) dE}_{\langle N \rangle_0} + \delta\mu \rho^{(0)}(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho^{(0)'}(\mu)$$

Damit folgt:

$$\delta\mu = -\frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\rho^{(0)'}(\mu)}{\rho^{(0)}(\mu)} \quad \text{bzw.}$$

$$\delta\mu = -\frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\rho^{(0)'}(\epsilon_F)}{\rho^{(0)}(\epsilon_F)}$$

Also

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} &= \left( \rho^{(0)}(\epsilon_F) + \delta\mu \rho^{(0)'}(\epsilon_F) \right) \left( 1 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \right) \\ &= \rho^{(0)}(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho^{(0)}(\epsilon_F) - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\rho^{(0)'}(\epsilon_F)^2}{\rho^{(0)}(\epsilon_F)} + \mathcal{O}(T^4) \\ &= \rho^{(0)}(\epsilon_F) \left( 1 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left( \frac{\rho^{(0)'}(\epsilon_F)}{\rho^{(0)}(\epsilon_F)} \right)^2 \right) \end{aligned}$$

$$k_0 = \frac{V}{\langle N \rangle_0^2} \cdot \rho^{(0)}(\epsilon_F) \cdot \left( 1 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left( 1 - \left( \frac{\rho^{(0)'}(\epsilon_F)}{\rho^{(0)}(\epsilon_F)} \right)^2 \right) \right)$$

• Wärme kapazität  $C_V^{(0)} = \left. \frac{\partial \mathcal{U}_0}{\partial T} \right|_{\langle N \rangle_0, V, B}$

zunächst die innere Energie

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} f(E-\mu) E \rho^{(0)}(E) dE \\ &= \int_{-\infty}^{\mu} E \rho^{(0)}(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (\mu \rho^{(0)'}(\mu) + \rho^{(0)}(\mu)) + \mathcal{O}(T^4) \\ &\approx \int_{-\infty}^{\epsilon_F} E \rho^{(0)}(E) dE + \delta\mu \epsilon_F \rho^{(0)}(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 (\epsilon_F \rho^{(0)'}(\epsilon_F) + \rho^{(0)}(\epsilon_F)) \end{aligned}$$

$$= U_0|_{T=0} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho^{(0)}(\epsilon_F)$$

(37)

$$U_0(T) = U_0(T=0) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \cdot \rho^{(0)}(\epsilon_F)$$

Für die Wärmekapazität folgt:

$$C_V^{(0)} = \mu_0 \cdot T \quad \mu_0 = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \rho^{(0)}(\epsilon_F)$$

• Suszeptibilität  $\chi_0 = \mu_0 \frac{1}{V} \frac{\partial n_0}{\partial B} \Big|_{T, V, \mu}$

$$\frac{\partial n_0}{\partial B} = \frac{\partial}{\partial B} \sum_c p z_c \int_{-\infty}^{\infty} f(E-\mu) \rho_c^{(0)}(E) dE \quad p = \frac{1}{2} g \mu_B$$

$$= p \sum_c z_c \int_{-\infty}^{\infty} f(E-\mu) \frac{\partial}{\partial B} \rho_c^{(0)}(E) dE$$

$$p z_c \frac{\partial}{\partial (p z_c B)} \rho_c^{(0)}(E) = p z_c \frac{\partial}{\partial E} \rho_c^{(0)}(E)$$

$$= p^2 \sum_c z_c^2 \int_{-\infty}^{\infty} f(E-\mu) \rho_c^{(0)'}(E) dE$$

$$= p^2 \int_{-\infty}^{\infty} f(E-\mu) \rho^{(0)'}(E) dE$$

$$= p^2 \left[ \rho^{(0)}(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho^{(0)''}(\mu) \right] + \mathcal{O}(T^4)$$

$$= p^2 \left[ \rho^{(0)}(\epsilon_F) + \delta\mu \rho^{(0)'}(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho^{(0)''}(\epsilon_F) \right]$$

$$= p^2 \rho^{(0)}(\epsilon_F) \left[ 1 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left( \frac{\rho^{(0)''}(\epsilon_F)}{\rho^{(0)}(\epsilon_F)} - \left( \frac{\rho^{(0)'}(\epsilon_F)}{\rho^{(0)}(\epsilon_F)} \right)^2 \right) \right]$$

Also:

$$\chi_0 = \frac{m_0 p^2}{V} \rho^{(0)}(\epsilon_F) \left[ 1 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left[ \frac{\rho^{(0)'}(\epsilon_F)}{\rho^{(0)}(\epsilon_F)} - \left( \frac{\rho^{(0)'}(\epsilon_F)}{\rho^{(0)}(\epsilon_F)} \right)^2 \right] \right]$$

Die abgeleiteten Ausdrücke für  $C_V^{(0)}$ ,  $\chi_0$ ,  $\kappa_0$  charakterisieren das nicht-wechselwirkende Gas von Fermionen auf einem Gitter. Das Gitter geht (nur) über die Zustandsdichte (und deren Ableitungen) an der Fermi-Energie ein. Die Form der Ausdrücke basiert entscheidend auf (der für Elektronen gültigen) Fermi-Statistik. Die offene und interessante Frage ist, wie sich die Elektron-Elektron-WW bemerkbar macht. Der Vergleich von  $C_V$ ,  $\chi$ ,  $\kappa$  mit  $C_V^{(0)}$ ,  $\chi_0$ ,  $\kappa_0$  wird zeigen, ob und inwieweit eine wechselwirkende Fermi-Flüssigkeit als eine "modifizierte" Fermi-Gas verstanden werden kann.



## II Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion

Die Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion, die im folgenden definiert werden soll, ist die zentrale Größe der QFT, da für sie eine geeignete Diagrammdarstellung gefunden werden kann. Sie ist allerdings nicht von direktem Interesse, sondern als Hilfsgröße zu verstehen, aus der z.B. die (wechselwirkende) Spektraldichte und auch alle thermodynamischen Erwartungswerte abgeleitet werden können.

### II A Wick-Rotation

Man betrachte eine zeitabhängige Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned}
 \langle A(t) B(0) \rangle &= \frac{1}{\text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}}} \text{Sp} (e^{-\beta \mathcal{H}} A(t) B(0)) \\
 &= \frac{1}{\text{Sp}} \text{Sp} (e^{-\beta \mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} B) \\
 &= \frac{1}{\text{Sp}} \text{Sp} (e^{i\mathcal{H}(t+i\beta)} A e^{-i\mathcal{H}(t+i\beta)} e^{-\beta \mathcal{H}} B) \\
 &= \frac{1}{\text{Sp}} \text{Sp} (e^{-\beta \mathcal{H}} B e^{i\mathcal{H}(t+i\beta)} A e^{-i\mathcal{H}(t+i\beta)}) \\
 &= \langle B(0) A(t+i\beta) \rangle
 \end{aligned}$$

Es macht also Sinn, die Definition von Operatoren im Heisenberg-Bild auf komplexe Zeiten wie  $t+i\beta$  zu erweitern.

Wir schreiben

$$t = \vartheta - i\tau \quad \text{mit } \vartheta, \tau \text{ reell}$$

und definieren für einen nicht explizit zeitabhängigen Operator  $A$ :

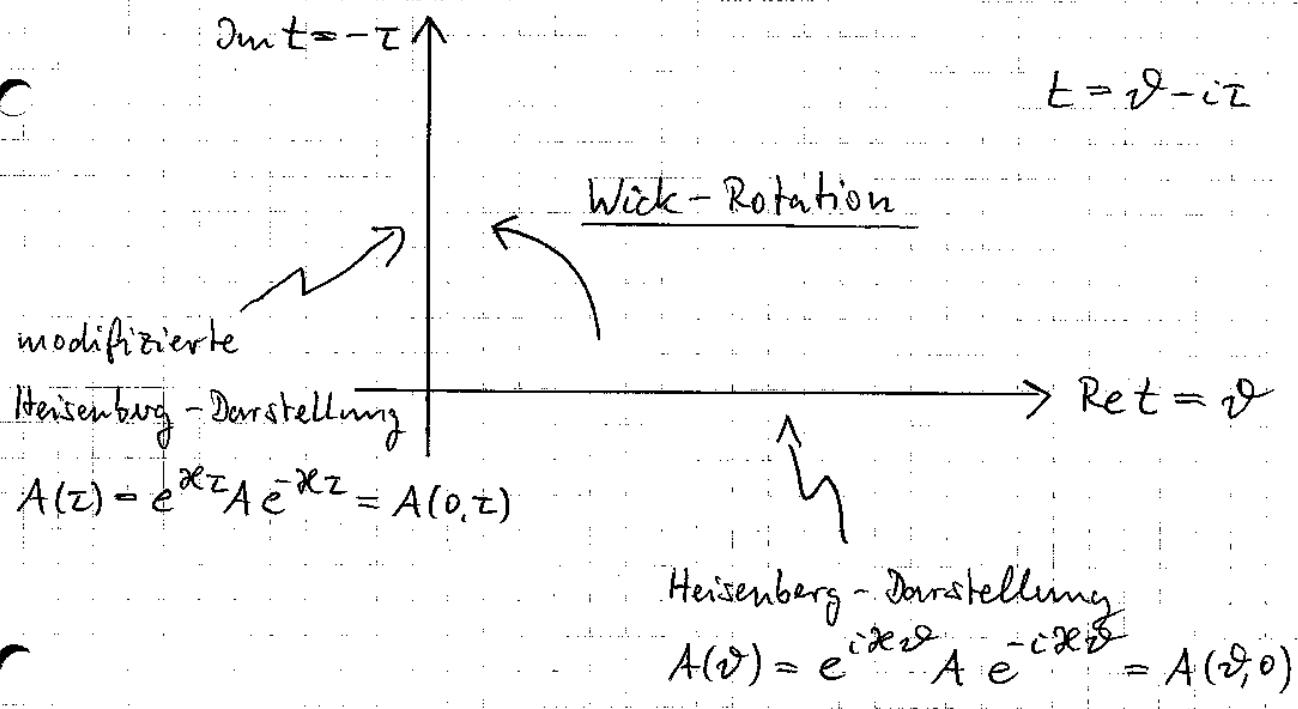
$$A(\vartheta, \tau) = e^{i\mathcal{H}(\vartheta - i\tau)} A e^{-i\mathcal{H}(\vartheta - i\tau)}$$

Im folgenden benötigen wir nur den Fall  $\vartheta = 0$ , betrachten also rein imaginäre Zeiten. Für einen nicht explizit zeitabhängigen Operator  $A$  definieren wir die sogenannte

Def.

Modifizierte Heisenberg-Darstellung

$$A(\tau) = e^{\mathcal{H}\tau} A e^{-\mathcal{H}\tau}$$



$A(z)$  erfüllt eine modifizierte Heisenberg-Bewegungsgleichung, die sogenannte Bloch-Gleichung

$$-\frac{\partial}{\partial z} A(z) = [A(z), \mathcal{H}]$$

Der Sinn der Wick-Rotation besteht darin, dass es gelingt, für (imaginär) zeitabhängige Korrelationsfunktionen vom Typ  $\langle A(z) B(0) \rangle$  eine Entwicklung in Potenzen des Wechselwirkungsanteils von  $H$  zu begründen und diagrammatisch darzustellen. Für reell zeitabhängige Korrelationsfunktionen vom Typ  $\langle A(t) B(0) \rangle$  gelingt dies i. allg. nicht.

Eine Ausnahme in dieser Hinsicht stellt der Spezialfall  $T=0$  dar. Eine Störungsentwicklung ist hier allerdings nur unter zusätzlichen Annahmen möglich (Hypothese des adiabatischen Einschaltens).

Für die Konstruktionsoperatoren  $c_\alpha, c_\alpha^\dagger$  ist

$$c_\alpha(z) = e^{\alpha z} c_\alpha e^{-\alpha z}$$
$$c_\alpha^\dagger(z) = e^{\alpha z} c_\alpha^\dagger e^{-\alpha z}$$

$c_\alpha(z)$  und  $c_\alpha^\dagger(z)$  sind (für  $z \neq 0$ ) nicht mehr adjungiert zueinander!

Transformation in die Ein-Teilchen-Basis, in der  $H_0$  diagonal ist:

$$c_k^\dagger(z) = e^{\alpha z} c_k^\dagger e^{-\alpha z} = e^{\alpha z} \sum_{\alpha} U_{\alpha k} c_{\alpha}^\dagger e^{-\alpha z}$$

$$= \sum_{\alpha} U_{\alpha k} c_{\alpha}^\dagger(z)$$

Zeitabhängigkeit im freien System,  $H = H_0$ :

Analog zu  $c_k^\dagger(t) = e^{i(\epsilon(k) - \mu)t} c_k^\dagger$  folgt hier

$$\boxed{\begin{aligned} c_k^\dagger(z) &= e^{(\epsilon(k) - \mu)z} c_k^\dagger \\ c_k(z) &= e^{-(\epsilon(k) - \mu)z} c_k \end{aligned}} \quad (\text{freies System})$$

Die Ausdrücke folgen aus separaten (analogen) Rechnungen, nicht aber durch Adjungieren!

## II B (zeitabhängige) Matsubara-Funktion

Für ein System von identischen Fermionen / Bosonen definieren wir den

(Def.)

Zeitordnungsoperator  $T_Z$

$$T_Z (c_{\alpha_1}^{(+)}(z_1) c_{\alpha_2}^{(+)}(z_2) \dots)$$

$$= \epsilon^P c_{\alpha_{P(1)}}^{(+)}(z_{P(1)}) c_{\alpha_{P(2)}}^{(+)}(z_{P(2)}) \dots$$

wobei  $P$  die Permutation ist, die die Zeitordnung bewirkt:

$$z_{P(1)} > z_{P(2)} > \dots$$

"frühere Operatoren operieren früher"

Bsp. Bosonen,  $\tau_1 < \tau_2$

$$T_{\tau} (c_{\alpha}(\tau_1) c_{\beta}(\tau_2)) = + c_{\beta}(\tau_2) c_{\alpha}(\tau_1) \\ = T_{\tau} (c_{\beta}(\tau_2) c_{\alpha}(\tau_1))$$

Bsp. Fermionen,  $\tau_1 < \tau_3 < \tau_2$

$$T_{\tau} (c_{\alpha_1}(\tau_1) c_{\alpha_2}^{\dagger}(\tau_2) c_{\alpha_3}(\tau_3)) = + c_{\alpha_2}^{\dagger}(\tau_2) c_{\alpha_3}(\tau_3) c_{\alpha_1}(\tau_1) \\ = T_{\tau} (c_{\alpha_2}^{\dagger}(\tau_2) c_{\alpha_3}(\tau_3) c_{\alpha_1}(\tau_1)) = - T_{\tau} (c_{\alpha_3}(\tau_3) c_{\alpha_2}^{\dagger}(\tau_2) c_{\alpha_1}(\tau_1))$$

Def.

Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion

auch: Temperatur-Green-Funktion

Für (imaginäre) Zeiten,  $\tau \in \mathbb{R}$ , mit  $-\beta < \tau < \beta = \frac{1}{k_B T}$   
sei

$$G_{\alpha\beta}(\tau) \equiv - \langle T_{\tau} (c_{\alpha}(\tau) c_{\beta}^{\dagger}(0)) \rangle$$

Für die Ein-Teilchen-ONB  $\{|k\rangle\}$ , in der  $\mathcal{H}_0$  diagonal ist, definieren wir:

$$G_k(\tau) \equiv - \langle T_{\tau} (c_k(\tau) c_k^{\dagger}(0)) \rangle$$

### Eigenschaften

- $G_{\alpha\beta}(z)$  ist i. allg. unstetig bei  $z=0$ :

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\beta}(z=0^+) &= - \langle T_z(c_\alpha(0^+) c_\beta^\dagger(0)) \rangle \\
 &= - \langle c_\alpha(0^+) c_\beta^\dagger(0) \rangle = - \langle c_\alpha c_\beta^\dagger \rangle \\
 &= -\delta_{\alpha\beta} - \varepsilon \langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle \quad (c_\alpha c_\beta^\dagger - \varepsilon c_\beta^\dagger c_\alpha = \delta_{\alpha\beta})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\beta}(z=0^-) &= - \langle T_z(c_\alpha(0^-) c_\beta^\dagger(0)) \rangle \\
 &= -\varepsilon \langle c_\beta^\dagger(0) c_\alpha(0^-) \rangle = -\varepsilon \langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle
 \end{aligned}$$

⇒

$$G_{\alpha\beta}(0^+) - G_{\alpha\beta}(0^-) = -\delta_{\alpha\beta} \quad (\varepsilon = \pm 1)$$

- Wegen  $\Xi \langle c_\alpha(\tau_1) c_\beta^\dagger(\tau_2) \rangle = \text{Sp} (e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\mathcal{H}\tau_1} c_\alpha e^{-\mathcal{H}\tau_1} e^{\mathcal{H}\tau_2} c_\beta^\dagger e^{-\mathcal{H}\tau_2}) = \text{Sp} (e^{-\beta\mathcal{H}} e^{\mathcal{H}(\tau_1-\tau_2)} c_\alpha e^{-\mathcal{H}(\tau_1-\tau_2)} c_\beta^\dagger)$   
 $= \Xi \langle c_\alpha(\tau_1-\tau_2) c_\beta^\dagger(0) \rangle$  kann man auch schreiben:

$$G_{\alpha\beta}(\tau_1-\tau_2) = - \langle T_z(c_\alpha(\tau_1) c_\beta^\dagger(\tau_2)) \rangle$$

(für  $\tau_1, \tau_2$  mit  $-\beta < \tau_1 - \tau_2 < \beta$ )

Homogenität der Matsubara-Funktion für nicht explizit zeitabhängigen Hamilton-Operator

- Sei  $-\beta < \tau < 0$ , dann ist  $0 < \tau + \beta < \beta$  und:

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\beta}(\tau) &= - \langle T_{\tau}(c_{\alpha}(\tau) c_{\beta}^{\dagger}(0)) \rangle = - \varepsilon \langle c_{\beta}^{\dagger}(0) c_{\alpha}(\tau) \rangle \\
 &= - \varepsilon \frac{1}{\Omega} \text{Sp} (e^{-\beta H} c_{\beta}^{\dagger} e^{\tau H} c_{\alpha} e^{-\tau H}) \\
 &= - \varepsilon \frac{1}{\Omega} \text{Sp} (e^{\tau H} c_{\alpha} e^{-\tau H} e^{-\beta H} c_{\beta}^{\dagger}) \\
 &= \frac{-\varepsilon}{\Omega} \text{Sp} (c_{\beta}^{\dagger} e^{\tau H} c_{\alpha} e^{-\tau H} e^{-\beta H}) \\
 &= - \varepsilon \langle c_{\alpha}(\tau + \beta) c_{\beta}^{\dagger}(0) \rangle \\
 &= - \varepsilon \langle T_{\tau}(c_{\alpha}(\tau + \beta) c_{\beta}^{\dagger}(0)) \rangle \\
 &= \varepsilon G_{\alpha\beta}(\tau + \beta)
 \end{aligned}$$

$$G_{\alpha\beta}(\tau) = \varepsilon G_{\alpha\beta}(\tau + \beta) \quad \text{für } -\beta < \tau < 0$$

- mit  $c_k^{\dagger}(\tau) = \sum_{\alpha} U_{\alpha k} c_{\alpha}^{\dagger}(\tau)$   
 $c_k(\tau) = \sum_{\alpha} U_{k\alpha}^{-1} c_{\alpha}(\tau)$  folgt unmittelbar  
 $G_k(\tau) = \sum_{\alpha\beta} U_{k\alpha}^{-1} G_{\alpha\beta}(\tau) U_{\beta k}$  bzw.  
 $G_{\alpha\beta}(\tau) = \sum_k U_{\alpha k} G_k(\tau) U_{k\beta}^{-1}$

Bem. Dazu ist die Definition von  $T_{\tau}$  etwas anzupassen:

$$\begin{aligned}
 T_{\tau} \sum_{x_1, x_2, \dots} x_{x_1} x_{x_2} \dots c_{x_1}^{(H)}(\tau_1) c_{x_2}^{(H)}(\tau_2) \dots \\
 \equiv \sum_{x_1, x_2, \dots} x_{x_1} x_{x_2} \dots T_{\tau} (c_{x_1}^{(H)}(\tau_1) c_{x_2}^{(H)}(\tau_2) \dots)
 \end{aligned}$$

• freie Matsubara-Funktion

für  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0$  ist mit  $c_k(z) = e^{-(\epsilon(k)-\mu)z} c_k$ ,  
 $c_k^\dagger(z) = e^{(\epsilon(k)-\mu)z} c_k^\dagger$  und  $\theta(z) \equiv \begin{cases} 1 & \text{f. } z > 0 \\ 0 & \text{f. } z < 0 \end{cases}$  :

$$\begin{aligned}
G_k^{(0)}(z) &= - \langle T_z (c_k(z) c_k^\dagger(0)) \rangle^{(0)} \\
&= - \langle c_k(z) c_k^\dagger(0) \rangle^{(0)} \theta(z) - \epsilon \langle c_k^\dagger(0) c_k(z) \rangle^{(0)} \theta(-z) \\
&= - e^{-(\epsilon(k)-\mu)z} \left[ \theta(z) \langle c_k c_k^\dagger \rangle^{(0)} + \epsilon \theta(-z) \langle c_k^\dagger c_k \rangle^{(0)} \right]
\end{aligned}$$

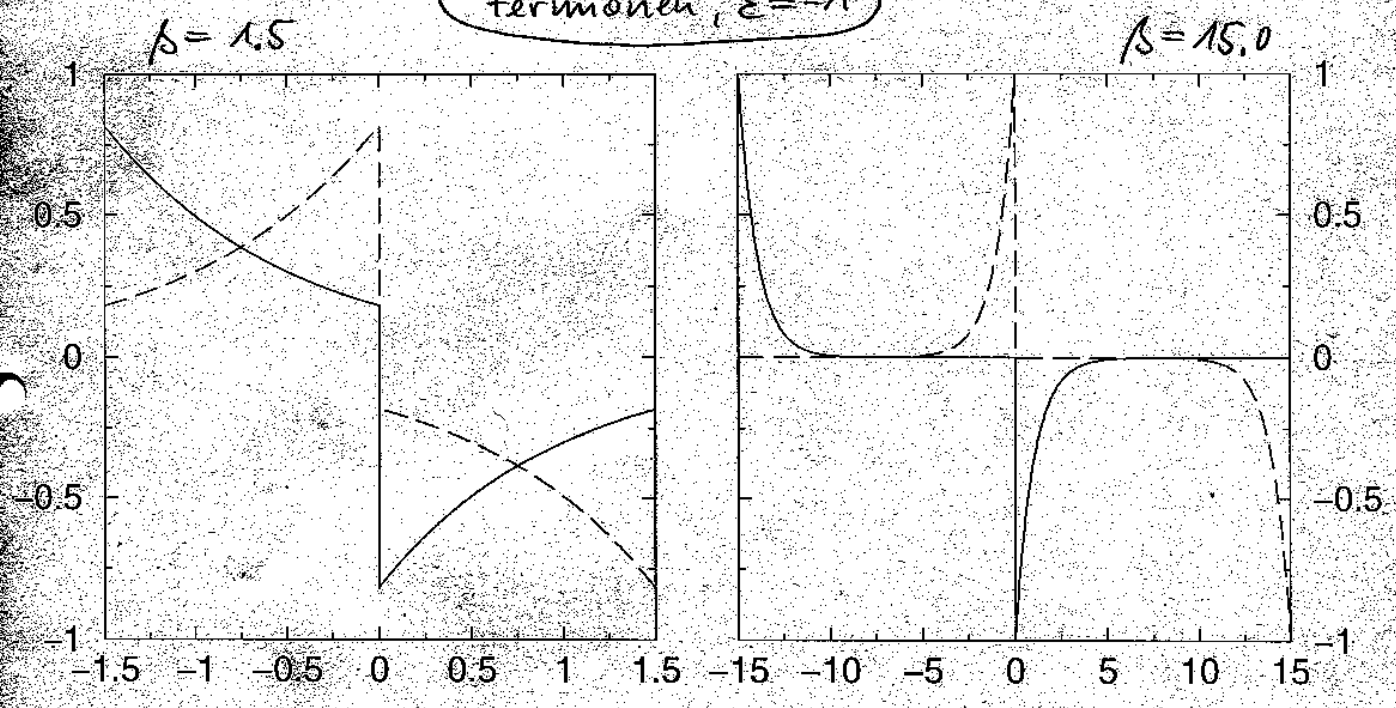
$$G_k^{(0)}(z) = - e^{-(\epsilon(k)-\mu)z} \left[ \theta(z) (1 + \epsilon \langle n_k \rangle^{(0)}) + \theta(-z) \epsilon \langle n_k \rangle^{(0)} \right]$$

wobei  $\langle n_k \rangle^{(0)} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(k)-\mu)} - \epsilon}$

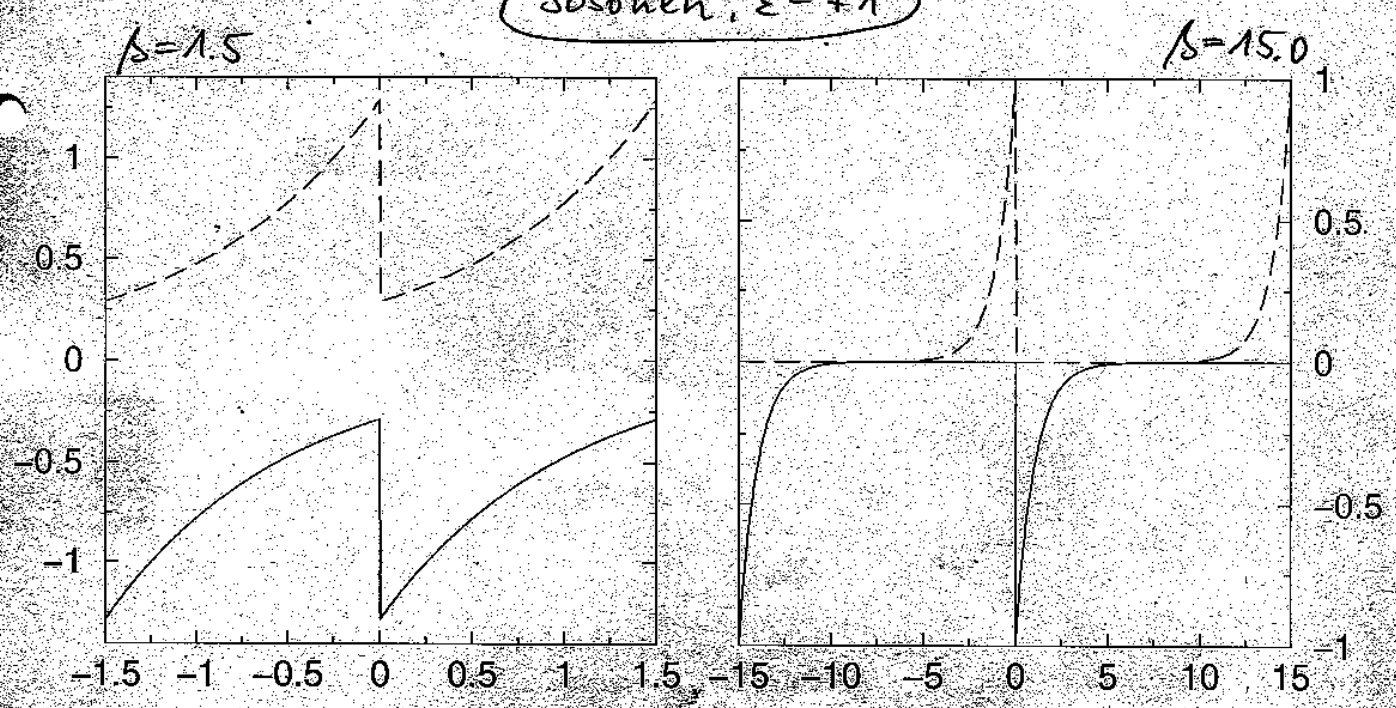


$G_k(\tau)$  f.  $-\beta < \tau < \beta$  und  $\epsilon(k) - \mu = \begin{cases} 1: \text{---} \\ -1: \text{- - -} \end{cases}$

Fermionen,  $\epsilon = -1$



Bosonen,  $\epsilon = +1$





Für die Fourier-Koeffizienten gilt:

$$a_{\alpha\beta}^{(n)} = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} dz G_{\alpha\beta}(z) e^{i \frac{n\pi}{\beta} z}$$

(Bem.)

$f_n(z) = \text{const.} \times e^{-i \frac{n\pi}{\beta} z}$  ist ein vollständiges und orthonormierbares Funktionensystem auf  $[-\beta, \beta]$ .

Festlegung der Vorfaktoren:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} dz e^{i \frac{n\pi}{\beta} z} G_{\alpha\beta}(z) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} dz e^{i \frac{n\pi}{\beta} z} \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\alpha\beta}^{(m)} e^{-i \frac{m\pi}{\beta} z} \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\alpha\beta}^{(m)} \cdot \frac{1}{2\beta} \int_{-\beta}^{\beta} dz e^{i(n-m)\frac{\pi}{\beta} z} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_{\alpha\beta}^{(m)} \delta_{mn} = a_{\alpha\beta}^{(n)} \checkmark \end{aligned}$$

Durch Ausnutzen der Relation  $G_{\alpha\beta}(z) = \varepsilon G_{\alpha\beta}(z+\beta)$  für  $-\beta < z < 0$

ist:

$$\begin{aligned} a_{\alpha\beta}^{(n)} &= \frac{1}{2} \int_0^{\beta} dz G_{\alpha\beta}(z) e^{i \frac{n\pi}{\beta} z} + \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 dz G_{\alpha\beta}(z) e^{i \frac{n\pi}{\beta} z} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\beta} dz G_{\alpha\beta}(z) e^{i \frac{n\pi}{\beta} z} + \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 dz \varepsilon G_{\alpha\beta}(z+\beta) e^{i \frac{n\pi}{\beta} z} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\beta} dz G_{\alpha\beta}(z) e^{i \frac{n\pi}{\beta} z} + \frac{1}{2} \int_0^{\beta} dz' \varepsilon G_{\alpha\beta}(z') e^{i \frac{n\pi}{\beta} z'} e^{-in\pi} \\ &= (1 + \varepsilon e^{-in\pi}) \frac{1}{2} \int_0^{\beta} dz G_{\alpha\beta}(z) e^{i \frac{n\pi}{\beta} z} \end{aligned}$$

$\varepsilon = -1$ , Fermionen:  $(\dots) \neq 0$  falls  $n$  ungerade

$\varepsilon = +1$ , Bosonen:  $(\dots) \neq 0$  falls  $n$  gerade

Def.

(fermionische / bosonische) Matsubara-Energien

$iE_n = i(2n+1)\frac{\pi}{\beta}$  (Fermionen)

$iE_n = i2n\frac{\pi}{\beta}$  (Bosonen)

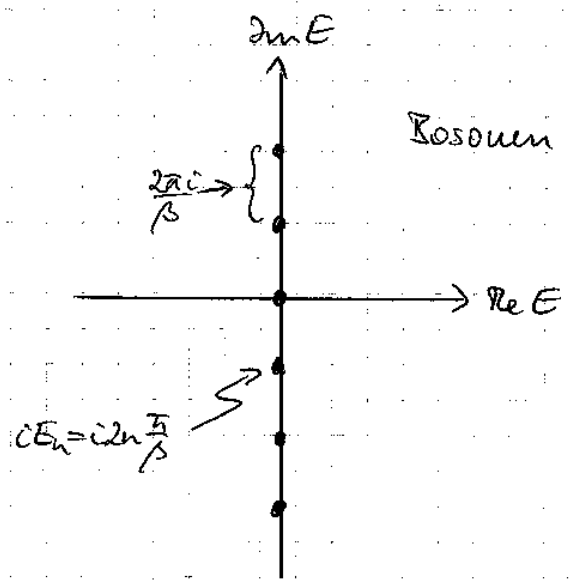
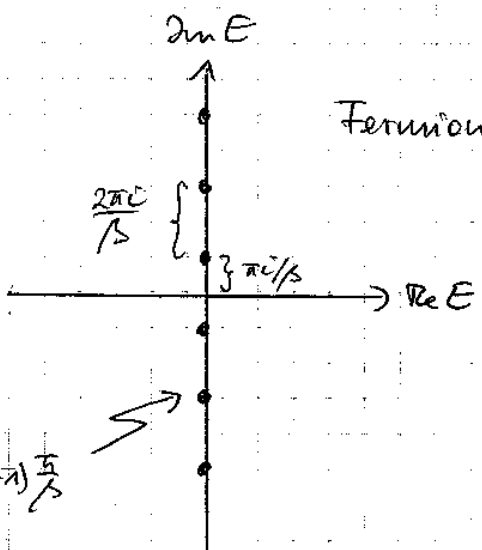
$n = \dots, -1, 0, 1, \dots$

Damit ist:

$$G_{\text{Fey}}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-iE_n \tau} G_{\text{Fey}}(iE_n)$$

$$G_{\text{Fey}}(iE_n) = \int_0^{\beta} G_{\text{Fey}}(\tau) e^{iE_n \tau} d\tau$$

Die Fourier-Koeffizienten  $G_{\text{Fey}}(iE_n) \equiv a_{\text{Fey}}^{(n)}$  definieren die energieabhängige Matsubara-Funktion.  $G_{\text{Fey}}(iE_n)$  ist auf einer diskreten Menge von rein imaginären Energien gegeben:



## II D Spektraldarstellung

Die energieabhängige Matsubara-Funktion ist auch deshalb von besonderer Bedeutung, weil sie in direktem Zusammenhang mit der Spektraldichte steht. Dies lässt sich mit Hilfe der Spektraldarstellung der Matsubara-Funktion zeigen.

Seien  $E_r, E_s$  Eigenenergien und  $|r\rangle, |s\rangle$  Eigenzustände von  $\mathcal{L}$ .  $iE_n$  bezeichne eine Matsubara-Energie (keine Eigenenergie!).

Es gilt:

$$\begin{aligned} G_{\text{exp}}(iE_n) &= \int_0^{\beta} G_{\text{exp}}(z) e^{iE_n z} dz = \int_0^{\beta} (-1) \langle T_z (c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(0)) \rangle e^{iE_n z} dz \\ &= - \int_0^{\beta} dz e^{iE_n z} \frac{1}{\Omega} \sum_r e^{-\beta E_r} \langle r | e^{\alpha z} c_\alpha e^{-\alpha z} c_\beta^\dagger | r \rangle \\ &= - \int_0^{\beta} dz e^{iE_n z} \frac{1}{\Omega} \sum_{rs} e^{-\beta E_r} e^{E_r z} e^{-E_s z} \langle r | c_\alpha | s \rangle \langle s | c_\beta^\dagger | r \rangle \end{aligned}$$

Die  $z$ -Integration kann ausgeführt werden:

$$\int_0^{\beta} dz e^{(iE_n + E_r - E_s)z} = \frac{1}{iE_n + E_r - E_s} (e^{(iE_n + E_r - E_s)\beta} - 1)$$

$$= \frac{1}{iE_n - (E_s - E_r)} (e^{-\beta(E_s - E_r)} \varepsilon - 1)$$

$$e^{i\beta E_n} = \varepsilon$$

Also ist:

$$G_{\text{exp}}(iE_n) = \frac{1}{\Omega} \sum_{rs} e^{-\beta E_r} (1 - \varepsilon e^{-\beta(E_s - E_r)}) \times$$

$$\times \langle r | c_\alpha | s \rangle \langle s | c_\beta^\dagger | r \rangle \frac{1}{iE_n - (E_s - E_r)}$$

Für die Ein-Teilchen-Spektraldichte gilt nach S. 27  
(mit leichter Verallgemeinerung auf beliebige Operatoren  
 $A$  und  $B$ , vgl. S. 28):

$$A_{\alpha\beta}(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{rs} e^{-\beta E_s} (e^{\beta E} - \varepsilon) \langle r | C_\alpha | s \rangle \langle s | C_\beta^\dagger | r \rangle \delta(E - (E_s - E_r))$$

(Lehmann-Darstellung)

Mit  $E = E_s - E_r$  ( $\delta$ -Fkt.) ist  $e^{-\beta E_s} (e^{\beta E} - \varepsilon) = e^{-\beta E_r} (1 - \varepsilon e^{-\beta(E_s - E_r)})$ ,  
also:

$$A_{\alpha\beta}(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{rs} e^{-\beta E_r} (1 - \varepsilon e^{-\beta(E_s - E_r)}) \langle r | C_\alpha | s \rangle \langle s | C_\beta^\dagger | r \rangle \delta(E - (E_s - E_r))$$

Der Zusammenhang ist jetzt offensichtlich:

Spektraldarstellung der Matsubara-Funktion

$$G_{\alpha\beta}(iE_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{\alpha\beta}(E')}{iE_n - E'} dE'$$

Damit haben sich die Definitionen der zeit- bzw. energieabhängigen Matsubara-Funktionen als sinnvoll erwiesen: Durch die im Anschluß zu entwickelnde Diagrammtechnik kann  $G_{\alpha\beta}(z)$  bzw.  $G_{\alpha\beta}(iE_n)$  berechnet werden. Durch Umkehrung des Zusammenhangs oben erhält man dann die Spektraldichte und damit die gewünschte Informationen über dynamische und statische Systemeigenschaften.

Wie aber sieht die Umkehrung konkret aus?

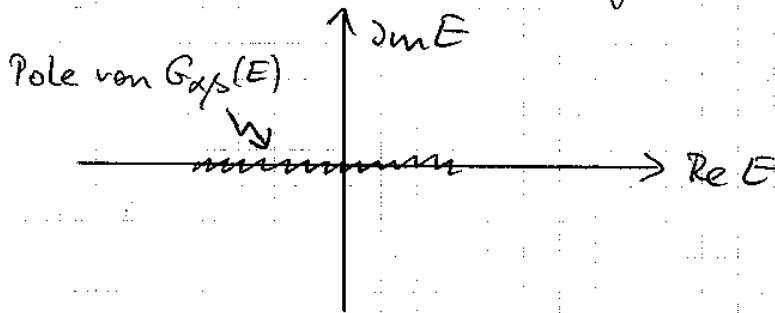
Wir definieren dazu die Green-Funktion:

Def.

$$G_{\text{GfS}}(E) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{\text{GfS}}(E')}{E - E'} dE'$$

für beliebige, komplexe Energien  $E$

Die Green-Funktion ist eine analytische Funktion in der oberen wie in der unteren  $E$ -Halbebene. Auf der reellen  $E$ -Achse besitzt sie Pole 1. Ordnung



An den Stellen  $E = iE_n$  stimmt die Green-Funktion per Definition mit der Matsubara-Funktion überein.

Wir benutzen nun einen Satz aus der Funktionen-Theorie:

Satz:

Sind  $F_1(E)$  und  $F_2(E)$  zwei in einer Umgebung eines Punktes  $E_0 \in \mathbb{C}$  analytische Funktionen und ist  $\{E_j\}_{j=1,2,\dots}$  eine Folge komplexer Zahlen, die gegen  $E_0$  konvergiert, so folgt aus

$$F_1(E_j) = F_2(E_j) \quad \forall j$$

dass

$$F_1(E) = F_2(E) \quad \forall E \in \mathbb{C}$$

(54)

Die Matsubara-Energien  $iE_n$  können als eine Folge mit  $\lim_{n \rightarrow \infty} iE_n = \infty$  in  $\mathbb{C} \cup \{\infty\}$  aufgefasst werden. Dies hat die Konsequenz, dass die Matsubara-Funktion die Green-Funktion in der gesamten komplexen Ebene eindeutig festlegt.

Der erste Schritt der Umkehrung ist damit getan:

$$G_{\text{Mats}}(iE_n) \xrightarrow[\text{Fortsetzung}]{\text{analytische}} G_{\text{Mats}}(E)$$

Fragen wir jetzt, wie man sich aus der Green-Funktion die Spektraldichte beschaffen kann. Wir betrachten dazu die Green-Funktion an den Energien  $E \pm i0^+$  mit  $0^+$  einem positiven Infinitesimal und  $E$  reell:

$$G_{\text{Mats}}(E \pm i0^+) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{\text{Mats}}(E')}{E \pm i0^+ - E'} dE'$$

Mit Hilfe der Dirac-Identität

$$\frac{1}{x \pm i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x)$$

folgt dann:

$$\mp \frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\text{Mats}}(E \pm i0^+) = A_{\text{Mats}}(E)$$

Dies stellt den zweiten Teil der Umkehrung dar. (\*)



Dabei wird ausgenutzt, dass die Spektraldichte reell ist. Dies ist leicht zu beweisen anhand der Lehmann-Darstellung. Zu zeigen ist lediglich:  $\langle r | C_\alpha | S \rangle$  reell!

Dazu kann z.B.  $|r\rangle$  in die Basiszustände  $\{|n_{x_1} n_{x_2} \dots\rangle^{(E)}$  entwickelt werden. Nach Definition erzeugt die Anwendung von  $C_\alpha$  auf die Basiszustände nur reelle Koeffizienten, so dass das ~~Skalar~~ Produkt  $\langle r | C_\alpha | S \rangle$  reell ist, falls die Koeffizienten  $x_{n_1 n_2 \dots}$  in der Entwicklung  $|r\rangle = \sum_{n_1 n_2 \dots} x_{n_1 n_2 \dots} |n_1 n_2 \dots\rangle^{(E)}$  als reell angenommen werden können. Ist dies möglich?  $\rightarrow$

Wir definieren einen Operator  $K$  durch  $K|r\rangle = \sum x_{n_1 n_2 \dots}^* |n_1 n_2 \dots\rangle^{(E)}$ .  $K$  ist antilinear. Es gilt:  $[K, H]_- = 0$ . Beweis: Sei  $|Y\rangle$  beliebig.  $\exists \psi_1, \psi_2$  mit  $|Y\rangle = |\psi_1\rangle + i|\psi_2\rangle$  und  $K|\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle, K|\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle$

(Zerlegung der Koeffizienten  $x_{\dots}$  in Real- u. Imag.-teil). Sei  $H|\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle, H|\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle$ . Es gilt  $KH|Y\rangle = KH(|\psi_1\rangle + i|\psi_2\rangle) = K(|\psi_1\rangle + i|\psi_2\rangle) \stackrel{\text{antilinear}}{=} K|\psi_1\rangle - iK|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle - i|\psi_2\rangle = H|\psi_1\rangle - iH|\psi_2\rangle = H(|\psi_1\rangle - i|\psi_2\rangle) = H(K|\psi_1\rangle - iK|\psi_2\rangle) = HK(|\psi_1\rangle + i|\psi_2\rangle) = HK|Y\rangle$  g.e.d.

Sei jetzt  $H|r\rangle = E_r|r\rangle$ . Dann gilt  $HK|r\rangle = KH|r\rangle = KE_r|r\rangle = E_r K|r\rangle$ , d.h. der Unterraum zu  $E_r$  ist invariant in bezug auf antilineare (antunitäre!) Transformation  $K$ . Daher kann eine Basis  $\{|r\rangle\}$  aus Eigenzuständen von  $H$  gefunden werden mit  $K|r\rangle = |r\rangle$  oder  $K|r\rangle = -|r\rangle$  (wegen  $K^2 = 1$  sind  $\pm 1$  die beiden einzigen Eigenwerte). Die Koeffizienten  $x_{\dots}$  in den beiden Entwicklungen von  $|r\rangle$  und  $|s\rangle$  in  $\langle r | C | S \rangle$  sind also <sup>beide</sup> reell oder rein imaginär (der "gemischte Fall" ist nicht möglich, da  $[0, K]_- = 0$  und  $\langle r | C | S \rangle = \langle r | K C K | S \rangle \cdot (-1) = -\langle r | C | S \rangle = 0$  folgen würde).

Damit ist  $\langle r | C | S \rangle$  reell g.e.d.

Wegen dieses Zusammenhangs definiert man auch eigens:

Def. retardierte Ein-Teilchen-Green-Funktion

$$G_{\alpha\beta}^{\text{ret}}(E) \equiv G_{\alpha\beta}(E+i0^+) \quad (E \text{ reell})$$

avancierte Ein-Teilchen-Green-Funktion

$$G_{\alpha\beta}^{\text{av}}(E) \equiv G_{\alpha\beta}(E-i0^+) \quad (E \text{ reell})$$

Es gilt:

$$A_{\alpha\beta}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\alpha\beta}^{\text{ret}}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\alpha\beta}^{\text{av}}(E)$$

Bsp. Freie, energieabhängige Matsubara-Funktion

Für die freie Spektraldichte in der 1-Teilchen-ONS  $\{|k\rangle\}$  gilt:

$$A_k(E) = \delta(E - (\varepsilon(k) - \mu))$$

Durch Ansetzen der Spektraldarstellung der Matsubara-Funktion folgt:

$$G_k(iE_n) = \frac{1}{iE_n - (\varepsilon(k) - \mu)}$$

Führen wir jetzt die Umkehrung durch:

Durch analytische Fortsetzung in die gesamte komplexe  $E$ -Ebene erhalten wir die Green-Funktion:

$$G_k(E) = \frac{1}{E - (\epsilon(k) - \mu)}$$

$G_k(E)$  besitzt einen Pol 1. Ordnung bei der reellen Energie  $E = \epsilon(k) - \mu$ .

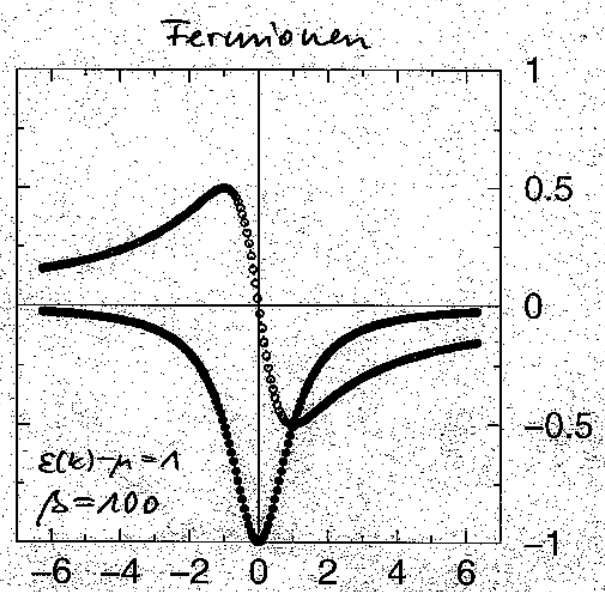
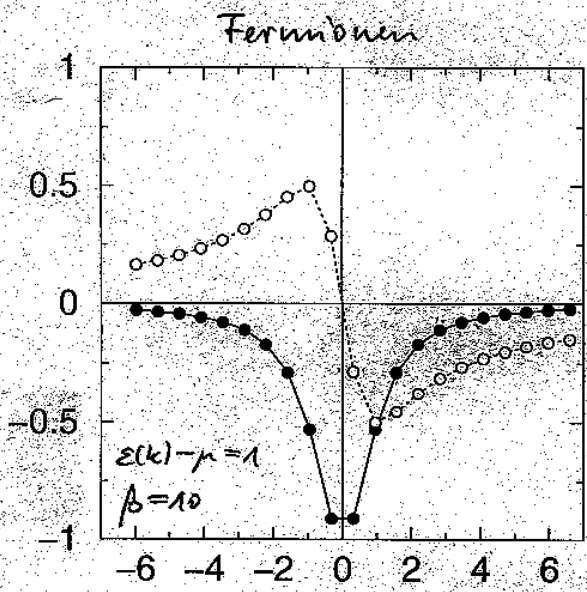
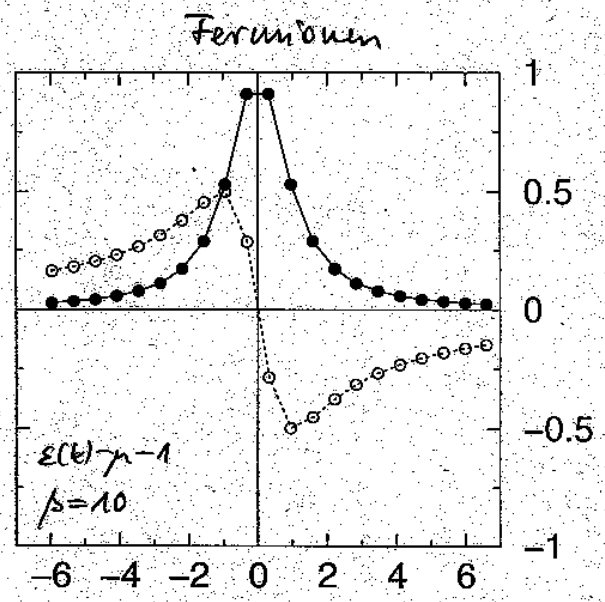
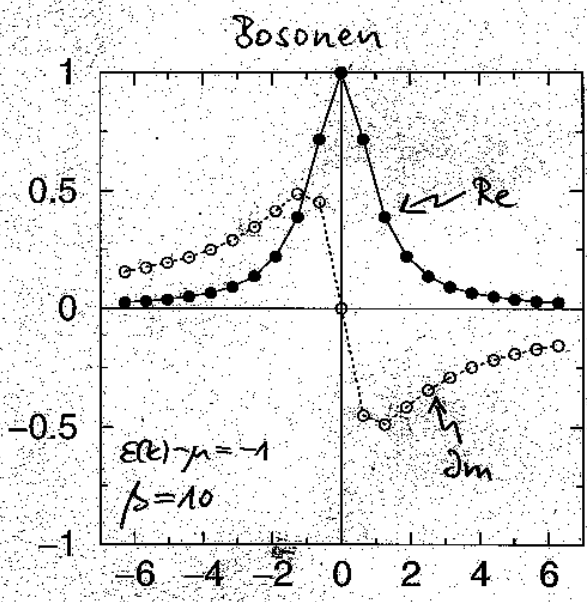
Die retardierte Green-Funktion ergibt sich als

$$G_k^{\text{ret}}(E) = \frac{1}{E + i0^+ - (\epsilon(k) - \mu)}$$

Damit folgt für die Spektraldichte:

$$A_k(E) = \delta(E - (\epsilon(k) - \mu)) \quad \checkmark$$

$G_k(iE_n)$ , Real- und Imaginärteil  
für das wechselwirkungs freie System



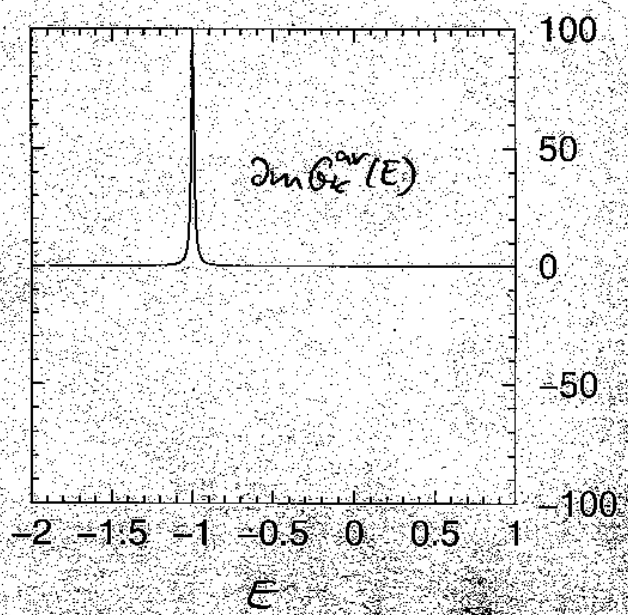
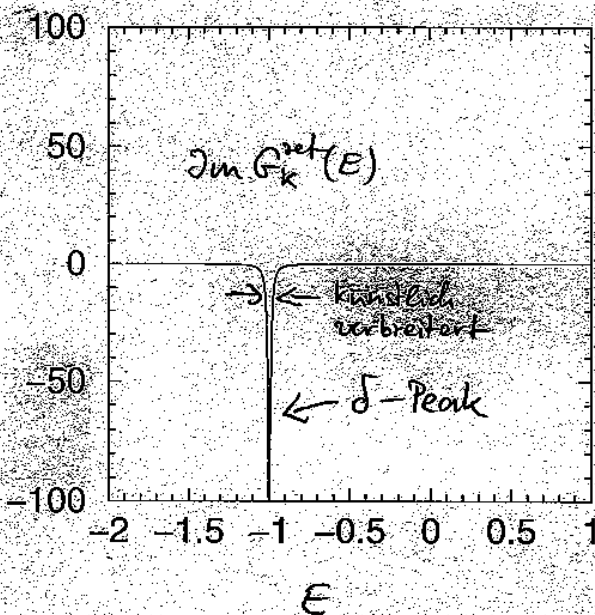
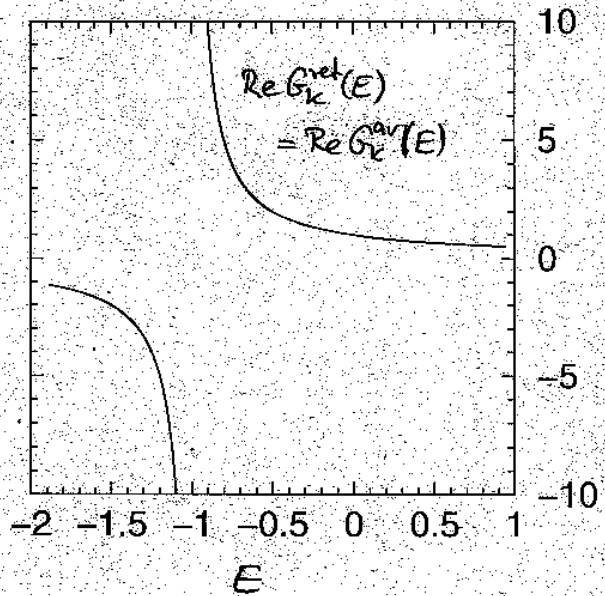
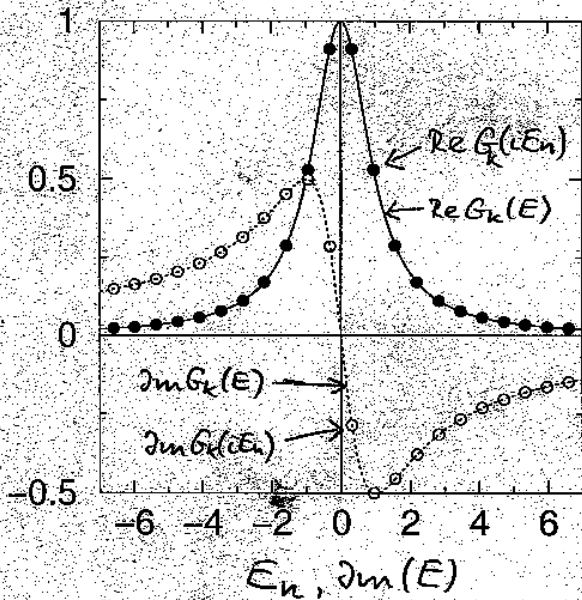
$\longrightarrow E_n$

Ferunionen

$\beta = 10$

$\epsilon(k) - \mu = -1$

(freies System)



### III Störungsentwicklung der Ein-Teilchen-

#### Natsubara-Funktion

Wir schreiben  $H = H_0 + V$  mit

$$H_0 = \sum_{\alpha\beta} \epsilon_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v(\alpha\beta\delta\gamma) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta}$$

und betrachten  $V$  als Störung des freien Systems

### III A S-Matrix

Sei  $A = A_S$  ein (nicht explizit von der Zeit abhängiger) Operator im Schrödinger-Bild. Wir hatten

$$A(\tau) \equiv A_H(\tau) \equiv e^{\mathcal{H}\tau} A_S e^{-\mathcal{H}\tau}$$

als den entsprechenden Operator im (modifizierten) Heisenberg-Bild definiert.

Für die Durchführung der Störungstheorie ist die Dirac'sche Wechselwirkungsdarstellung günstig:

(Def.) Operator im (modifizierten) Dirac-Bild

$$A_D(\tau) \equiv e^{\mathcal{H}_0\tau} A_S e^{-\mathcal{H}_0\tau}$$

Zwischen Operatoren im Dirac- und Heisenberg-Bild besteht die folgende Zusammenhang:

$$\begin{aligned}
A_H(z) &= e^{\mathcal{H}z} A_S e^{-\mathcal{H}z} = e^{\mathcal{H}z} e^{-\mathcal{H}_0 z} e^{\mathcal{H}_0 z} A_S e^{-\mathcal{H}_0 z} e^{\mathcal{H}_0 z} e^{-\mathcal{H}z} \\
&= (e^{\mathcal{H}z} e^{-\mathcal{H}_0 z}) A_D(z) (e^{\mathcal{H}_0 z} e^{-\mathcal{H}z}) \\
&= S(z, 0) A_D(z) S(z, 0) \quad \text{mit der}
\end{aligned}$$

Def. S-Matrix oder Dirac'scher Zeitentwicklungsoperator

$$S(z, z') \equiv e^{\mathcal{H}_0 z} e^{-\mathcal{H}(z-z')} e^{-\mathcal{H}_0 z'}$$

Eigenschaften:

- $S(z, z) = \mathbb{1}$
- $S(z, z') S(z', z'') = S(z, z'')$
- $S(z, z')$  ist (i. allg.) nicht unitär

Die Zeitabhängigkeit der Konstruktionsoperatoren im Dirac-Bild

ist dieselbe wie die im freien System,

$$\begin{aligned}
c_{k,D}^\dagger(z) &= e^{+(\mathcal{E}(k)-\mu)z} c_k^\dagger \\
c_{k,D}(z) &= e^{-(\mathcal{E}(k)-\mu)z} c_k
\end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
c_{\alpha,D}^\dagger(z) &= \sum_k U_{k\alpha}^{-1} c_{k,D}^\dagger(z) = \sum_k U_{k\alpha}^{-1} e^{+(\mathcal{E}(k)-\mu)z} c_k^\dagger \\
&= \sum_\beta \left( \sum_k U_{\beta k} e^{+(\mathcal{E}(k)-\mu)z} U_{k\alpha}^{-1} \right) c_\beta^\dagger
\end{aligned}$$

$$c_{\alpha,D}(z) = \sum_\beta \left( \sum_k U_{k\alpha} e^{-(\mathcal{E}(k)-\mu)z} U_{k\beta}^{-1} \right) c_\beta$$

und kann also als bekannt vorausgesetzt werden.

Mit  $C_{\alpha, H}^{(+)}(z) = S(0, z) C_{\alpha, D}^{(+)}(z) S(z, 0)$  ist dann auch die Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion bekannt,  $G_{\alpha\beta}(z) = -\langle T_z (C_{\alpha, H}(z) C_{\beta, H}^\dagger(0)) \rangle$ , wenn (zumindest formal) die Zeitabhängigkeit der S-Matrix bestimmt werden kann.

### III B Formale Lösung der Bewegungsgleichung

Für die S-Matrix kann folgende Bewegungsgleichung abgeleitet werden:

$$\begin{aligned}
 -\frac{\partial}{\partial z} S(z, z') &= -\frac{\partial}{\partial z} \left( e^{\alpha_0 z} e^{-\alpha(z-z')} e^{-\alpha_0 z'} \right) \\
 &= e^{\alpha_0 z} \underbrace{(\alpha - \alpha_0)}_V e^{-\alpha(z-z')} e^{-\alpha_0 z'} \\
 &= e^{\alpha_0 z} V e^{-\alpha_0 z} e^{\alpha_0 z} e^{-\alpha(z-z')} e^{-\alpha_0 z'} \\
 &= V_D(z) S(z, z')
 \end{aligned}$$

Mit der Randbedingung  $S(z, z) = \mathbb{1}$  kann die Bewegungsgleichung in integrale Form gebracht werden

$$S(z, z') = \mathbb{1} - \int_{z'}^z V_D(z'') S(z'', z') dz''$$



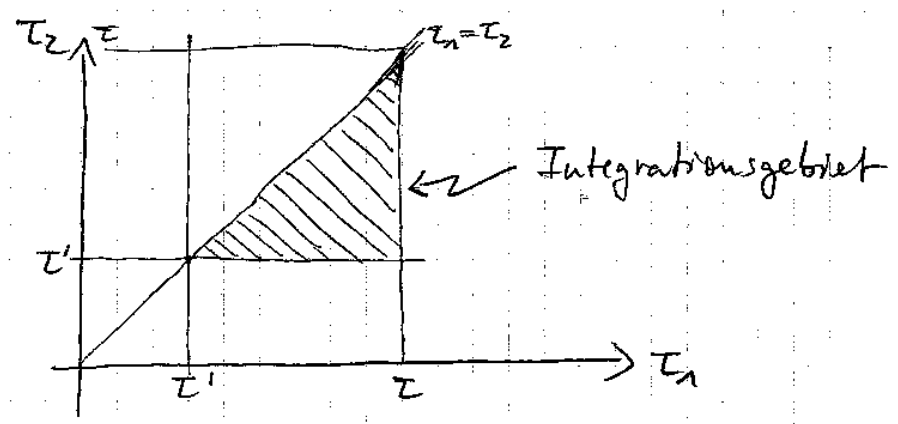
Durch Iteration erhält man die von Neumannsche Reihe:

$$S(z, z') = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_{z'}^z dz_1 \int_{z'}^{z_1} dz_2 \int_{z'}^{z_2} dz_3 \dots \int_{z'}^{z_{n-1}} dz_n V_0(z_1) \dots V_0(z_n)$$

(Beachte: Operatoren zu verschiedenen Zeiten kommutieren nicht!)

Nun betrachte den Term  $n=2$

$$S^{(2)}(z, z') = (-1)^2 \int_{z'}^z dz_1 \int_{z'}^{z_1} dz_2 V_0(z_1) V_0(z_2)$$



Also alternativ:

$$\begin{aligned} S^{(2)}(z, z') &= \int_{z'}^z dz_2 \int_{z_2}^z dz_1 V_0(z_1) V_0(z_2) \\ &= \int_{z'}^z dz_1 \int_{z_1}^z dz_2 V_0(z_2) V_0(z_1) \end{aligned}$$

Oder zusammen:

$$\begin{aligned} S^{(2)}(z, z') &= \frac{(-1)^2}{2!} \int_{z'}^z \int_{z'}^z dz_1 dz_2 [V_0(z_1) V_0(z_2) \theta(z_1 - z_2) + V_0(z_2) V_0(z_1) \times \\ &\quad \times \theta(z_2 - z_1)] \\ &= \frac{(-1)^2}{2!} \int_{z'}^z \int_{z'}^z dz_1 dz_2 T_2(V(z_1) V(z_2)) \end{aligned}$$

wobei  $T_Z$  auf die Konstruktionsoperatoren in

$$V_D(z) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \neq 0} v(\alpha, \beta) c_{\alpha, D}(z) c_{\beta, D}^\dagger(z) c_{\gamma, D}(z) c_{\delta, D}(z)$$

wirkt. Der Faktor  $\varepsilon$  kommt hier nur in geraden Potenzen vor!

Ein Problem ergibt sich aber durch die Gleichzeitigkeit der Konstruktionsoperatoren in  $V_D(z)$ . Wie wirkt  $T_Z$  hier?

Def.

$$T_Z (c_\alpha(z) c_\beta(z)) = c_\alpha(z) c_\beta(z)$$

$$T_Z (c_\alpha^\dagger(z) c_\beta^\dagger(z)) = c_\alpha^\dagger(z) c_\beta^\dagger(z)$$

$$T_Z (c_\alpha^\dagger(z) c_\beta(z)) = c_\alpha^\dagger(z) c_\beta(z)$$

$$T_Z (c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z)) = \varepsilon c_\beta^\dagger(z) c_\alpha(z)$$

und analog für Produkte aus mehr als zwei gleichzeitigen Konstruktionsoperatoren.

$$T_{Erzeuger} = T_{vernichtet} + 0^\dagger$$

Die Vollentwicklung auf  $n$  Terme liefert die formale Lösung der Bewegungsgleichung:

$$S(z, z') = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{z'}^z dz_1 \dots \int_{z'}^z dz_n \cdot T_Z (V_D(z_1) \dots V_D(z_n))$$

Symbolisch:

$$S(z, z') = T_Z \exp\left(-\int_{z'}^z V_D(z'') dz''\right)$$

Damit ist die S-Matrix (formal) bekannt.

### III C Ausgangsgleichungen der Störungstheorie

#### Vereinbarung

Wir arbeiten von jetzt an ausschließlich in der Dirac-Darstellung. Der Index "D" wird fortgelassen. Für jeden (imaginär) zeitabhängigen Operator  $A(\tau)$  ist

$$A(\tau) = e^{\mathcal{H}_0 \tau} A e^{-\mathcal{H}_0 \tau}$$

definiert. Die Zeitabhängigkeit von Operatoren ist im folgenden immer die des freien Systems, oder wird explizit gekennzeichnet.

Die S-Matrix erlaubt alternative Darstellungen für die großkanonische Zustandssumme

$$\Xi = \text{Sp} (e^{-\beta \mathcal{H}_0} S(\beta, 0))$$

und für die

#### Ein-Teilchen-Nutzenbara-Funktion

$$G_{\alpha\beta}(\tau) = \frac{\text{Sp} (e^{-\beta \mathcal{H}_0} T_{\tau} (S(\beta, 0) c_{\alpha}(\tau) c_{\beta}^{\dagger}(0)))}{\text{Sp} (e^{-\beta \mathcal{H}_0} S(\beta, 0))}$$

$(-\beta < \tau < \beta)$

die die Ausgangsgleichungen für die Störungstheorie darstellen.

Beweis:

1) Es gilt unmittelbar

$$e^{-\alpha z} = e^{-\alpha z_0} S(z, 0) \quad (S(z, 0) \stackrel{\text{Def}}{=} e^{\alpha_0 z} e^{-\alpha z})$$

Für  $z = \beta$  ist also:

$$e^{-\beta \alpha} = e^{-\beta \alpha_0} S(\beta, 0) \quad \text{und} \quad \Xi = \text{Sp}(e^{-\beta \alpha_0} S(\beta, 0)) \quad \checkmark$$

2) Fallunterscheidung; zunächst sei  $z > 0$ :

$$\Xi \cdot G_{\alpha, \beta}(z) = - \text{Sp}(e^{-\beta \alpha_0} T_z(c_{\alpha, H}(z) c_{\beta, H}^+(0)))$$

hier noch mal Heisenberg-Bild, gekennzeichnert durch Index "H"

$$= - \text{Sp}(e^{-\beta \alpha_0} S(\beta, 0) T_z(c_{\alpha, H}(z) c_{\beta, H}^+(0)))$$

$$= - \text{Sp}(e^{-\beta \alpha_0} S(\beta, 0) c_{\alpha, H}(z) c_{\beta, H}^+(0)) \quad (z > 0)$$

$$= - \text{Sp}(e^{-\beta \alpha_0} S(\beta, 0) S(0, z) c_{\alpha}(z) S(z, 0) c_{\beta}^+(0)) \quad (\text{Dirac})$$

$$= - \text{Sp}(e^{-\beta \alpha_0} S(\beta, z) c_{\alpha}(z) S(z, 0) c_{\beta}^+(0)) \quad (\text{ist bereits zeitgeordnet})$$

$$= - \text{Sp}(e^{-\beta \alpha_0} T_z(S(\beta, z) c_{\alpha}(z) S(z, 0) c_{\beta}^+(0)))$$

$$= - \text{Sp}(-e^{\beta \alpha_0} T_z(S(\beta, z) S(z, 0) c_{\alpha}(z) c_{\beta}^+(0))) \quad (z^{2n})$$

$$= - \text{Sp}(e^{-\beta \alpha_0} T_z(S(\beta, 0) c_{\alpha}(z) c_{\beta}^+(0))) \quad \checkmark$$

(67)

jetzt  $z < 0$ :

$$\begin{aligned}
\boxed{G_{\text{ops}}(z)} &= -S_p \left( e^{\beta z} T_z \left( c_{\alpha, H}(z) c_{\beta, H}^\dagger(0) \right) \right) \\
&= -S_p \left( e^{\beta z} S(\beta, 0) \varepsilon c_{\beta, H}^\dagger(0) c_{\alpha, H}(z) \right) \\
&= -\varepsilon S_p \left( e^{\beta z} S(\beta, 0) c_{\beta}^\dagger(0) S(0, z) c_\alpha(z) S(z, 0) \right) \\
&= -\varepsilon S_p \left( e^{\beta z} T_z \left( S(\beta, 0) c_{\beta}^\dagger(0) S(0, z) c_\alpha(z) S(z, 0) \right) \right) \\
&= -\varepsilon S_p \left( e^{\beta z} T_z \left( S(\beta, 0) c_{\beta}^\dagger(0) c_\alpha(z) \right) \right) \\
&= -\varepsilon^2 S_p \left( e^{\beta z} T_z \left( S(\beta, 0) c_\alpha(z) c_{\beta}^\dagger(0) \right) \right) \quad \checkmark
\end{aligned}$$

Die Matsubara-Funktion kann auch geschrieben werden als:

$$G_{\text{ops}}(z) = -\frac{\Omega_0}{\Omega} \left\langle T_z \left( S(\beta, 0) c_\alpha(z) c_{\beta}^\dagger(0) \right) \right\rangle^{(0)}$$

und  $\frac{\Omega}{\Omega_0} = \left\langle S(\beta, 0) \right\rangle^{(0)}$

Also:

$$-G_{\text{ops}}(z) = \frac{\left\langle T_z \left( S(\beta, 0) c_\alpha(z) c_{\beta}^\dagger(0) \right) \right\rangle^{(0)}}{\left\langle S(\beta, 0) \right\rangle^{(0)}}$$

Wir haben damit die wechselwirkende Matsubara-Funktion über freie Erwartungswerte von Operatoren mit freier Zeitabhängigkeit ausgedrückt!

### III D Wick - Theorem

Zur Auswertung der Ausgangsgleichungen benötigen wir eine praktikable Methode, freie Erwartungswerte von zeitgeordneten Produkten mehrerer Konstruktionsoperatoren zu berechnen. Eine solche wird durch das Wick - Theorem bereitgestellt. Das Wick - Theorem wird dadurch zu dem Theorem der QFT.

**Def.** Seien  $U, V$  Konstruktionsoperatoren, die zu den Zeiten  $z_u, z_v$  wirken (Dirac - Darstellung)

$$\underbrace{UV}_{\text{Kontraktion}} \equiv \langle T_z(UV) \rangle^{(0)}$$

**Bsp.**

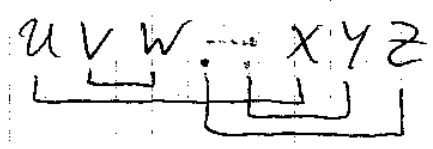
$$\begin{aligned} \bullet \quad c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z') &= \langle T_z(c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z')) \rangle^{(0)} = -G_{\alpha\beta}^{(0)}(z-z') \\ &= \varepsilon \underbrace{c_\beta^\dagger(z') c_\alpha(z)} \end{aligned}$$

(Kontraktionen sind c-Zahlen)

$$\bullet \quad \underbrace{c_\alpha(z) c_\beta(z')} = \langle T_z(c_\alpha(z) c_\beta(z')) \rangle^{(0)} = 0$$

(Teilchenzahlerhaltung)

**Def.** Seien  $U, V, W, \dots, X, Y, Z$  beliebige Konstruktionsoperatoren. Ausdrücke der Form



werden wie folgt definiert:

Man bringe die zu kontrahierenden Operatoren in benachbarte Position. Jede Vertauschung liefert dabei einen Faktor  $\varepsilon$ . Anschließend wende man die obige Definition für die Kontraktion an.

Bsp.

$$\begin{aligned}
C_{\alpha_1}(\tau_1) C_{\alpha_2}^\dagger(\tau_2) C_{\alpha_3}^\dagger(\tau_3) C_{\alpha_4}(\tau_4) &= \varepsilon C_{\alpha_1}(\tau_1) C_{\alpha_3}^\dagger(\tau_3) C_{\alpha_2}^\dagger(\tau_2) C_{\alpha_4}(\tau_4) \\
&= \varepsilon^2 C_{\alpha_1}(\tau_1) C_{\alpha_3}^\dagger(\tau_3) C_{\alpha_4}(\tau_4) C_{\alpha_2}^\dagger(\tau_2) = + G_{\alpha_1 \alpha_3}^{(0)}(\tau_1 - \tau_3) G_{\alpha_4 \alpha_2}^{(0)}(\tau_4 - \tau_2)
\end{aligned}$$

Wick-Theorem

Seien  $U, V, W, \dots, X, Y, Z$  beliebige zeitabhängige Konstruktionsoperatoren. Ihre Anzahl sei gerade.

$$\begin{aligned}
\langle T_Z(UVW\dots XYZ) \rangle^{(0)} &= UVW\dots XYZ \\
&\quad + UVW\dots XYZ \\
&\quad + \dots
\end{aligned}$$

Die rechte Seite wird auch als totale Paarung bezeichnet und stellt die Summe aller möglichen Aufteilungen des Operatorprodukts  $U \dots Z$  in Produkte von Kontraktionen dar.

Es gibt  $\binom{n_0}{2} \binom{n_0-2}{2} \binom{n_0-4}{2} \dots \binom{2}{2} = \frac{n_0!}{2!(n_0-2)!} \frac{(n_0-2)!}{2!(n_0-4)!} \frac{(n_0-4)!}{2!(n_0-6)!} \dots \frac{2!}{2!0!}$   
 $= n_0! 2^{-\frac{n_0}{2}}$  Summanden, wenn  $n_0$  die Anzahl der Konstruktionsoperatoren ist. Man beachte aber, dass die Kontraktion zweier

Vernichter oder die zweier Erzeuger verschwindet. Eine von Null verschiedene totale Paarung kann es nur geben, wenn die Anzahl der Erzeuger gleich der Anzahl der Vernichter ist. Dies wird aber im weiteren immer der Fall sein.

Läßt man von vornherein nur Kontraktionen zwischen einem Erzeuger und einem Vernichter zu, so hat man noch  $\frac{n_0}{2} \cdot (\frac{n_0}{2} - 1) \cdot \dots \cdot 1 = (\frac{n_0}{2})!$  Summanden.

### Beweis des Wick - Theorems:

Wir beweisen das Theorem zunächst für den Fall von Konstruktionsoperatoren, die sich auf die 1-Teilchen-ONB  $\{|k\rangle\}$  beziehen und in der  $\mathcal{H}_0$  diagonal ist.

In dieser Basis können wir die einfache freie Zeitabhängigkeit der Konstruktionsoperatoren ansetzen und schreiben:

$$U = \prod_n \eta_n(\tau_n) \alpha_n \quad \text{mit} \quad \alpha_n = c_n \text{ oder } c_n^\dagger \quad \text{und}$$

$$\eta_n(\tau_n) = e^{G_n(\epsilon(n)-\mu)\tau_n}, \quad G_n = +/- \text{ f. } \alpha_n = c_n^\dagger / c_n$$

Weiter gilt in dieser 1-Teilchen-ONB, daß die freie Matsubara-Funktion diagonal ist,  $G_{kk'}^{(0)}(\tau) = \delta_{kk'} G_k^{(0)}(\tau)$ .

Analog gilt für die Kontraktion  $(\tau_n > \tau_v)$ :

$$\underbrace{UV}_{\text{Kontraktion}} = \langle T_\tau(UV) \rangle^{(0)} = \langle UV \rangle^{(0)} = \eta_u(u) \eta_v(v) \langle \alpha_u \alpha_v \rangle^{(0)}$$

$$\Rightarrow \underbrace{UV}_{\text{Kontraktion}} \neq 0 \text{ nur für } \begin{array}{l} 1) \alpha_u = c_u \text{ und } \alpha_v = c_u^\dagger \text{ oder} \\ 2) \alpha_u = c_u^\dagger \text{ und } \alpha_v = c_v \end{array}$$



mit  $\langle n_n \rangle^{(0)} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{0n} - \mu)} - \epsilon}$  in der ONS  $\{1k\}$  folgt (71)

für Fall 1) und 2):

1)

$$\begin{aligned}
 \underbrace{UV}_{\substack{\downarrow \\ \tau_u > \tau_v}} &= p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \langle \alpha_n \alpha_v \rangle^{(0)} \\
 &\stackrel{1)}{=} p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \langle c_n c_v^\dagger \rangle^{(0)} \\
 &= p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \left( 1 + \frac{\epsilon}{e^{\beta(\epsilon_{0n} - \mu)} - \epsilon} \right) \\
 &= p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \frac{1}{1 - \epsilon e^{\beta(\epsilon_{0n} - \mu)}} \\
 &\stackrel{1)}{=} p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \frac{1}{1 - \epsilon p_n(\beta)} \\
 &\stackrel{1)}{=} p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \frac{[\alpha_n, \alpha_v] - \epsilon}{1 - \epsilon p_n(\beta)}
 \end{aligned}$$

2)

$$\begin{aligned}
 \underbrace{UV}_{\substack{\downarrow \\ \tau_u > \tau_v}} &= p_n(\tau_v) p_v(\tau_v) \langle \alpha_n \alpha_v \rangle^{(0)} \\
 &\stackrel{2)}{=} p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{0n} - \mu)} - \epsilon} \\
 &\stackrel{2)}{=} p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \frac{1}{p_n(\beta) - \epsilon} \\
 &\stackrel{2)}{=} p_n(\tau_u) p_v(\tau_v) \frac{[\alpha_n, \alpha_v] - \epsilon}{1 - \epsilon p_n(\beta)} \quad \leftarrow -\epsilon = [c_v^\dagger, c_n] - \epsilon
 \end{aligned}$$

(gleiches Ergebnis!)

$$\underbrace{UV}_{\substack{\downarrow \\ \tau_u > \tau_v}} = \frac{[U, V] - \epsilon}{1 - \epsilon p_n(\beta)}$$

Hilfssatz a)

Als zweiten Hilfssatz benötigen wir

$$\boxed{U e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \mu_n(\beta) e^{-\beta \mathcal{H}_0} U} \quad \text{Hilfssatz b)}$$

Beweis:  $U = \mu_n(\tau_n) \cdot c_n$ :

$$\begin{aligned} U e^{-\beta \mathcal{H}_0} &= \mu_n(\tau_n) c_n e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-\beta)^k \mu_n(\tau_n) c_n \mathcal{H}_0^k \\ &\stackrel{(S.30)}{=} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-\beta)^k \mu_n(\tau_n) (\varepsilon c_n - \mu + \mathcal{H}_0)^k c_n \\ &= \mu_n(\tau_n) e^{-\beta(\varepsilon c_n - \mu)} e^{-\beta \mathcal{H}_0} c_n = \mu_n(\beta) e^{-\beta \mathcal{H}_0} U \end{aligned}$$

und analog für  $U = \mu_n(\tau_n) c_n^\dagger$  ✓

Für a) hatten wir  $\tau_n > \tau_v$  vorausgesetzt. Dies ist sinnvoll, denn in

$$\langle T_{\tau} (UV \dots YZ) \rangle^{(0)} = \underbrace{UV \dots YZ} + \dots$$

führt jede Vertauschung zweier Operatoren zu je einem Faktor  $\varepsilon$  auf beiden Seiten der Gleichung. Wir können die Gleichung also solange durch Vertauschungen umformen, bis das Produkt  $U \dots Z$  zeitgeordnet ist.

Für den eigentlichen Beweis können wir also  $T_{\tau}$  auf der linken Seite weglassen.

$n_0$  sei wieder die Anzahl der Operatoren  $U, \dots, Z$ .  $n_0$  gerade.

$$\begin{aligned}
\langle T_z(uv \dots yz) \rangle^{(0)} &\stackrel{\varepsilon_0}{=} \langle uv \dots yz \rangle^{(0)} \\
&= \langle [u, v]_{-\varepsilon} w \dots xyz \rangle^{(0)} + \varepsilon \langle vw \dots xyz \rangle^{(0)} \\
&= \langle [u, v]_{-\varepsilon} \dots yz \rangle^{(0)} \\
&+ \varepsilon \langle v [u, w]_{-\varepsilon} \dots z \rangle^{(0)} \\
&+ \dots \\
&+ \varepsilon^{n_0-2} \langle vw \dots y [u, z]_{-\varepsilon} \rangle^{(0)} + \underbrace{\varepsilon^{n_0-1} \langle vw \dots yz u \rangle^{(0)}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\Xi_0} \text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}_0} v \dots z u) \\
&\stackrel{b)}{=} \frac{\eta_u(\beta)}{\Xi_0} \text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}_0} uv \dots z)
\end{aligned}$$

⇒

$$\begin{aligned}
(1 - \varepsilon \eta_u(\beta)) \langle T_z(uv \dots yz) \rangle^{(0)} \\
&= \langle [u, v]_{-\varepsilon} \dots z \rangle^{(0)} \varepsilon^0 + \dots + \langle v \dots [u, z]_{-\varepsilon} \rangle^{(0)} \varepsilon^{n_0-1} \\
&\stackrel{a)}{=} (1 - \varepsilon \eta_u(\beta)) \left[ \langle \underbrace{uv \dots z} \rangle^{(0)} \varepsilon^0 + \dots + \langle v \dots \underbrace{uz} \rangle^{(0)} \varepsilon^{n_0-1} \right] \\
&= (1 - \varepsilon \eta_u(\beta)) \left[ \langle \underbrace{uv \dots yz} \rangle^{(0)} + \dots + \langle \underbrace{uv \dots yz} \rangle^{(0)} \right]
\end{aligned}$$

⇒

$$\begin{aligned}
\langle T_z(uv \dots yz) \rangle^{(0)} &= \langle \underbrace{uvw \dots xyz} \rangle^{(0)} \\
&+ \langle \underbrace{uvw \dots xyz} \rangle^{(0)} \\
&\vdots \\
&+ \langle \underbrace{uvw \dots xyz} \rangle^{(0)} \\
&+ \langle \underbrace{uvw \dots xyz} \rangle^{(0)}
\end{aligned}$$

Da die Kontraktion eine c-Zahl ist, kann sie aus dem Erwartungswert herausgezogen werden. Iterieren der eben abgeleiteten Gleichung liefert also exakt die totale Paarung.

Damit ist das Wick-Theorem für die 1-Teilchen-ONB  $\{|k\rangle\}$  bewiesen:

$$\langle T_Z (c_{k_1}^{(+)}(\tau_1) \dots c_{k_{n_0}}^{(+)}(\tau_{n_0})) \rangle^{(0)} = \underbrace{c_{k_1}^{(+)}(\tau_1)} \dots \underbrace{c_{k_{n_0}}^{(+)}(\tau_{n_0})} + \dots$$

Fassen wir die Transformationsformeln für c und c<sup>†</sup> von einer beliebigen 1-Teilchen-ONB  $\{|k\rangle\}$  nach  $\{|k\rangle\}$  formal zusammen (S.13):

$$c_\alpha^{(+)} = \sum_k U_{\alpha k}^{(*)} c_k^{(+)} \Leftrightarrow c_\alpha = \sum_k U_{\alpha k} c_k \text{ oder } c_\alpha^\dagger = \sum_k U_{\alpha k}^* c_k^\dagger$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} & \langle T_Z (c_{\alpha_1}^{(+)}(\tau_1) \dots c_{\alpha_{n_0}}^{(+)}(\tau_{n_0})) \rangle^{(0)} \\ &= \langle T_Z \left( \left( \sum_{k_1} U_{\alpha_1 k_1}^{(*)} c_{k_1}^{(+)}(\tau_1) \right) \dots \left( \sum_{k_{n_0}} U_{\alpha_{n_0} k_{n_0}}^{(*)} c_{k_{n_0}}^{(+)}(\tau_{n_0}) \right) \right) \rangle^{(0)} \\ &= \sum_{k_1 \dots k_{n_0}} U_{\alpha_1 k_1}^{(*)} \dots U_{\alpha_{n_0} k_{n_0}}^{(*)} \langle T_Z (c_{k_1}^{(+)}(\tau_1) \dots c_{k_{n_0}}^{(+)}(\tau_{n_0})) \rangle^{(0)} \\ &= \sum_{k_1 \dots k_{n_0}} U_{\alpha_1 k_1}^{(*)} \dots U_{\alpha_{n_0} k_{n_0}}^{(*)} \left( \underbrace{c_{k_1}^{(+)}(\tau_1)} \dots \underbrace{c_{k_{n_0}}^{(+)}(\tau_{n_0})} + \dots \right) \\ &= \left( \sum_{k_1} U_{\alpha_1 k_1}^{(*)} c_{k_1}^{(+)}(\tau_1) \right) \dots \left( \sum_{k_{n_0}} U_{\alpha_{n_0} k_{n_0}}^{(*)} c_{k_{n_0}}^{(+)}(\tau_{n_0}) \right) + \dots \\ &= \underbrace{c_{\alpha_1}^{(+)}(\tau_1)} \dots \underbrace{c_{\alpha_{n_0}}^{(+)}(\tau_{n_0})} + \dots \\ &= \{ \text{totale Paarung} \} \quad \checkmark \end{aligned}$$

# IV Diagramm-Darstellung der Ein-Teilchen-

## Natsubara-Funktion

Fassen wir die wichtigsten Ergebnisse noch einmal zusammen:

S-Matrix:

$$S(\beta, 0) = T_Z \exp\left(-\int_0^\beta V(z') dz'\right)$$

Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion:

$$G_{\alpha\beta}(z) = \frac{\langle T_Z (S(\beta, 0) c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(0)) \rangle^{(0)}}{\langle S(\beta, 0) \rangle^{(0)}}$$

Eingesetzt:

$$G_{\alpha\beta}(z) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-1)^n \int_0^\beta dz_1 \dots \int_0^\beta dz_n \langle T_Z (V(z_1) \dots V(z_n) c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(0)) \rangle^{(0)}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-1)^n \int_0^\beta dz_1 \dots \int_0^\beta dz_n \langle T_Z (V(z_1) \dots V(z_n)) \rangle^{(0)}}$$

Jeder Term n-ter Ordnung im Zähler oder Nenner kann jetzt mit Hilfe des Wick-Theorems ausgewertet werden. Dies führt zu den sogenannten Feynman-Diagrammen

## IV A Grundlagen der Diagrammdarstellung

Wir betrachten zunächst den (einfacheren) Nenner, d.h. den freien Erwartungswert der S-Matrix  $\langle S(\beta, 0) \rangle^{(0)} = Z/Z_0$ . Die Natsubara-Funktion kann analog behandelt werden. Dies wird später diskutiert.

Mit  $V(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v(\alpha\beta\delta\gamma) c_\alpha^\dagger(\tau) c_\beta^\dagger(\tau) c_\gamma(\tau) c_\delta(\tau)$  ist

für den Term  $n$ -ter Ordnung:

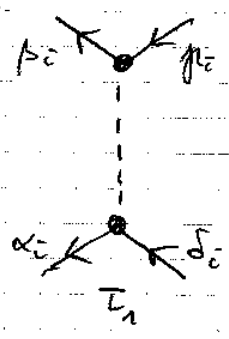
$$\langle S(\beta, 0) \rangle^{(0), (n)} = \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \frac{1}{2^n} \sum_{\alpha_1\beta_1\gamma_1\delta_1} \dots \sum_{\alpha_n\beta_n\gamma_n\delta_n} v(\alpha_1\beta_1\delta_1\gamma_1) \dots v(\alpha_n\beta_n\delta_n\gamma_n) \cdot \left\{ c_{\alpha_1}^\dagger(\tau_1) \dots c_{\beta_1}^\dagger(\tau_1) \dots \dots c_{\alpha_n}^\dagger(\tau_n) \dots c_{\beta_n}^\dagger(\tau_n) \right\}_{TP}$$

Der Beitrag  $n$ -ter Ordnung wird durch Diagramme  $n$ -ter Ordnung graphisch dargestellt. Jeder Summand der TP entspricht dabei einem ganz bestimmten Diagramm. totale Paarung ↗

### 1) Vertex

Ein Diagramm  $n$ -ter Ordnung enthält  $n$  Vertices:

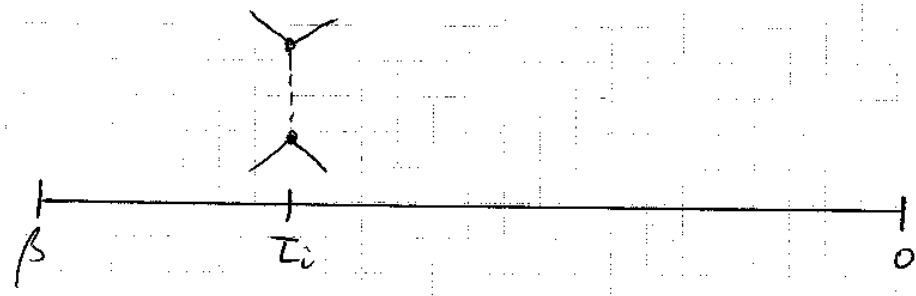
Symbol:



Term:

$$v(\alpha\beta\delta\gamma)$$

Zu einem Vertex gehört eine Zeitvariable  $\tau_i$  entsprechend dem Argument von  $V(\tau_i)$ . Es ist  $0 < \tau_i < \beta \quad \forall i=1, \dots, n$ . Man kann sich eine Zeitachse vorstellen und den Vertex an die entsprechende Stelle platzieren denken:



An einem Vertex bestehen 4 Anschlußmöglichkeiten, die den 4 Konstruktionsoperatoren in  $V(\tau_i)$  entsprechen.

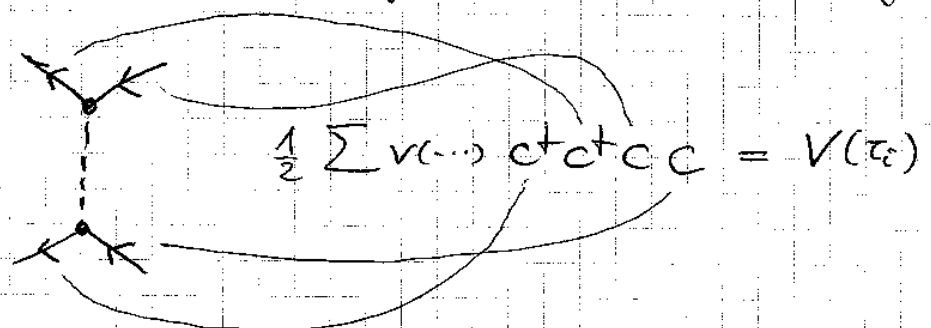
Anschlußmöglichkeiten für

- 2 auslaufende Linien  $\leftrightarrow$  2 Erzeuger in  $V(\tau_i)$
- 2 einlaufende Linien  $\leftrightarrow$  2 Vernichter

Anschlußmöglichkeiten am Vertex

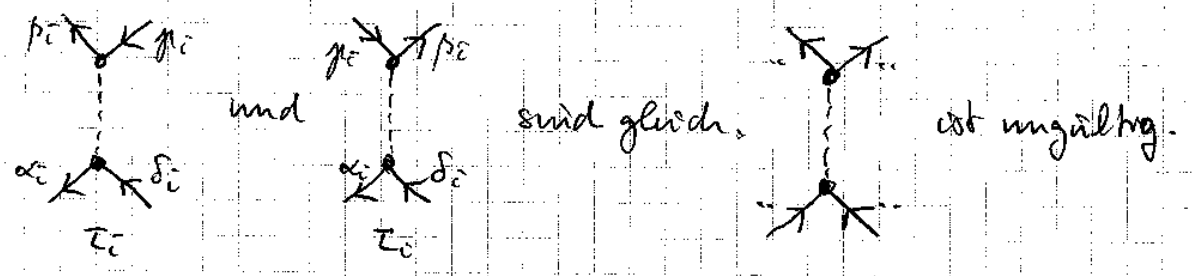
- oben  $\leftrightarrow$  innere Konstruktionsoperatoren in  $V(\tau_i)$
- unten  $\leftrightarrow$  äußere

Mit diesen Vereinbarungen ist eine eindeutige Zuordnung



gegeben, die auf den Pfeilrichtungen und der oben-unten-Unterscheidung basiert.

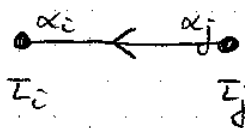
Bsp.



## 2) Propagator

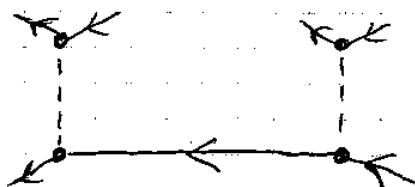
Zu  $n$ -ter Ordnung gibt es 2n Kontraktionen in der TP.  
Diese werden durch 2n Propagatoren dargestellt.

Symbol:                      Term



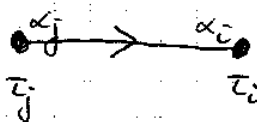
$$c_{\alpha_i}(z_i) c_{\alpha_j}^\dagger(z_j) = -G_{\alpha_i \alpha_j}^{(0)}(z_i - z_j)$$

Ein Propagator beginnt und endet an einem Vertex:



Jeder Propagator trägt einen Pfeil: Der Vermichter in der Kontraktion,  $c_{\alpha_i}(z_i)$ , wird durch das Ende der Linie bei  $\alpha_i, z_i$  und der Erzeuger,  $c_{\alpha_j}^\dagger(z_j)$ , durch das Beginn der Linie bei  $\alpha_j, z_j$  symbolisiert.

Für  $z_i < z_j$  wird  $c_{\alpha_i}(z_i) c_{\alpha_j}^\dagger(z_j) = -G_{\alpha_i \alpha_j}^{(0)}(z_i - z_j)$  durch



symbolisiert. Im Argument der freien

Natsubara-Funktion steht also immer

$$z_{\text{Vermichter}} - z_{\text{Erzeuger}}$$

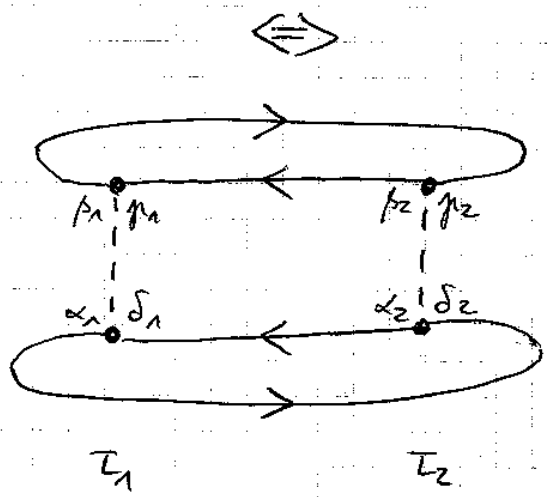
Wirden jeweils alle 4 Anschlussmöglichkeiten an allen  $n$  Vertices so durch die 2n Propagatoren verbunden, erhält man ein gültiges Diagramm, das einem Term der TP



entspricht. Da  $2n$  Linien aus allen Vertizes austreten, und  $2n$  Linien in allen Vertizes enden, gibt es  $(2n)!$  Möglichkeiten, Diagramme  $n$ -ter Ordnung zu zeichnen. Diese entsprechen den  $\left(\frac{n_0}{2}\right)! = (2n)!$  Summanden in der TP.

Bsp.  $n=2$

$$v(\alpha_1/\lambda \delta_1 \eta_1) v(\alpha_2/\lambda \delta_2 \eta_2) \underbrace{c_{\alpha_1}^\dagger(z_1) c_{\beta_1}^\dagger(z_1) c_{\eta_1}(z_1) c_{\delta_1}(z_1)}_{\tau_1} \cdot \underbrace{c_{\alpha_2}^\dagger(z_2) c_{\beta_2}^\dagger(z_2) c_{\eta_2}(z_2) c_{\delta_2}(z_2)}_{\tau_2}$$

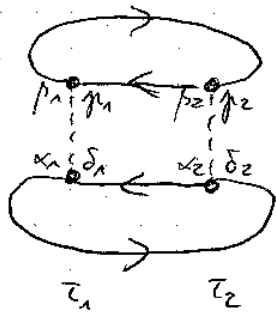


### 3) Summen / Integrale

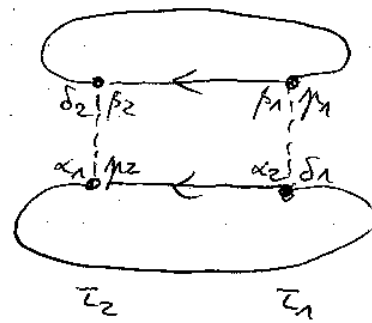
Ein Beitrag  $n$ -ter Ordnung  $\langle S(\beta, 0) \rangle^{(0), (n)}$  ergibt sich nach Summation über alle Indizes  $\alpha_1 \dots \delta_1 \dots \alpha_n \dots \delta_n$  und nach Integration über alle Zeitvariablen  $\int_0^\beta dt_{z_1} \dots \int_0^\beta dt_{z_n}$ .

Die Summen / Integrale können in jedem einzelnen Summanden der TP ausgeführt werden. Wer vereinbaren daher, daß bei der Auswertung eines Diagramms über alle Indizes / Zeiten summiert / integriert wird.

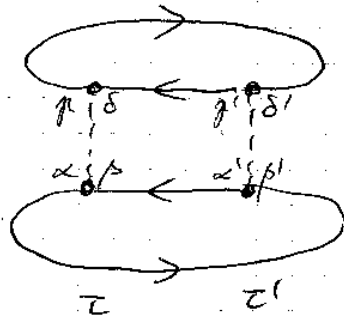
Weil Summationsindizes bzw. Integrationsvariablen stets frei umbenannt werden können, repräsentieren  $\delta$ - $\delta$ .



und

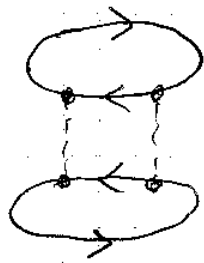


oder



denselben Summanden in der TP nach Ausführen der Summen / Integrale.

Für das Auffinden aller Terme der TP sind daher die Indizierungen unnötig. Wir zeichnen



### 4) Gleichzeitigkeit

Werden Konstruktionsoperatoren untereinander kontrahiert, die zu dem gleichen  $V(z)$  gehören, tritt das Problem der Gleichzeitigkeit auf:  $c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z)$ . Auf S. 64 hatten wir für diesen Fall

$$T_{\text{Erzeuger}} = T_{\text{Vermichtet}} + O^+$$

vereinbart. Dasselbe kommt bei der gleichzeitigen Kontraktion

zur Anwendung.

3ap



Propagator-Symbol

Def. für Gleichzeitigkeit

$$c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z) = c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z+0^+)$$

Def d. Kontraktion

$$G_{\alpha\beta}^{(0)}(-0^+) \stackrel{\text{Def.}}{=} \langle T_z (c_\alpha(-0^+) c_\beta^\dagger(0)) \rangle^{(0)} = \varepsilon \langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle^{(0)}$$



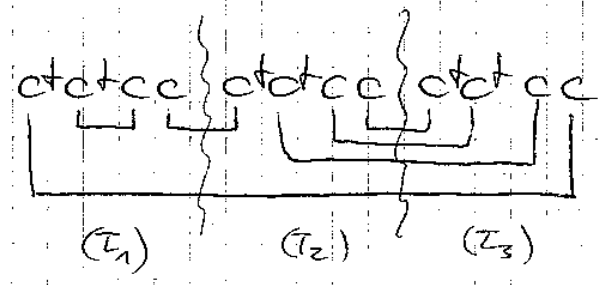
$$c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z) = \dots = \varepsilon \langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle^{(0)}$$

Bem.

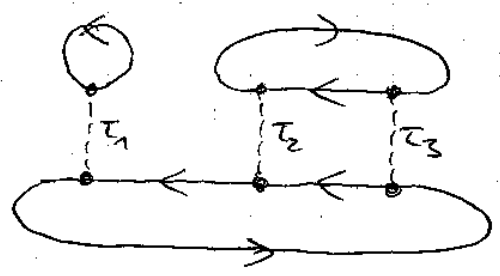
Wegen  $\langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle = \langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle^* = \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle$  ist ein Pfeil an einer Glase eigentlich überflüssig.

### 5) Schleifen (Loops)

Die Kontraktionen in einem bestimmten Summand der TP, z.B. in



werden in dem entsprechenden Diagramm

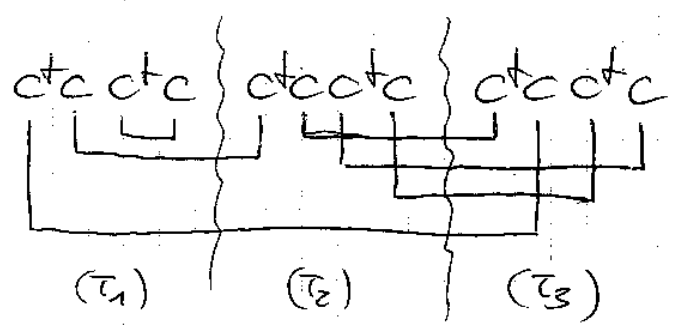


durch Propagatoren dargestellt, die wir gemäß 2) als  $\underbrace{c c^\dagger}$  (und nicht als  $\underbrace{c^\dagger c}$ ) algebraisch übersetzt haben. Damit bleibt aber noch die Frage nach dem Gesamtvorzeichen des Summanden zu klären. Dies kann einfach durch das Abzählen von Schleifen (d.h. von geschlossenen Brüngen aus Propagatoren) geschehen, wie gleich gezeigt wird. Im Beispiel haben wir  $S=3$  Schleifen.

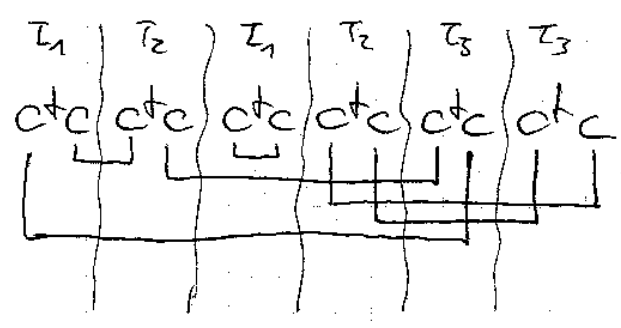
Wir transformieren zunächst jede 4er Einheit folgendermaßen:

$$\begin{array}{cccc}
 c_2^\dagger(z) & c_3^\dagger(z) & c_4(z) & c_5(z) \\
 \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\
 c_2^\dagger(z) & c_5(z) & c_3^\dagger(z) & c_4(z)
 \end{array}
 \longrightarrow$$

(kein Vorzeichenwechsel,  $\varepsilon^2=1$ ). Im Beispiel erhält man:

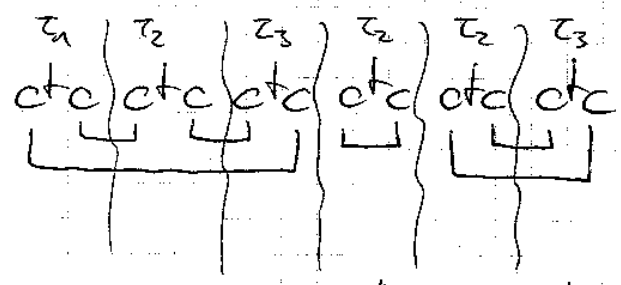


Die Zer-Einheiten lassen sich ohne Vorzeichenwechsel durch das Produkt ziehen. Wir halten die erste fest und holen von rechts eine weitere heran, so daß sich ein Ausdruck der Form  $c^{\dagger} c c^{\dagger} c$  ergibt. Im Beispiel:



Jetzt kann - wenn vorhanden - eine dritte Zer-Einheit herangezogen werden, die ~~mit der~~ zweiten gemäß  $c^{\dagger} c c^{\dagger} c c^{\dagger} c$  anschließt usw. bis das Verfahren abbricht.

Danach kann mit ~~dem~~ am weitesten links stehenden und bislang unberücksichtigt gebliebenen Zer-Einheit fortgefahren werden. Man erhält schließlich (alles ohne Vorzeichenwechsel):



Der Term zerfällt in 3 "Schleifen", die den 3 Schleifen im Diagramm entsprechen. Da wir einen Propagator mit  $c c^{\dagger}$  übersetzt haben, in jeder Schleife aber gerade einmal eine Kontraktion  $c^{\dagger} c$  vorkommt, bekommt das Diagramm einen Zusatzverzeichen  $\epsilon^S$ , wobei S die Anzahl der Schleifen ist (Schleifenregel).

## 6) Vorfaktor

Schließlich ist noch der verbleibende Vorfaktor

$$\frac{(-1)^n}{2^n n!}$$

zu berücksichtigen.

## 7) Regeln für den freien Erwartungswert der S-Matrix

Wir fassen zusammen: Der Beitrag  $n$ -ter Ordnung zu  $\langle S(\beta, 0) \rangle^{(0)}$  ergibt sich als Summe der Terme, die durch alle verschiedenen Diagramme  $n$ -ter Ordnung dargestellt werden.

1)  $i$ -ter Vertex:  $V(\alpha_i \beta_i \delta_i \eta_i)$

2) Propagator:  $-G_{\alpha_i \beta_j}^{(0)}(\tau_i - \tau_j)$ ,  $\tau_i$ : Vernichterzeit,  $\tau_j$ : Erzeugerzeit

3) Summation über alle  $\alpha_i \beta_i \delta_i$  ( $i=1, \dots, n$ )

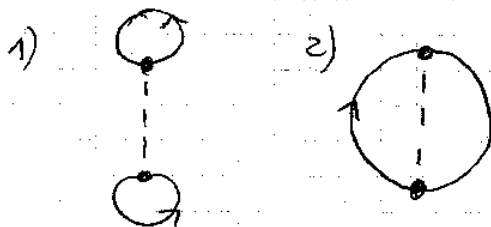
Integration über alle  $\tau_i$  von 0 bis  $\beta$

4) Bei Gleichzeitigkeit:  $\tau_{\text{Erzeuger}} = \tau_{\text{Vernichter}} + 0^+$

5) Faktor  $\varepsilon^S$

6) Vorfaktor  $\frac{(-1)^n}{2^n n!}$

Bsp.  $n=1$ ,  $(2-1)! = 2$  Diagramme



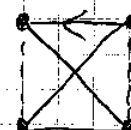
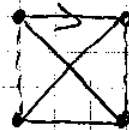
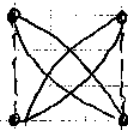
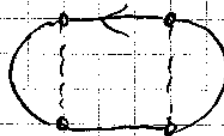
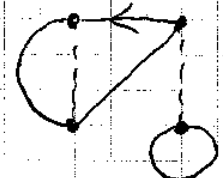
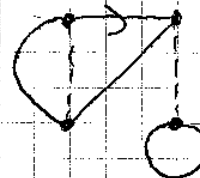
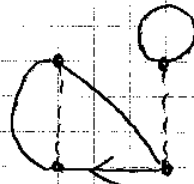
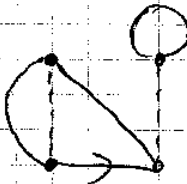
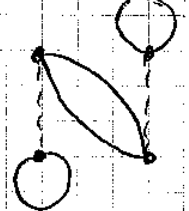
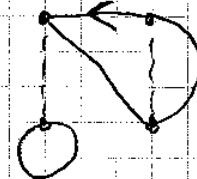
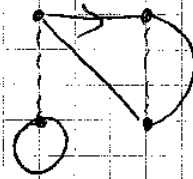
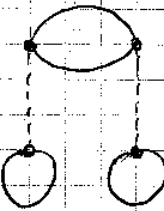
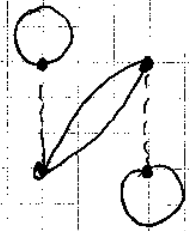
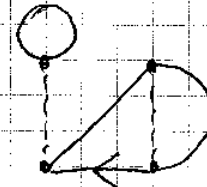
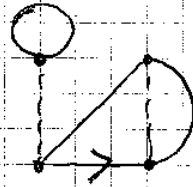
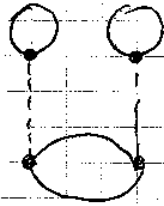
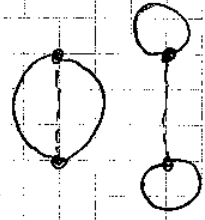
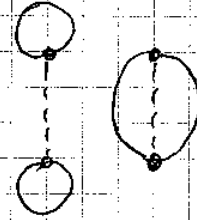
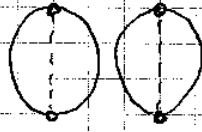
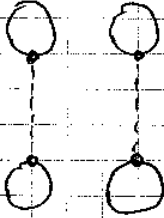
$\mathbb{I}_{sp}$

$n=2$

$(2-2)! = 24$  Diagramme

85

$\tau_1$     $\tau_2$



Bem.

- Vertices sind "fest", Propagatoren können beliebig "verdreht" werden
- Pfeilrichtungen sind zu beachten. In vielen Fällen ist es aber unnötig, jedem Propagator mit einem Pfeil zu versehen. Oft reichen einige wenige Pfeile pro Diagramm, um alle anderen eindeutig festzulegen.

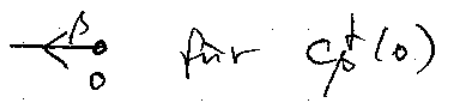
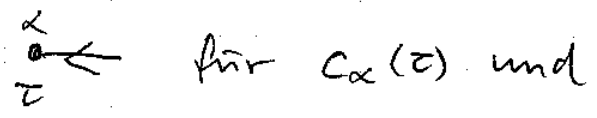
### IV B Diagrammregeln in Zeitdarstellung

#### 1) Regeln für den "Zähler" $\langle S \rangle^{(0)}$ . (-6)

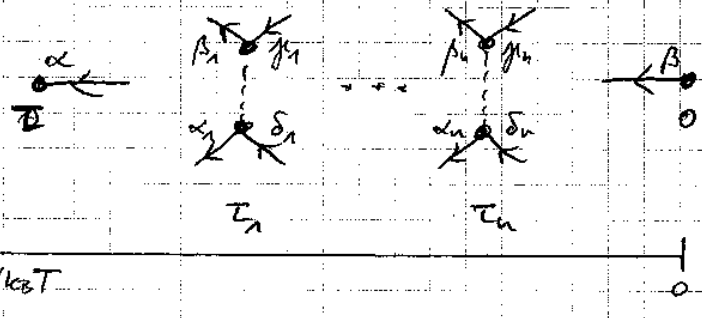
Wir kommen jetzt wieder zurück zur Diskussion der Gri-Teilchen-Datsubara-Funktion (S. 75). Eine Diagrammdarstellung für den Nenner haben wir bereits gefunden. Was ändert sich im Falle des Zählers

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} dz_1 \dots \int_0^{\beta} dz_n \langle T_{\mathbb{Z}}(V(z_1) \dots V(z_n) c_{\alpha}(z) c_{\beta}^{\dagger}(0)) \rangle^{(0)} ?$$

- Wick-Theorem: totale Paarung aller Konstruktionsoperatoren, der in den  $V(z_i)$  und der "äußeren",  $c_{\alpha}(z), c_{\beta}^{\dagger}(0)$
- n Vertices in n-ter Ordnung
- Zusätzlich 2 äußere Anschlußmöglichkeiten,



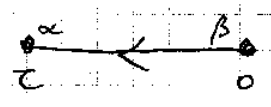




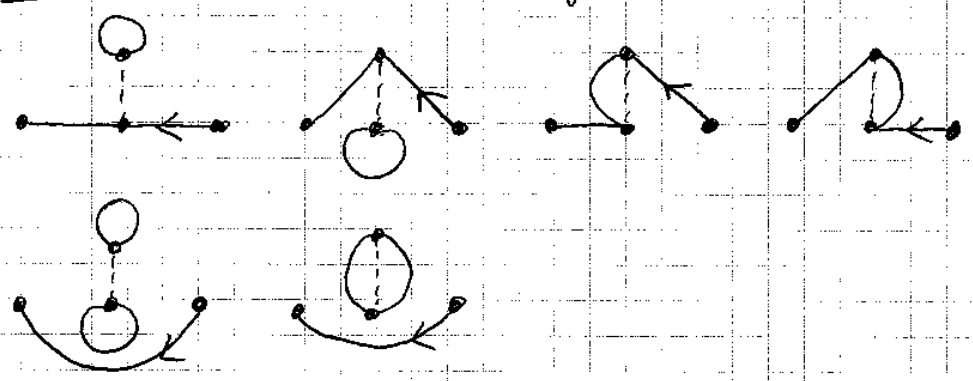
- $(2n+1)$  Propagatoren zur Darstellung der  $(2n+1)$  Kontraktionen in der TP. Es gibt also  $(2n+1)!$  verschiedene Diagramme
- Summen über alle inneren Indizes, Integrale über innere Zeiten (nicht über die äußeren)
- Schleifenregel und Vorfaktor unverändert

Bsp.

$n=0 \quad (2 \cdot 0 + 1)! = 1$  Diagramm



$n=1 \quad (2 \cdot 1 + 1)! = 6$  Diagramme



Pfeile sind weggelassen, soweit möglich

## 2.) Zusammenhängende Diagramme

Die bislang aufgetretenen Diagramme können folgendermaßen klassifiziert werden:

Def. Offenes Diagramm: Diagramm mit äußeren Anschlüssen  
(→ Zähler)

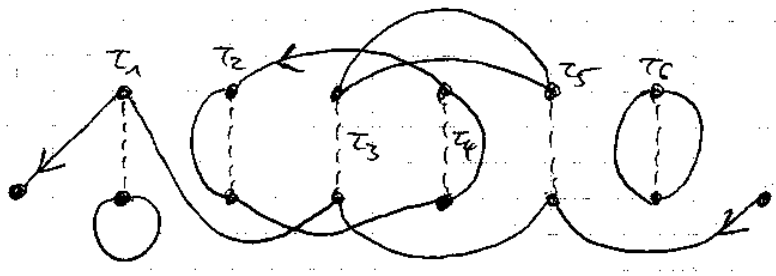
Geschlossenes Diagramm: Diagramm ohne äußere Anschlüsse  
(→ Nenner)

Def. Zusammenhängendes Diagramm:

Diagramm, das nicht durch einen Schnitt in 2 Teile zerlegt werden kann.

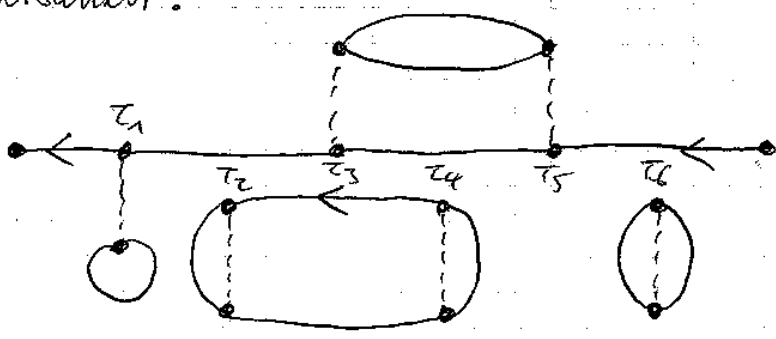
Bsp.

a)

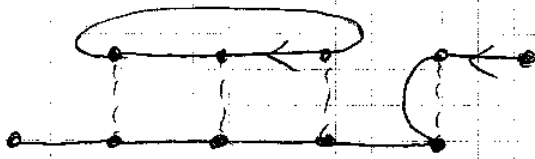


offen,  
nicht zus.-hängend.

Es ist offensichtlich erlaubt, ein solches Diagramm zu "entzerren", indem man die Vertices geeignet vertikal verschiebt!

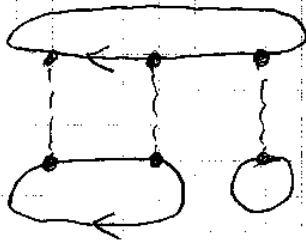


b)



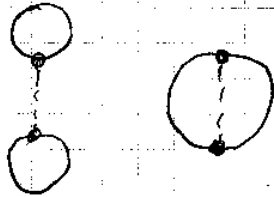
offen,  
zusammenhängend

c)



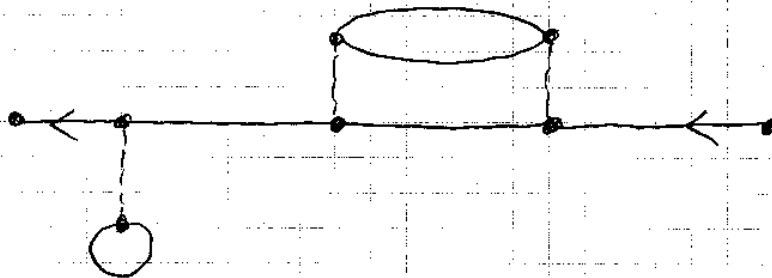
geschlossen,  
zusammenhängend

d)



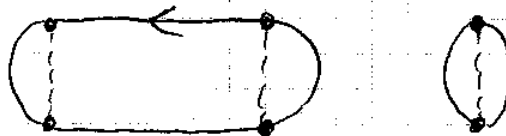
geschlossen  
nicht zusammenhängend

Betrachten wir die Klasse der offenen, nicht zusammenhängenden Diagramme. Jedes dieser Diagramme besteht aus 2 Teilen. Zum ersten Teil gehört die aus Propagatoren gebildete Linie von  $Z_\alpha$  nach  $O, \beta$  und alle Diagrammelemente (Propagatoren, Vertices), die mit dieser Linie verbunden sind. Beispiel a):



(1. Teil)

Die weiteren Bestandteile bilden den zweiten Teil. Beispiel a):



(2. Teil)

Der Gesamtbeitrag des Diagramms zum Zähler faktorisiert in diese beiden Teile:

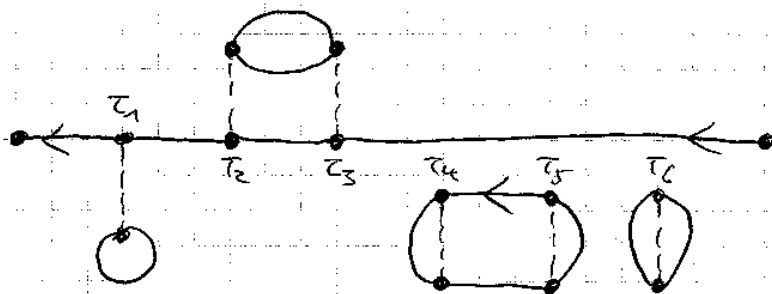
$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^n}{n!} \int d\tau_1 \dots \int d\tau_n \langle T_{\mathbb{C}}(V(\tau_1) \dots V(\tau_n) c_{\alpha}(\tau) c_{\beta}^{\dagger}(0)) \rangle_{\text{bestimmtes Diagramm}}^{(c)} \\ &= \frac{(-1)^n}{n!} \int d\tau_1 \dots \int d\tau_m \langle T_{\mathbb{C}}(V(\tau_1) \dots V(\tau_m) c_{\alpha}(\tau) c_{\beta}^{\dagger}(0)) \rangle_{1\text{-Teil}}^{(c)} \\ & \quad \times \int d\tau_{m+1} \dots \int d\tau_n \langle T_{\mathbb{C}}(V(\tau_{m+1}) \dots V(\tau_n)) \rangle_{2\text{-Teil}}^{(c)} \end{aligned}$$

( $\langle \dots \rangle_{\dots}^{(c)}$  steht hier für den entsprechenden Summand in der TP)

Beispiel a):  $m=3, n=6$

In dem Diagramm

a')



sind gegenüber a) die verschiedenen Potential-Terme  $V(\tau_i)$  anders in die beiden Teile aufgeteilt worden. Die Diagramme a) und a') sind verschieden, liefern aber denselben Wert.

Die Anzahl solcher Diagramme ist  $\frac{n!}{m!(n-m)!}$ , nämlich die

Anzahl der Möglichkeiten, die  $V(\tau_i)$  in  $m$  Terme für den 1-Teil und in  $(n-m)$  Terme für den 2-Teil aufzuteilen.

Der Gesamtbeitrag aller dieser Diagramme lässt sich unter Verwendung von

$$\frac{(-1)^n}{n!} \cdot \frac{n!}{m!(n-m)!} = \frac{(-1)^m}{m!} \cdot \frac{(-1)^{n-m}}{(n-m)!}$$

wie folgt angeben:

$$\frac{(-1)^m}{m!} \int dz_1 \dots \int dz_m \langle T_Z(V(z_1) \dots V(z_m) c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(0)) \rangle_{1\text{-Teil}}^{(0)}$$

$$\times \frac{(-1)^{n-m}}{(n-m)!} \int dz_{m+1} \dots \int dz_n \langle T_Z(V(z_{m+1}) \dots V(z_n)) \rangle_{2\text{-Teil}}^{(0)}$$

Wir summieren jetzt die Beiträge aller Diagramme beliebiger Ordnung, die aus einem ganz bestimmten (offenen, zusammenhängenden) 1. Teil und einem beliebigen (geschlossenen, zusammenhängenden oder nicht zusammenhängenden) 2. Teil bestehen und erhalten:

$$\frac{(-1)^m}{m!} \int dz_1 \dots \int dz_m \langle T_Z(V(z_1) \dots V(z_m) c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(0)) \rangle_{\text{bestimmtes Diag. 1. Teil}}^{(0)}$$

$$\times \underbrace{\left[ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int dz_{m+1} \dots \int dz_{m+k} \langle T_Z(V(z_{m+1}) \dots V(z_{m+k})) \rangle^{(0)} \right]}_{= \langle S(\beta, 0) \rangle^{(0)} !}$$

$\langle S(\beta, 0) \rangle^{(0)}$  kürzt sich damit in der Formel auf S. 75 gegen den Nenner heraus!

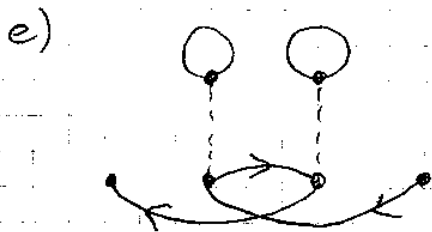
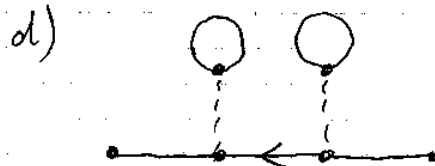
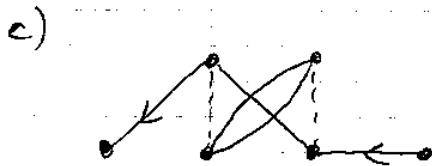
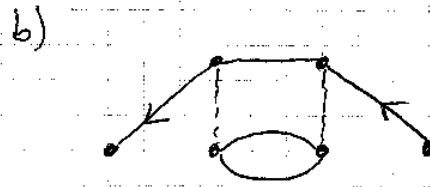
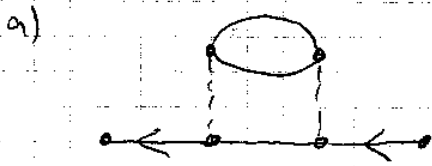
Damit folgt das wichtige Resultat

$$-G_{\alpha\beta}(z) = \left\langle T_z(S(\beta, 0) c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(0)) \right\rangle_{\text{ens.}}^{(0)}$$

$\langle \dots \rangle_{\text{ens.}}^{(0)}$  deutet an, daß nur solche Summanden in der TP zu berücksichtigen sind, die zu zusammenhängenden (offenen) Diagrammen führen. Die Ein-Teilchen-Ratsubara-Funktion wird also durch die Summe aller verschiedenen offenen und zusammenhängenden Diagramme dargestellt.

### 3) Topologisch gleiche Diagramme

Man betrachte die folgenden Diagramme zu  $-G_{\alpha\beta}(z)$ :



Die Diagramme a), b) und c) sind paarweise verschieden, liefern aber denselben Wert. Man kann auf die Unterscheidung zwischen oben und unten an jedem Vertex verzichten, denn:

$$T_Z(\dots c_{\alpha_i}^+(z_i) \overset{\text{unten}}{c_{\beta_i}^+(z_i)} c_{\gamma_i}(z_i) c_{\delta_i}(z_i) \dots)$$

$$= + T_Z(\dots c_{\beta_i}^+(z_i) c_{\alpha_i}^+(z_i) c_{\delta_i}(z_i) c_{\gamma_i}(z_i) \dots)$$

und

$$v(\alpha_i \beta_i \delta_i \gamma_i) = v(\beta_i \alpha_i \gamma_i \delta_i) \quad (\text{s. S. 12}).$$

Ein Diagramm  $n$ -ter Ordnung mit  $n$  Vertices gehört damit zu einer Klasse von  $2^n$  Diagrammen mit gleichem Wert.

Die Diagramme d) und e) sind verschieden, liefern aber den gleichen Wert. Man kann die feste Nummerierung der Vertices aufgeben, da alle Summanden in der TP in:

$$\int dz_1 \dots \int dz_n \langle T_Z(V(z_1) \dots V(z_n) c_\alpha(z) c_\beta^+(z)) \rangle_{\text{ens.}}^{(0)},$$

die nur durch eine Permutation der  $V(z_i)$  auseinander hervorgehen, denselben Wert haben. Jedes Diagramm  $n$ -ter Ordnung gehört damit zu einer Klasse von  $n!$  Diagrammen mit gleichem Wert.

Def.

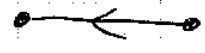
Zwei offene, zusammenhängende Diagramme zu  $G_{\text{FS}}(\mathbb{Z})$  heißen topologisch gleich, wenn sie sich durch eine beliebige, stetige Deformation der Diagramm-elemente (Vertizes, Propagatoren) ineinander überführen lassen können. Die Pfeile an den Propagatoren bleiben dabei fest, genauso wie die äußeren Anschlussmöglichkeiten.

Lassen wir nur topologisch verschiedene Diagramme zu, so können wir auf den Vorfaktor  $\frac{1}{2^n n!}$  verzichten.

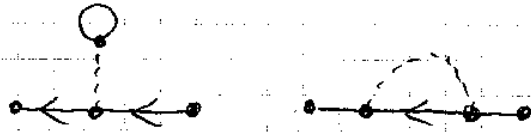
Bsp.

Alle topologisch verschiedene, zusammenhängende Diagramme zu  $-G_{\text{FS}}(\mathbb{Z})$  für

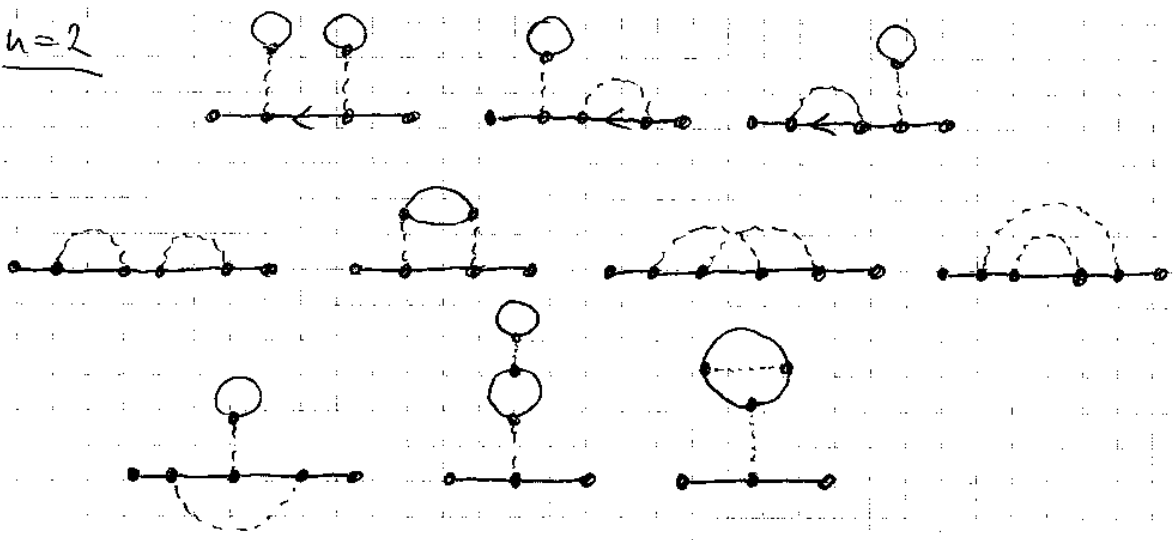
n=0



n=1



n=2





Zu jedem dieser Diagramme gibt es weitere  $(2^n n! - 1)$  topologisch gleiche Diagramme, die denselben Wert liefern.

#### 4) Diagrammregeln für die Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion in Zeitdarstellung

Wir formulieren nun die endgültigen Diagrammregeln für die Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion in Zeitdarstellung:

Man suche alle topologisch verschiedene, zusammenhängende, offene Diagramme. Der Beitrag eines Diagramms  $n$ -ter Ordnung berechnet sich gemäß

1) Vertex:  $v(\alpha\beta\delta\mu)$

2) Propagator:  $-G_{\alpha\beta}^{(0)}(z-z')$   $z$ : Veru.zeit,  $z'$ : Erz.zeit

3) Summen und Integrale über alle inneren Indizes und Zeiten

4) Gleichzeitigkeit:  $z_{Erzeuger} = z_{Vernichter} + 0^+$

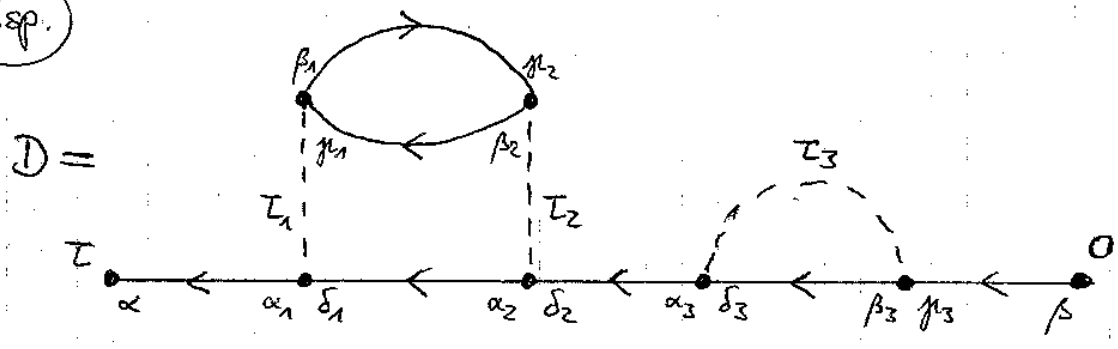
5) Schleifen:  $\varepsilon^S$

6) Faktor  $(-1)^n$

Die Summe aller Diagramme ergibt  $-G_{\alpha\beta}(z)$

# 5) Zusammensetzbarkeit von Diagrammen

Bsp.



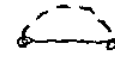

Der Beitrag dieses Diagramms zu  $-G_{\alpha\beta}(z)$  ist:

$$\begin{aligned}
 -G_{\alpha\beta}^{(D)}(z) &= (-1)^3 (-1) \sum_{\alpha_1 \dots \delta_3} \int_0^{\tau_1} d\tau_1 \int_0^{\tau_2} d\tau_2 \int_0^{\tau_3} d\tau_3 \\
 &\quad \times V(\alpha_1 \beta_1 \delta_1 \eta_1) V(\alpha_2 \beta_2 \delta_2 \eta_2) V(\alpha_3 \beta_3 \delta_3 \eta_3) \\
 &\quad \cdot (-1)^7 G_{\alpha\alpha_1}^{(0)}(z-\tau_1) G_{\delta_1\alpha_2}^{(0)}(\tau_1-\tau_2) G_{\delta_2\alpha_3}^{(0)}(\tau_2-\tau_3) G_{\delta_3\beta_3}^{(0)}(-0^+) G_{\beta_3\beta}^{(0)}(\tau_3-0) \\
 &\quad \times G_{\eta_1\beta_2}^{(0)}(\tau_1-\tau_2) G_{\eta_2\beta_1}^{(0)}(\tau_2-\tau_1)
 \end{aligned}$$

Für die freien Matsubara-Funktion hatten wir abgeleitet:

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\beta}^{(0)}(z) &= \sum_k U_{\alpha k} G_k^{(0)}(z) U_{k\beta}^{-1} \\
 G_k^{(0)}(z) &= -e^{-\epsilon(E_k - \mu)z} \left[ \theta(z) (1 + \epsilon \langle n_k \rangle^{(0)}) + \theta(-z) \epsilon \langle n_k \rangle^{(0)} \right] \\
 \langle n_k \rangle^{(0)} &= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(E_k - \mu) - \mu)} - 1}
 \end{aligned}$$

Die Ausführung der  $z$ -Integrale ist wegen der  $\theta$ -Funktionen in  $G_{\alpha\beta}^{(0)}(z)$  etwas kompliziert. In der im folgenden zu diskutierenden Energiedarstellung ist die Berechnung von Diagrammen o.ä. praktischer.

An dem Beispiel kann man sehen, dass sich Diagramme aus elementaren Bestandteilen, wie z.B.  oder , zusammensetzen lassen, welche man vorab berechnen kann. Die Zusammensetzbarkeit von Diagrammen erleichtert konkrete Rechnungen. Sie basiert auf der Tatsache, dass die Diagrammregeln gewissermaßen "lokal" sind. D.h. in die Berechnung eines Diagrammteils gehen keine globalen Diagrammeigenschaften ein, wie z.B. die Ordnung des Diagramms. Bei der Diskussion des großkanonischen Potentials werden wir feststellen, dass die Zusammensetzbarkeit in diesem Fall nicht gegeben ist.

IV C Diagrammregeln in Energiedarstellung

Wir führen jetzt den Übergang in die Energiedarstellung aus.

In Zeitdarstellung:

$$\begin{array}{c} \tau_x \\ \bullet \\ \alpha \end{array} \xleftarrow{\quad} \begin{array}{c} \tau_{x'} \\ \bullet \\ \alpha' \end{array} \quad \longleftrightarrow \quad -G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(\tau_x - \tau_{x'})$$

Fourier-Transformation:

$$-G_{\alpha\alpha'}(\tau_x - \tau_{x'}) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE_n(\tau_x - \tau_{x'})} \cdot (-G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(iE_n))$$

In Energiedarstellung:

$$\begin{array}{c} E_n \\ \bullet \xleftarrow{\quad} \bullet \\ \alpha \quad \alpha' \end{array} \quad \longleftrightarrow \quad -G_{\alpha\alpha'}^{(0)}(iE_n)$$

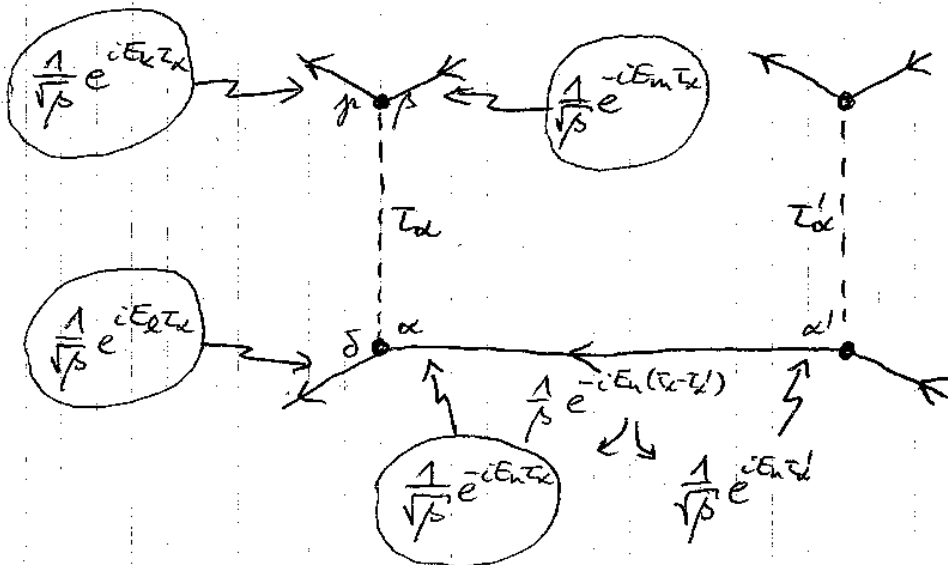
Die Energievariable  $E_n$  übernimmt die Rolle der Zeitvariablen  $\tau_x, \tau_{x'}$ . Als innere Variable, über die zu

summierten sind, gelten jetzt die  $E_n$  und die Indizes  $\alpha, \beta, \dots$  der  $E_n$ -Teilchen-ONB.

Der verbleibende Term wird gemäß

$$\frac{1}{\beta} e^{-iE_n(\tau_x - \tau'_x)} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{-iE_n \tau_x} \cdot \frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{iE_n \tau'_x}$$

aufgeteilt und an den beiden Vertices gerechnet, die durch den Propagator verbunden werden:



Jeder Vertex erhält demnach neben  $v(\alpha\beta\delta\eta)$  einen weiteren Faktor

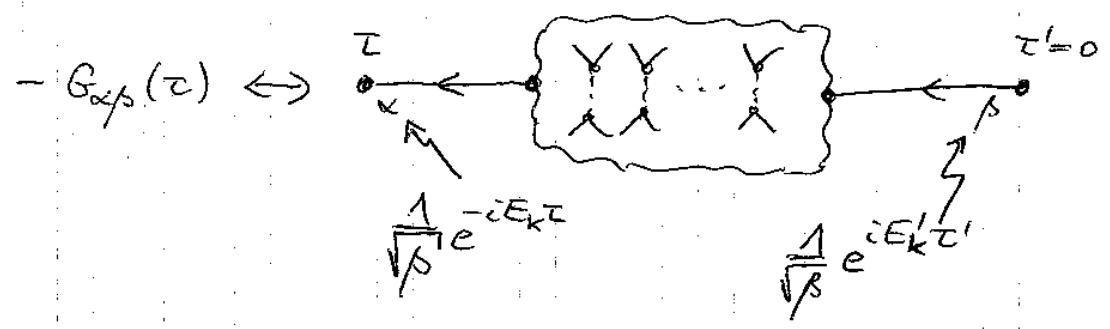
$$\int_0^\beta d\tau_x \left(\frac{1}{\sqrt{\beta}}\right)^4 e^{-i(E_n + E_m - E_k - E_e)\tau_x} = \frac{1}{\beta} \delta_{E_n + E_m, E_k + E_e}$$

(Da weitere  $\tau_x$ -Abhängigkeiten im Diagramm nicht auftreten, kann die  $\tau_x$ -Integration durchgeführt werden).

In jedem Vertex gilt damit die Energieerhaltung

"Die Summe der einlaufenden Energien ist gleich der Summe der auslaufenden"

Nachdem wir jeden Propagator Fourier-transformiert und alle inneren  $z$ -Integrationen ausgeführt haben, verbleiben noch zwei Faktoren, die von den äußeren Propagatoren stammen.



Da innerhalb der "black box" auf jeden Fall die Energieerhaltung gilt, muss  $E_k = E'_k$  sein.

Für die Fourier-transformierte Matsubara-Funktion gilt also:

$$\begin{aligned}
 -G_{\text{exp}}(iE_n) &= \int_0^\beta dz [-G_{\text{exp}}(z)] e^{iE_n z} \\
 &= \int_0^\beta dz e^{iE_n z} \cdot \frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{-iE_k z} \left[ \begin{array}{c} E_k \\ \alpha \leftarrow \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \rightarrow E_k \\ \beta \end{array} \right] \\
 &= \delta_{E_n E_k} \left[ \begin{array}{c} E_n \\ \leftarrow \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \rightarrow E_n \end{array} \right]
 \end{aligned}$$

Wir vereinbaren, die Energievariablen an den äußeren Propagatoren nicht als frei zu betrachten, sondern festgelegt durch die "äußere" Energie  $E_n$ . Dann ist  $\delta_{E_n E_k} = 1$ .

Wir fassen zusammen:

Diagrammregeln für die Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion in Energiedarstellung

1) Vertex:  $\frac{1}{\beta} \delta_{E_1+E_3, E_2+E_4} v(\alpha_i; \beta; \delta_i; \gamma_i)$   
                  ↑                  ↑  
          einlaufend          auslaufend

2) Propagator:  $-G_{\alpha\beta}^{(0)}(iE_k)$

3) Summen über alle inneren Indizes und Energien

4) Energie der äußeren Propagatoren:  $E_n$  (äußere Energie)

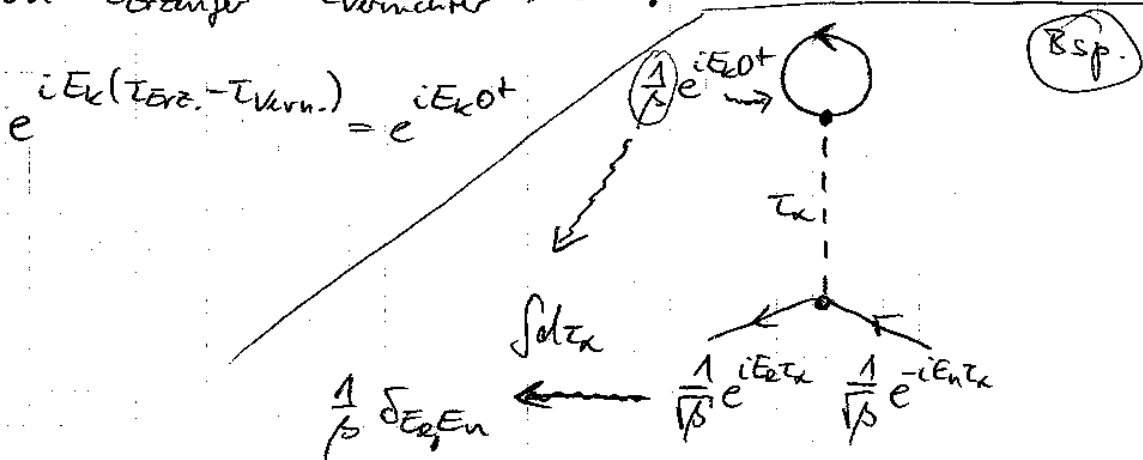
5) Gleichzeitigkeit:  $-G_{\alpha\beta}^{(0)}(iE_k) e^{iE_k 0^+}$

6) Schleifen:  $\varepsilon^S$

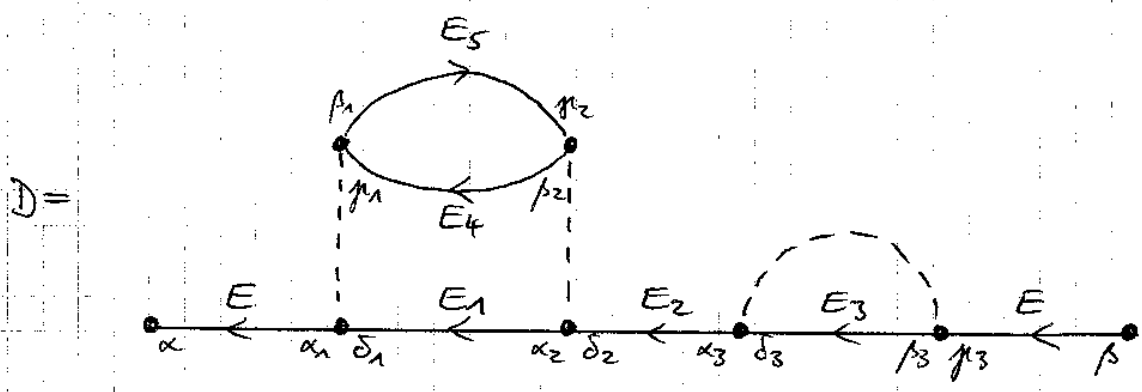
7) Faktor:  $(-1)^n$

→ Beitrag eines Diagramms n-ter Ordnung zu  $-G_{\alpha\beta}(iE_n)$

Der zusätzliche Faktor  $e^{iE_k 0^+}$  bei Propagatoren, die am gleichen Vertex beginnen und enden, ist das Analogon zu  $T_{\text{Erzener}} = T_{\text{von nicht}} + 0^+$ :



Bsp. (vergl. S. 96)



$$\begin{aligned}
 -G_{\alpha\beta}^{(2)}(iE) &= (-1)^3 (-1) \sum_{\alpha_1 \dots \delta_3} \sum_{E_1 \dots E_5} v(\alpha_1/\beta_1 \delta_1/\beta_1) v(x_2/\beta_2 \delta_2/\beta_2) v(\alpha_3/\beta_3 \delta_3/\beta_3) \\
 &\times \frac{1}{\beta_3} \delta_{E+E_5, E_1+E_4} \delta_{E_1+E_4, E_2+E_5} \delta_{E+E_3, E_2+E_3} \\
 &\times (-1)^7 G_{\alpha\alpha_1}^{(0)}(iE) G_{\delta_1\alpha_2}^{(0)}(iE_1) G_{\delta_2\alpha_3}^{(0)}(iE_2) G_{\delta_3\beta_3}^{(0)}(iE_3) G_{\beta_1\beta_2}^{(0)}(iE) \\
 &\times G_{\beta_2\beta_1}^{(0)}(iE_4) G_{\beta_2\beta_1}^{(0)}(iE_5) \times e^{iE_3 0^+}
 \end{aligned}$$

Wegen  $E_2 = E$ ,  $E_1 + E_4 = E_2 + E_5 \Rightarrow E + E_5 = E_1 + E_4$  ist eine "Energie-Erhaltung" redundant.

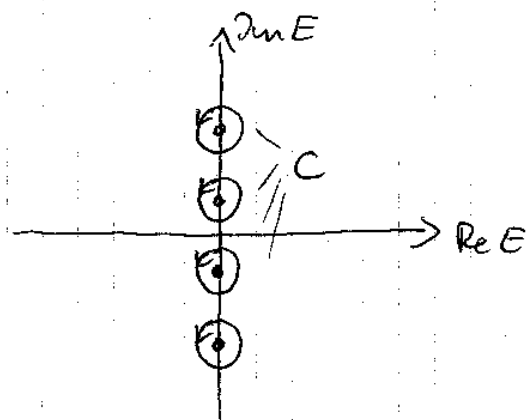
Man sieht:

- Diagramm  $n$ -ter Ordnung
- $n$  Vertices
- $n$  "Energie-Erhaltungs-Bedingungen"
- 1 Energie-Erhaltung redundant
- $2n+1$  Propagatoren
- $2n-1$  interne Energievariablen
- $n$  freie Energievariablen

Zum Abschluß beweisen wir noch eine nützliche Formel zur Berechnung der Energie-Summen:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{E_n} F(iE_n) = \frac{\varepsilon}{2\pi i} \oint_C \frac{F(E)}{e^{\beta E} - \varepsilon} dE$$

C umschließt die (fermionischen bzw. bosonischen) Matsubara-Energien in der komplexen E-Ebene:



F(E) ist die (eindeutig bestimmte) analytische Fortsetzung der auf den Matsubara-Energien gegebenen Funktion F(iE<sub>n</sub>). F muß stärker als 1/E für E → ∞ verschwinden, damit die Summe konvergiert.

Beweis:

Die Fermi- bzw. Bose-Funktion  $\frac{1}{e^{\beta E} - \varepsilon}$  besitzt Pole

1. Ordnung an den Matsubara-Energien. Dies sieht man an der Entwicklung von  $e^{\beta E}$  um  $E = iE_n$ :

$$\begin{aligned} e^{\beta E} &= e^{\beta iE_n} + (E - iE_n) \beta e^{\beta iE_n} + \dots \\ &= \varepsilon + \varepsilon \cdot \beta \cdot (E - iE_n) + \dots \end{aligned}$$



Also:

$$\frac{1}{e^{\beta E} - \epsilon} \approx \frac{1}{\beta} \frac{\epsilon}{E - i\epsilon_n} \quad \text{für } E \rightarrow i\epsilon_n.$$

Für das Residuum folgt:

$$\text{Res}_{i\epsilon_n} \left( \frac{1}{e^{\beta E} - \epsilon} \right) = \frac{\epsilon}{\beta}$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{2\pi i} \oint_C \frac{F(E)}{e^{\beta E} - \epsilon} dE &= \epsilon \sum_{\epsilon_n} \text{Res}_{i\epsilon_n} \left( \frac{F(E)}{e^{\beta E} - \epsilon} \right) \\ &= \epsilon \sum_{\epsilon_n} \frac{\epsilon}{\beta} F(i\epsilon_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\epsilon_n} F(i\epsilon_n) \quad \checkmark \end{aligned}$$

## V Selbstenergie

In der bislang abgeleiteten Störungstheorie sind die Matsubara-Funktion und damit die Spektraldichte und dynamische Größen des wechselwirkenden Viel-Teilchen-Systems als (komplizierte) Funktionale der freien Matsubara-Funktion gegeben. Die Eigenschaften des freien Systems sind aber eigentlich ohne jede Relevanz; das freie Anregungsspektrum kann niemals experimentell bestimmt werden, da die Teilchen immer wechselwirken. Die (Coulomb-) Wechselwirkung kann strenggenommen auch nicht als schwach bezeichnet werden. Dies läßt das Konzept der Störungstheorie fragwürdig erscheinen. Einen Ausweg bietet die Methode der Partialsommen bzw. der selbstkonsistenten Renormierung.

## V A Dyson-Gleichung

Die im folgenden zu diskutierende erste Partialsummen führt zur sogenannten Dyson-Gleichung.

(Def.)

Selbstenergieeinschub:

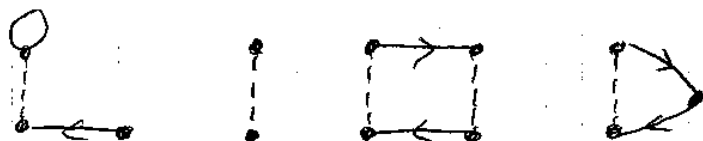
Teil eines Diagramms zur Ein-Teilchen-Matsubara-Funktion mit zwei Anschlußmöglichkeiten, eine für eine einlaufende und eine für eine auslaufende Linie.

Bsp:

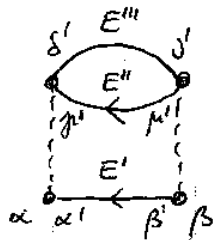
Selbstenergieeinschübe:



ungültig:



Bei einem Selbstenergieeinschub, z. B.



unterscheiden wir zwischen inneren und äußeren Variablen.

Innere Indizes sind solche, über die summiert werden kann.

(Im Bsp. alle gestrichelten). Es bleiben zwei äußere Indizes  $\alpha$  und  $\beta$ , von denen ein Selbstenergieeinschub abhängt.

Sehen wir uns jetzt die Energieerhaltung an:

Selbstenergieeinschub  $n$ -ter Ordnung

$n$  Vertizes

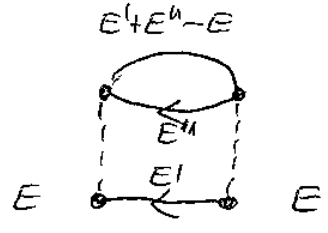
$n$  Energieerhaltungsbedingungen, davon:

1 Energieerhaltung, die ausdrückt, daß die in den Einschub einlaufende gleich der auslaufenden Energie sein muß.

$2n-1$  Propagatoren, innere Energien

$n$  freie Energievariablen

Bsp.



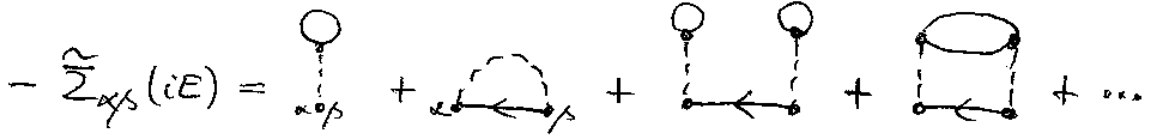
$E', E''$  frei

Also: Ein Selbstenergieeinschub hängt von 2 inneren Indizes und 1 äußeren Energie ab.

Def.

Uneigentliche (reduzible) Selbstenergie  $\tilde{\Sigma}_{\alpha\beta}(iE)$

-  $\tilde{\Sigma}_{\alpha\beta}(iE)$  = Summe der Beiträge aller Selbstenergieeinschübe mit Energie  $iE$  und Anschlussmöglichkeiten für mit  $\alpha$  und  $\beta$  beginnende bzw. endende äußere Propagatoren.

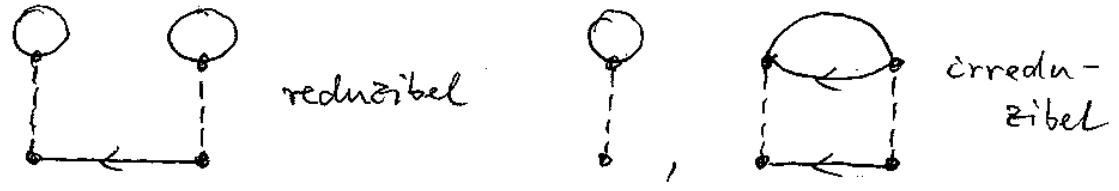


Def

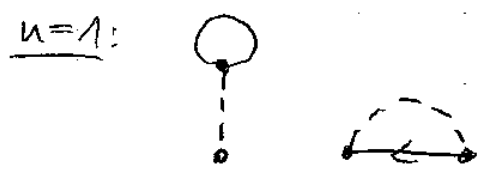
Eigentlicher (irreduzibler) Selbstenergieeinschub

Selbstenergieeinschub, der sich nicht durch Auftrennen eines Propagators in zwei Anteile zerlegen lässt.

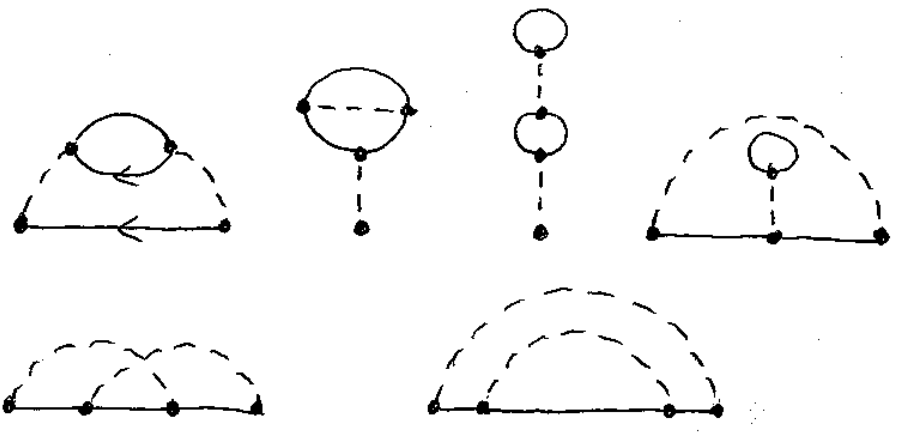
Bsp



Alle irreduziblen Selbstenergieeinschübe in Ordnung



n=2:



Def

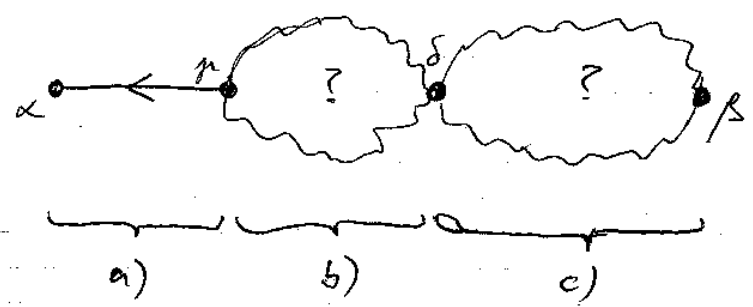
Selbstenergie  $\Sigma_{\alpha\beta}(iE)$

-  $\Sigma_{\alpha\beta}(iE)$  = Summe der Beiträge aller irreduziblen Selbstenergieeinschübe



Wir leiten jetzt die Dyson-Gleichung ab: Ein beliebiges Diagramm zur Ein-Teilchen-Natsubara-Funktion.

-  $G_{\alpha\beta}(iE)$  lässt sich offensichtlich immer in 3 Anteile zerlegen (Ausnahme: das Diagramm 0. Ordnung):



a) -  $G_{\alpha\beta}^{(0)}(iE)$

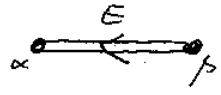
b) irreduzibler Selbstenergieeinschub

c) beliebiges Diagramm zur Natsubara-Funktion -  $G_{\beta\alpha}(iE)$

Man erhält die Matsubara-Funktion  $-G_{\alpha\beta}(iE)$ , wenn man in b) über alle corr. Selbstenergieeinschübe summiert (dies ergibt  $-\Sigma_{\alpha\beta}(iE)$ ) und in c) über alle Diagramme zu  $-G_{\alpha\beta}(iE)$ . Also:

Dyson-Gleichung

$$G_{\alpha\beta}(iE) = G_{\alpha\beta}^{(0)}(iE) + \sum_{\mu\delta} G_{\alpha\mu}^{(0)}(iE) \Sigma_{\mu\delta}(iE) G_{\delta\beta}(iE)$$

wobei wir  $-G_{\alpha\beta}(iE)$  durch das Symbol  dargestellt haben.

Bem

Hat man einen (z.B. approximativen) Ausdruck für die Selbstenergie gefunden, so kann die Matsubara-Funktion durch Lösen der Dyson-Gleichung bestimmt werden:

Inversion:

$$\underline{G}(iE) = \underline{G}^{(0)}(iE) + \underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}(iE) \underline{G}(iE)$$

(Matrixschreibweise)

$$\Rightarrow \underline{G}(iE) = (\mathbb{1} - \underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}(iE))^{-1} \underline{G}^{(0)}(iE)$$

$$\underline{G}(iE) = \frac{\mathbb{1}}{\frac{\mathbb{1}}{\underline{G}^{(0)}(iE)} - \underline{\Sigma}(iE)}$$

Iteration:



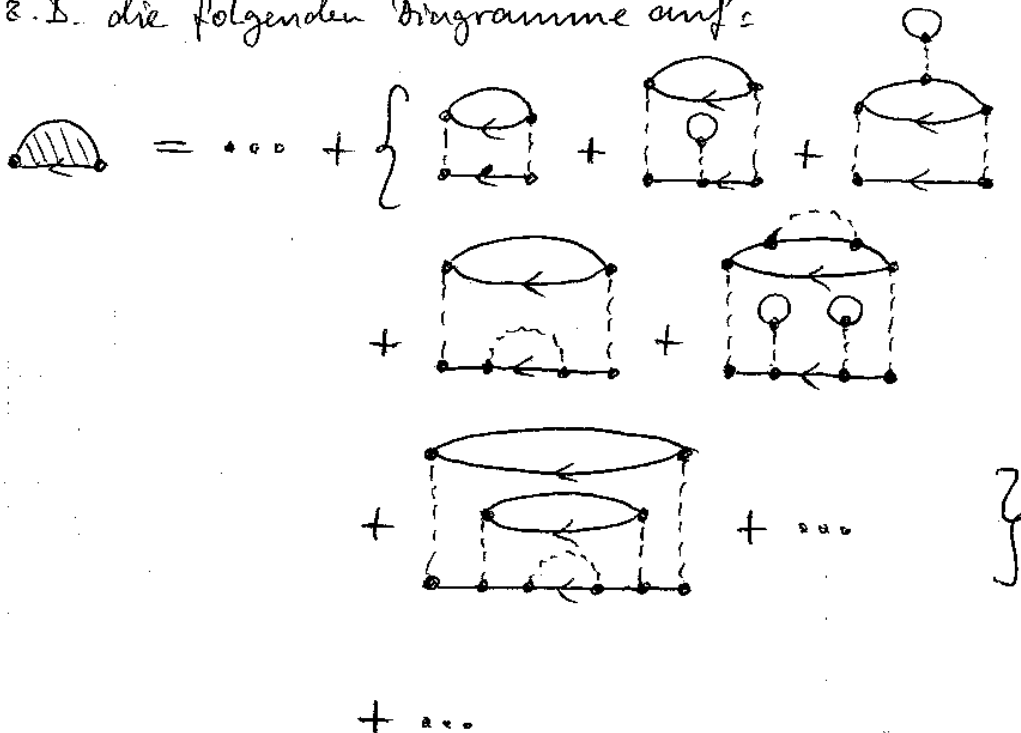
Mit Hilfe der Dyson-Gleichung summiert man eine unendliche Teilreihe von Diagrammen auf (Partialsunne),


V B Skelett-Diagramme, selbstkonsistente

Renormierung

Die Dyson-Gleichung ermöglicht es, die Matsubara-Funktion durch die Selbstenergie auszudrücken. Eine weitere Vereinfachung durch Bilden von Partialsummen werden wir jetzt vornehmen.

In der Diagrammdevelopment für  $-\Sigma_{\text{qs}}(iE)$  treten z.B. die folgenden Diagramme auf:



Man erhält diese Untermenge von Diagrammen, wenn man in den Propagatoren des Ausgangsdiagramms, hier  mehr und mehr Selbstenergieeinschübe einbaut.

Es gilt offenbar:

$$\text{diagram} = \dots + \left\{ \text{diagram with self-energy} \right\} + \dots$$

wobei

$$\text{diagram with self-energy} = \text{diagram} + \text{diagram with bubble} + \dots$$

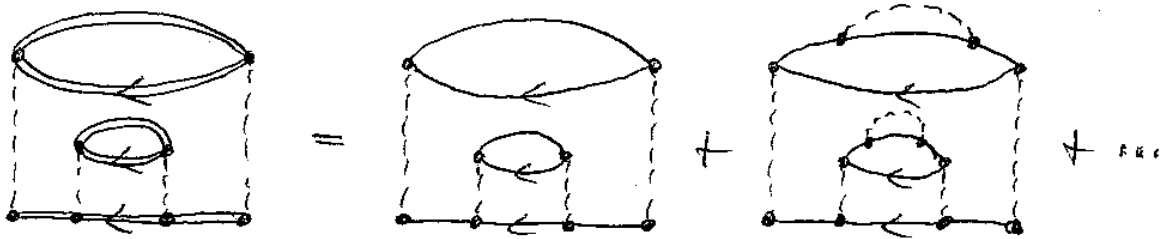
Dieser "Trick" kann auf die gesamte Diagrammreihe angewendet werden und führt zu einer deutlichen Vereinfachung:


$$\begin{aligned} \text{diagram} &= \text{diagram} + \text{diagram} && (n=1) \\ &+ \text{diagram} + \text{diagram} && (n=2) \\ &+ \dots && (n \geq 3) \end{aligned}$$

Nur je 2 Diagramme sind für  $n=1$  und  $n=2$  zu berücksichtigen!

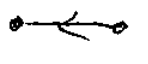
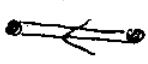


Es muss darauf geachtet werden, dass kein Diagramm doppelt gezählt wird. Z.B. tritt das Diagramm



nicht in der vereinfachten Reihe auf, denn es ist bereits in  enthalten.

**Def-** Ein Selbstenergiediagramm heißt ein Skelett, falls es ausschließlich aus Propagatoren aufgebaut wird, die keine Selbstenergieeinschrübe beinhalten.

**Def-** Ein angezogenes Skelett ist ein Skelett aus der Entwicklung der Selbstenergie, bei dem jeder seiner Propagatoren  durch , also durch die wechselwirkende Ein-Teilchen-Hatsubara-Funktion ersetzt ist.

Es gilt:

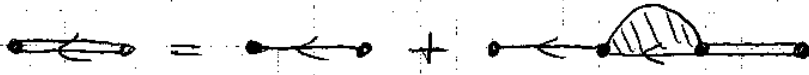
Selbstenergie = Summe aller  
angezogenen Skelette

Natürlich ist der wechselwirkende Propagator nicht bekannt. Er muss aus der Dyson - Gleichung erst bestimmt werden.

Damit sind



und



gleichzeitig zu lösen. Dies kann iterativ geschehen, bis bei Selbstkonsistenz abgebrochen werden kann. Das gesamte Verfahren heißt demnach selbstkonsistente Renormierung.

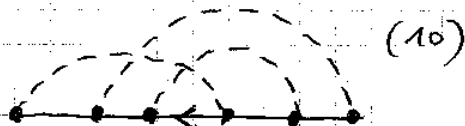
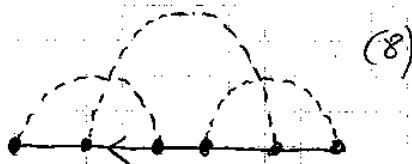
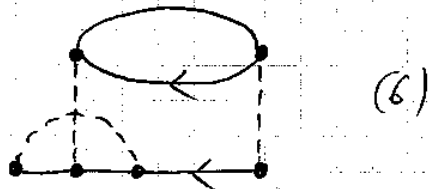
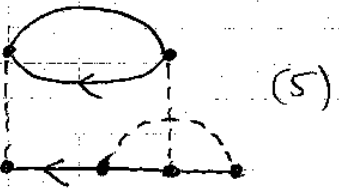
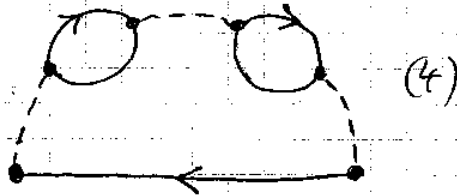
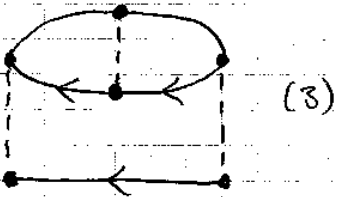
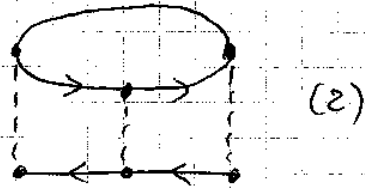
Bem

Die Doppellinien in der Skelett-Diagramm-Entwicklung werden oft ausgelassen und durch einfache Linien ersetzt. Dabei wird vereinbart, daß alle Propagatoren bereits angezogen sind.

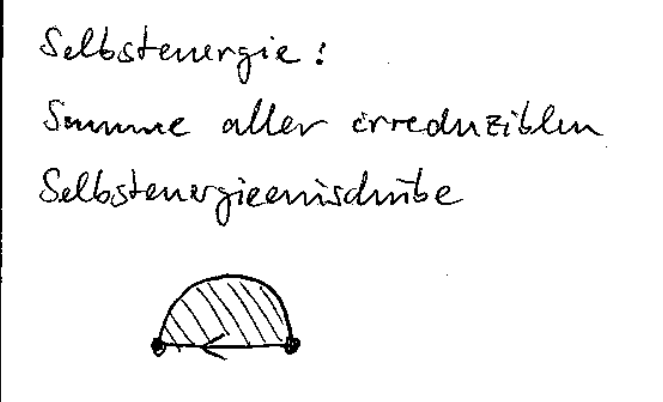
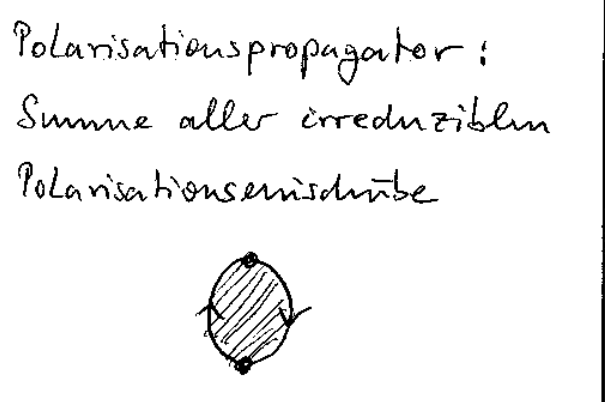
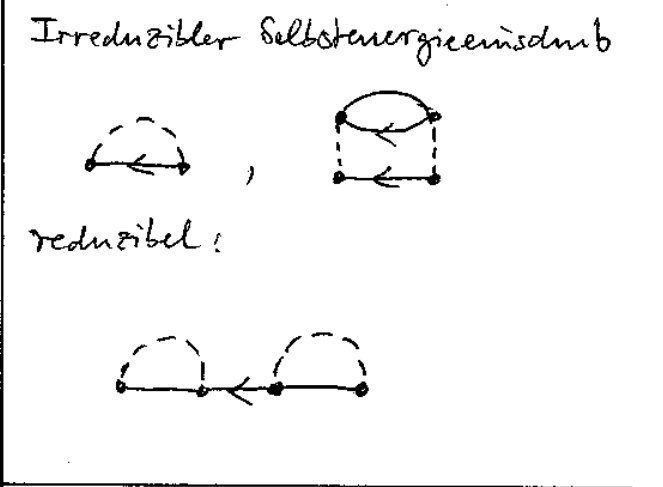
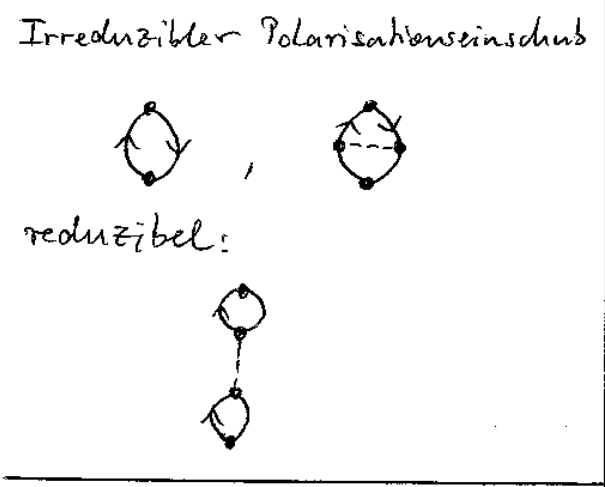
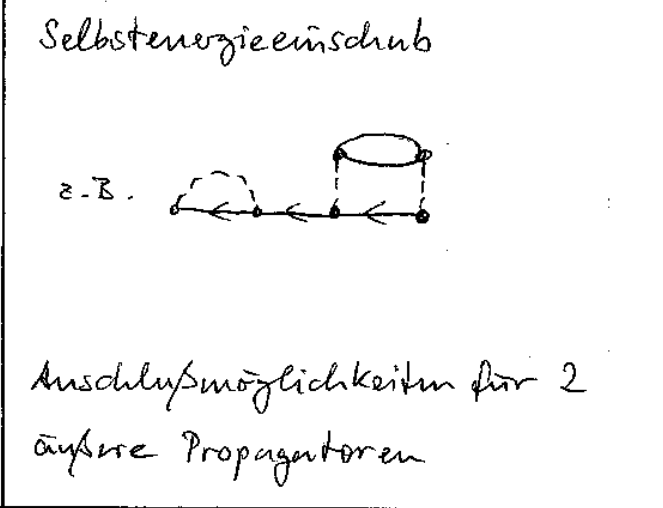
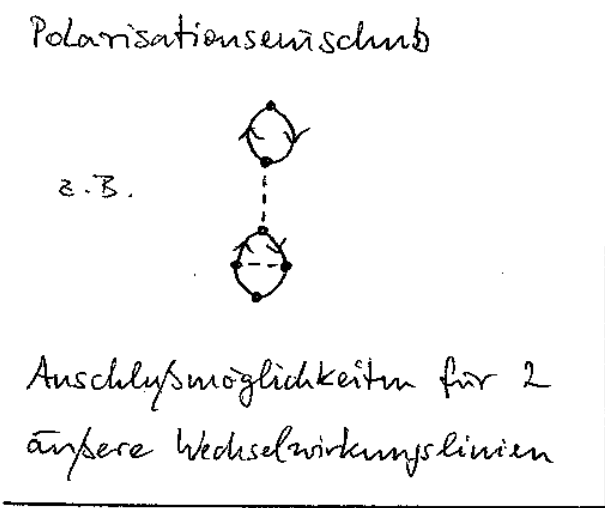
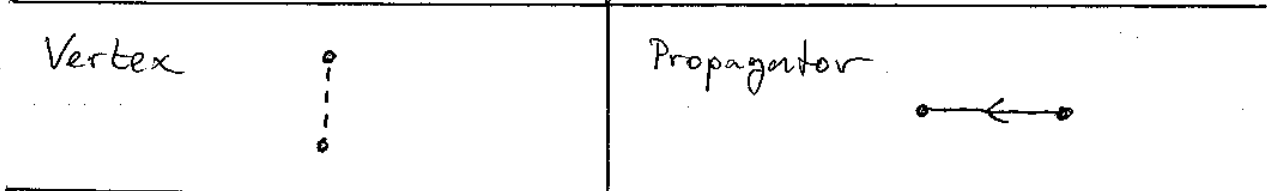
Bsp.

113

# Alle Skelett-Diagramme in 3. Ordnung



Als weiteres Beispiel für selbstkonsistente Renormierung diskutieren wir (schematisch) die angezogene oder effektive Wechselwirkung:



Effektive (angezogene) Wechselwirkung:

Summe aller Diagramme der Form



Wechselwirkender Propagator

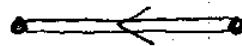
Summe aller Diagramme der Form



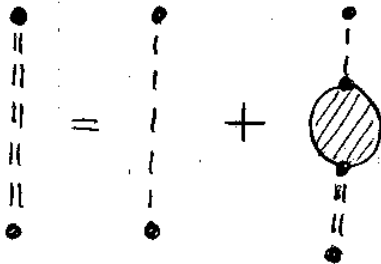
Symbol:



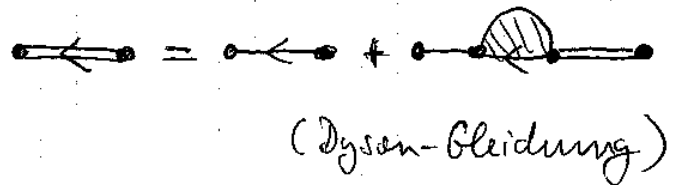
Symbol:



Zerlegung der effektiven WW:



Zerlegung des ww Propagators:



(Dyson-Gleichung)

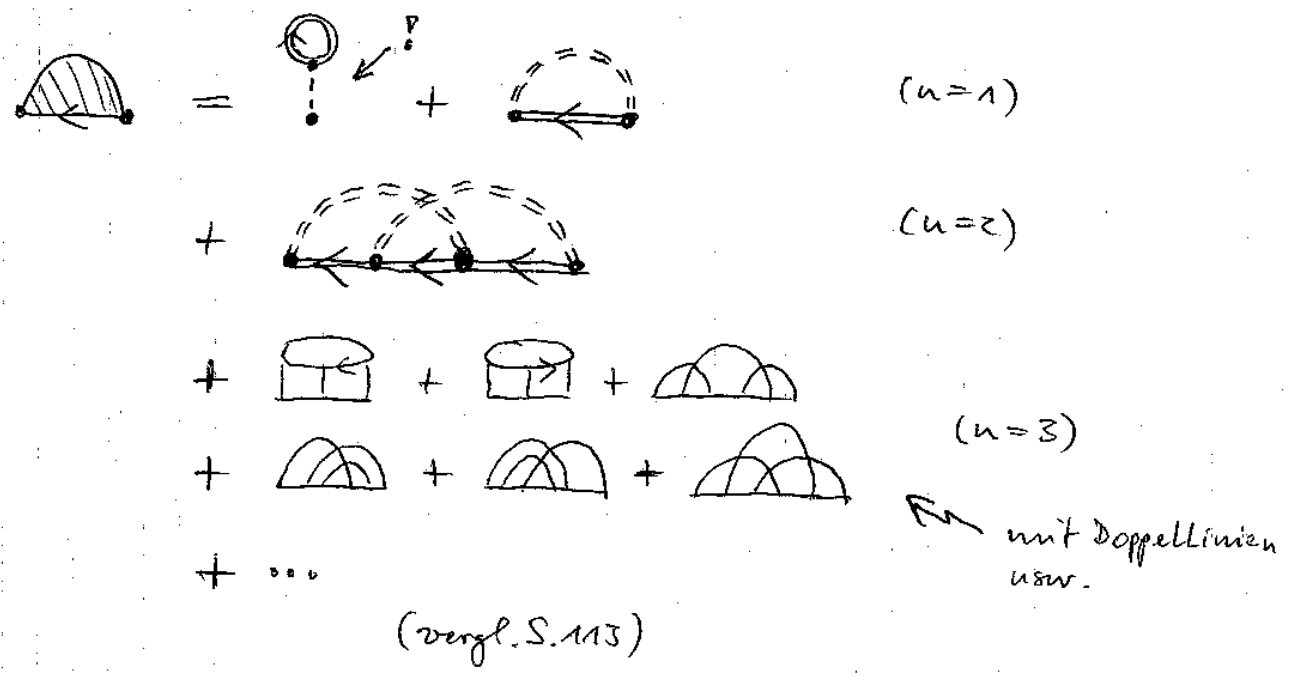
Entfernen aller Polarisations-einschlüsse aus einem Diagramm des Polarisationspropagators  
→ Skelett

Entfernen aller Selbstenergie-einschlüsse aus einem Diagramm der Selbstenergie  
→ Skelett

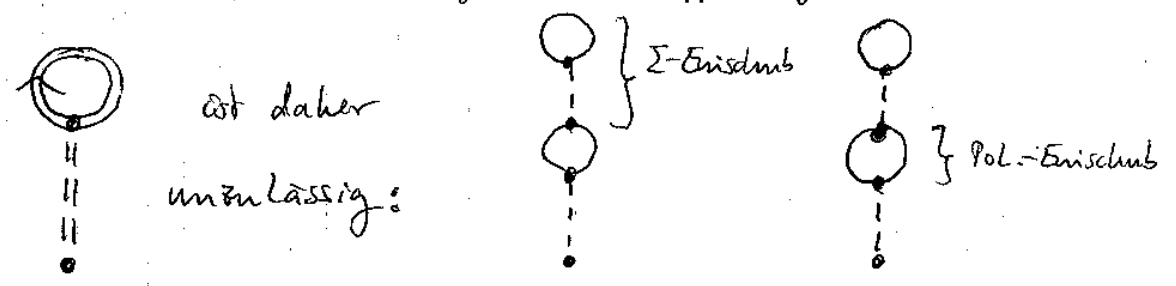
Polarisationspropagator = Summe aller angezogenen Skelette

Selbstenergie = Summe aller angezogenen Skelette

Man kann auch weiter gehen und alle Polarisations-einschrübe aus Selbstenergiediagrammen bzw. alle Selbstenergie-einschrübe aus Polarisationspropagator-Diagrammen entfernen, um dann anschließend die entstandenen Skelette wieder anzuziehen. Man erhält z.B.

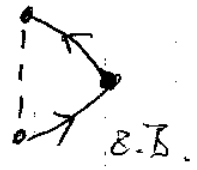


Beim Verfahren der selbstkonsistenten Renormierung ist stets zu beachten, daß kein Diagramm doppelt gezählt wird.



Weitere Renormierungen lassen sich auch durch die Definition von Vertex-Einschrüben konstruieren.

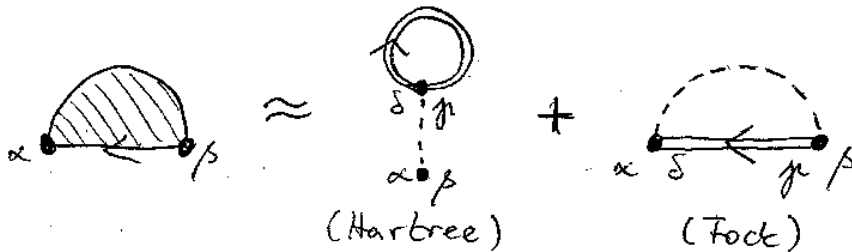
Vertex-Einschrübe: Diagramm mit Anschlußmöglichkeiten für zwei äußere Propagatoren und einer äußeren Wechselwirkungslinie



# VC Einfache Approximationen

Einfache Näherungen für die Selbstenergie erhält man, wenn man die Skelett-Diagramm-Entwicklung nach endlich vielen Termen abbricht.

## 1) Hartree-Fock-Theorie



Abbrechen nach der 1. Ordnung ergibt die fieldtheoretische Version der Hartree-Fock-Theorie. Die gewöhnliche HF-Theorie erhält man als Spezialfall  $T=0$ .

- Hartree-Term: ( $\varepsilon = -1$ )

$$-\sum_{\alpha\beta}^{(H)}(iE) = (-1)(-1) \sum_{\mu\delta} \sum_{E'} \left( -G_{\mu\delta}(iE') e^{iE'0^+} \right) \frac{1}{\beta} v(\alpha\delta/\mu)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{E'} G_{\mu\delta}(iE') e^{iE'0^+} & \stackrel{S.50}{=} G_{\mu\delta}(-0^+) \stackrel{S.43}{=} -\langle T_{\varepsilon}(c_{\mu}(-0^+) c_{\delta}^{\dagger}(0)) \rangle \\ & = -\varepsilon \langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\mu} \rangle \stackrel{\varepsilon=-1}{=} \langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\mu} \rangle \end{aligned}$$

$$\sum_{\alpha\beta}^{(H)}(iE) = \sum_{\alpha\beta}^{(H)} = \sum_{\mu\delta} v(\alpha\delta/\mu) \langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\mu} \rangle$$

• Fock-Term:

$$-\sum_{\alpha\beta}^{(F)}(iE) \equiv (-1) \sum_{\mu\delta} \sum_{E'} (-G_{\delta\mu}(iE') e^{iE'0^+}) \frac{1}{\beta} v(\alpha\mu\delta\beta)$$

$$\sum_{\alpha\beta}^{(F)}(iE) = \sum_{\alpha\beta}^{(F)} = - \sum_{\mu\delta} v(\alpha\delta\mu\beta) \langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\mu} \rangle$$

Die Hartree - Fock - Selbstenergie

$$\sum_{\alpha\beta}^{(HF)}(iE) = \sum_{\mu\delta} (v(\alpha\delta\mu\mu) - v(\alpha\delta\mu\beta)) \langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\mu} \rangle$$

ist energienunabhängig und reell, Der Erwartungswert  $\langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\mu} \rangle$  muss selbstkonsistent bestimmt werden:

$$\langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\mu} \rangle \rightarrow \sum_{\alpha\beta}^{(HF)} \xrightarrow{\text{Dyson-Gleichung}} G_{\alpha\beta}(iE) = \left( \frac{1}{\tilde{G}^{(0)-1}(iE) - \sum_{\alpha\beta}^{(HF)}} \right)_{\alpha\beta}$$

$$\langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\mu} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{E'} G_{\mu\delta}(iE') e^{iE'0^+}$$

Bisweilen ist es günstiger, den Erwartungswert auf andere Weise zu berechnen:

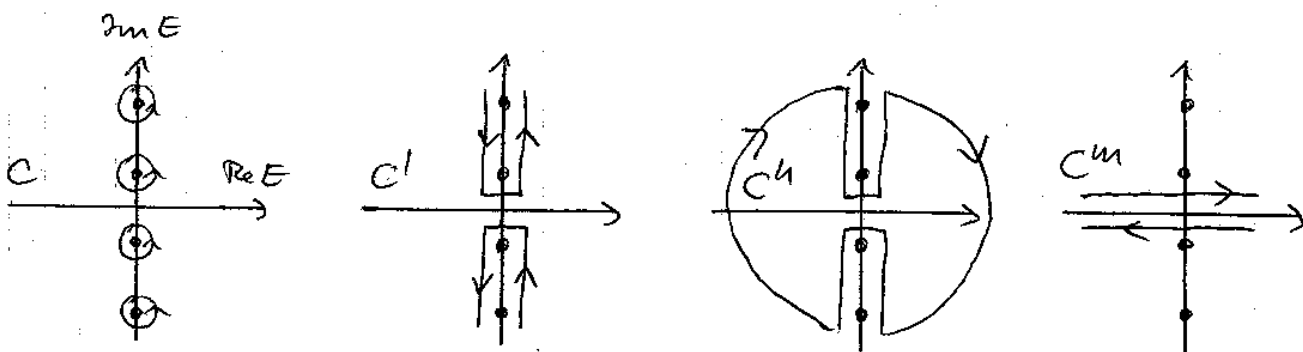
$$\langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\alpha} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_E G_{\alpha\beta}(iE) e^{iE0^+}$$

$$\stackrel{S.102}{=} \int_{\epsilon=-1}^{-1} \frac{-1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{e^{\beta E} + 1} G_{\alpha\beta}(E) e^{E0^+} dE$$

Auf der imaginären Achse ist  $e^{E0^+}$  oszillierend, so daß das Integral konvergiert. Auf der reellen Achse sorgt



$e^{E0^+}$  für  $E \rightarrow -\infty$  und die Fermi-Funktion für  $E \rightarrow +\infty$  für Konvergenz. Wir transformieren  $C \rightarrow C^I \rightarrow C^H \rightarrow C^M$ :



Also:

$$\begin{aligned} \langle C_p^\dagger C_\alpha \rangle &= \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{e^{\beta E + 1}} \left[ G_{\alpha p}(E + i0^+) - G_{\alpha p}(E - i0^+) \right] e^{E0^+} \\ &\stackrel{S.54}{=} -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{e^{\beta E + 1}} \text{Im} G_{\alpha p}(E + i0^+) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{e^{\beta E + 1}} A_{\alpha p}(E) \end{aligned}$$

$\Sigma_{\alpha p}^{(HF)}$  ist eine reelle Konstante. In HF ist der einzige Effekt der Coulomb-Wechselwirkung eine Modifikation der Ein-Teilchen-Hopping-Parameter  $t_{\alpha p}$ . In der Tat führt der effektive (Ein-Teilchen-) Hamilton-Operator

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\alpha p} \underbrace{(t_{\alpha p} + \Sigma_{\alpha p}^{(HF)})}_{\tilde{t}_{\alpha p}} c_\alpha^\dagger c_p$$

zum gleichen Resultat für die Green-Funktion:

$$\tilde{G}_{\alpha p}(E) = \frac{1}{\tilde{G}_{\alpha p}^{(0)-1}(E) - \Sigma_{\alpha p}^{(HF)}} = \frac{1}{E - (\tilde{t}_{\alpha p} - \mu) - \Sigma_{\alpha p}^{(HF)}} = \frac{1}{E - (\tilde{E}_{\alpha p} - \mu)}$$

$$\left( G_k^{(0)}(E) = \frac{1}{E - (E(k) - \mu)} \xrightarrow[\text{Transform.}]{\text{unitäre}} \tilde{G}^{(0)}(E) = \frac{1}{E - (\frac{t}{\hbar} - \mu)} \right) \quad (120)$$

**Bem.** Im Hubbard-Modell verschwindet der Fock-Term, da nur Fermionen unterschiedlichem Spin ( $\uparrow, \downarrow$ ) miteinander wechselwirken (S. 17). Weiter ist die Wechselwirkung lokal, nur  $v(i, i) \neq 0, = U$

$$\sum_{ijc}^{(HF)} G_{ijc}(E) = \delta_{ij} U \langle n_{ic} \rangle \quad (\text{Hubbard-Modell})$$

**Bem.** Man kann  $\circlearrowleft$  als das mittlere Potential interpretieren, das von allen Teilchen erzeugt wird und das auf das Test-Teilchen wirkt. Was aber ist dann mit Termen wie

wie  $\begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \downarrow \\ \alpha \circ \alpha \end{array}$  (Selbstwechselwirkungsterme),

die in dem Ausdruck für  $\sum_{\alpha c}^{(HF)}$  vorkommen?

Es ist:

$$\begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \downarrow \\ \alpha \circ \alpha \end{array} = - \begin{array}{c} \text{---} \\ \alpha \circ \alpha \quad \alpha \circ \alpha \end{array}$$

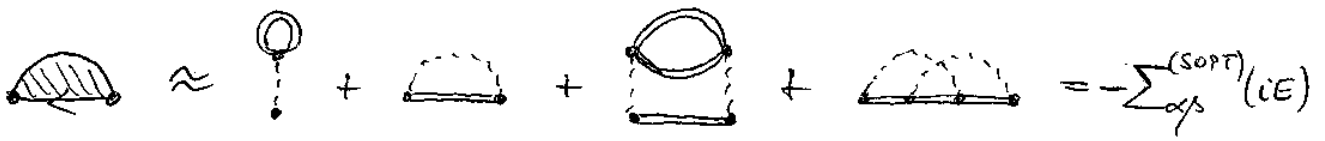
Selbstwechselwirkungsterme heben sich heraus. Letztlich ist dies eine Konsequenz des Pauli-Prinzips.

→ Das Pauli-Prinzip kann in einer Approximation verletzt werden, in der nur eine Untmenge von Diagrammen aufsummiert wird.

## 2) Selbstkonsistente Störungstheorie 2. Ordnung

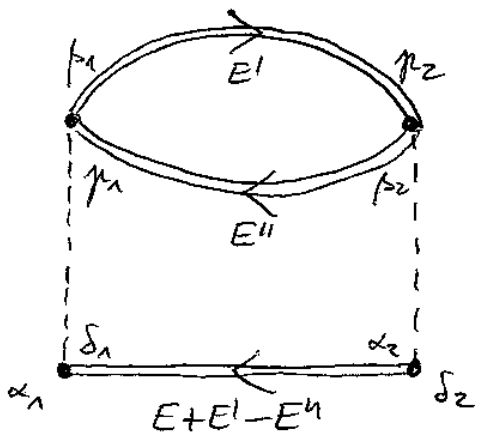
Die Terme 2. Ordnung in der Skelett-Diagramm-Entwicklung der Selbstenergie beschreiben die ersten nicht-trivialen Viel-Teilchen-Effekte.

Wir berechnen die Selbstenergie in selbstkonsistenter Störungstheorie 2. Ordnung:



$$\text{Diagram} \approx \text{Diagram} + \text{Diagram} + \text{Diagram} + \text{Diagram} = -\sum_{\alpha\beta}^{(2,0)}(iE)$$

Zunächst das "direkte" Diagramm 2. Ordnung

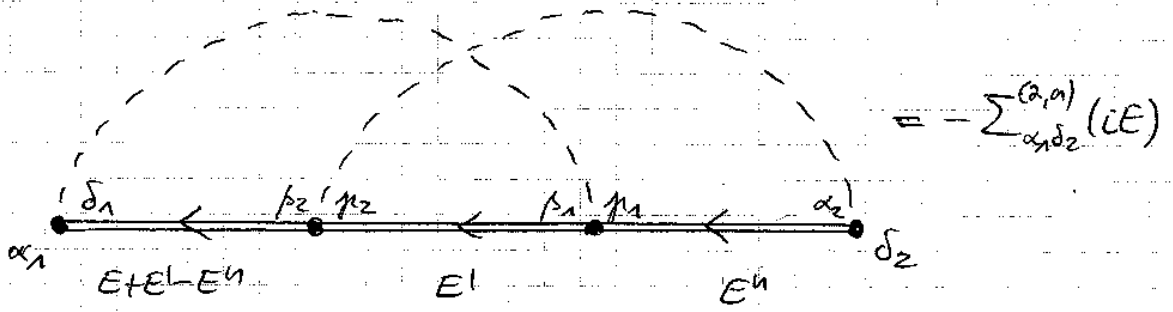
$$-\sum_{\alpha_1 \delta_2}^{(2,d)}(iE) =$$


$$-\sum_{\alpha_1 \delta_2}^{(2,d)}(iE) = (-1)^2(-1) \sum_{E^l E^h} \sum_{\beta_1 \gamma_2} \frac{1}{\beta_2} V(\alpha_1 \beta_1 \delta_1 \gamma_1) V(\alpha_2 \beta_2 \delta_2 \gamma_2) \times$$

$$\times \underbrace{\delta_{E^h + (E+E^l-E^h), E+E^l}}_1 (-1)^3 G_{\delta_1 \alpha_2}(iE+E^l-E^h) G_{\gamma_2 \beta_1}(iE^l) G_{\gamma_1 \beta_2}(iE^h)$$

$$\sum_{\alpha_1 \delta_2}^{(2,d)}(iE) = \sum_{\beta_1 \gamma_2} V(\alpha_1 \beta_1) V(\alpha_2 \gamma_2) \cdot I_{\delta_1 \alpha_2, \beta_2 \beta_1, \gamma_1 \beta_2}(iE)$$

"Austausch - Diagramm"



$$\sum_{\alpha_1, \alpha_2}^{(2, n)} (iE) = - \sum_{\beta_1, \gamma_2} v(\alpha_1, \gamma_1) v(\alpha_2, \gamma_2) \cdot I_{\delta_1, \beta_2, \gamma_2, \beta_1, \gamma_1, \alpha_2} (iE)$$

Die Energiesummen sind zusammengesetzt mit:

$$I_{1,2,3} (iE) \equiv \frac{-1}{\beta^2} \sum_{E^L, E^H} G_1 (iE + iE^L - iE^H) G_2 (iE^L) G_3 (iE^H)$$

mit  $G_{1(2,3)} (iE) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{1(2,3)}(x)}{iE - x} dx$  Spektraldarstellung (S. 53)

Kann man schreiben:

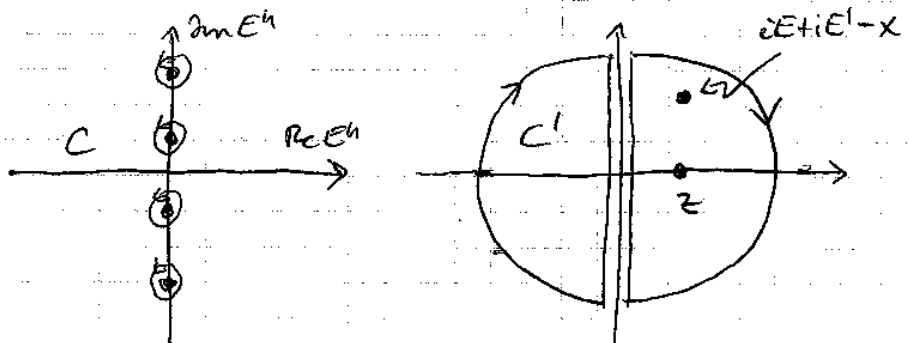
$$I_{1,2,3} (iE) = - \iiint_{-\infty}^{\infty} dx dy dz A_1(x) A_2(y) A_3(z) \cdot F(iE, x, y, z)$$

$$F(iE, x, y, z) = \frac{1}{\beta^2} \sum_{E^L, E^H} \frac{1}{iE + iE^L - iE^H - x} \frac{1}{iE^L - y} \frac{1}{iE^H - z}$$

$$\stackrel{S. 102}{=} \frac{1}{\beta} \sum_{E^L} \frac{1}{iE^L - y} \frac{-1}{2\pi i} \oint_C f(E^H) \frac{1}{iE + iE^L - E^H - x} \frac{1}{E^H - z} dE^H$$

Wir transformieren

$$C \rightarrow C'$$



Anwendung des Residuumsatzes:

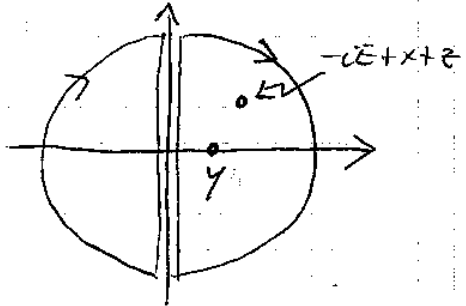
$$F(iE, x, y, z) = \frac{1}{\beta} \sum_{E'} \frac{1}{iE' - y} \left[ f(z) \frac{1}{iE' + iE' - z - x} + f(iE' + iE' - x) \frac{(-1)}{iE' + iE' - x - z} \right]$$

Es ist:

$$f(iE' + iE' - x) = f(-x), \text{ also:}$$

bosonisch!

$$\begin{aligned} F(iE, x, y, z) &= \frac{1}{\beta} \sum_{E'} \frac{1}{iE' - y} (f(z) - f(-x)) \frac{1}{iE' + iE' - x - z} \\ &= (f(z) - f(-x)) \frac{-1}{2\pi i} \oint_C f(E') \frac{1}{E' - y} \frac{1}{iE' + E' - x - z} dE' \\ &= (f(z) - f(-x)) (f(y) - f(x+z-iE)) \frac{1}{iE + y - x - z} \end{aligned}$$



$$f(-iE+x+z) = \frac{1}{e^{\beta(-iE+x+z)} + 1}$$

↑  
fermionisch

$$= \frac{1}{-e^{\beta(x+z)} + 1}$$

(b: Bose-Fakt.)

$$= -\frac{1}{e^{\beta(x+z)} - 1} \equiv -b(x+z)$$

$$= (f(z) - f(-x)) (f(y) + b(x+z)) \frac{1}{iE - x + y - z}$$

$$\begin{aligned} (f(z) - f(-x)) b(x+z) &= f(z) \left[ 1 - \frac{e^{\beta z} + 1}{e^{\beta x} + 1} \right] \frac{1}{e^{\beta x} e^{\beta z} - 1} \\ &= f(z) \frac{e^{\beta x} - e^{\beta z}}{e^{\beta x} + 1} \frac{e^{\beta x}}{e^{\beta z} - e^{\beta x}} = -f(z) \frac{1}{1 + e^{\beta x}} = -f(x) f(z) \end{aligned}$$

$$= \left[ f(y) f(z) - f(-x) f(y) - f(x) f(z) \right] \frac{1}{iE - x + y - z}$$

Mit  $f(x) + f(-x) = 1$  gilt:

$$\begin{aligned}
& f(y)f(z) - f(-x)f(y) - f(x)f(z) \\
&= f(x)f(y)f(z) + f(-x)f(y)f(z) \\
&- f(-x)f(y)f(z) - f(-x)f(y)f(-z) \\
&- f(x)f(y)f(z) - f(x)f(-y)f(z) \\
&= -(f(x)f(-y)f(z) + f(-x)f(y)f(-z))
\end{aligned}$$

und damit:

$$F(iE, x, y, z) = - \frac{f(x)f(-y)f(z) + f(-x)f(y)f(-z)}{iE - x + y - z}$$

und:

$$I_{1,2,3}(iE) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [f(x)f(-y)f(z) + f(-x)f(y)f(-z)] \frac{A_1(x)A_2(y)A_3(z)}{iE - x + y - z}$$

Die Selbstenergie ist also gegeben durch:

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha\beta}^{(SOPT)}(iE) &= \sum_{\alpha\beta}^{(1)}(iE) + \sum_{\alpha\beta}^{(2,d)}(iE) + \sum_{\alpha\beta}^{(2,m)}(iE) \\
&= \sum_{\mu\nu\delta_1} [v(\alpha\delta_1\beta\mu) - v(\alpha\delta_1\mu\beta)] \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\mu} \rangle \\
&+ \sum_{\mu\nu\delta_1} \sum_{\alpha\beta\gamma_2} v(\alpha\beta\delta_1\mu) v(\alpha\gamma_2\beta\gamma_2) \cdot [I_{\delta_1\alpha_2\mu\beta\mu_1\mu_2}(iE) - I_{\delta_1\beta_2\mu\beta\mu_1\mu_2}(iE)]
\end{aligned}$$

wobei die Ein-Teilchen-Spektraldichte  $A_{\alpha\beta}(x)$  (in  $I_{1,2,3}$ ) noch selbstkonsistent zu bestimmen ist:

$$\underline{\Sigma}(iE) \longrightarrow \underline{\underline{G}}(iE) = \frac{1}{\underline{\underline{G}}^{(0)-1}(iE) - \underline{\Sigma}(iE)}$$



$$\underline{A}(E) = -\frac{1}{2} \text{Im} \underline{\underline{G}}(E+i0^+) \longleftarrow \underline{\underline{G}}(E+i0^+) = \frac{1}{\underline{\underline{G}}^{(0)-1}(E+i0^+) - \underline{\Sigma}(E+i0^+)}$$

Die sogenannte retardierte Selbstenergie  $\underline{\Sigma}^{\text{ret}}(E) = \underline{\Sigma}_{\alpha\beta}(E+i0^+)$  erhält man wie die retardierte Green-Funktion durch die analytische Fortsetzung  $iE \mapsto E+i0^+$

Einen etwas einfacheren Ausdruck für die retardierte Selbstenergie im SDPT erhält man im Hubbard-Modell

$$(V(\alpha\beta\gamma\delta) = U \cdot \delta_{i\alpha i\beta} \delta_{i\alpha i\gamma} \delta_{i\alpha i\delta} \cdot \delta_{i\alpha - i\beta} \delta_{i\alpha i\gamma} \delta_{i\alpha i\delta}, \quad \alpha \leftrightarrow (i_\alpha, \alpha_\alpha))$$

$$\underline{\Sigma}_{ij\delta}^{(\text{SDPT})}(E+i0^+) = \delta_{ij} U \langle n_{i-\delta} \rangle$$

$$+ U^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz [f(x)f(y)f(z) + f(-x)f(y)f(-z)] \frac{A_{ij\delta}(x)A_{j-\delta}(y)A_{j-\delta}(z)}{E+i0^+ - x + y - z}$$

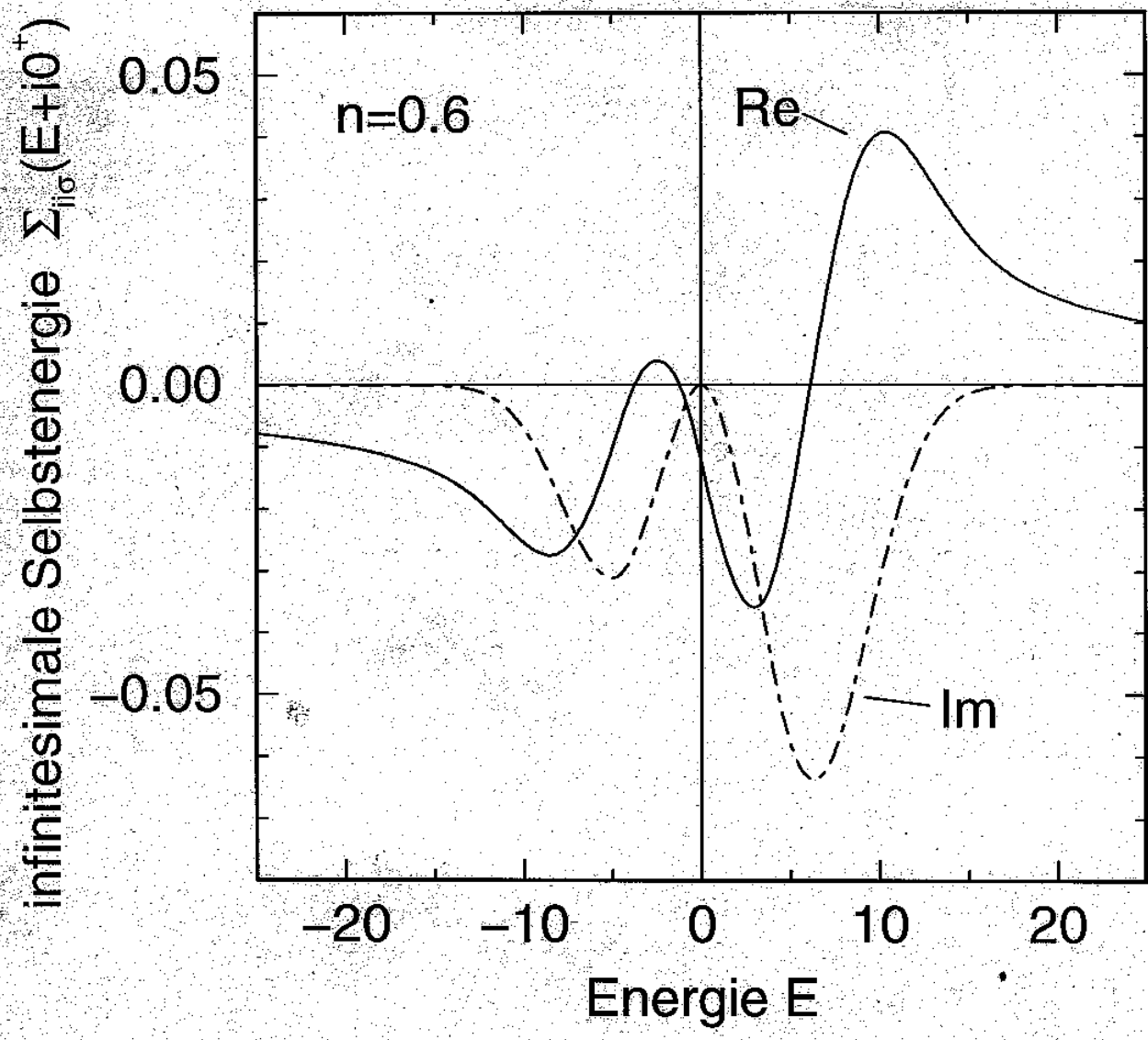
(das "Austausch-Diagramm" in Ordnung  $U^2$  verschwindet)

Im Grenzfall  $U \rightarrow 0$ ,  $U \neq 0$  ist dies exakt. Die retardierte Selbstenergie ist also i. allg. nicht-diagonal in den Indizes der Ein-Teilchen-ONB, energieabhängig und komplex.

Eine selbstkonsistente Bestimmung der Spektraldichte gelingt nur mit Hilfe numerischer Auswertung.

Bsp.

121



$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dE^2} \Sigma_{ii}(E+i0^+) \Big|_0$  ("infinitesimale Selbstenergie")

im Hubbard-Modell

- dreidimensionales s.c. Gitter
- Temperatur  $T=0$
- mittlere Teilchendichte  $n = \frac{\langle N \rangle}{N_{\text{Gitter}}} = 0.6$
- Nächst-Nachbar-Hopping  $t = -1$



## VD Quasiteilchen - Konzept

Oft ist eine vollständige Kenntnis der Spektraldichte nicht notwendig. In vielen Fällen reicht es aus, sich auf einen kleinen Energiebereich nahe der Fermi-Energie zu beschränken. Wesentliche Systemeigenschaften werden hier bestimmt (Pauli-Prinzip!, s. auch S. 33 ff.).

Zur Diskussion des damit verbundenen Quasiteilchen-Konzepts werden wir insbesondere den Grenzfall  $T \rightarrow 0$  betrachten. Der Einfachheit halber beschränken wir uns von jetzt ab ausschließlich auf Systeme wechselwirkender Fermionen. Die Behandlung von Bose-Flüssigkeiten für  $T=0$  und kleine Temperaturen ist dagegen erheblich aufwendiger. Der Grund dafür liegt in der Bose-Einstein-Kondensation, die schon in nicht-wechselwirkendem System (Bose-Gas) unterhalb einer kritischen Temperatur eintritt. Schwierigkeiten ergeben sich aus der Notwendigkeit, das Ein-Teilchen-Niveau mit niedrigerer Energie gesondert behandeln zu müssen. Siehe dazu auch:

Abrikosov, Gorkov, Dzyaloshinski

"Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics", Dover, 1963.

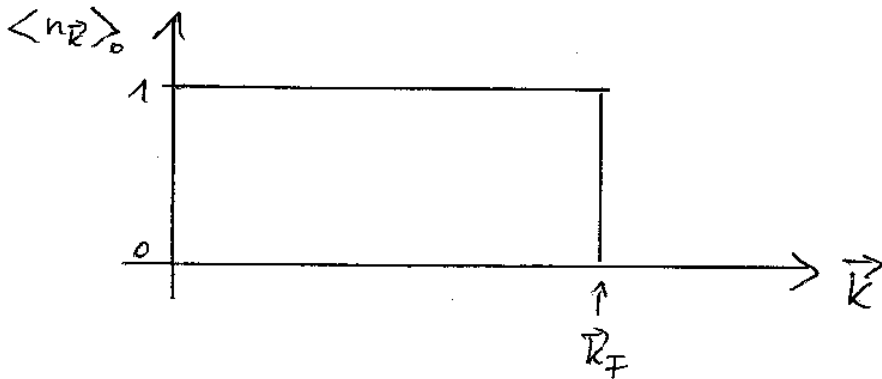
# 1) Fermi-Fläche im freien System

Für die mittlere Besetzungszahl in einem idealen Fermi-Gas ( $v=0$ ) hatten wir gefunden (S.22):

$$\langle n_k \rangle_0 = f(\epsilon(k) - \mu_0) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(k) - \mu_0)} + 1}$$

Der Index "0" soll anzeigen, dass  $v=0$ . Die Fermi-Funktion gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Ein-Teilchen-Zustand  $|k\rangle$  bei Temperatur  $T$  besetzt ist. Betrachten wir den Fall eines Ein-Band-Modells (z.B. Hubbard-Modell). Für  $T=0$  ist

$$f(\epsilon(k) - \mu_0) = \Theta(\mu_0 - \epsilon(k)).$$



Nur wegen der Unstetigkeit der Fermi-Verteilungsfunktion bei  $\vec{k} = \vec{k}_F$  und für  $T=0$  macht es Sinn, eine Fermi-Fläche (im  $\vec{k}$ -Raum) durch

$$\{ \vec{k} \mid \epsilon(\vec{k}) \stackrel{!}{=} \mu_0 = \epsilon_F^{(0)} \}$$

zu definieren.

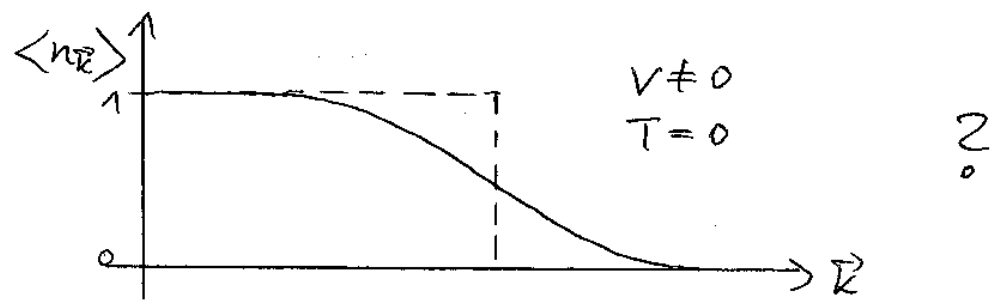
Fermi

Wenn Band- und Sprünghöhen  $r$  und  $\sigma$  zusätzlich betrachtet werden (Multi-Band-Modell,  $k = (\vec{k}, r, \sigma)$ ) haben wir mehrere Fermi-Flächen, definiert durch:

$$\{ \vec{k} \mid \epsilon_{r\sigma}(\vec{k}) \stackrel{!}{=} \mu_0 \} \quad r = 1, 2, \dots$$

Was passiert mit dem Konzept der Fermi-Fläche in einem System wechselwirkender Fermionen?

Da typische Werte für  $\epsilon_F^{(0)}$  und  $v$  von vergleichbarer Größe sind ( $\sim 5\text{eV}$ ), könnte man annehmen, dass die Wechselwirkung eine starke Umverteilung von Teilchen aus besetzten Zuständen unterhalb  $\vec{k}_F$  in unbesetzte oberhalb  $\vec{k}_F$  bewirkt und dass die Fermi-Fläche stark ausgedünnt wird:



Dies steht aber im Widerspruch zu experimentellen Befunden, die auf eine deutliche Unstetigkeit der Verteilungsfunktion (innerhalb von  $\sim 10^{-4}\text{eV}$ ) für  $T \rightarrow 0$  hinweisen. Die Frage ist also: Woher kommt diese Unstetigkeit? Bzw.: Unter welchen Bedingungen existiert eine Fermi-Fläche?

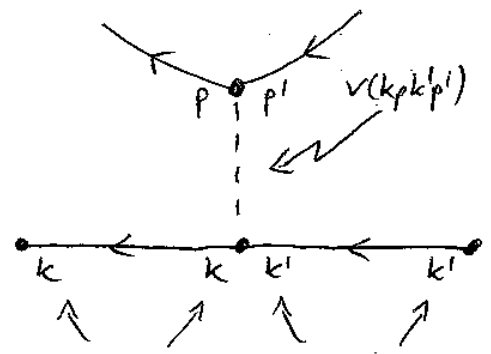
## 2) Impuls- und Bandindexabhängigkeit von Green-Funktion und Selbstenergie

Diese Frage soll für den allgemeinen Fall eines oder mehrerer Bänder diskutiert werden. Dazu ein paar Vorbereitungen:

In der Ein-Teilchen-ONB  $\{|k\rangle\} = \{|E_{\vec{k}}\rangle\}$  ist  $\mathcal{H}_0$  und damit auch  $\underline{G}^{(0)}$  diagonal:

$$G_{kk'}^{(0)}(E) = \delta_{kk'} G_k^{(0)}(E)$$

Für die wechselwirkende Green-Funktion und auch für die Selbstenergie und die Spektraldichte gilt dies i. allg. nicht mehr. Diese Größen sind also zweifach zu indizieren: z. B.  $G_{kk'}(E)$  oder  $G_{kk'}(E)$ .

$$-G_{kk'}(iE) = \dots +$$


$$+ \dots$$

$\underline{G}^{(0)}$  diagonal

Für ein translationsinvariantes Gitter haben wir die folgende Vereinfachung:

$$\begin{aligned}
v(k_p k_{p'}) &= v(\vec{k}_r c, \vec{p} s \vec{c}, \vec{k}'_r c', \vec{p}' s' \vec{c}') \\
&= \delta_{cc'} \delta_{ss'} \cdot v(\vec{k}_r, \vec{p} s, \vec{k}'_r, \vec{p}' s') \\
&= \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \delta_{cc'} \delta_{ss'} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \psi_{\vec{k}_r}^*(\vec{r}_1) \psi_{\vec{p} s}^*(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_{\vec{k}'_r}(\vec{r}_1) \psi_{\vec{p}' s'}(\vec{r}_2)
\end{aligned}$$

Mit dem Bloch-Theorem

$$\psi_{\vec{k}_r}(\vec{r} + \Delta \vec{R}_c) = e^{i \Delta \vec{R}_c \cdot \vec{k}_r} \psi_{\vec{k}_r}(\vec{r})$$

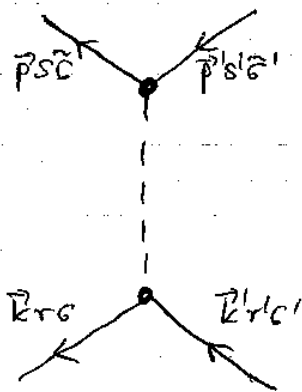
und den Substitutionen  $\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_1 + \Delta \vec{R}_c, \vec{r}_2 \rightarrow \vec{r}_2 + \Delta \vec{R}_c$  ist

$$v(k_p k_{p'}) = e^{-i \Delta \vec{R}_c \cdot (\vec{k}_r + \vec{p} - \vec{k}'_r - \vec{p}')} \cdot v(k_p k_{p'})$$

Summieren  $(\frac{1}{N_{\text{Gitter}}} \sum_{\Delta \vec{R}_c})$  ergibt:

$$v(k_p k_{p'}) = \delta_{\vec{k}_r + \vec{p}, \vec{k}'_r + \vec{p}'} \cdot v(k_p k_{p'})$$

D.h. es gilt



Impulserhaltung am Vertex

Die Summe der einlaufenden ist gleich der Summe der auslaufenden Wellenvektoren:

$$\vec{k}_r + \vec{p} = \vec{k}'_r + \vec{p}'$$

Für die Green-Funktion (Selbstenergie, Spektraldichte) folgt die Diagonalität bezüglich der Wellenvektorabhängigkeit:

$$G_{kk'}(E) = \delta_{\mathbb{R}\mathbb{R}'} \delta_{\mathbb{G}\mathbb{G}'} \cdot G_{\mathbb{R}\mathbb{G}, \mathbb{R}'\mathbb{G}'}(E)$$

$$\Sigma_{kk'}(E) = \delta_{\mathbb{R}\mathbb{R}'} \delta_{\mathbb{G}\mathbb{G}'} \cdot \Sigma_{\mathbb{R}\mathbb{G}, \mathbb{R}'\mathbb{G}'}(E)$$

$$A_{kk'}(E) = \delta_{\mathbb{R}\mathbb{R}'} \delta_{\mathbb{G}\mathbb{G}'} \cdot A_{\mathbb{R}\mathbb{G}, \mathbb{R}'\mathbb{G}'}(E)$$

Bezüglich der Bandindizes bleibt die Nichtdiagonalität.

### 3) Fermi-Fläche im wechselwirkenden System

Wir definieren die Impulsverteilungsfunktion

$$n_{\mathbb{G}}(\mathbb{R}) = \sum_{\mathbb{r}} \langle n_{\mathbb{R}\mathbb{G}\mathbb{r}} \rangle$$

und suchen nach deren Unstetigkeiten.

Es ist

$$n_{\mathbb{G}}(\mathbb{R}) = \sum_{\mathbb{r}} \langle n_{\mathbb{R}\mathbb{G}\mathbb{r}} \rangle$$

$$= \sum_{\mathbb{r}} \langle c_{\mathbb{R}\mathbb{G}\mathbb{r}}^{\dagger} c_{\mathbb{R}\mathbb{G}\mathbb{r}} \rangle$$

$$\stackrel{\text{S.M.9}}{=} \sum_{\mathbb{r}} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{e^{\beta E} + 1} A_{\mathbb{R}\mathbb{G}, \mathbb{r}\mathbb{r}}(E)$$

$$= \int dE \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \text{Sp} A_{\mathbb{R}\mathbb{G}}(E)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \int dE f(E) \text{Sp} \text{Im} G_{\mathbb{R}\mathbb{G}}(E+i0^+)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \int dE f(E) \text{Sp} \text{Im} \frac{1}{\underbrace{G_{\mathbb{R}\mathbb{G}}^{(0)}(E+i0^+)}_{\substack{\text{diagonal in den Bandindizes} \\ \uparrow}} - \underbrace{\sum_{\mathbb{r}}}_{\substack{\text{nichtdiagonal} \\ \uparrow}}}$$

$$= -\frac{1}{\alpha} \int dE f(E) \text{Sp} \text{Im} \frac{1}{E+i0^+ - (\underline{\epsilon}(\mathbb{R}) - \mu) - \sum_{\mathbb{R}_c} (E+i0^+)}$$

Wegen  $\text{Im} A = \frac{1}{2i} (A - A^*)$ , ist  $\text{Sp} \text{Im} A = \frac{1}{2i} (\text{Sp} A - \text{Sp} A^*)$   
 $= \text{Im} \text{Sp} A$  für eine beliebige Matrix  $A$ . Weiter gilt  
 $\text{Sp} A = \sum_{\rho} \lambda_{\rho}$  wenn  $\lambda_{\rho}$  die Eigenwerte von  $A$  sind. Also:

$$n_c(\mathbb{R}) = \sum_{\rho} \int_{-\infty}^0 \left(-\frac{1}{\alpha}\right) \text{Im} \frac{1}{E+i0^+ - (\eta_{\rho c}(\mathbb{R}, E+i0^+) - \mu)} dE$$

(Impulsverteilungsfunktion für  $T=0$ )

- $\eta_{\rho c}(\mathbb{R}, E)$ ,  $\rho=1, 2, \dots$  sind die Eigenwerte der Matrix  $\underline{\epsilon}_r(\mathbb{R}) \delta_{rr'} + \sum_{\mathbb{R}_c} \underline{\epsilon}_{c, rr'}(E)$ .
- $\rho$  heißt auch der wahre Bandindex
- für ein Ein-Band-Modell (z.B. Hubbard-Modell) ist  $\rho = r = 1$  und  $\eta_{\rho c}(\mathbb{R}, E) = \epsilon(\mathbb{R}) + \sum_{\mathbb{R}_c} \epsilon_c(E) \equiv \eta_c(\mathbb{R}, E)$
- die Matrix  $\underline{\epsilon}(\mathbb{R}) + \sum_{\mathbb{R}_c} \underline{\epsilon}_c(E+i0^+)$  (mit den Elementen  $\epsilon_r(\mathbb{R}) \delta_{rr'} + \sum_{\mathbb{R}_c} \epsilon_{c, rr'}(\mathbb{R}, E+i0^+)$ ) ist i.allg. nicht hermitesch
- $\sum_{\mathbb{R}_c} \underline{\epsilon}_c(E+i0^+)$  ist aber symmetrisch<sup>(\*)</sup> - und damit  $\underline{\epsilon}(\mathbb{R}) + \sum_{\mathbb{R}_c} \underline{\epsilon}_c(E+i0^+)$
- es gilt:  $\eta_c(\mathbb{R}, E) = \underline{S}_c^{-1}(\mathbb{R}, E) \left[ \underline{\epsilon}(\mathbb{R}) + \sum_{\mathbb{R}_c} \underline{\epsilon}_c(E) \right] \underline{S}_c(\mathbb{R}, E)$   
 mit einer i.allg. nicht unitären Transformationsmatrix  $\underline{S}_c(\mathbb{R}, E)$
- die Eigenwerte  $\left( \eta_c(\mathbb{R}, E+i0^+) \right)_{\rho\rho'} = \eta_{\rho c}(\mathbb{R}, E+i0^+) \cdot \delta_{\rho\rho'}$  sind i.allg. komplex.

(Beweis), daß  $\underline{\Sigma}_{\mathbb{R}^3}(E)$  symmetrisch:  $\underline{\Sigma}_{\mathbb{R}^3}(E)$  ist symmetrisch

134

in bel. Ein-Teilchen-ONB, denn:  $A_{\mathbb{R}^3}(E)$  ist symmetrisch  
(s. Lehmann-Darstellung S. 52 und beachte, daß  $\langle E_n | c_\alpha | E_m \rangle$   
reell, S. 55.  $\Rightarrow \langle r | c_\alpha | s \rangle \langle s | c_\beta^\dagger | r \rangle = \langle s | c_\beta^\dagger | r \rangle \langle r | c_\alpha | s \rangle =$   
 $\langle r | c_\beta | s \rangle \langle s | c_\alpha^\dagger | r \rangle$ ), also auch  $G_{\mathbb{R}^3}(E)$  f. bel. komplexe  $E$   
(S. 52 Spektraldarstellung) und  $\underline{\Sigma}_{\mathbb{R}^3}(E)$  (S. 108 Dyson-Glg.  
 $\Rightarrow \underline{\Sigma} = \underline{\xi}^{(0)-1} - \underline{\xi}^{-1}$ ; und  $A^{-1\dagger} = A^{\dagger-1}$  f. bel. Matrix  $A$ ).

Es gibt keinen Grund, eine irreguläre  $\mathbb{R}$ -Abhängigkeit  
von  $\xi_{\mathbb{R}}(\mathbb{R})$  oder  $\underline{\Sigma}_{\mathbb{R}^3, \text{rr}}(E+i0^+)$  und damit von  
 $\eta_{\mathbb{R}^3}(\mathbb{R}, E+i0^+)$  anzunehmen. Eine Unstetigkeit von  $n_0(\mathbb{R})$   
kann also nur durch eine Singularität des Integranden  
entstehen, also insbesondere nur an einer Energie  $E$   
mit  $\text{Im } \eta_{\mathbb{R}^3}(\mathbb{R}, E+i0^+) = 0$ . In der Tat werden wir  
feststellen, daß

$$\text{Im } \underline{\Sigma}_{\mathbb{R}^3}(E+i0^+) \Big|_{E=0} = 0$$

An der Stelle  $E=0$  ist  $\underline{\Sigma}_{\mathbb{R}^3}(E+i0^+) = \underline{\Sigma}_{\mathbb{R}^3}(i0^+)$  eine  
symmetrische und reelle Matrix, also hermitesch. Die  
Eigenwerte von  $\underline{\xi}(\mathbb{R}) + \underline{\Sigma}_{\mathbb{R}^3}(i0^+)$  sind also reell.

Eine Singularität des Integranden tritt also auf  
für Wellenvektoren  $\vec{k}$  auf den



(Def.)

Fermi-Flächen

$$\{ \mathbb{R} \mid \eta_{\rho\rho}(\mathbb{R}, i0^+) = \mu \} \quad \rho = 1, 2, \dots$$

Diese Definition verallgemeinert die auf S. 129 für das freie System.

Um die tatsächliche Existenz der Fermi-Fläche(n) im wechselwirkenden System zu beweisen, ist also zu zeigen

$$1) \quad \text{Im} \sum_{\rho} \mathcal{D}_{\rho} (E+i0^+) \Big|_{E=0} = 0$$

2) Die Singularität des Integranden auf der "Fermi-Fläche" führt zu einer Unstetigkeit in  $n_{\rho}(\mathbb{R})$

4) Niederenergieentwicklung der Selbstenergie

Es gilt:

$$\text{Im} \sum_{\rho} \mathcal{D}_{\rho} (E+i0^+) = \text{const.} \cdot E^2 \quad \text{f. } E \rightarrow 0$$

Der Beweis basiert auf der Skelett-Diagramm-Entwicklung der Selbstenergie.

Man kann ganz allgemein zeigen, daß für den Beitrag  $\Sigma_n(E+i0^+)$  eines angezogenen Skeletts  $n$ -ter Ordnung

$$\text{Im} \Sigma_n(E+i0^+) \propto E^{2n-2} \quad \text{f. } E \rightarrow 0$$

Für  $n=1$  ist  $\text{Im } \Sigma_{\text{ps}}(E+i0^+) = 0$  (Hartree-Fock-Term). Der führende Summand für  $E \rightarrow 0$  wird daher durch den  $n=2$ -Term bestimmt. Wir beschränken uns daher auf diesen Fall. Der allgemeine Beweis verläuft ganz ähnlich, ist aber technisch aufwendiger (s. J. H. Luttinger: Phys. Rev. 121, 942 (1961)).

Die Energieabhängigkeit der Beiträge 2. Ordnung in der Skelett-Dragramm-Entwicklung von  $\Sigma_{\text{ps}}(E+i0^+)$  ist durch

$$I_{1,2,3}(E+i0^+) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [\Theta(-x)\Theta(y)\Theta(z) + \Theta(x)\Theta(-y)\Theta(z)] \times \frac{A_1(x) A_2(y) A_3(z)}{E+i0^+ - x + y - z} dx dy dz$$

gegeben (analytische Fortsetzung von  $I_{1,2,3}(iE)$  auf S. 124 und  $T=0: f(x) = \Theta(-x)$ ).

Es gilt:

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im } I_{1,2,3}(E+i0^+) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dx dy dz \times \left[ A_1(-x) A_2(y) A_3(-z) \delta(E+x+y+z) + A_1(x) A_2(-y) A_3(z) \delta(E-x-y-z) \right]$$

$\leftarrow \neq 0$  nur für  $E \leq 0$   
 $\nearrow \neq 0$  nur für  $E \geq 0$

Man darf  $\int_0^\infty \mapsto \int_0^{|E|}$  setzen (z.B. für  $x > |E| = -E \geq 0$ )

im ersten Term ist  $E+x+y+z > 0$ , da  $y, z \geq 0$ , und somit  $\delta(\dots) = 0$ .

Desweiteren substituieren wir  $x = |E| - x_0$ ,  $dx = |E| dx_0$ :

$$-\frac{1}{\hbar} \operatorname{Im} I_{1,2,3}(E+i0^+) = \int_0^{|E|} \int_0^{|E|} \int_0^{|E|} |E|^3 dx_0 dy_0 dz_0 \left[ A_1(-|E|x_0) A_2(|E|y_0) A_3(-|E|z_0) \delta(E+|E|(x_0+y_0+z_0)) \right. \\ \left. + A_1(|E|x_0) A_2(-|E|y_0) A_3(|E|z_0) \delta(E-|E|(x_0+y_0+z_0)) \right]$$

(E < 0)  
↙  
(E > 0) ↗

$$-\frac{1}{\hbar} \operatorname{Im} I_{1,2,3}(E+i0^+) = E^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 dx_0 dy_0 dz_0 \delta(1-x_0-y_0-z_0) \left[ A_1(-|E|x_0) A_2(|E|y_0) A_3(-|E|z_0) \right. \\ \left. + A_1(|E|x_0) A_2(-|E|y_0) A_3(|E|z_0) \right]$$

Entwicklung:

$$A_c(x) = A_c(0) + x A'_c(0)$$

Damit ist

$$A_1(-|E|x_0) A_2(|E|y_0) A_3(-|E|z_0) + A_1(|E|x_0) A_2(-|E|y_0) A_3(|E|z_0) \\ = 2 \cdot A_1(0) A_2(0) A_3(0) \\ + |E| \cdot \left( -x_0 A'_1(0) A_2(0) A_3(0) + y_0 A_1(0) A'_2(0) A_3(0) - z_0 A_1(0) A_2(0) A'_3(0) \right. \\ \left. + x_0 A'_1(0) A_2(0) A_3(0) - \dots + \dots \right) \\ + O(|E|^2)$$

Also:

$$-\frac{1}{2} \text{Im } I_{1,2,3}(E+i0^+) = A_1(0)A_2(0)A_3(0) \cdot E^2 + \mathcal{O}(E^4)$$

Damit gilt:

$$\Sigma_{\alpha\beta}(E+i0^+) = A_{\alpha\beta} + B_{\alpha\beta} \cdot E + iC_{\alpha\beta} E^2 + \dots$$

mit  $A_{\alpha\beta}, B_{\alpha\beta}, C_{\alpha\beta}$  reell

Nach unitärer Transformation (Transformationsformel für die Selbstenergie aus:  $\underline{\Sigma} = \underline{\xi}^{(0)-1} - \underline{\xi}^{-1}$  und Trsf.-formeln für  $\xi^{(0)}$  und  $\xi$ ),

$$\Sigma_{\mathbb{R}c, \mathbb{R}r'}(E+i0^+) = \sum_{\alpha\beta} U_{\mathbb{R}c, \alpha}^{-1} \Sigma_{\alpha\beta}(E+i0^+) U_{\beta, \mathbb{R}r'}$$

folgt das analoge Resultat für  $\underline{\Sigma}_{\mathbb{R}c}(E+i0^+)$

$$\underline{\Sigma}_{\mathbb{R}c}(E+i0^+) = \underline{A}_{\mathbb{R}c} + \underline{B}_{\mathbb{R}c} \cdot E + i\underline{C}_{\mathbb{R}c} \cdot E^2 + \dots$$

mit  $\underline{A}_{\mathbb{R}c}, \underline{B}_{\mathbb{R}c}, \underline{C}_{\mathbb{R}c}$  reell

Beweis:

zunächst gilt die Trsf.-formel für jede Koeffizientenmatrix separat, also z. B.

$$A_{\alpha\beta} \xrightarrow[\text{Trsf.}]{\text{unitär}} A_{\mathbb{R}c, \mathbb{R}r'}$$

$\Sigma_{\alpha\beta}(E)$  ist symmetrisch in  $\alpha, \beta \Rightarrow A_{\alpha\beta}$  ist symmetrisch  $\Rightarrow$  (mit  $A_{\alpha\beta}$  reell)  $A_{\alpha\beta}$  ist hermitesch. Also ist  $\underline{A}_{\mathbb{R}c}$  hermitesch (als unitär transformierte einer hermiteschen Matrix). Andererseits ist  $\underline{A}_{\mathbb{R}c}$  symmetrisch, da  $\underline{\Sigma}_{\mathbb{R}c}$  symmetrisch, also reell. Analog für  $B$  und  $C$ . ✓

Mit diesem Resultat folgt natürlich auch die Form der Niederenwertentwicklung der Eigenwerte  $\eta_c(\mathcal{R}, E+i0^+)$ .  
Wir setzen  $E^+ \equiv E+i0^+$ :

$$\eta_c(\mathcal{R}, E^+) = \eta_c(\mathcal{R}) + E \cdot \delta \eta_c(\mathcal{R}) + i E^2 \delta^2 \eta_c(\mathcal{R}) + \dots$$

( $\eta_c, \delta \eta_c, \delta^2 \eta_c$  sind Diagonalmatrizen)

$\eta_c(\mathcal{R})$  und  $\delta \eta_c(\mathcal{R})$  sind reell, der erste imaginäre Beitrag ist von der Ordnung  $E^2$ .

Beweis:

Nach Definition ist

$$\eta_c(\mathcal{R}, E^+) = \underline{S}_c^{-1}(\mathcal{R}, E^+) \left[ \underline{\xi}(\mathcal{R}) + \underline{\sum}_{\mathcal{R}_c}(E^+) \right] \cdot \underline{S}_c(\mathcal{R}, E^+)$$

Also:

$$\eta_c(\mathcal{R}) = \underline{S}_c^+(\mathcal{R}, i0^+) \cdot \overbrace{\underline{A}_{\mathcal{R}_c}}^{[\underline{\xi}(\mathcal{R}) + \underline{\sum}_{\mathcal{R}_c}(E^+)]} \cdot \underline{S}_c(\mathcal{R}, i0^+) = \eta_c(\mathcal{R})^*$$

Für die lineare Ordnung in  $E$  gilt:

$$\delta \eta_c(\mathcal{R}) = \left( \underline{S}_c^+(\mathcal{R}, i0^+) \underline{B}_{\mathcal{R}_c} \underline{S}_c(\mathcal{R}, i0^+) \right)_{pp}$$

und damit  $\delta \eta_c(\mathcal{R})$  reell. Die Beziehung folgt aus zeitunabhängiger Störungstheorie 1. Ordnung:

$$H = H_0 + \lambda V, \quad H_0 |E_0\rangle = E_0 |E_0\rangle, \quad E = E_0 + \lambda \Delta E_0 + \dots$$

$$\Rightarrow \Delta E_0 = \langle E_0 | \lambda V | E_0 \rangle, \quad \text{Hier: } \underline{\xi}(\mathcal{R}) + \underline{\sum}_{\mathcal{R}_c}(E^+)$$

$$\Leftrightarrow \text{Hamilton-Operator } H; \quad \underline{\xi}(\mathcal{R}) + \underline{A}_{\mathcal{R}_c} \Leftrightarrow H_0;$$

$$E \cdot \underline{\sum}_{\mathcal{R}_c} \Leftrightarrow \lambda V; \quad E \Leftrightarrow \lambda$$

## 5) Quasiteilchen

Welche Konsequenzen hat die Niedrigenergieentwicklung der Selbstenergie für die Green-Funktion?

Wir haben:

$$\begin{aligned}
 G_{\mathbb{R}c}(E^+) &= \frac{1}{E^+ - (\underline{\epsilon}(\mathbb{R}) - \mu) - \Sigma_{\mathbb{R}c}(E^+)} \\
 &= \underline{\Sigma}_c(\mathbb{R}, E^+) \frac{1}{E^+ + \mu - \underline{\Sigma}_c^{-1}(\mathbb{R}, E^+) [\underline{\epsilon}(\mathbb{R}) + \Sigma_{\mathbb{R}c}(E^+)] \underline{\Sigma}_c(\mathbb{R}, E^+)} \underline{\Sigma}_c^{-1}(\mathbb{R}, E^+) \\
 &= \underline{\Sigma}_c(\mathbb{R}, E^+) \frac{1}{E^+ - (\eta_c(\mathbb{R}, E^+) - \mu)} \underline{\Sigma}_c^{-1}(\mathbb{R}, E^+)
 \end{aligned}$$

Die  $E$ -Abhängigkeit von  $\underline{\Sigma}_c(\mathbb{R}, E^+)$  ist genauso wie die  $\mathbb{R}$ -Abhängigkeit relativ uninteressant. Eine Unstetigkeit von

$$n_c(\mathbb{R}) = -\frac{1}{a} \int_{-\infty}^0 S_p \operatorname{Im} G_{\mathbb{R}c}(E^+) dE$$

kann sich nur aus dem Energienenner ergeben. Dazu die folgende

Def.

Quasiteilchenenergie  $E_{pc}(\mathbb{R})$

$E_{pc}(\mathbb{R})$  ist die Lösung der Gleichung

$$E_{pc}(\mathbb{R}) - \operatorname{Re} \eta_{pc}(\mathbb{R}, E_{pc}(\mathbb{R}) - \mu) = 0$$

in der Nähe der/einer Fermi-Fläche

$$\{ \mathbb{R} \mid \eta_{pc}(\mathbb{R}, i0^+) \equiv \eta_{pc}(\mathbb{R}) \stackrel{!}{=} \mu \}$$

(141)

Sei  $\vec{k}$  ein Wellenvektor, der auf der durch  $(p, \epsilon)$  charakterisierten Fermi-Fläche liegt. Dann ist offensichtlich

$$\vec{k} \in FS_{pc} \Leftrightarrow E_{pc}(\vec{k}) = \mu$$

Falls  $\vec{k}$  nahe der  $(p, \epsilon)$ -Fermi-Fläche ist, ist  $E_{pc}(\vec{k}) - \mu$  klein, und wir können die Entwicklung von  $\eta_{pc}(\vec{k}, E_{pc}^{\pm}(\vec{k}) - \mu)$  nach dem linearen Term abbilden:

$$\begin{aligned} 0 &= E_{pc}(\vec{k}) - \operatorname{Re} \eta_{pc}(\vec{k}, E_{pc}^{\pm}(\vec{k}) - \mu) \\ &= E_{pc}(\vec{k}) - \eta_{pc}(\vec{k}) - (E_{pc}(\vec{k}) - \mu) \cdot \delta \eta_{pc}(\vec{k}) - \dots \\ &= (1 - \delta \eta_{pc}(\vec{k})) (E_{pc}(\vec{k}) - \mu) - (\eta_{pc}(\vec{k}) - \mu) \end{aligned}$$

(Def.)

Quasiteilchengewicht  $Z_{pc}(\vec{k})$

$$Z_{pc}(\vec{k}) \equiv \frac{1}{1 - \delta \eta_{pc}(\vec{k})} \quad \text{f. } \vec{k} \text{ nahe der } (pc)\text{-FS}$$

Damit folgt für die Quasiteilchenenergie  $E_{pc}(\vec{k})$ :

$$\begin{aligned} E_{pc}(\vec{k}) - \mu &= Z_{pc}(\vec{k}) \cdot (\eta_{pc}(\vec{k}) - \mu) \\ (\vec{k} \text{ nahe der } (p, \epsilon)\text{-FS}) \end{aligned}$$

Brechen wir die Entwicklung von  $\eta_{pc}(\mathcal{R}, E^+)$  nach der 1. Ordnung ab, so folgt für die Green-Funktion:

$$\begin{aligned} & \left( \underline{S}_c^{-1}(\mathcal{R}, E^+) \underline{G}_{\mathcal{R}c}(E^+) \underline{S}_c(\mathcal{R}, E^+) \right)_{pp} \\ &= \frac{1}{E^+ + \mu - \eta_{pc}(\mathcal{R}) - E \cdot \delta \eta_{pc}(\mathcal{R})} \\ &= \frac{1}{z_{pc}^{-1}(\mathcal{R}) \cdot E^+ - (\eta_{pc}(\mathcal{R}) - \mu)} \\ &= \frac{z_{pc}(\mathcal{R})}{E^+ - (E_{pc}(\mathcal{R}) - \mu)} \end{aligned}$$

für  $\mathcal{R}$  nahe der  $(p, c)$ -FS. Oder:

$$\boxed{G_{\mathcal{R}c}(E+i0^+) = \underline{S}_c(\mathcal{R}, E^+) \frac{z_{pc}(\mathcal{R})}{E+i0^+ - (E_{pc}(\mathcal{R}) - \mu)} \underline{S}_c^{-1}(\mathcal{R}, E^+)}$$

f. kleine  $|E|$

Gehen wir bis zur Ordnung  $E^2$ , dann ist

$$\begin{aligned} & \left( \underline{S}_c^{-1}(\mathcal{R}, E^+) \underline{G}_{\mathcal{R}c}(E^+) \underline{S}_c(\mathcal{R}, E^+) \right)_{pp} \\ &= \frac{1}{z_{pc}^{-1}(\mathcal{R}) E^+ - (\eta_{pc}(\mathcal{R}) - \mu) - i E^2 \delta^2 \eta_{pc}(\mathcal{R})} \\ &= \frac{z_{pc}(\mathcal{R})}{E^+ - (E_{pc}(\mathcal{R}) - \mu) - i E^2 z_{pc}(\mathcal{R}) \delta^2 \eta_{pc}(\mathcal{R})} \end{aligned}$$



eine bei  $E = E_{pc}(\mathbb{R}) - \mu$  gepunktete Funktion mit einer Breite umgekehrt proportional zur

Def. Quasiteilchen-Lebensdauer  $\tau_{pc}(\mathbb{R})$

$$\tau_{pc}^{-1}(\mathbb{R}) \propto (E_{pc}(\mathbb{R}) - \mu)^2 \cdot Z_{pc}(\mathbb{R}) \cdot \delta^2 \eta_{pc}(\mathbb{R})$$

Auf der  $(p,c)$ -FS ist die Lebensdauer unendlich. Der Quasiteilchenpeak ist hier unendlich scharf. Die Lebensdauer wird endlich und die Breite nimmt schnell (quadratisch in  $E_{pc}(\mathbb{R}) - \mu$ ) zu, sobald  $\mathbb{R}$  sich von der  $(p,c)$ -FS entfernt. Alle Quasiteilcheneigenschaften sind dann zunehmend schlechter definiert, die Niederenergieentwicklung bricht letztlich zusammen.

Spezialfall: Freies System

$$\eta_{pc}(\mathbb{R}, E^+) \rightarrow \eta_{pc}(\mathbb{R}) = \text{"Eigenwerte von } \underline{\xi}(\mathbb{R})^n = \underline{\xi}(\mathbb{R})$$

$$\Rightarrow E_{pc}(\mathbb{R}) = \epsilon_r(\mathbb{R}) \quad (p=r)$$

$$Z_{pc}(\mathbb{R}) = 1$$

$$G_{pc}(E^+) = \frac{1}{E^+ - (\underline{\xi}(\mathbb{R}) - \mu)}$$

$$\tau_{pc}^{-1}(\mathbb{R}) = 0$$

Eine andere (nicht-triviale) Vereinfachung liegt bei einem Ein-Band-Modell vor (z.B. Hubbard-Modell):

$$G_{\mathbb{R}c}(E+i0^+) = \frac{1}{E+i0^+ - (\varepsilon(\mathbb{R}) - \mu) - \Sigma_{\mathbb{R}c}(E+i0^+)}$$

kleine  $E$ :

$$G_{\mathbb{R}c}(E+i0^+) = \frac{1}{E+i0^+ - (\varepsilon(\mathbb{R}) - \mu) - A_{\mathbb{R}c} - B_{\mathbb{R}c} \cdot E - iC_{\mathbb{R}c} \cdot E^2}$$

$$= \frac{Z_{\mathbb{R}c}}{E+i0^+ - Z_{\mathbb{R}c} (\varepsilon(\mathbb{R}) + A_{\mathbb{R}c} - \mu) - iE^2 Z_{\mathbb{R}c} C_{\mathbb{R}c}}$$

$$= \frac{Z_{\mathbb{R}c}}{E+i0^+ - (E_{\mathbb{R}c} - \mu) - iE^2 Z_{\mathbb{R}c} C_{\mathbb{R}c}} \quad \text{mit}$$

$$Z_{\mathbb{R}c} = \frac{1}{1 - B_{\mathbb{R}c}}, \quad E_{\mathbb{R}c} - \mu = Z_{\mathbb{R}c} (\varepsilon(\mathbb{R}) + A_{\mathbb{R}c} - \mu)$$

(Bsp.)

$Z_{\mathbb{R}c} = Z$  unabhängig von  $\mathbb{R}, c$

$$C_{\mathbb{R}c} = C$$

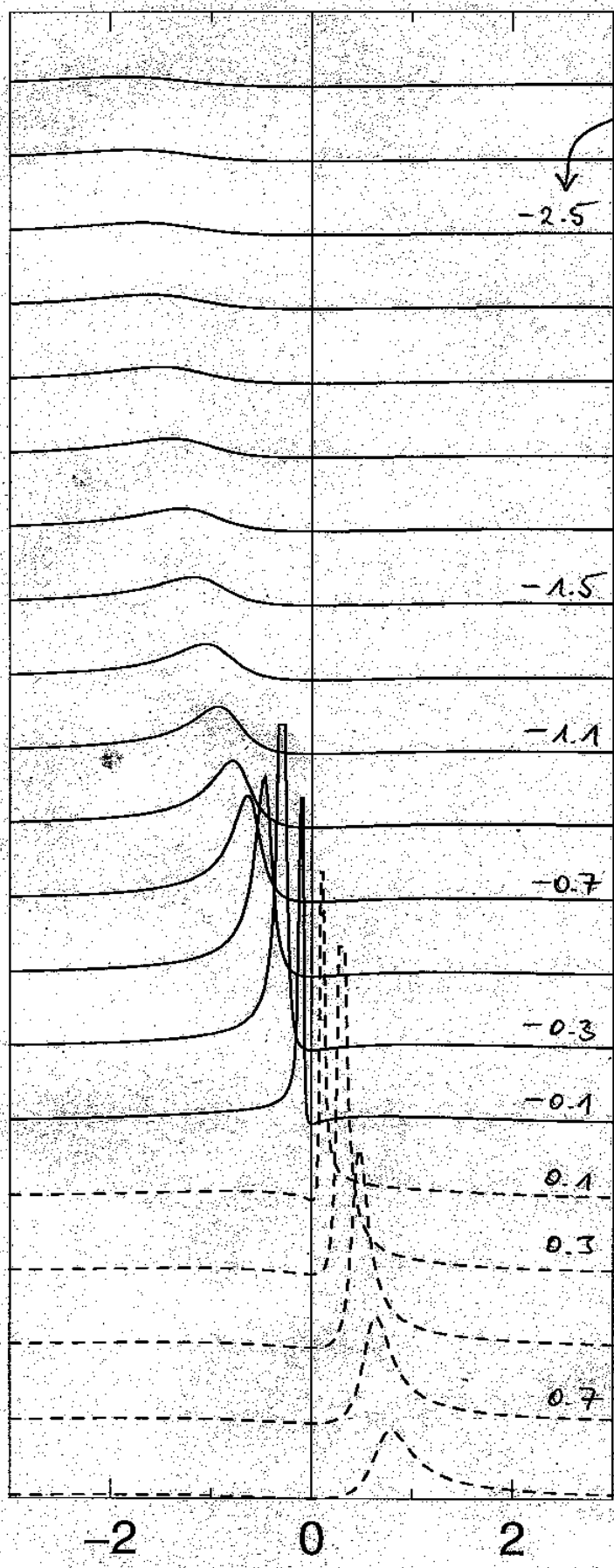
Ein-Band-Modell

$$A_{\mathbb{R}c}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{Z}{E+i0^+ - (E_{\mathbb{R}c} - \mu) - iE^2 Z \cdot C}$$



# Quasiteilchen - Spektrum

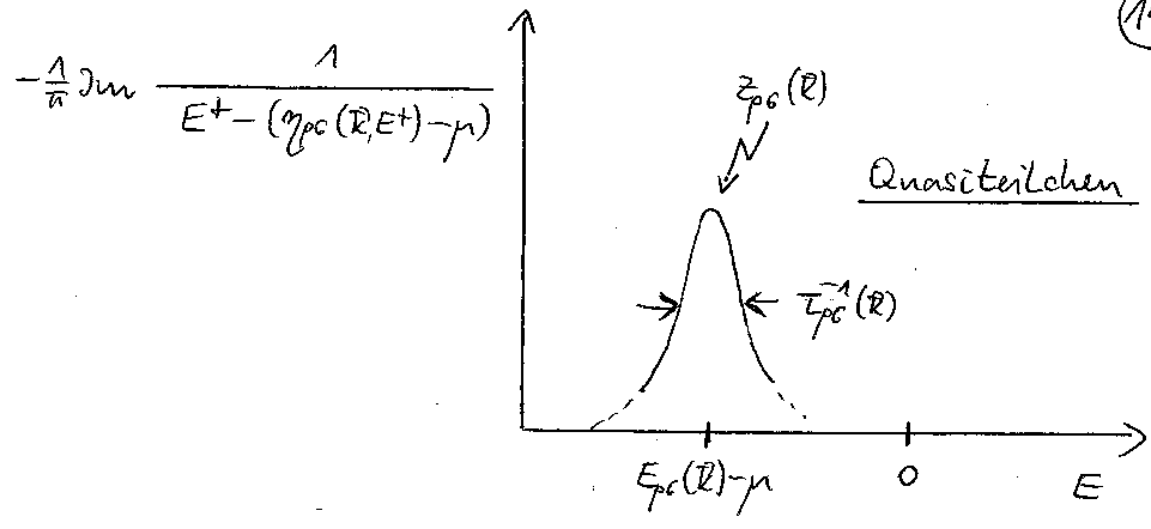
$z = 0.5$   
 $C = -1.0$



QT-Energie  
 $E_{pc}(R) - \mu$

$\vec{k}$  innerhalb der Fermi-Fläche  
 $\updownarrow$   
 $\vec{k}$  außerhalb

→ Energie E



Der Quasiteilchen-Peak in der Nähe der Fermi-Fläche entspricht einer gedämpften Anregung des Systems.  $E_{pc}(R) - \mu$  ist keine exakte Anregungsenergie sondern gewissermaßen der Schwerpunkt einer Vielzahl von exakten, benachbarten Anregungsenergien (s. Lehmann-Darstellung der Spektraldichte!). Im freien System ist  $E_{pc}(R) - \mu$  die exakte Anregungsenergie, die dem "Heransnehmen" bzw. dem "Hinzufügen" eines Teilchens aus dem / in das System entspricht (PE/IPE). In Analogie dazu sprechen wir im wechselwirkenden System von Quasiteilchen.

### 6) Impulsverteilungsfunktion

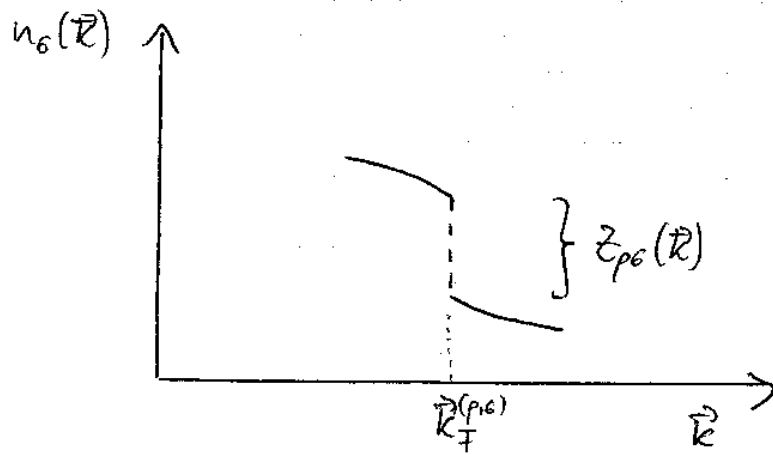
Kehren wir jetzt zur Ausgangsfrage zurück und betrachten die Impulsverteilungsfunktion für  $R$  nahe der Fermi-Fläche ( $p, \epsilon$ ):

$$\begin{aligned}
n_c(\mathbb{R}) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 \text{Sp} \, \text{Im} \, \underline{G}_{\mathbb{R}c}(E+i0^+) \, dE \\
&= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 \text{Im} \, \text{Sp} \, \underline{S}_c(\mathbb{R}, E^+) \frac{1}{E^+ - (\epsilon_{pc}(\mathbb{R}, E^+) - \mu)} \underline{S}_c^{-1}(\mathbb{R}, E^+) \, dE \\
&= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 \text{Im} \, \text{Sp} \frac{1}{E^+ - (\epsilon_{pc}(\mathbb{R}, E^+) - \mu)} \, dE \\
&= -\frac{1}{\pi} \int_{-\epsilon}^0 \text{Im} \frac{z_{pc}(\mathbb{R})}{E+i0^+ - (E_{pc}(\mathbb{R}) - \mu)} \, dE + \tilde{n}_c(\mathbb{R}) \\
&= \int_{-\epsilon}^0 z_{pc}(\mathbb{R}) \delta(E - (E_{pc}(\mathbb{R}) - \mu)) \, dE + \tilde{n}_c(\mathbb{R}) \\
&\quad (\epsilon > 0, \text{ klein})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n_c(\mathbb{R}) &= z_{pc}(\mathbb{R}) \Theta(\mu - E_{pc}(\mathbb{R})) + \tilde{n}_c(\mathbb{R}) \\
&\quad \text{f. } \mathbb{R} \text{ nahe der } (p,c)\text{-Fermi-Fläche}
\end{aligned}$$

Der erste sogenannte kohärente Anteil der Green-Funktion oben bewirkt die Unstetigkeit der Impulsverteilungsfunktion.  $\tilde{n}_c(\mathbb{R})$  ist dagegen eine reguläre Funktion von  $\mathbb{R}$ .

Die Höhe des Sprungs von  $n_c(\mathbb{R})$  an der  $(p,c)$ -Fermi-Fläche wird durch das Quasiteilchengewicht  $z_{pc}(\mathbb{R})$  gegeben. Der Sprung korreliert mit einem Quasiteilchen des Gewichts  $z_{pc}(\mathbb{R})$ , dessen Dispersion die Fermi-Energie kreuzt:  $E_{pc}(\mathbb{R}) - \mu$ .



Für eine weitergehende Charakterisierung von  $n_0(\vec{k})$  benötigen wir das sogenannte Luttinger - Theorem, das aber erst später abgeleitet werden kann.

Im freien System ist  $z_{p0}(\vec{k}) = 1$ . Für  $v \neq 0$  wird  $z_{p0}(\vec{k}) < 1$ .

### 7) Normale Fermi-Flüssigkeiten

Die abgeleiteten Eigenschaften von wechselwirkenden Fermionen-Systemen sind von so allgemeiner Natur, daß diese eine eigene Klasse von Systemen definieren, nämlich die sogenannte normale Fermi-Flüssigkeit.

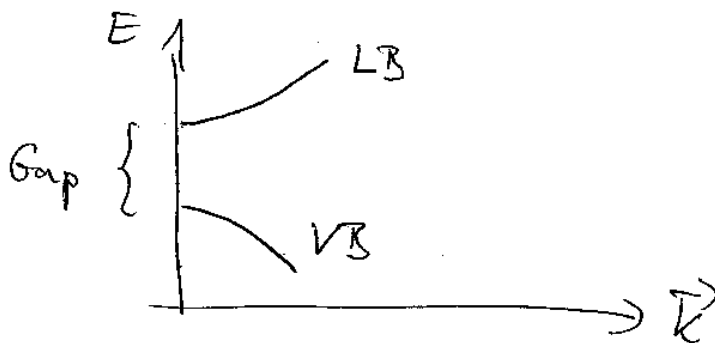
Mit dem Begriff "Flüssigkeit" erzielt man die Abgrenzung zum idealen Fermi-Gas, also dem System nicht-wechselwirkender Fermionen.

Charakteristisch für Fermi-Flüssigkeiten sind:

- die Existenz einer (oder mehrerer) Fermi-Fläche(n)
- die Existenz von Quasiteilchen als die Anregungen niedrigster Energie
- das  $E^2$ -Verhalten des Imaginärteils der Selbstenergie und das damit verbundene gleichartige Verhalten der Quasiteilchen - Lebensdauer.
- die Unstetigkeit der Impulsverteilungsfunktion an der Fermi-Fläche

Weitere Charakteristika werden wir in Zusammenhang mit dem Luttinger - Theorem ableiten.

Gewöhnliche Band-Isolatoren, z.B. Diamant, sind keine Fermi-Flüssigkeiten. In diesen Systemen gibt es keine Fermi-Fläche. Die Anregungen niedrigster Energie sind keine Quasiteilchen, da das Ein-Teilchen-Spektrum ein Gap aufweist:



Alle Systeme wechselwirkender Fermionen, für die die Diagrammentwicklung konvergiert, sind Fermi-Flüssigkeiten, denn die Konvergenz war (mehr oder weniger) die einzige Voraussetzung, die gemacht worden ist.

Wir werden später Systeme mit spontan gebrochener Symmetrie kennenlernen. Hier divergiert die Störreihe an einem kritischen Punkt. (Hochtemperatur-) Supraleiter und (Anti-) Ferromagnete, z.B., sind demnach keine normalen Fermi-Flüssigkeiten. Können aber Teile des Fermi-Flüssigkeits-Konzepts beibehalten werden, so spricht man z.B. beim Ferromagneten von einer ferromagnetischen im Gegensatz zu einer normalen Fermi-Flüssigkeit.

Fermi-Flüssigkeits-Eigenschaften zeigen sich nur für kleine Anregungsenergien, für Wellenvektoren in der Nähe der Fermi-Fläche und für  $T=0$  oder kleine Temperaturen.

Zur Erläuterung des letzten Punkts betrachten wir noch einmal den entscheidenden Term  $I_{1,2,3}(E+i0^+)$  aus der SPT für  $T \neq 0$  (S. 124). Für  $E=0$  ist:

$$-\frac{1}{a} \operatorname{Im} I_{1,2,3}(E+i0^+) \Big|_{E=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [f(x)f(-y)f(z) + f(-x)f(y)f(-z)] \\ \times A_1(x)A_2(y)A_3(z) \delta(x-y+z) dx dy dz$$



$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx dy A_1(x) A_2(y) A_3(y-x) \times$$

$$\times \left[ \underbrace{f(x) f(-y) f(y-x)}_{\uparrow} + \underbrace{f(-x) f(y) f(\overset{\leftarrow y}{\cancel{y-x}})}_{\uparrow} \right]$$

$T \leftrightarrow -T$

Für  $T=0$  ist  $\text{Im } I_{1,2,3}(\omega^+) = 0$  und damit  $\text{Im } \Sigma_{\text{FS}}(\omega^+) = 0$ , wie es für eine Fermi-Flüssigkeit sein muss. Für kleine  $T$  ist

$$\text{Im } \Sigma_{\text{FS}}(\omega^+) \propto T^2 \quad (T \rightarrow 0)$$

denn  $\text{Im } I_{1,2,3}(\omega^+)$  ist eine reguläre Funktion von  $T$  auch für  $T \leq 0$  und symmetrisch ( $\text{Im } I_T = \text{Im } I_{-T}$  für  $E=0$ ).

$\text{Im } \Sigma_{\text{FS}}(\omega^+) \propto T^2$  impliziert eine für  $T > 0$  und steigende  $T$  zunehmende Aufweichung der Fermi-Fläche. Das Fermi-Flüssigkeits-Konzept ist also nur für kleine Temperaturen sinnvoll.

# VI Diagrammentwicklung des großkanonischen Potentials

Wir kommen jetzt zurück zur Diagrammentwicklung des großkanonischen Potentials, d.h. im wesentlichen zur Diagrammentwicklung der S-Matrix. Aus der Ein-Teilchen-Katsubara-Funktion können die thermodynamischen Eigenschaften des Systems abgeleitet werden; in manchen Fällen ist es jedoch praktischer, das großkanonische Potential  $\Omega$  direkt zu berechnen. Die Diskussion wird zudem zeigen, daß auf diese Weise einige tiefgreifende Resultate abgeleitet werden können, die von grundlegender Bedeutung für das Verständnis von Fermi-Flüssigkeiten sind.

## VI A Diagrammregeln

Fassen wir zusammen, was bis jetzt schon erarbeitet worden ist:

- großkanonische Zustandssumme und Potential

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi \quad \Xi = \text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}}) = e^{-\beta \Omega}$$

- Ausgangsgleichung der Störungstheorie

$$\frac{\Xi}{\Xi_0} = \langle S(\beta, 0) \rangle^{(0)}$$

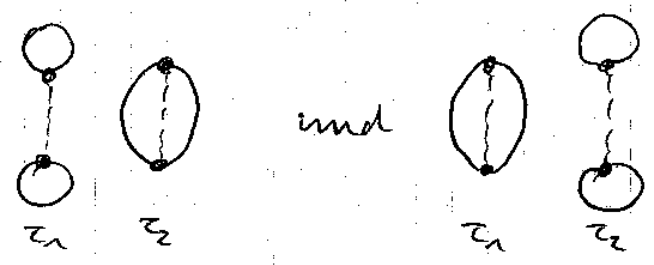
S-Matrix

$$S(\beta, 0) = T_Z \exp \left( - \int_0^\beta V(z^1) dz^1 \right)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta dz_1 \dots \int_0^\beta dz_n T_Z (V(z_1) \dots V(z_n))$$

(Operatoren in Dirac-Darstellung)

- Auswertung der freien Erwartungswerte mit Hilfe des Wick-Theorems → totale Paarung
- Diagrammdarstellung:  $(2n)!$  Diagramme  $n$ -ter Ordnung mit je  $2n$  Propagatoren und  $n$  Vertices
- Vertices sind "fest", d.h.



sind verschieden.

- $\langle S(\beta, 0) \rangle^{(0)}$  = Summe aller geschlossenen nicht-zusammenhängenden und zusammenhängenden Diagramme
- Diagrammregeln auf S. 84

## Linked-Cluster-Theorem

Wie schon bei der Ein-Teilchen-Partiellbruch-Funktion genügt es, sich auf zusammenhängende Diagramme zu beschränken. Diese wichtige Vereinfachung resultiert aus dem Linked-Cluster-Theorem:

$$\frac{\Xi}{\Xi_0} = \exp \left( \langle S(\beta, 0) \rangle_{\text{zus.}}^{(0)} - 1 \right)$$

$\langle \dots \rangle_{\text{zus.}}$  meint, dass über alle zusammenhängenden Diagramme zu summieren ist.

Mit  $\Delta \Omega \equiv \Omega - \Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi / \Xi_0$  gilt auch:

$$-\beta \Delta \Omega = \langle S(\beta, 0) \rangle_{\text{zus.}}^{(0)} - 1$$

d.h. die Summe aller geschlossenen, zusammenhängenden Diagramme ergibt direkt die Korrektur des großkanonischen Potentials!

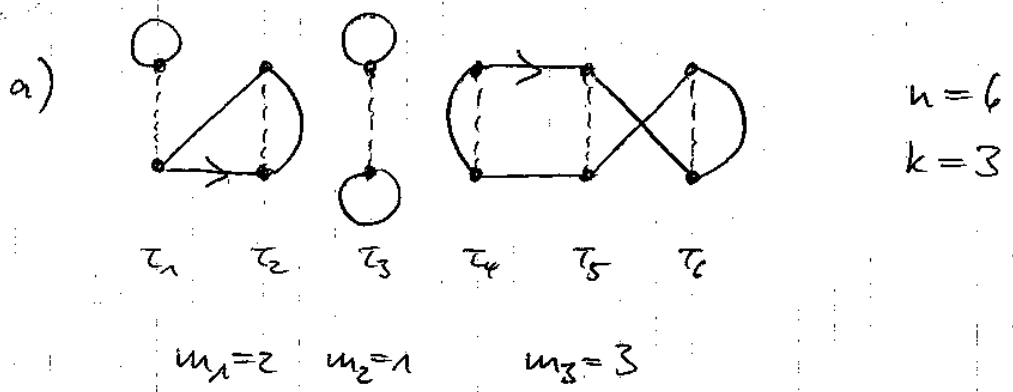
$$-\beta \Delta \Omega = \text{diagramm 1} + \text{diagramm 2} + \text{diagramm 3} + \dots$$

Die 1 hebt sich gegen den Term 0-ter Ordnung in  $\langle S(\beta, 0) \rangle_{\text{zus.}}^{(0)}$  weg. Die Ordnung der Diagramme ist  $n \geq 1$ .

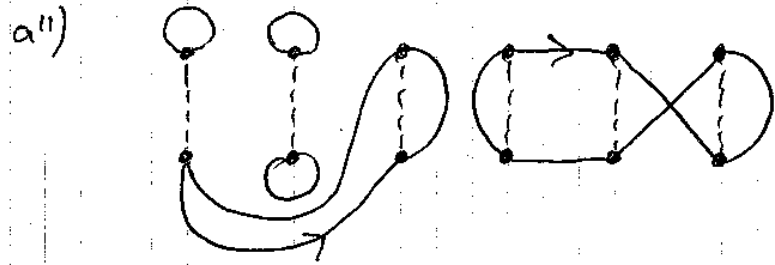
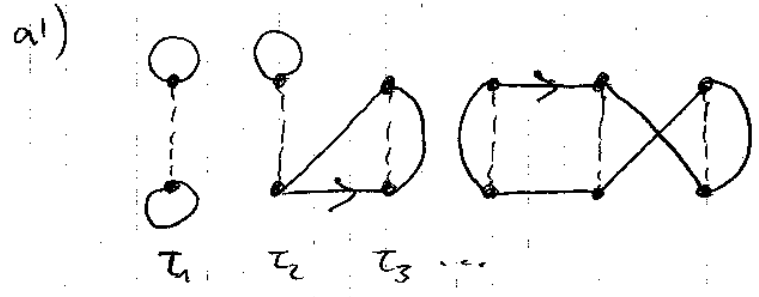
Beweis

Jedes Diagramm  $n$ -ter Ordnung zerfällt in  $k$  zusammenhängende Teile der jeweiligen Ordnung  $m_k$ . Es gilt  $n = \sum_{k=1}^k m_k$ . Wir betrachten zunächst den Fall, daß die  $k$  Teile paarweise verschieden sind.

Z.B.:



Die Diagramme



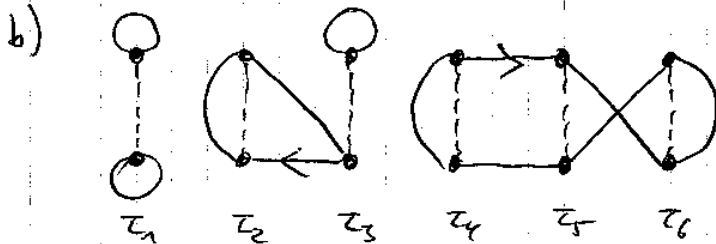
sind von a) verschieden, haben aber den gleichen Wert, wie man durch Umbenennen der Integrationsvariablen  $\tau_i$  zu  $\tau'_i$

$$\frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\Lambda} dz_1 \dots \int_0^{\Lambda} dz_n \langle T_Z (V(z_1) \dots V(z_n)) \rangle^{(0)}$$

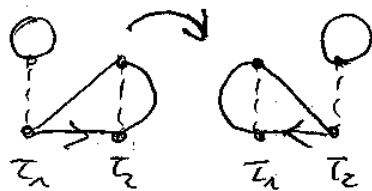
leicht sehen kann. Wir summieren über alle Diagramme  $a), a'), a''), \dots$  gleicher Struktur:

**Def.** Zwei Diagramme haben die gleiche Struktur, wenn sie durch eine Permutation der Vertices auseinander hervorgehen, die die Abfolge der Vertices innerhalb eines Diagrammteils allerdings nicht verändert.

Das Diagramm



hat ebenfalls denselben Wert wie Diagramm a). Es hat aber eine andere Struktur, denn mit



ist die innere Reihenfolge der Vertices im 2. Teil des Diagramms vertauscht.

Wie viele Diagramme gleicher Struktur gibt es?

So viele, wie es Möglichkeiten gibt,  $n$  Vertices in  $k$  Mengen mit  $m_1, m_2, \dots, m_k$  Plätzen aufzuteilen:

$$S = \frac{n!}{m_1! m_2! \dots m_k!}$$

Der Beitrag eines bestimmten Diagramms  $n$ -ter Ordnung ist:

$$\frac{(-1)^h}{n!} \int d\tau_1 \dots \int d\tau_n \langle T_{\mathbb{Z}}(V(\tau_1) \dots V(\tau_n)) \rangle_{\text{Diagr.}}^{(0)}$$

wobei der Index "Diagr." anzeigt, dass nur der entsprechende, eine Summand der TP gemeint ist.

Offensichtlich faktorisiert der Beitrag des Diagramms in die Beiträge der einzelnen Teile:

$$\begin{aligned} & \frac{(-1)^h}{n!} \times \int d\tau_1 \dots \int d\tau_{m_1} \langle T_{\mathbb{Z}}(V(\tau_1) \dots V(\tau_{m_1})) \rangle_{1.\text{Teil}}^{(0)} \\ & \times \int d\tau_1 \dots \int d\tau_{m_2} \langle T_{\mathbb{Z}}(V(\tau_1) \dots V(\tau_{m_2})) \rangle_{2.\text{Teil}}^{(0)} \\ & \quad \vdots \\ & \times \int d\tau_1 \dots \int d\tau_{m_k} \langle T_{\mathbb{Z}}(V(\tau_1) \dots V(\tau_{m_k})) \rangle_{k.\text{ter Teil}}^{(0)} \end{aligned}$$

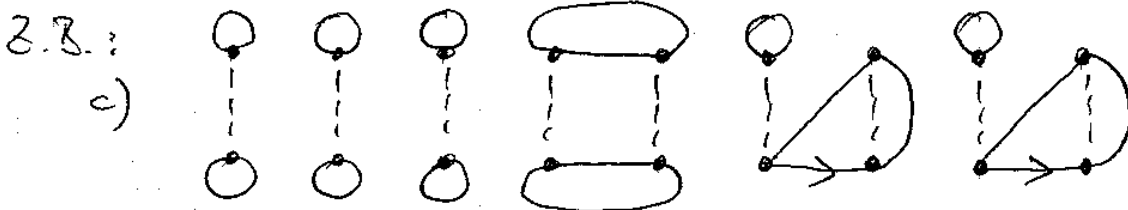
Zur Berechnung der Summe der Beiträge eines bestimmten Diagramms und allen dazu strukturgleichen Diagrammen ist lediglich mit dem Faktor  $S$  zu multiplizieren.

Dies ergibt:

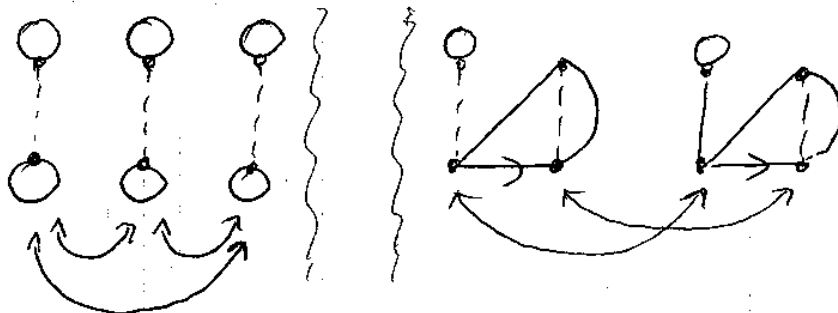
$$\frac{(-1)^{m_1}}{m_1!} \int d\tau_1 \dots \int d\tau_{m_1} \langle T_2(V(\tau_1) \dots V(\tau_{m_1})) \rangle_1^{(c)}$$

$$\frac{(-1)^{m_k}}{m_k!} \int d\tau_1 \dots \int d\tau_{m_k} \langle T_2(V(\tau_1) \dots V(\tau_{m_k})) \rangle_k^{(c)}$$

Wir betrachten jetzt auch solche Diagramme, deren zusammenhängende Teile nicht paarweise verschieden sind.



Wir summieren wieder über alle zu c) strukturgleichen Diagramme, die also durch Permutation der Vertices aus c) hervorgehen, aber die innere Reihenfolge der Vertices unverändert lassen. Sind (wie im Bsp.) 2 oder mehr Diagrammteile gleich, liefert eine bestimmte Permutation der Vertices dasselbe Diagramm c):



Diese Doppelzählung muss natürlich vermieden werden.



In einem Diagramm  $n$ -ter Ordnung können jeweils  $p_i$  Teile ( $i=1, \dots, k$ ) zu Gruppen von gleichen Diagrammen zusammengefasst werden. Innerhalb einer Gruppe haben alle  $p_i$  Diagramme jeweils die Ordnung  $m_i$ .  
 Im Bsp.:

$$\begin{array}{ccccccc} n=9 & p_1=3 & p_2=1 & p_3=2 & & & k=3 \\ & m_1=1 & m_2=2 & m_3=2 & & & \end{array}$$

Es gilt 
$$n = \sum_{i=1}^k m_i p_i$$

Die Anzahl der zu einem Diagramm strukturgleichen Diagramme ist

$$S = \frac{n!}{(m_1!)^{p_1} \dots (m_k!)^{p_k}} \cdot \frac{1}{p_1! \dots p_k!}$$

Der 2. Faktor vermeidet die angesprochene Doppelzählung. Zu c) existieren (incl. c) selbst)  $3! / ((1 \cdot 2 \cdot 2^2) \cdot (3! 1! 2!))$  strukturgleiche Diagramme.

Der 1. Faktor hebt den Faktor  $n!$  heraus und ersetzt ihn - wie schon vorab diskutiert - durch den Vorfaktor  $\frac{1}{(m_i)!}$  in jedem Diagrammteil  $m_i$ -ter Ordnung.

Wir bekommen alle Diagramme zu  $\langle S(\beta, 0) \rangle^{(0)}$ , wenn wir alle paarweise verschiedenen, zusammenhängenden Diagramme  $D_1, D_2, D_3, \dots$  nehmen und diese zu allen möglichen zusammenhängenden und nicht-zusammenhängenden Diagrammen kombinieren, die paarweise verschiedene Struktur besitzen.

$$\begin{aligned}
\langle S(\psi, 0) \rangle^{(0)} &= \\
&1 + D_1 + D_2 + D_3 + \dots \\
&+ \frac{1}{2!} D_1^2 + D_1 D_2 + D_1 D_3 + \dots \\
&+ \frac{1}{2!} D_2^2 + D_2 D_3 + D_2 D_4 + \dots \\
&+ \frac{1}{2!} D_3^2 + D_3 D_4 + \dots \\
&\vdots \\
&+ \frac{1}{3!} D_1^3 + \frac{1}{2!} D_1^2 D_2 + \dots \\
&\vdots \\
&\vdots
\end{aligned}$$

$$\langle S(\psi, 0) \rangle^{(0)} = \sum_{p_1 p_2 \dots} \frac{1}{p_1!} (D_1)^{p_1} \cdot \frac{1}{p_2!} (D_2)^{p_2} \dots$$

$D_i$  bezeichnet hier auch den Wert des Diagramms  $D_i$ .  
 Er berechnet sich ganz gemäß den Regeln auf S. 84.  
 D.h. mit dem Vorfaktor  $\frac{1}{m_i!}$ , falls  $D_i$  die Ordnung  $m_i$  besitzt.

Also gilt

$$\begin{aligned}
\langle S(\psi, 0) \rangle^{(0)} &= \left( \sum_{p_1} \frac{1}{p_1!} (D_1)^{p_1} \right) \left( \sum_{p_2} \frac{1}{p_2!} (D_2)^{p_2} \right) \dots \\
&= e^{D_1} \cdot e^{D_2} \cdot e^{D_3} \dots \\
&= e^{D_1 + D_2 + D_3 + \dots} \\
&= \exp \left( \langle S(\psi, 0) \rangle_{\text{aus.}}^{(0)} - 1 \right) \quad \checkmark
\end{aligned}$$

## Diagrammregeln in Zeitdarstellung

Damit haben wir die folgenden Regeln zur Berechnung der Differenz  $\Delta\Omega = \Omega - \Omega_0$  des großkanonischen Potentials relativ zum Wert im freien System:

Die Korrektur  $n$ -ter Ordnung in der Wechselwirkung ergibt sich als Summe aller geschlossenen, zusammenhängenden Diagramme gemäß:

1)  $i$ -ter Vertex  $V(\alpha_i \beta_i \delta_i \eta_i)$

2) Propagator  $-G_{\alpha_i \beta_j}^{(0)}(\tau_i - \tau_j)$   $\tau_i$ : Vernichterzeit  
 $\tau_j$ : Erzeugerzeit

3) Summen und Integrale über alle  $\alpha_i \beta_i \eta_i \delta_i$  und  $\tau_i$

4) Gleichzeitigkeit:  $\tau_{\text{Erzeuger}} = \tau_{\text{Vernichter}} + 0^+$

5) Schleifen  $(-1)^S$  (Fermionen)

6) Vorfaktor  $\frac{(-1)^n}{2^n n!} \cdot \left(-\frac{1}{\beta}\right)$

## Diagrammregeln in Energiedarstellung

Der Übergang zur Energiedarstellung erfolgt wie gehabt (S. 97 ff.). Beitrag eines geschlossenen, zusammenhängenden Diagramms  $n$ -ter Ordnung zu  $\Delta\Omega$ :

1) Vertex  $\frac{1}{\beta} \delta_{E_T + E_r, E_k + E_e} \cdot V(\alpha_i \beta_i \delta_i \eta_i)$

2) Propagator  $-G_{\alpha_i \beta_j}^{(0)}(iE_k)$

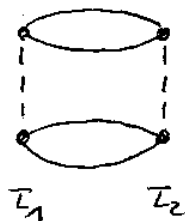
3) Summen über alle  $\alpha_i \beta_i \delta_i$  und  $iE_k$

4) Gleichzeitigkeit  $-G_{\alpha_i \beta_j}^{(0)}(iE_k) e^{iE_k 0^+}$

5) Schleifen  $(-1)^S$

6) Vorfaktor  $\frac{(-1)^n}{2^n n!} \cdot \left(-\frac{1}{\beta}\right)$

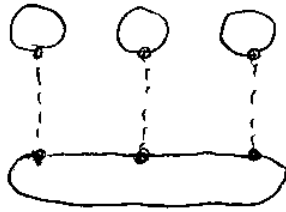
Hinsichtlich der Zusammensetzbarkeit von Diagrammen besteht ein wesentlicher Unterschied zur Darstellung der Ein-Teilchen-Natsubawa-Funktion. Dort hebt sich der Faktor  $\frac{1}{n!}$  heraus, wenn man nur über die topologisch verschiedenen und nicht über sämtliche Diagramme summiert. Der Grund liegt darin, dass jede der  $n!$  Permutationen der Vertizes zu einem vom Ausgangsdiagramm verschiedenen Diagramm führt, das aber den gleichen Wert besitzt. Das folgende Beispiel zeigt, dass dies für die Diagrammdarstellung von  $\Delta\Omega$  nicht mehr gilt:



Wir halten daher an der festen Nummerierung der Vertizes fest. Als Nachteil müssen wir dann in Kauf nehmen, dass die Diagrammregeln nicht mehr "Lokal" formuliert

werden können.

Bsp.



$$\sim \frac{1}{3!}$$



$$\sim \left(\frac{1}{1!}\right)^3$$

Die Vorfaktoren  $(-1)^n$ ,  $\frac{1}{2^n}$  und  $(-\frac{1}{\beta})$  sind dagegen unproblematisch.

## VI B Erzeugendes Funktional

Bei der Diskussion der Gri-Teilchen-Matsubara-Funktionen und der Selbstenergie haben wir das Verfahren der selbstkonsistenten Renormierung kennengelernt. Dies war sowohl von fundamentaler Bedeutung (S.S. 104) als auch eine starke Vereinfachung für praktische Rechnungen. Wir hatten gesehen, daß

Selbstenergie = Summe aller angezogenen Skelette

Kann ein analoges Verfahren auch für das großkanonische Potential entwickelt werden?

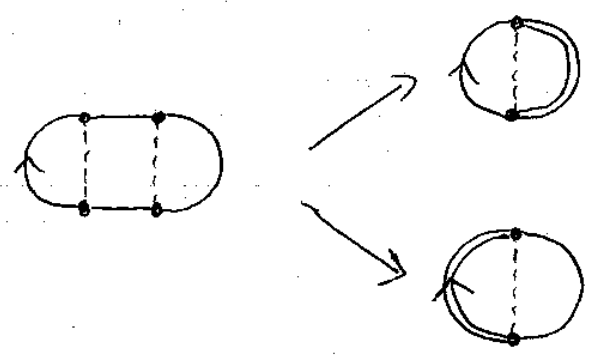
In der Entwicklung von  $\Delta\Omega$  treten die folgenden Diagramme auf:

$$\Delta\Omega = \dots + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \dots$$

Es liegt nahe, eine Partialsumme durchzuführen:

$$\Delta\Omega = \dots + \text{diagram 2} + \dots \quad (?)$$

Dies ist aber nicht möglich, da es so zur Doppelzählung von Diagrammen kommt:



Im folgenden wird entwickelt, wie die selbstkonsistente Renormierung dennoch durchgeführt werden kann. Dabei ergeben sich auch einige wichtige Zusammenhänge zwischen  $\Omega$ ,  $\Sigma$  und  $G$ , die zu weiteren Einsichten in die thermodynamischen Eigenschaften von normalen Fermi-Flüssigkeiten führen.

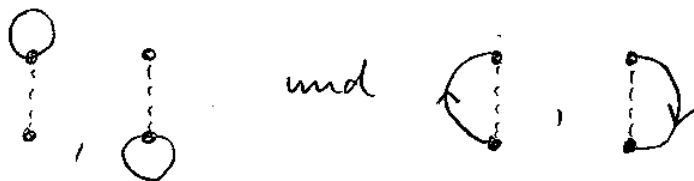
# 1) Zusammenhang zwischen $\Omega$ und

## reduzierbarer Selbstenergie

Die Diagramme der Ordnung  $n=1$  zu  $\Delta\Omega$  sind:



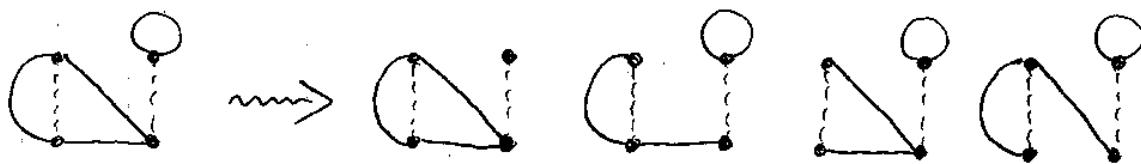
Durch Entfernen eines freien Propagators (jeweils zwei Möglichkeiten) ergeben sich Selbstenergiediagramme:



Dabei ist gemäß den Regeln zu beachten, dass Permutationen der Vertizes ( $n \geq 2$ ) und Vertauschungen von oben und unten an den Vertizes zu neuen Diagrammen führen.

Wir lassen also alle Selbstenergiediagramme zu und nicht nur die topologisch verschiedenen. (Vorfaktor  $\frac{1}{2^n} \frac{1}{n!}$  auch für Selbstenergiediagramme).

Ein  $\Delta\Omega$ -Diagramm  $n$ -ter Ordnung hat  $2n$  Propagatoren und führt zu  $2n$  (irreduziblen und reduzierbaren) Selbstenergiediagrammen.

Bsp.  $n=2$ 

- Zusammenhängende  $\Delta\Omega$ -Diagramme bleiben auch bei Entfernen eines freien Propagators zusammenhängend.
- Jedes Diagramm zur reduzierten Selbstenergie  $n$ -ter Ordnung kann durch Entfernen eines freien Propagators aus einem  $\Delta\Omega$ -Diagramm  $n$ -ter Ordnung erzeugt werden (denn durch Hinanfügen eines freien Propagators in einem  $\tilde{\Sigma}$ -Diagramm entsteht immer ein  $\Delta\Omega$ -Diagramm).
- In der Menge der  $\tilde{\Sigma}$ -Diagramme, die durch Entfernen eines beliebigen freien Propagators aus allen  $\Delta\Omega$ -Diagrammen entstehen, treten keine Diagramme doppelt auf (denn ein  $\Delta\Omega$ -Diagramm entsteht in eindeutiger Weise aus einem  $\tilde{\Sigma}$ -Diagramm).
- Jeweils 2 $n$  verschiedene  $\tilde{\Sigma}$ -Diagramme der Ordnung  $n$  führen durch Hinanfügen eines freien Propagators zum gleichen  $\Delta\Omega$ -Diagramm.

Bem.

 $\tilde{\Sigma}_{\text{sp}}(iE)$ : reduzierte Selbstenergie (S. 106)



Berücksichtigt man noch die Besonderheiten der jeweiligen Diagrammregeln, dann ist

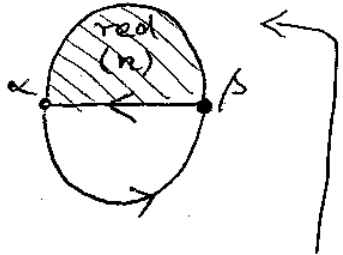
$$\Delta\Omega_n = \left(-\frac{1}{\beta}\right) \cdot (-1) \cdot \frac{1}{2n} \sum_E \sum_{\alpha\beta} \left[-G_{\alpha\beta}^{(0)}(iE)\right] \left[-\tilde{\Sigma}_{\beta\alpha}^{(n)}(iE)\right]$$

↑ Beitrag n-ter Ordnung  
 ↑ anderer Vorfaktor  
 ↑ s.o.  
 in jedem Fall wird genau eine Schleife aufgebrochen  
 ↑ Beitrag n-ter Ordnung zur reduzierten Selbstenergie

Also:

$$\Delta\Omega = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( G^{(0)}(iE) \tilde{\Sigma}^{(n)}(iE) \right)$$

(Matrizen mit Indizes  $\alpha, \beta$ )

$$\Delta\Omega = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \sum_{\alpha\beta}$$


reduzible Selbstenergie n-te Ordnung

## 2) Darstellung von $\Delta\Omega$ als Integral über die Wechselwirkungsstärke

Den störenden Vorfaktor  $\frac{1}{2h}$  können wir durch den folgenden Trick eliminieren:

Wir schreiben

$$v(\alpha\beta\delta\mu) = \lambda \tilde{v}(\alpha\beta\delta\mu)$$

$\Rightarrow$

$$\tilde{\Sigma}_{\alpha\beta}^{(n)}(iE, \lambda) = \lambda^n \tilde{\Sigma}_{\alpha\beta}^{(n)}(iE) \quad \nwarrow = \tilde{\Sigma}_{\alpha\beta}^{(n)}(iE, \lambda=1)$$

$\Rightarrow$

$$\frac{1}{h} \tilde{\Sigma}_{\alpha\beta}^{(n)}(iE, \lambda) = \int_0^{\lambda} \tilde{\Sigma}_{\alpha\beta}^{(n)}(iE, \lambda') \frac{d\lambda'}{\lambda'}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \Delta\Omega &= \frac{1}{2} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( G^{(0)}(iE) \sum_n \int_0^{\lambda} \tilde{\Sigma}^{(n)}(iE, \lambda') \frac{d\lambda'}{\lambda'} \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\lambda} \frac{d\lambda'}{\lambda'} \cdot \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( G^{(0)}(iE) \tilde{\Sigma}(iE, \lambda') \right) \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}(iE) &= \underline{\Sigma}(iE) + \underline{\Sigma}(iE) \underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}(iE) + \dots \\ &= \underline{\Sigma}(iE) \left( \mathbb{1} + \underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}(iE) + \dots \right) \\ &= \underline{\Sigma}(iE) \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} - \underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}(iE)} \end{aligned}$$

kann (analog zur Herleitung der Dyson-Gleichung S. 107) die reduzierbare auf die irreduzible Selbstenergie zurückgeführt werden.

Es ist also:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\Sigma}}(iE) \underline{\underline{G}}^{(0)}(iE) &= \underline{\underline{\Sigma}}(iE) \frac{1}{1 - \underline{\underline{G}}^{(0)}(iE) \underline{\underline{\Sigma}}(iE)} \underline{\underline{G}}^{(0)}(iE) \\ &= \underline{\underline{\Sigma}}(iE) \frac{1}{\underline{\underline{G}}^{(0)-1}(iE) - \underline{\underline{\Sigma}}(iE)} \underline{\underline{G}}^{(0)-1}(iE) \underline{\underline{G}}^{(0)}(iE) \\ &= \underline{\underline{\Sigma}}(iE) \underline{\underline{G}}(iE) \end{aligned}$$

Damit folgt die Integraldarstellung von  $\Delta\Omega$ :

$$\Delta\Omega = \frac{1}{2} \int_0^{\lambda} \frac{d\lambda'}{\lambda'} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{\underline{\Sigma}}(iE, \lambda') \underline{\underline{G}}(iE, \lambda') \right)$$

Oder auch:

$$\lambda \frac{d\Omega}{d\lambda} = \frac{1}{2} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{\underline{\Sigma}}(iE, \lambda) \underline{\underline{G}}(iE, \lambda) \right)$$

Dies ist die Ausgangsformel für die Rückführung des großkanonischen Potentials auf das sogenannte erzeugende Funktional  $\Phi$

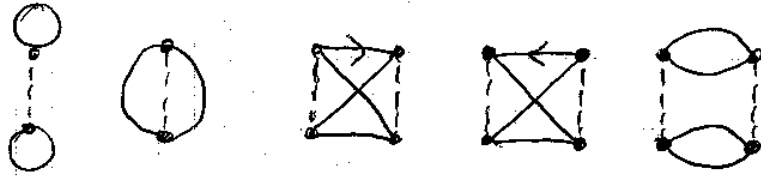
### 3) Definition des erzeugenden Funktionals

(Def.)

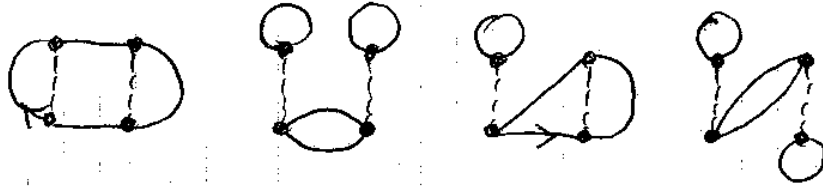
Ein Diagramm in der Entwicklung von  $\Delta\Omega$  heißt ein Skelett, falls keine Selbstenergieeinschübe in ihm vorkommen.

Esp.

Skelette:



keine Skelette:



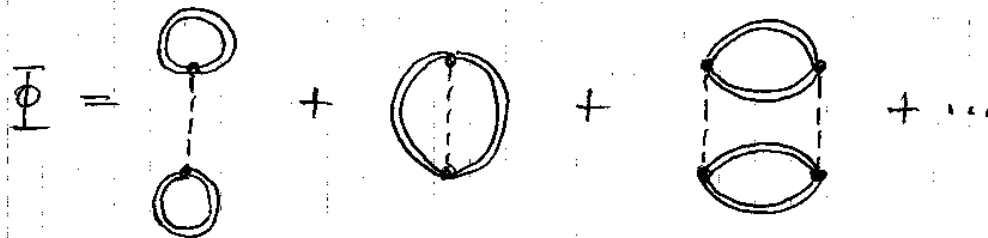
ungültiges Diagramm(!):



Def.

Erzeugendes Funktional  $\bar{\Phi}$

$\bar{\Phi} \equiv$  Summe der Beiträge aller geschlossenen, zusammenhängenden Skelett-Diagramme, bei denen jeder freie Propagator durch den entsprechenden wechselwirkenden Propagator ersetzt worden ist.



Wie oben diskutiert:  $\bar{\Phi} \neq \Delta\Omega$  ! (bzw.  $\bar{\Phi} \neq \Omega$ )

Statt dessen gilt der folgende fundamentale Zusammenhang:

$$\Omega = \mathbb{I} + \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\theta} \text{Sp} \left\{ \ln(-\underline{G}(iE)) - \underline{\Sigma}(iE) \underline{G}(iE) \right\}$$

Für den Beweis benötigen wir:

### 4) Funktionalableitungen

Wir betrachten Funktionale  $F$  von Objekten der Form  $X_{\alpha\beta}(iE)$  (z.B.  $\underline{\Sigma}_{\alpha\beta}(iE)$  oder  $\underline{G}_{\alpha\beta}(iE)$ ).

Bsp.

$$F_1 = \sum_E \sum_{\alpha} X_{\alpha\alpha}(iE)$$

$$F_2 = \sum_E \sum_{\alpha\beta} X_{\alpha\beta}(iE) X_{\beta\alpha}(iE)$$

$$F_3 = \sum_E \text{Sp} \left( \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} - \underline{X}(iE)} \right)$$

$$F_4 = \sum_E \text{Sp} f(\underline{X}(iE)) \text{ mit } f: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C} \text{ analytisch}$$

$$F_5 = \sum_{E, E'} \sum_{\alpha\beta\gamma} X_{\alpha\beta}(iE+iE') X_{\beta\gamma}(iE) X_{\gamma\alpha}(iE')$$

Wäre die Indexmenge  $\{\alpha\}$  (bzw.  $\{\beta\}$ ) und die Menge der Matsubara-Energien  $\{iE_k\}$  endlich,  $\alpha = 1, \dots, \alpha_0$  und  $iE_k = i(2k+1)\pi/\beta$   $k = -k_0, \dots, k_0$ , so wäre  $F$  eine gewöhnliche Funktion mehrerer Veränderlicher, nämlich von

$$\begin{aligned}
& X_{11}(iE_1), X_{12}(iE_2), X_{13}(iE_3), \dots \\
& X_{21}(iE_1), X_{22}(iE_2), \dots \\
& \vdots \\
& X_{\alpha_1}(iE_2), X_{\alpha_2}(iE_2), \dots \\
& \vdots
\end{aligned}$$

und wir könnten die gewöhnliche partielle Ableitung von  $F$  nach einer dieser Veränderlichen,  $X_{\alpha\beta}(iE)$ , bilden:

$$\frac{\partial F}{\partial X_{\alpha\beta}(iE)}$$

Der Begriff der Funktionalableitung verallgemeinert dies für den Fall einer Funktion, die von unendlich vielen Veränderlichen abhängt. Wir schreiben:

$$\frac{\delta F}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)}$$

Die Rechenregeln sind die gleichen wie bei partiellen Ableitungen.

Esp.

$$\bullet \frac{\delta}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} (aF + bG) = a \frac{\delta F}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} + b \frac{\delta G}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)}$$

- $X_{\alpha\beta}(iE)$  sei abhängig von einem Parameter  $\mathcal{R}$ . Es gilt:

$$\frac{d}{d\mathcal{R}} F = \sum_E \sum_{\alpha\beta} \frac{\delta F}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} \cdot \frac{\partial X_{\alpha\beta}(iE)}{\partial \mathcal{R}}$$

$$\begin{aligned} \bullet \frac{\delta F_1}{\delta X_{\alpha\alpha}(iE)} &= \frac{\delta}{\delta X_{\alpha\alpha}(iE)} \sum_{E'} \sum_{\alpha'} X_{\alpha\alpha'}(iE') \\ &= \sum_{E'} \sum_{\alpha'} \frac{\delta X_{\alpha\alpha'}(iE')}{\delta X_{\alpha\alpha}(iE)} = \sum_{E'} \sum_{\alpha'} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{EE'} = 1 \end{aligned}$$

$$\bullet \frac{\delta F_1}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} = \delta_{\beta\alpha}$$

$$\begin{aligned} \bullet \frac{\delta F_2}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} &= \sum_{E'} \sum_{\alpha'\beta'} \frac{\delta}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} (X_{\alpha'\beta'}(iE') X_{\beta\alpha'}(iE')) \\ &= \sum_{E'} \sum_{\alpha'\beta'} (\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \delta_{EE'} X_{\beta\alpha'}(iE') + \delta_{\alpha\beta'} \delta_{\beta\alpha'} \delta_{EE'} X_{\alpha\beta'}(iE')) \\ &= 2 X_{\beta\alpha}(iE) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet \frac{\delta F_3}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} &= \sum_{E'} \frac{\delta}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} S_p \left( \frac{1}{1 - \underline{\chi}(iE')} \right) \\ &= \frac{\delta}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} S_p \left( \frac{1}{1 - \underline{\chi}(iE)} \right) = \end{aligned}$$

$$= \frac{\delta}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} \sum_{\alpha'} \left( 1 + X_{\alpha\alpha'}(iE) + \sum_{\beta'} X_{\alpha\beta'}(iE) X_{\beta'\alpha}(iE) \right. \\ \left. + \sum_{\beta''\gamma'} X_{\alpha\beta''}(iE) X_{\beta''\gamma'}(iE) X_{\gamma'\alpha}(iE) + \dots \right) \quad (A4)$$

$$= 0 + \delta_{\beta\alpha} + 2 X_{\beta\alpha}(iE) + \sum_{\gamma} X_{\beta\gamma}(iE) X_{\gamma\alpha}(iE) + \dots$$

$$= \left[ \frac{1}{(1 - \underline{X}(iE))^2} \right]_{\beta\alpha}$$

$$\bullet \frac{\delta F_4}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} = \frac{\delta}{\delta X_{\alpha\beta}(iE)} \text{Sp} f(\underline{X}(iE)) = \left[ f'(\underline{X}(iE)) \right]_{\beta\alpha}$$

denn:

Satz:

Sei  $f$  eine analytische Funktion,  $f: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ .  
Für eine Matrix  $\underline{A}$  ist dann  $f(\underline{A})$  wohldefiniert.  
Sind  $\underline{A}$  und  $\underline{B}$  Matrizen, die nicht notwendigerweise untereinander kommutieren, dann gilt:

$$\frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} \text{Sp} f(\underline{A} + \underline{B}) = \left[ f'(\underline{A} + \underline{B}) \right]_{\beta\alpha}$$

Speziell:

$$\frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} \text{Sp} f(\underline{A}) = \left[ f'(\underline{A}) \right]_{\beta\alpha}$$



Beweis:

$$x \in \mathbb{C}, f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n \quad f'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n n x^{n-1}$$

$$\frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} \operatorname{Sp} f(\underline{A} + \underline{B}) = \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} \operatorname{Sp} \sum_{n=0}^{\infty} f_n (\underline{A} + \underline{B})^n$$

$$= \sum_n f_n \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} \operatorname{Sp} (\underline{A} + \underline{B})^n$$

$$= \sum_n f_n \sum_p \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} [(\underline{A} + \underline{B})^n]_{pp}$$

$$= \sum_n f_n \sum_p \left[ \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} (\underline{A} + \underline{B})^n \right]_{pp}$$

$$= \sum_n f_n \operatorname{Sp} \left( \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} (\underline{A} + \underline{B})^n \right)$$

$$= \sum_n f_n \operatorname{Sp} \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} (\underline{A} + \underline{B}) \dots (\underline{A} + \underline{B})$$

$$= \sum_n f_n \operatorname{Sp} \sum_{i=1}^n (\underline{A} + \underline{B}) \dots \left( \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} (\underline{A} + \underline{B}) \right) \dots (\underline{A} + \underline{B})$$

$$\stackrel{(*)}{=} \sum_n f_n \operatorname{Sp} \sum_{i=1}^n (\underline{A} + \underline{B}) \dots \underline{E}^{(\alpha\beta)} \dots (\underline{A} + \underline{B}) \quad \leftarrow i\text{-te Stelle}$$

$$= \sum_n f_n \sum_{i=1}^n \operatorname{Sp} \left( \underline{E}^{(\alpha\beta)} (\underline{A} + \underline{B})^{n-1} \right)$$

$$\stackrel{(**)}{=} \sum_n f_n \sum_{i=1}^n [(\underline{A} + \underline{B})^{n-1}]_{\alpha\alpha}$$

$$= \sum_n f_n n [(\underline{A} + \underline{B})^{n-1}]_{\alpha\alpha}$$

$$= [f'(\underline{A} + \underline{B})]_{\alpha\alpha} \quad \checkmark$$

$$(*) \quad \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} \tilde{A} = \frac{\delta}{\delta A_{\alpha\beta}} \begin{pmatrix} A_{\alpha 1} & A_{\alpha 2} \\ A_{\alpha 2} & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\delta A_{\alpha 1}}{\delta A_{\alpha\beta}} & \frac{\delta A_{\alpha 2}}{\delta A_{\alpha\beta}} \\ \dots & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \uparrow \\ \beta \end{pmatrix} \leftarrow \alpha \quad (176)$$

$$\tilde{E}^{(\alpha\beta)} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ \uparrow \\ \beta \end{pmatrix} \leftarrow \alpha$$

$$(**) \quad \text{Sp}(\tilde{E}^{(\alpha\beta)} \cdot \underline{C}) = \sum_{\mu\delta} E_{\mu\delta}^{(\alpha\beta)} C_{\delta\mu} = \sum_{\mu\delta} \delta_{\alpha\mu} \delta_{\mu\beta} C_{\delta\mu} = C_{\beta\alpha}$$

## 5) Beweis des Zusammenhangs zwischen $\Omega$ und $\Phi$

Wir definieren

$$Y \equiv \Phi + \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0t} \text{Sp} \left\{ \ln(-\underline{G}(iE)) - \sum_{\mu} \underline{C}(iE) \underline{G}(iE) \right\}$$

Zu zeigen:  $Y = \Omega$ . Zunächst stellen wir fest:

$\Phi = \begin{array}{c} \textcircled{0} \\ \vdots \\ \textcircled{0} \end{array} + \dots$  ist ein wohldefiniertes Funktional der

Selbstenergie  $\Sigma_{\alpha\beta}(iE)$ , denn  $\Phi$ -Diagramme sind angezogene Skelette und werden daher (neben konstanten Wechselwirkungsparametern, Summen und anderen konstanten Faktoren) aus wechselwirkenden Propagatoren  $G_{\alpha\beta}(iE)$  aufgebaut, und diese wiederum können als

$$\underline{G}(iE) = \frac{1}{\underline{G}^{(0)-1}(iE) - \underline{\Sigma}(iE)} \quad (\text{Dyson-Gleichung})$$

geschrieben werden.

Die Funktionalableitung  $\frac{\delta \Phi}{\delta \Sigma_{\varphi}(iE)}$  ist also wohldefiniert. Sie kann explizit berechnet werden. Dazu nutzen wir aus, daß

$$\Phi = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) \underline{\Sigma}^{(n)}(iE) \right)$$

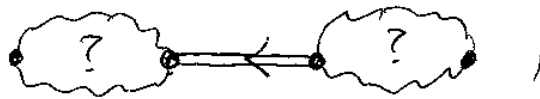
Die Begründung dieser Darstellung ist dieselbe wie auf S. 166. Wir müssen nur zusätzlich zeigen, daß

- 1) das Entfernen eines wechselwirkenden Propagators aus einem beliebigen  $\Phi$ -Diagramm zu 2n Selbstenergie-Diagrammen führt, welche irreduzible Skelette sind, und daß
- 2) jedes irreduzible Selbstenergie-Skelett durch (das eindeutige) Hinzufügen eines wechselwirkenden Propagators zu einem  $\Phi$ -Diagramm, also zu einem Skelett wird.

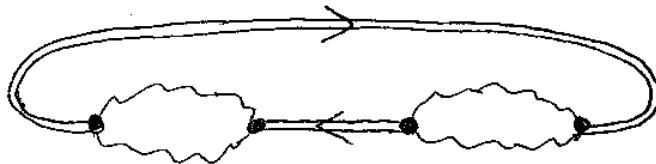
Zu 1)

Sei  $\varphi$  ein  $\Phi$ -Diagramm. Dann ist  $\varphi$  ein Skelett. Sei  $\varphi \setminus G$  das Selbstenergie-Diagramm, das durch Entfernen eines ganz bestimmten Propagators  $G$  aus  $\varphi$  entsteht. Annahme:  $\varphi \setminus G$  ist reduzibel.

Dann hat  $\gamma \setminus G$  die Form



wobei jede der black boxes mindestens von 1. Ordnung ist. Damit hätte aber  $\gamma$  die Form



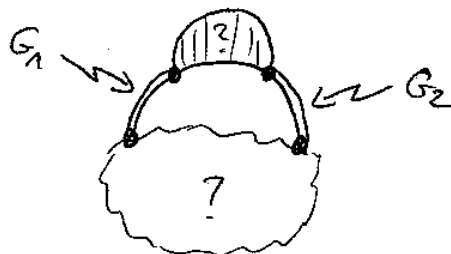
und war somit kein Skelett ( $\rightarrow$  Widerspruch!).

Mit der Annahme, dass  $\gamma \setminus G$  kein Skelett ist, folgt ebenfalls ein Widerspruch. Denn dann hätte  $\gamma \setminus G$  einen Selbstenergieeinschub in einem der Propagatoren, und somit desgleichen  $\gamma$  ( $\rightarrow$  Widerspruch! denn  $\gamma$  ist ein Skelett).

Zu 2)

Sei  $\sigma$  ein  $\Sigma$ -Diagramm.  $\sigma$  ist also ein irreduzibles Skelett. Sei  $\sigma + G$  das eindeutig bestimmte Diagramm, das durch Hinanfügen von  $G$  ans  $\sigma$  ein geschlossenes Diagramm erzeugt. Annahme:  $\sigma + G$  ist kein Skelett.

Dann hat  $\sigma + G$  mindestens einen Selbstenergieeinschub, d.h.  $\sigma + G$  hat die Form:



Ist  $\sigma$  nun das  $\Sigma$ -Diagramm, das durch Entfernen von  $G_1$  oder von  $G_2$  entsteht, ist  $\sigma$  reduzibel ( $\rightarrow$  Widerspruch). Entsteht  $\sigma$  durch das Entfernen eines anderen Propagators, so ist  $\sigma$  aber offensichtlich kein Skelett ( $\rightarrow$  Widerspruch).  $\checkmark$

Damit ist die Darstellung von  $\Gamma$  auf S. 177 bewiesen.

Wir kommen jetzt zurück zur Berechnung von  $\frac{\delta \Gamma}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)}$ .

$\Gamma$  hängt nur über die Propagatoren von  $\Sigma$  ab. Mit der Kettenregel folgt:

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta \in E} \frac{\delta \Gamma}{\delta G_{\alpha\beta\gamma\delta}(iE')} \cdot \frac{\delta G_{\alpha\beta\gamma\delta}(iE')}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)}$$

Die Berechnung von  $\frac{\delta \Gamma}{\delta G_{\alpha\beta\gamma\delta}(iE')}$  kann Diagramm für Diagramm durchgeführt werden (Linearität der Funktionalableitung). Für ein Diagramm  $n$ -ter Ordnung mit  $2n$  Propagatoren ist dabei die Produktregel zu beachten. Wir differenzieren einen bestimmten Propagator im  $\Gamma$ -Diagramm und halten den Rest fest (das  $\Sigma$ -Diagramm) fest. Dann wird der nächste Propagator differenziert und so fort. Die Ergebnisse sind anschließend zu summieren.

z.B. für  $n=1$

$$\frac{\delta \Gamma^{(n=1)}}{\delta G} = \frac{\delta}{\delta \text{---}} \left( \text{---} + \text{---} \right)$$

$$= \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} = \Sigma^{(n=1)}$$

Genauer:

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta G_{\alpha\beta}(iE)} = \frac{\delta}{\delta G_{\alpha\beta}(iE)} \left( \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underbrace{G(iE) \Sigma^{(n)}(iE)}_{\text{jeweils } 2n \text{ gleiche Summanden}} \right) \right)$$

$$= \frac{\delta}{\delta G_{\alpha\beta}(iE)} \left( \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underbrace{G(iE) \Sigma^{(n)}(iE)}_{\text{wirkt nur auf}} \right) \right) \quad (\text{Produktregel!})$$

$$= \frac{\delta}{\delta G_{\alpha\beta}(iE)} \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha/\beta} G_{\alpha\beta}(iE) \Sigma_{\beta\alpha}(iE) = \frac{1}{\beta} \Sigma_{\beta\alpha}(iE)$$

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta G_{\alpha\beta}(iE)} = \frac{1}{\beta} \Sigma_{\beta\alpha}(iE)$$

Die Selbstenergie kann durch Funktionalableitung nach der Green-Funktion aus dem erzeugenden Funktional "erzeugt" werden!

Damit sind wir in der Lage, die Funktionalableitung von  $Y$  nach  $\Sigma$  zu bestimmen:

$$\begin{aligned} \frac{\delta Y}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} &= \frac{\delta}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} \left[ \Phi + \frac{1}{\beta} \sum_{E'} e^{iE' t} \text{Sp} \left\{ \ln(-\underline{G}(iE')) - \underline{\Sigma}(iE') \underline{G}(iE') \right\} \right] \\ &= \frac{\delta \Phi}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} + \frac{1}{\beta} \frac{\delta \text{Sp} \ln(-\underline{G}(iE))}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} - \frac{1}{\beta} \frac{\delta \text{Sp}(\underline{\Sigma}(iE) \underline{G}(iE))}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Phi}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} &= \sum_{\alpha'\beta' E'} \frac{\delta \Phi}{\delta G_{\alpha'\beta'}(iE')} \cdot \frac{\delta G_{\alpha'\beta'}(iE')}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} \\ &= \sum_{\alpha'\beta'} \frac{1}{\beta} \sum_{\beta' \alpha'} \underline{\Sigma}(iE) \frac{\delta G_{\alpha'\beta'}(iE)}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \frac{\delta \text{Sp} \ln(-\underline{G}(iE))}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} &= \frac{1}{\beta} \frac{\delta}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} \text{Sp} \left\{ \ln \frac{-1}{\underline{G}^{(0)-1}(iE) - \underline{\Sigma}(iE)} \right\} \\ &\quad \text{Dyson-Gleichung} \qquad \underbrace{f(\underline{\Sigma}(iE) - \underline{G}^{(0)-1}(iE))} \\ &\quad f(x) = \ln \frac{1}{x}, \quad f'(x) = -\frac{1}{x} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\beta} \left[ \frac{1}{\underline{G}^{(0)-1}(iE) - \underline{\Sigma}(iE)} \right]_{\beta\alpha} = \frac{1}{\beta} G_{\beta\alpha}(iE)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \frac{\delta \text{Sp}(\underline{\Sigma}(iE) \underline{G}(iE))}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} &= \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha'\beta'} \frac{\delta}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} \left( \underline{\Sigma}_{\alpha'\beta'}(iE) G_{\beta'\alpha'}(iE) \right) \\ &= \frac{1}{\beta} G_{\beta\alpha}(iE) + \frac{1}{\beta} \sum_{\alpha'\beta'} \underline{\Sigma}_{\beta'\alpha'}(iE) \frac{\delta G_{\alpha'\beta'}(iE)}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} \end{aligned}$$

Insgesamt also:

$$\frac{\delta Y}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} = 0$$

$Y$  als Funktional der Selbstenergie ist stationär bezüglich 1-ster-Ordnungs-Variationen der Selbstenergie. Man kann zudem zeigen, daß  $Y$  in der Tat maximal wird für die korrekte Selbstenergie.

Mit dieser Stationaritätseigenschaft kann der Beweis für  $Y \stackrel{!}{=} \Omega$  zu Ende geführt werden. Wir zeigen, daß  $Y$  dieselbe Differentialgleichung wie  $\Omega$  erfüllt (S. 169). D.h. wir müssen  $Y$  nach der Wechselwirkungsstärke  $\lambda$  differenzieren. Wegen der Stationaritätseigenschaft von  $Y$  kann dabei die  $\lambda$ -Abhängigkeit von  $\Sigma_{\alpha\beta}(iE)$  ignoriert werden! Die einzige verbleibende  $\lambda$ -Abhängigkeit von  $Y$  resultiert dann noch aus den Vertizes in  $\Phi$ .

$$Y = Y \left[ \underbrace{\Sigma_{\alpha\beta}(iE, \lambda)}_{\text{Vertizes}} \uparrow, \lambda \right]$$

$$\frac{dY}{d\lambda} = \sum_{\alpha\beta E} \underbrace{\frac{\delta Y}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE, \lambda)}}_{=0} \frac{\partial \Sigma_{\alpha\beta}(iE, \lambda)}{\partial \lambda} + \frac{\partial Y}{\partial \lambda} = \frac{\partial Y}{\partial \lambda} = \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda}$$



Mit der Darstellung auf S. 177 gilt:

$$2 \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} = 2 \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) \underline{\Sigma}^{(n)}(iE, \lambda) \right) \right]$$

↑ hier sind die Vertices!

$$= 2 \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[ \sum_n \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) \lambda^n \underline{\Sigma}^{(n)}(iE) \right) \right]$$

$$= \sum_n \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) 2 \cdot n \lambda^{n-1} \underline{\Sigma}^{(n)}(iE) \right)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) \sum_n \underline{\Sigma}^{(n)}(iE, \lambda) \right)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{G}(iE, \lambda) \underline{\Sigma}(iE, \lambda) \right) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{S. 169}}}{=} 2 \frac{d\Omega}{d\lambda}$$

Also:  $\frac{dY}{d\lambda} = \frac{d\Omega}{d\lambda}$

Jetzt fehlt nur noch  $Y(\lambda=0) \stackrel{!}{=} \Omega(\lambda=0) = \Omega_0$ .

$$Y(\lambda=0) = \left[ \Phi + \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} \text{Sp} \left\{ \ln \left( -\underline{G}(iE) \right) - \underline{\Sigma}(iE) \underline{G}(iE) \right\} \right]_{\lambda=0}$$

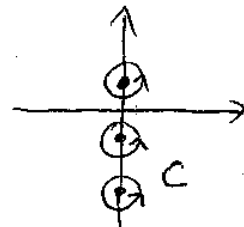
$$= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} \text{Sp} \ln \left( -\underline{G}^{(0)}(iE) \right) \quad \text{Auswertung der Spur in 1-Teilchen-ONS } \{|k\rangle\}$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_E \sum_k e^{iE0^+} \ln \frac{-1}{iE - (\epsilon(k) - \mu)}$$

$$= -\frac{1}{\beta} \sum_E \sum_K e^{iE0^+} \ln(\epsilon(k) - \mu - iE)$$

S.102

$$\int_C \frac{1}{2\pi i} \sum_K \oint_C \frac{1}{e^{\beta E} + 1} e^{E0^+} \ln(\epsilon(k) - \mu - E) dE$$



$$= \frac{1}{2\pi i} \sum_K \int_{C'} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} e^{E0^+} \ln(\epsilon(k) - \mu - E) dE$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \sum_K \int_{C'} \left(-\frac{1}{\beta}\right) \frac{d}{dE} (\ln(1 + e^{-\beta E})) e^{E0^+} \ln(\epsilon(k) - \mu - E) dE$$

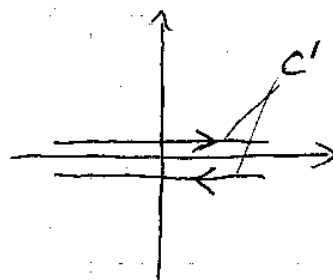
$$= \frac{-1}{2\pi i} \sum_K \int_{C'} \left(-\frac{1}{\beta}\right) \ln(1 + e^{-\beta E}) e^{E0^+} \frac{d}{dE} \ln(\epsilon(k) - \mu - E) dE$$

$$= \frac{1}{\beta} \frac{1}{2\pi i} \sum_K \int_{C'} \ln(1 + e^{-\beta E}) e^{E0^+} \frac{1}{E - (\epsilon(k) - \mu)} dE$$

$$= \frac{1}{\beta} \frac{1}{2\pi i} \sum_K \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{-\beta E}) e^{E0^+} \underbrace{\left( \frac{1}{E + i0^+ - (\epsilon(k) - \mu)} - \frac{1}{E - i0^+ - (\epsilon(k) - \mu)} \right)}_{-2\pi i \delta(E - (\epsilon(k) - \mu))} dE$$

$$= -\frac{1}{\beta} \sum_K \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon(k) - \mu)})$$

$$= \Omega_0 \quad (S.21)$$



Damit folgt insgesamt:

$$\Omega = \gamma \quad \checkmark$$

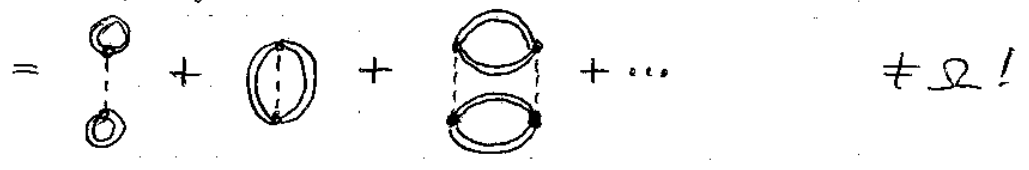
Wir fassen die wesentlichen Resultate noch einmal zusammen:

- Differentialgleichung für  $\Omega$

$$\lambda \frac{d\Omega}{d\lambda} = \frac{1}{2} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp}(\underline{\Sigma}(iE, \lambda) \underline{G}(iE, \lambda))$$

- Definition des erzeugenden Funktionals  $\bar{\Phi}$

$\bar{\Phi}$  = Summe aller zusammenhängenden, geschlossenen, angezogenen Skelette



- Darstellung von  $\Omega$  mit Hilfe von  $\bar{\Phi}$

$$\Omega = \bar{\Phi} + \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} \text{Sp} \left\{ \ln(-\underline{G}(iE)) - \underline{\Sigma}(iE) \underline{G}(iE) \right\}$$

- Zusammenhang zwischen  $\bar{\Phi}$  und Selbstenergie

$$\bar{\Phi} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp}(\underline{\Sigma}^{(n)}(iE) \underline{G}(iE))$$

- Erzeugen der Selbstenergie aus  $\bar{\Phi}$

$$\frac{\delta \bar{\Phi}}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} = \frac{1}{\beta} \Sigma_{\beta\alpha}(iE)$$

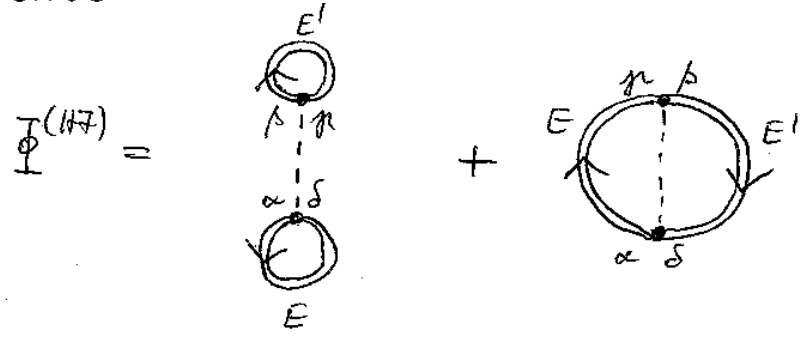
- Stationarität des großkanonischen Potentials:

$$\frac{\delta \Omega}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE)} = 0 \quad (\text{falls } \Sigma \text{ die Dyson-Gleichung erfüllt, also für die korrekte Selbstenergie})$$

## 6) Hartree - Fock - Grundzustandsenergie

Als Beispiel diskutieren wir die Grundzustandsenergie in Hartree - Fock - Näherung.

Die Hartree - Fock - Näherung ist durch das erzeugende Funktional



definiert. Nach den Regeln S. 161 gilt:

$$\begin{aligned}
 \mathbb{I}^{(HF)} &= \frac{(-1)^1}{2^1 1!} \left(-\frac{1}{\beta}\right) (-1)^2 \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{EE'} (-G_{\beta\alpha}(iE)) e^{iE0^+} (-G_{\gamma\delta}(iE')) e^{iE'0^+} \\
 &\quad \times \frac{1}{\beta} \delta_{E+E', E+E'} v(\alpha\beta\delta\gamma) \\
 &+ \frac{(-1)^1}{2^1 1!} \left(-\frac{1}{\beta}\right) (-1) \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{EE'} (-G_{\gamma\alpha}(iE)) e^{iE0^+} (-G_{\beta\delta}(iE')) e^{iE'0^+} \\
 &\quad \times \frac{1}{\beta} \delta_{E+E', E+E'} v(\alpha\beta\delta\gamma) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \left[ \left( \frac{1}{\beta} \sum_E G_{\beta\alpha}(iE) e^{iE0^+} \right) \left( \frac{1}{\beta} \sum_{E'} G_{\gamma\delta}(iE') e^{iE'0^+} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \left( \frac{1}{\beta} \sum_E G_{\gamma\alpha}(iE) e^{iE0^+} \right) \left( \frac{1}{\beta} \sum_{E'} G_{\beta\delta}(iE') e^{iE'0^+} \right) \right] v(\alpha\beta\delta\gamma) \\
 \mathbb{I}^{(HF)} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \left[ \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle - \langle c_\alpha^\dagger c_\gamma \rangle \langle c_\beta^\dagger c_\delta \rangle \right] v(\alpha\beta\delta\gamma) \\
 &\hspace{15em} (s. S. 117)
 \end{aligned}$$

Für die Selbstenergie folgt somit:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta\gamma}^{(HF)} (iE) &= \beta \frac{\delta \mathcal{F}^{(HF)}}{\delta G_{\beta\alpha'}^{(HF)}(iE)} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \left[ \delta_{\beta'\delta} \delta_{\alpha\alpha'} \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle + \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} \rangle \delta_{\beta'\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right. \\ &\quad \left. - \delta_{\beta'\gamma} \delta_{\alpha\alpha'} \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} \rangle + \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle \delta_{\beta'\delta} \delta_{\alpha\beta} \right] v(\alpha\beta\delta\gamma) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma} \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle v(\alpha\beta\beta'\gamma) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\delta} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} \rangle v(\alpha\alpha'\delta\beta') \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\beta\delta} \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} \rangle v(\alpha\beta\delta\beta') - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle v(\alpha\alpha'\beta'\gamma) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta\delta} \left[ v(\alpha\beta\delta\beta') + v(\delta\alpha'\beta'\beta) - v(\alpha\beta\delta\beta') - v(\delta\alpha'\beta'\beta) \right] \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle \end{aligned}$$

und mit  $v(\alpha\beta\delta\gamma) = v(\beta\alpha\gamma\delta)$  (S.112)

$$\sum_{\alpha\beta}^{(HF)} (iE) = \sum_{\beta\delta} \left( v(\alpha\delta\beta\gamma) - v(\alpha\delta\gamma\beta) \right) \langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle$$

Das ist derselbe Ausdruck wie der durch direkte Berechnung der Selbstenergie (S.118).

Großkanonisches Potential:

$$\begin{aligned} \Omega^{(HF)} &= \mathcal{F}^{(HF)} + \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \text{Sp} \left\{ \ln(-\underline{G}^{(HF)}(iE)) - \sum_{\alpha\beta}^{(HF)} (iE) \underline{G}^{(HF)}(iE) \right\} \\ \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \text{Sp} \left( \sum_{\alpha\beta}^{(HF)} (iE) \underline{G}^{(HF)}(iE) \right) &= \sum_{\alpha\beta} \sum_{\alpha\beta}^{(HF)} \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} G_{\beta\alpha}^{(HF)}(iE) \\ &= \sum_{\alpha\beta} \sum_{\alpha\beta}^{(HF)} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \left( v(\alpha\delta\beta\gamma) - v(\alpha\delta\gamma\beta) \right) \langle c_{\delta}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \left( \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} \rangle \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle - \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} \rangle \right) v(\alpha\beta\delta\gamma) = 2 \mathcal{F}^{(HF)} \end{aligned}$$

Seien  $E_p(\mathbb{R})$  die Eigenwerte von  $t_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha\beta}^{(HF)}$   
 (HF-Ein-Teilchen-Energien, HF-Bandstruktur),  
 dann gilt:

$$\underline{G}^{(HF)}(iE) = \frac{\mathbb{1}}{\underline{G}^{(0)-1}(iE) - \underline{\Sigma}^{(HF)}} = \frac{\mathbb{1}}{iE - (\underline{\xi} - \mu) - \underline{\Sigma}^{(HF)}}$$

$$\text{Sp} \ln(-\underline{G}^{(HF)}(iE)) = \sum_{\mathbb{R}p} \ln \frac{-1}{iE - (E_p(\mathbb{R}) - \mu)}$$

Analog zur Rechnung auf S. 183 folgt also:

$$\text{Sp} \ln(-\underline{G}^{(HF)}(iE)) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbb{R}p} \ln(1 + e^{-\beta(E_p(\mathbb{R}) - \mu)})$$

Und insgesamt:

$$\Omega^{(HF)} = -\frac{1}{\beta} \text{Sp} \ln(1 + e^{-\beta(\underline{\xi} - \mu + \underline{\Sigma}^{(HF)})}) \\ - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (\langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle \langle c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} \rangle - \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} \rangle) v(\alpha\beta\delta\gamma)$$

$T=0$  - Limes:

$$E_p(\mathbb{R}) - \mu < 0 \Rightarrow \ln(1 + e^{-\beta(E_p(\mathbb{R}) - \mu)}) \rightarrow -\beta(E_p(\mathbb{R}) - \mu)$$

$$E_p(\mathbb{R}) - \mu > 0 \Rightarrow \ln(\dots) \rightarrow 0$$

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbb{R}p} \ln(1 + e^{-\beta(E_p(\mathbb{R}) - \mu)}) \rightarrow \sum_{E_p(\mathbb{R}) < \mu} (E_p(\mathbb{R}) - \mu)$$

Grundzustandsenergie  $E_0^{(HF)}$ :

$$E_0^{(HF)} = \left( \Omega^{(HF)} + \mu \langle \hat{N} \rangle^{(HF)} \right)_{T \rightarrow 0}$$

$$\begin{aligned} \langle N \rangle^{(HF)} &= \sum_k \langle n_k \rangle^{(HF)} = \sum_k \langle c_k^\dagger c_k \rangle^{(HF)} = \sum_k \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} G_{kk}^{(HF)}(iE) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} S_p \tilde{G}^{(HF)}(iE) = \sum_{R_p} \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \frac{1}{iE - (E_p(R) - \mu)} \\ \stackrel{\text{S.M. 1/114}}{\Rightarrow} &= \sum_{R_p} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \delta(E - (E_p(R) - \mu)) \stackrel{T=0}{=} \sum_{R_p} 1 \\ & \quad E_p(R) < \mu \end{aligned}$$

⇒

$$E_0^{(HF)} = \sum_{R_p} E_p(R) - \frac{1}{2} \sum_{r \neq s} \langle c_r^\dagger c_s \rangle \langle c_r c_s \rangle - \langle c_r^\dagger c_r \rangle \langle c_s^\dagger c_s \rangle \quad \times v(r,s) \delta_{rs}$$

↑  
Summe der besetzten  
HF-Ein-Teilchen-Energien

↑  
Doppelzählungskorrektur  
(vergl. A. Messiah, Quantenmechanik,  
Band 2, S. 259)

↓  
 $= \langle H_{eff} \rangle$

$(H_{eff} = \sum_{rs} (E_{rs} + \sum_{sp}^{(HF)}) c_r^\dagger c_p, \text{ S. 114})$

## VI C Luttinger - Theorem

Das Luttinger - Theorem (oder auch: Luttinger - Summenregel, J.N. Luttinger and J.C. Ward, Phys. Rev. 118 (1960) 1417) stellt einen Zusammenhang zwischen der mittleren Teilchenzahl  $\langle \hat{N} \rangle$  (statische Größe) und der Selbstenergie bzw. Green-Funktion (dynamische Größen) her.

Im freien System ist die mittlere Teilchenzahl (S.22):

$$\langle \hat{N} \rangle^{(0)} = \sum_{k\alpha} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{k\alpha} - \mu)} + 1}$$

Eine einfache Verallgemeinerung dieses Resultats für das wechselwirkende System ist:

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle &= \sum_{\alpha} \langle n_{\alpha} \rangle \stackrel{\substack{\text{S. 43} \\ \text{S. 50}}}{=} \sum_{\alpha} \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} G_{\alpha\alpha}(iE) \\ &\stackrel{\text{S. 119}}{=} \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} A_{\alpha\alpha}(E) dE \end{aligned}$$

Diese Beziehungen liefern allerdings keine wirklich neue Information, denn sie folgen unmittelbar aus der Definition der Matsubara-Funktion.

Das Luttinger-Theorem dagegen besagt, daß die mittlere Teilchenzahl  $\langle \hat{N} \rangle$  gleich dem von der Fermi-Fläche eingeschlossenen  $k$ -Raum-Volumen ist. Das Fermi-Volumen ist eine von  $\langle \hat{N} \rangle$  a priori unabhängige Größe, so daß der Zusammenhang keineswegs trivial ist. Im Gegensatz zur obigen einfachen Summenregel ist das



Luttinger-Theorem auch nicht unter allen Umständen gültig. Es basiert wesentlich auf der Gültigkeit der Diagrammentwicklung. Damit macht das Theorem (zunächst nur) eine Aussage über normale Fermi-Flüssigkeiten.

Für die genaue Formulierung und den Beweis gehen wir von oben gefundenen Darstellungen für  $\Omega$  aus und berechnen  $\langle N \rangle = -\partial\Omega/\partial\mu$ .

Beginnen wir mit der Darstellung (S. 167):

$$\Omega = \Omega_0 + \Delta\Omega = \Omega_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} (\underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}^{(n)}(iE))$$

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = -\frac{\partial\Omega_0}{\partial\mu} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{\partial}{\partial\mu} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} (\underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}^{(n)}(iE))$$

diagrammatische Produktregel =  $\langle N \rangle^{(0)} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\beta} \sum_E \frac{\partial}{\partial\mu} \text{Sp} (\underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}^{(n)}(iE))$

$$= \langle N \rangle^{(0)} - \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \underline{\Sigma}(iE) \frac{\partial}{\partial\mu} \frac{1}{iE - (\epsilon - \mu)} \right)$$

$$= \langle N \rangle^{(0)} + \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} (\underline{G}^{(0)}(iE)^2 \underline{\Sigma}(iE))$$

$$= \langle N \rangle^{(0)} + \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} (\underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}(iE) \underline{G}^{(0)}(iE))$$

$$\underbrace{\underline{\Sigma}(iE) \underline{G}^{(0)}(iE)}_{\text{(S. 169)}}$$

$$\underline{G}(iE) - \underline{G}^{(0)}(iE) \quad (\text{Dyson-Gleichung})$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\underline{E}} e^{i\underline{E}0^+} \text{Sp} \underline{G}(i\underline{E}) \quad (\text{nach Einfügen von } \exp(i\underline{E}0^+))$$

Dies liefert also nichts Neues.

Berechnen wir  $\langle N \rangle$  jetzt als:

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\frac{\partial}{\partial \mu} \left[ \Phi + \frac{1}{\beta} \sum_{\underline{E}} e^{i\underline{E}0^+} \text{Sp} \left\{ \ln(-\underline{G}(i\underline{E})) - \underline{\Sigma}(i\underline{E}) \underline{G}(i\underline{E}) \right\} \right]$$

$\mu$ -Abhängigkeit von  $\Omega$ :

$$\Omega = \Omega[\underline{\Sigma}, \underline{G}], \quad \text{denn } \Phi = \Phi[\underline{G}]$$

$$\underline{G} = \frac{1}{\underline{G}^{(0)-1} - \underline{\Sigma}} = \frac{1}{\underline{E} - (\underline{t} - \mu) - \underline{\Sigma}(i\underline{E})} = \underline{G}(\mu, \underline{\Sigma})$$

$$\Rightarrow \Omega = \Omega[\underline{\Sigma}, \underline{G}(\mu, \underline{\Sigma})]$$

Die  $\mu$ -Abhängigkeit von  $\Omega$  vermöge der  $\mu$ -Abhängigkeit von  $\underline{\Sigma}$  braucht nicht berücksichtigt zu werden, da

$$\frac{\delta \Omega}{\delta \underline{\Sigma}} = 0 \quad ?$$

Also (mit  $\frac{\partial}{\partial \mu} =$  Ableitung nach der expliziten  $\mu$ -Abhängigkeit):

$$\begin{aligned} \langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = & - \sum_{\underline{E}} \frac{\delta \Phi}{\delta \underline{G}_{\text{exp}}(i\underline{E})} \frac{\partial \underline{G}_{\text{exp}}(i\underline{E})}{\partial \mu} \\ & - \frac{1}{\beta} \sum_{\underline{E}} e^{i\underline{E}0^+} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Sp} \ln(-\underline{G}(i\underline{E})) \\ & + \frac{1}{\beta} \sum_{\underline{E}} e^{i\underline{E}0^+} \text{Sp} \left( \underline{\Sigma}(i\underline{E}) \frac{\partial \underline{G}(i\underline{E})}{\partial \mu} \right) \end{aligned}$$

Mit  $\frac{\delta \Phi}{\delta G_{\text{exp}}(iE)} = \frac{1}{\beta} \sum_{\mu} \beta_{\mu}(iE)$  folgt:

$$\langle N \rangle = -\frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Sp} \ln(-G(iE))$$

Direktes Weiterrechnen,

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Sp} \ln(\underline{t} - \mu + \underline{\Sigma}(iE) - iE) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \text{Sp} \frac{1}{iE - (\underline{t} - \mu) - \underline{\Sigma}(iE)} \end{aligned}$$

föhrt wieder zum gleichen Ergebnis. Es ist dagegen interessanter, die  $\mu$ -Ableitung in eine Energieableitung umzuwandeln:

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \text{Sp} \ln \underline{G}(iE) = \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Sp} \ln \frac{-1}{iE - (\underline{t} - \mu) - \underline{\Sigma}(iE)}$$

$$= \frac{\partial}{\partial(iE)} \text{Sp} \ln \frac{-1}{iE - (\underline{t} - \mu) - \underline{\Sigma}(iE)}$$

$$\uparrow \frac{\partial}{\partial(iE)} \text{Sp} \ln \frac{-1}{iE - (\underline{t} - \mu) - \underline{\Sigma}(iE)}$$

(Kettenregel)  $-\sum_{\alpha \beta E'} \frac{\delta \text{Sp} \ln \frac{-1}{iE - (\underline{t} - \mu) - \underline{\Sigma}(iE)}}{\delta \Sigma_{\alpha\beta}(iE')} \cdot \frac{\partial \Sigma_{\alpha\beta}(iE')}{\partial(iE)}$

$$\uparrow = \frac{\partial}{\partial(iE)} \text{Sp} \ln(-G(iE)) - \sum_{\alpha \beta} \left[ \frac{1}{iE - (\underline{t} - \mu) - \underline{\Sigma}(iE)} \right]_{\text{po}} \cdot \frac{\partial \Sigma_{\alpha\beta}(iE)}{\partial(iE)}$$

$f(x) = \ln \frac{-1}{-x} = \ln \frac{1}{x} = -\ln x$   
 $f'(x) = \frac{-1}{-x} = \frac{1}{x}$  (vergl. S. 174)

$$= \frac{\partial}{\partial(iE)} \text{Sp} \ln(-\underline{G}(iE)) - \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) \cdot \frac{\partial \underline{\Sigma}(iE)}{\partial(iE)} \right)$$

Also:

$$\langle \hat{N} \rangle = -\frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} \frac{\partial}{\partial(iE)} \text{Sp} \ln(-\underline{G}(iE)) + R$$

mit

$$R = \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) \cdot \frac{\partial \underline{\Sigma}(iE)}{\partial(iE)} \right)$$

Wir zeigen, dass  $R=0$  für  $T=0$ :

$$\lim_{T \rightarrow 0} R = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) \cdot \frac{\partial \underline{\Sigma}(iE)}{\partial(iE)} \right)$$

$$= \left( \sum_E \frac{2\pi i}{\beta} \right)_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} e^{iE0^+} \text{Sp} \left( \underline{G}(iE) \frac{\partial \underline{\Sigma}(iE)}{\partial(iE)} \right)$$

$$= \mathcal{P} \int_{-i\infty}^{i\infty} dE \frac{1}{2\pi i} e^{E0^+} \text{Sp} \left( \underline{G}(E) \frac{\partial \underline{\Sigma}(E)}{\partial E} \right)$$

(Dies ist gerade die Definition des Riemann-Integrals. Das Hauptwertzeichen ist nötig, da  $G(E)$  f.  $E=0$  einen Pol 1. Ordnung besitzen kann. Die Summe  $\sum_E$  wird zu einem Hauptwert, da die  $iE$  paarweise symmetrisch zu  $E=0$  liegen)

$$= -\mathcal{P} \int_{-i\infty}^{i\infty} dE \frac{1}{2\pi i} e^{E0^+} \text{Sp} \left( \underline{\Sigma}(E) \frac{\partial \underline{G}(E)}{\partial E} \right)$$

(partielle Integration,  $G(E) \sim 1/E$  f.  $E \rightarrow \infty$ ,  $\Sigma(E) \sim \text{const}$  f.  $E \rightarrow \infty$ , s. Spektraldarstellung S.52 und Dyson-Glg.)

$$= - \left( \frac{1}{\beta} \sum_E \right) e^{iE0^+} \text{Sp} \left( \underline{\Sigma}(iE) \frac{\partial \underline{G}(iE)}{\partial(iE)} \right) \quad \left| \frac{1}{\beta} \sum_E \rightarrow \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \right.$$

$$= - \left( \frac{1}{\beta} \sum_E \right) e^{iE0t} \text{Sp} \left( \sum_{\Sigma} (iE) \frac{\partial}{\partial \lambda} G(iE + \lambda) \right) \Big|_{\Sigma \rightarrow \beta} \Big|_{\lambda=0}$$

$$= - \frac{\partial}{\partial \lambda} \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E \text{Sp} \left( \sum_{\Sigma} (iE) G(iE + \lambda) \right)}_{\bar{\Phi}} \Big|_{\Sigma \rightarrow \beta, \lambda=0} \quad (\text{S. 185})$$

D.h. wir können  $\lim_{T \rightarrow 0} R$  berechnen, indem wir die Summe aller  $\bar{\Phi}$ -Diagramme bilden, in denen jeweils ein Propagator nach  $iE$  differenziert ist. Energiesummen sind durch Integrale zu ersetzen, ein Kronecker- $\delta$  durch eine  $\delta$ -Funktion:

$$\lim_{T \rightarrow 0} R = - \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial iE} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ \frac{\partial}{\partial iE} \text{---} \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial iE} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \dots \right\} \Big|_{\Sigma \rightarrow \beta}$$

Die Energievariablen treten als Argument im Propagator auf, aber auch als Argument in den  $\delta$ -Funktionen, die die Energieerhaltung repräsentieren:

$$\sum_{(\dots)} (\dots) \frac{\partial G(E_k)}{\partial E_k} \cdot G(E_2) \cdot G(E_m) \cdot G(E_n) \delta(E_k + E_2 - E_m - E_n)$$

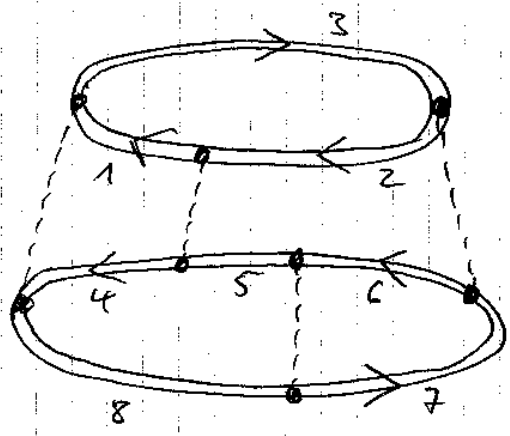
Die Differentiation kann auf die  $\delta$ -Funktionen abgewälzt werden:  $-\frac{\partial}{\partial E_k} \delta(E_k + E_2 + E_m - E_n)$ .

Fassen wir jeweils 4 Diagramme zusammen, so ist aber:

$$\left( \frac{\partial}{\partial E_k} + \frac{\partial}{\partial E_2} + \frac{\partial}{\partial E_m} + \frac{\partial}{\partial E_n} \right) \delta(E_k + E_2 - E_m - E_n) = 0$$

und damit  $R=0 \quad \downarrow \quad T=0$ .

Bsp.



$$\left. \begin{aligned}
 &\delta(1+4 - 3+8) \\
 &\delta(2+5 - 1+4) \\
 &\delta(3+7 - 2+6) \\
 &\delta(6+8 - 5+7)
 \end{aligned} \right\} \begin{aligned}
 &\delta(2+5 - 3+8) \\
 &\delta(3+7 - 2+6) \\
 &\delta(6+8 - 5+7)
 \end{aligned} \left. \begin{aligned}
 &\delta(2+5 - 3+8) \\
 &\delta(3+7 - 2+6)
 \end{aligned} \right\}$$

(1,2,3,... stehen für  $E_1, E_2, E_3, \dots$ )

Über 1 und 4 kann frei summiert / integriert werden:

$$\frac{\partial}{\partial E_1} \int \dots \sim \int \dots \frac{\partial G(E_1)}{\partial E_1} \sim \int \underbrace{-\frac{\partial}{\partial E_1} (\dots)}_{=0} \cdot G(E_1) = 0$$

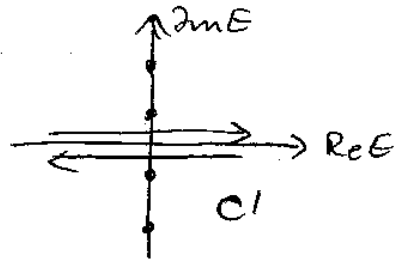
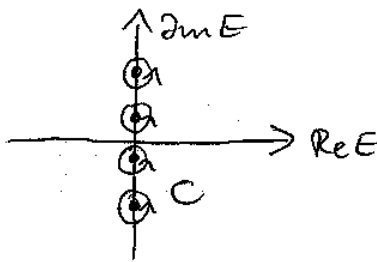
Die Diagramme, bei denen nach 2,3,5,6,7,8 differenziert wird, enthalten zusammengefasst den Faktor

$$(\partial_2 + \partial_3 + \partial_5 + \partial_6 + \partial_7 + \partial_8) \delta(2+5-3-8) \delta(3+7-2-6) = 0$$

Für  $T=0$  bleibt also:

$$\langle N \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{-1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} \frac{2}{2(iE)} S_p \ln(-\zeta(iE))$$

$$\stackrel{S.102}{=} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{-1}{2\pi i} \int_C \frac{1}{e^{\beta E} + 1} e^{E0^+} \frac{2}{2E} S_p \ln(\underline{t} - \mu + \underline{\zeta}(E) - E) dE$$



$$= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{C'} \frac{2}{2E} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} S_p \ln(\underline{t} - \mu + \underline{\zeta}(E) - E) dE$$

$$\stackrel{\theta(-E) = -\delta(E)}{\downarrow} = \frac{-1}{2\pi i} \int_{C'} \delta(E) S_p \ln(\underline{t} - \mu + \underline{\zeta}(E) - E) dE$$

$$= \frac{-1}{2\pi i} \left[ S_p \ln(\underline{t} - \mu + \underline{\zeta}(i0^+) - i0^+) - S_p \ln(\underline{t} - \mu + \underline{\zeta}(-i0^+) + i0^+) \right]$$

$$\underline{\zeta}(\pm i0^+) = \underline{\zeta}(0) \text{ reell} \quad \int_{-\infty}^{\infty} = - \int_{\infty}^{-\infty}$$

(S.138)

$$= \frac{1}{2\pi i} \left[ S_p \ln(\underline{t} - \mu + \underline{\zeta}(0) + i0^+) - S_p \ln(\underline{t} - \mu + \underline{\zeta}(0) - i0^+) \right]$$

Seien  $\eta_{ps}(\mathbb{R}, E)$  die Eigenwerte von  $\underline{t} + \underline{\zeta}(E)$  bzw. von  $\mathcal{E}_T(\mathbb{R}) \mathcal{E}_{rr} + \underline{\zeta}_{\mathbb{R}, rr}(E)$ , und sei  $\eta_{ps}(\mathbb{R}) \equiv \eta_{ps}(\mathbb{R}, i0^+)$  (s. S. 133, 139).

Damit können wir schreiben:

$$\langle N \rangle = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathbb{R}^{pc}} \left[ \ln(\eta_{pc}(\mathbb{R}) - \mu + i0^+) - \ln(\eta_{pc}(\mathbb{R}) - \mu - i0^+) \right]$$

Hauptzweig des ln:

$$\ln z = \ln |z| + i\varphi \quad f. \quad z = |z| e^{i\varphi} \quad -\pi < \varphi \leq \pi$$

$$\eta_{pc}(\mathbb{R}) - \mu > 0 \quad \Rightarrow \quad [\dots] = 0$$

$$\eta_{pc}(\mathbb{R}) - \mu < 0 \quad \Rightarrow \quad [\dots] = (i\pi) - (-i\pi) = 2\pi i$$

Also:

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbb{R}^{pc}} \Theta(\mu - \eta_{pc}(\mathbb{R}))$$

Luttinger - Theorem

Wir hatten die Fermi - Flächen durch

$$\{ \mathbb{R} \mid \eta_{pc}(\mathbb{R}) = \mu \}$$

definiert. (S. 135). Für ein reales Metall hat die Gleichung  $\eta_{pc}(\mathbb{R}) = \mu$  nur für einige wenige (wahre Bandindizes)  $(p, c)$  eine Lösung.

Wir definieren daher:



Def.

partiell besetztes Band  $(\rho, \epsilon)$

$$\eta_{\rho\epsilon}(\mathbb{R}) = \mu \quad \text{für } \mathbb{R} \in \mathbb{FS}_{\rho, \epsilon}$$

voll besetztes Band  $(\rho, \epsilon)$

$$\eta_{\rho\epsilon}(\mathbb{R}) < \mu \quad \forall \mathbb{R} \in \mathbb{BZ}$$

leeres Band  $(\rho, \epsilon)$

$$\eta_{\rho\epsilon}(\mathbb{R}) > \mu \quad \forall \mathbb{R} \in \mathbb{BZ}$$

(für Isolatoren hat die Gleichung nie eine Lösung, hier existiert keine Fermi-Fläche)

Sei  $\rho = 1, \dots, \rho_{\max}$  und  $\rho_{\max} = \rho_{\text{part}} + \rho_{\text{voll}} + \rho_{\text{leer}}$ .  
Dann ist offensichtlich

$$\langle \hat{N} \rangle = 2 N_{\text{Gitter}} \rho_{\text{voll}} + \sum_{\mathbb{R} \in \mathbb{BZ}} \sum_{\rho=1}^{\rho_{\text{part}}} \Theta(\mu - \eta_{\rho\epsilon}(\mathbb{R})) + 0$$

wobei  $N_{\text{Gitter}}$  die Anzahl der Punkte im  $\mathbb{R}$ -Raum also die Anzahl der Einheitszellen im Kristall ist ( $N_{\text{Gitter}} \rightarrow \infty$ ).

Wir definieren die mittlere Leitungselektronenzahl

$$N_c \equiv \langle \hat{N} \rangle - 2 N_{\text{Gitter}} \rho_{\text{voll}}$$

$$N_c = \sum_{\mathbb{R} \in \mathbb{BZ}} \sum'_{\rho} \Theta(\mu - \eta_{\rho\epsilon}(\mathbb{R}))$$

Die Summe ( $\Sigma'$ ) läuft nur über die partiell besetzten Bänder.

$$V_{pc}^{(FS)} \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{k} \Theta(\mu - \eta_{pc}(\mathbf{k}))$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{V_{EZ}} \cdot \frac{1}{N_{Gitter}} \sum_{\mathbf{k}} \Theta(\mu - \eta_{pc}(\mathbf{k}))$$

definiert offenbar das von der  $(\mu, \epsilon)$  Fermi-Fläche eingeschlossene Volumen im  $\mathbb{R}^3$ -Raum ("Fermi-Volumen").  
 ( $V_{EZ}$  ist das Volumen der Einheitszelle im realen Raum,  $V_{EZ} \cdot V_{BZ} = (2\pi)^3$ .)

Damit kann das Luttinger-Theorem als

$$N_c = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \sum_{pc} V_{pc}^{(FS)}$$

geschrieben werden ( $V \equiv N_{Gitter} \cdot V_{EZ}$ ). Für ein Ein-Band-Modell ( $\rho_{part} = 1$ ) und  $V = (2\pi)^3$  ist  $\langle N \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} \cdot 2 \cdot V^{(FS)}$

Luttinger-Theorem: Die Anzahl der Leitungselektronen ist gleich dem Fermi-Volumen im  $\mathbb{R}^3$ -Raum  $\propto \frac{V}{(2\pi)^3}$

(Man bedenke, wie einfach die Aussage ist und wie schwierig es war, sie zu beweisen!)

Eine unmittelbare Konsequenz des Luttinger-Theorems ist:

Das Fermi-Volumen ist invariant bei Variation der Wechselwirkungsstärke

$N_e$  ist dabei durch geeignete Wahl von  $\mu = \mu(\lambda)$  konstant zu halten bei Variation von  $\lambda$  in  $\lambda \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}$ .

Wählt man  $\lambda = 0$ , so gilt:

Das Fermi-Volumen eines Systems von  $N_e$  wechselwirkenden Fermionen ist gleich dem Fermi-Volumen des entsprechenden Systems von  $N_e$  freien Fermionen (Fermi-Gas)

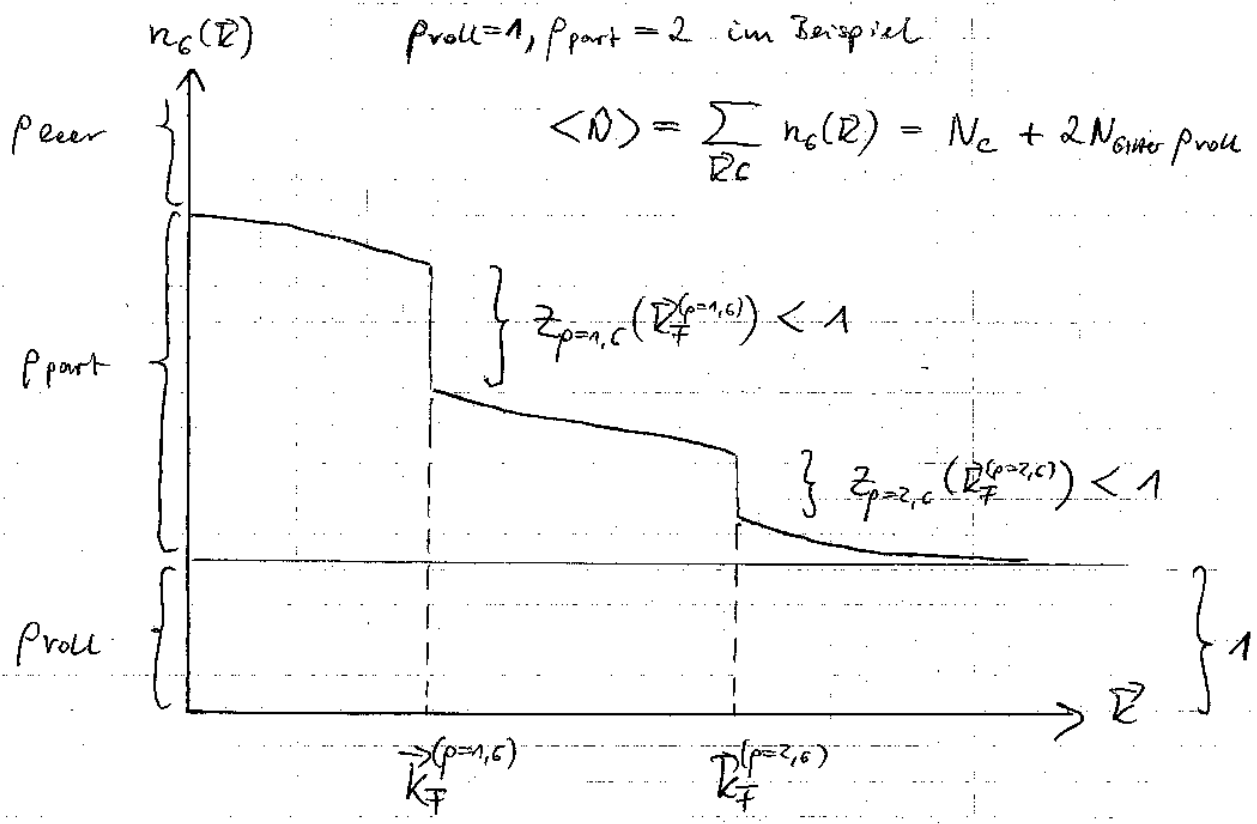
Während das Fermi-Volumen eine Invariante ist, ändert sich e. allg. die Form der Fermi-Fläche.

Die Invarianz des Fermi-Volumens ist eine wichtige Eigenschaft normaler Fermi-Flüssigkeiten. Das Luttinger-Theorem gilt nicht notwendig für:

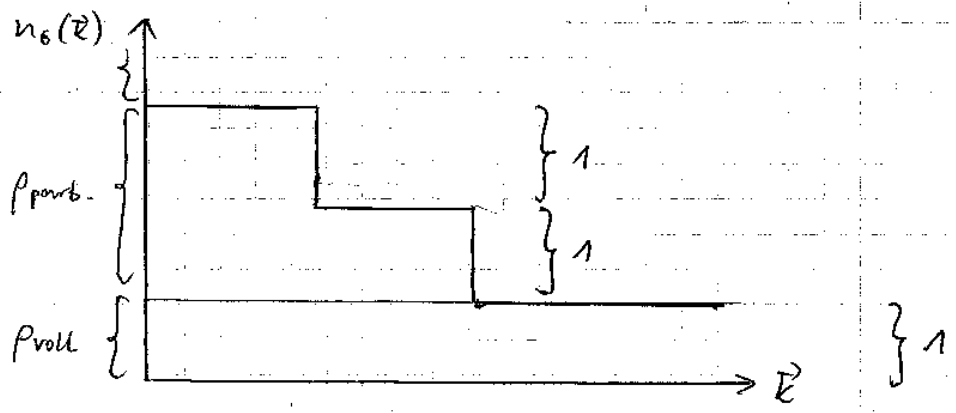
- Isolatoren (bzw. ist hier trivial)
- endliche Temperaturen
- für metallische Nicht-Fermi-Flüssigkeiten
- in Fällen, wo die Diagrammentwicklung sinnlos ist

Ein metallischer Ferromagnet ist möglicherweise ein Beispiel für ein System, bei dem die Diagrammentwicklung prinzipiell fragwürdig ist (s. später).

Eine Bemerkung zur Impulsverteilungsfunktion:  
 Nachdem wir auch für wechselwirkende Fermionen-Systeme sinnvoll von vollen, leeren und partiell besetzten Bändern sprechen können, ist klar, daß die Impulsverteilungsfunktion schematisch die folgende Gestalt haben muß:

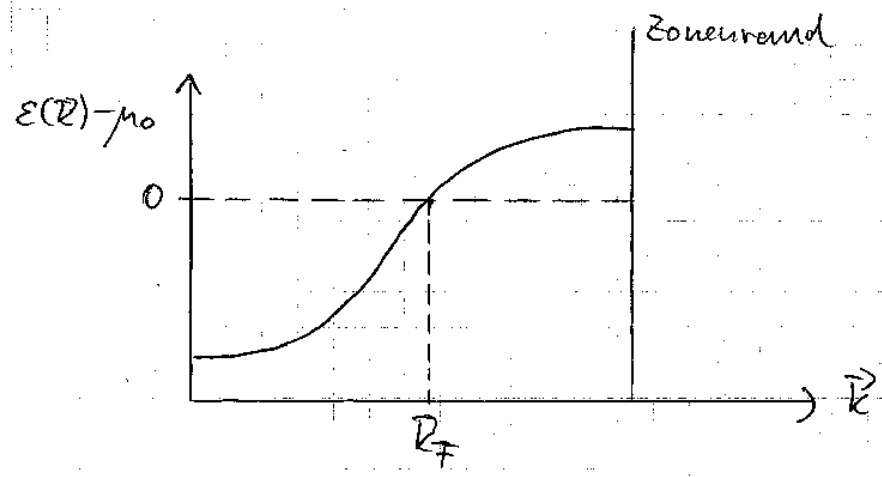


Freies System:



Abschließend sei das Luttinger - Theorem noch einmal anhand eines Ein - Band - Modells (z.B. Hubbard - Modell) diskutiert.

- $U=0$ , Fermi - Gas



Offensichtlich ist:

$$\langle N \rangle_0 = \int_{-\infty}^0 \sum_{\vec{k} \in \text{BZ}} \delta(E - (E(\vec{k}) - \mu_0)) dE$$

Dies kann man schreiben als:

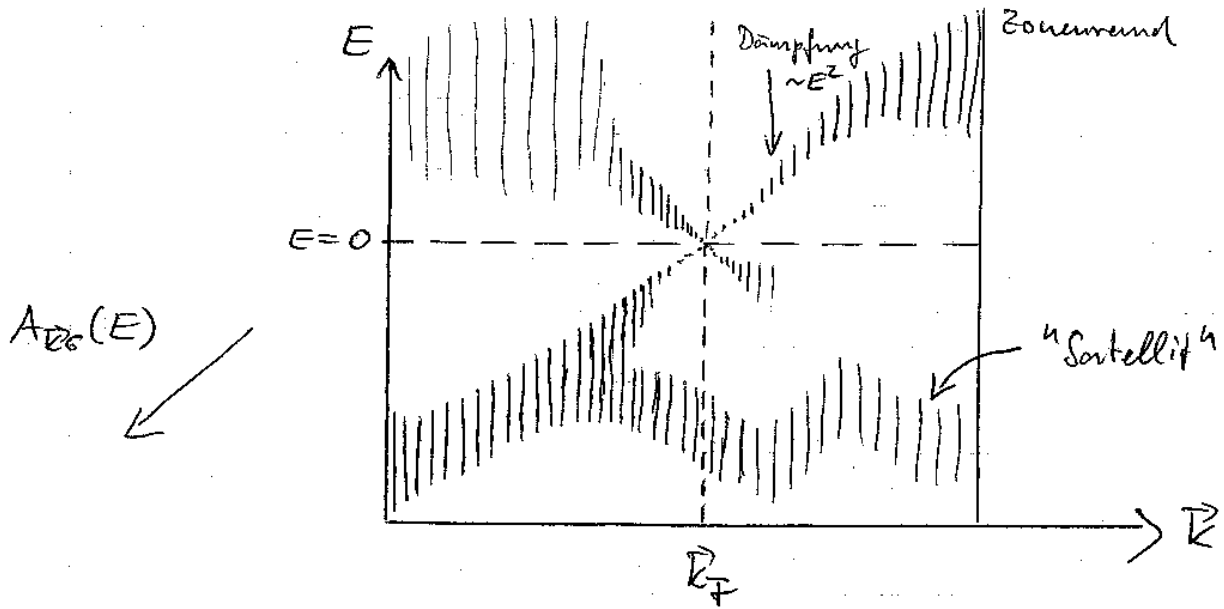
$$\langle N \rangle_0 = \sum_{\vec{k} \in \text{BZ}} \Theta(\mu_0 - E(\vec{k})) = \frac{V}{(2\pi)^3} 2 \cdot V^{(FB)}$$

Das Luttinger - Theorem für  $U=0$  ist trivial.

Man beachte für  $U=0$ :

Alle Ein - Teilchen - Zustände innerhalb des Fermi - Volumens sind besetzt,  $\langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle_0 = 1$ , und außerhalb unbesetzt,  $\langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle_0 = 0$ .

•  $U \neq 0$ , Fermi-Flüssigkeit



(vergl. auch S. 145)

Für  $U \neq 0$  findet man spektrales Gewicht auch

- außerhalb der Fermi-Kugel, aber für  $E < 0$ , und
- innerhalb der Fermi-Kugel, aber für  $E > 0$ .

Wie für  $U=0$  gilt:

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^0 \sum_{Dc} A_{Dc}(E) dE \quad (*)$$

$$= \int_{-\infty}^0 \sum_{Dc} \left(-\frac{1}{\alpha}\right) \text{Im } G_{Dc}(E+i0^+) dE$$

$$= \int_{-\infty}^0 \sum_{Dc} \left(-\frac{1}{\alpha}\right) \text{Im} \frac{1}{E^+ - (E(D) - \mu) - \Sigma_{Dc}(E^+)} dE$$

Hier geht die Rechnung (anders als für das freie System) nicht weiter. Setzt man in dem Ausdruck ad hoc

$$\Sigma_{\mathbb{R}^3}(E^+) \rightarrow \Sigma_{\mathbb{R}^3}(0),$$

$$\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^0 \sum_{\mathbb{R}^3} \left(-\frac{1}{\pi}\right) \operatorname{Im} \frac{1}{E^+ - (\epsilon(\mathbb{R}) - \mu) - \Sigma_{\mathbb{R}^3}(0)} dE$$

$$= \int_{-\infty}^0 \sum_{\mathbb{R}^3} \delta(E - (\epsilon(\mathbb{R}) - \mu) - \Sigma_{\mathbb{R}^3}(0)) dE$$

$$= \sum_{\mathbb{R}^3} \Theta(\mu - \epsilon(\mathbb{R}) - \Sigma_{\mathbb{R}^3}(0)) \quad (*)$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot V^{(FS)}$$

dann erhalt man das Luttinger - Theorem. Naturlich ist dies kein erlaubter Rechenschritt. Im Nachhinein allerdings (mit Kenntnis des Luttinger - Theorems), ist er aber doch erlaubt. Man sieht: Nur der Wert der Selbstenergie fur  $E=0$  allein bestimmt Teilchenzahl und Fermi - Volumen.

Aus der Gleichheit der beiden mit (\*) gekennzeichneten Terme und mit  $\int_{-\infty}^{\infty} A_{\mathbb{R}^3}(E) dE = 2\pi A_{\mathbb{R}^3}(t=0) = 1$  folgt:

$\int_{-\infty}^0 dE \sum_{\mathbb{R}^3}^{\text{au\ss}erhalb} A_{\mathbb{R}^3}(E) = \int_0^{\infty} dE \sum_{\mathbb{R}^3}^{\text{innerhalb}} A_{\mathbb{R}^3}(E)$ <p style="text-align: center;"><u>Luttinger - Theorem</u></p>
--

# VI D Erhaltende Näherungen

Der Beweis des Luttinger - Theorems zeigt einen Weg auf, wie approximative Theorien konstruiert werden können, die das Luttinger - Theorem und damit auch dessen Konsequenzen respektieren :

Für jede Näherung, die sich aus einem expliziten, diagrammatischen Ausdruck für das erzeugende Funktional ableiten läßt, die sich also durch eine Partialsummation von  $\Phi$  - Diagrammen darstellen läßt, kann der Beweis ganz analog durchgeführt werden. Voraussetzung ist lediglich, daß  $\Phi$ , Selbstenergie und Green - Funktion konsistent zueinander sind, d.h. daß

$$\Sigma_{\text{op}}(iE) = \beta \cdot \frac{\delta \Phi}{\delta G_{\text{px}}(iE)} \quad \text{und} \quad \underline{G}(iE) = \underline{G}^{(0)}(iE) + \underline{G}^{(0)}(iE) \underline{\Sigma}(iE) \underline{G}(iE)$$

erfüllt sind. Solche Näherungen heißen auch:

"conserving approximations"  
(erhaltende Näherungen)

In der Praxis gibt man sich - physikalisch motiviert - einen Satz von  $\Phi$  - Diagrammen vor, bildet daraus durch "graphische Funktionalableitung" die dazu gehörigen Selbstenergiediagramme. Selbstenergie und Green - Funktion können dann (selbstkonsistent, iterativ) unter Annahme der Dyson - Gleichung bestimmt werden.



Beispiele:

### 1) Hartree-Fock-Theorie

Das einfachste Beispiel für eine erhaltende Näherung ist die Hartree-Fock-Theorie.  $\Phi^{(HF)}$  ist definiert als (S. 186):

$$\Phi^{(HF)} = \begin{array}{c} \circ \\ \vdots \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ \\ \vdots \\ \circ \end{array}$$

Wer verzichtet hier auf die Darstellung mit doppelten Linien. Alle hier und in folgenden auftretenden Propagatoren sind als vollständig renormiert anzusehen.

Die Funktionalableitung  $\beta \frac{\delta \Phi}{\delta G}$  ( $\Leftrightarrow$  Entfernen eines beliebigen Propagators) liefert die dazu konstante Selbstenergie (vergl. auch S. 117):

$$\Sigma^{(HF)} = \begin{array}{c} \circ \\ \vdots \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ \\ \vdots \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ \\ \vdots \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ \\ \vdots \\ \circ \end{array}$$

Läßt man nur die topologisch verschiedenen Diagramme zu (Diagrammregeln ohne den Vorfaktor  $1/(2^n n!)$ ), hat man

$$\Sigma^{(HF)} = \begin{array}{c} \circ \\ \vdots \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ \\ \vdots \\ \circ \end{array}$$

## 2) Störungstheorie 2. Ordnung

$$\mathbb{I}^{(SOPT)} = \begin{array}{c} \text{diagram 1} \\ \text{diagram 2} \\ \text{diagram 3} \\ \text{diagram 4} \\ \text{diagram 5} \\ \text{diagram 6} \end{array}$$

(alle zusammenhängenden Skelett-Diagramme von S.85 in 2. Ordnung)

Man kann auch schreiben:

$$\mathbb{I}^{(SOPT)} = \begin{array}{c} \text{diagram 1} \\ \text{diagram 2} \\ \text{diagram 3} \\ \text{diagram 4} \end{array}$$

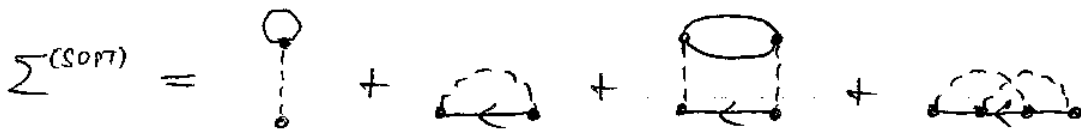
wenn vereinbart wird, daß jedes Diagramm die Summe aller zu ihm topologisch gleichen Diagramme einschließt. Dies wollen wir von jetzt an tun. Wir definieren dabei zwei  $\mathbb{I}$ -Diagramme als topologisch gleich, falls sie durch eine Permutation der Vertices oder/und durch Vertauschen von "oben" und "unten" an den Vertices aneinander hervorgehen. Dies ist analog zur topologischen Gleichheit von  $G$ - und  $\Sigma$ -Diagrammen. Ebenso analog beschränken wir uns dann in der  $\mathbb{I}$ -Entwicklung auf die topologisch paarweise verschiedenen Diagramme. Topologisch gleiche Diagramme haben offensichtlich denselben Wert. Daher ist jedes

der topologisch verschiedenen  $\Phi$ -Diagramme mit einem Faktor

$$\frac{S}{2^n n!}$$

zu versehen, wobei  $S$  die Zahl der zu dem Diagramm topologisch gleichem aber paarweise verschiedenen Diagramme (inklusive dem Diagramm selbst) ist. Man beachte (S. 162), dass - ein Unterschied zu  $\Sigma$ - und  $G$ -Diagrammen - i. allg.  $S \neq 2^n n!$  ist.

Die Funktionalableitung  $\delta \Phi^{(SOPT)} / \delta G$  führt auf die SOPT-Selbstenergie (vergl. S. 121):

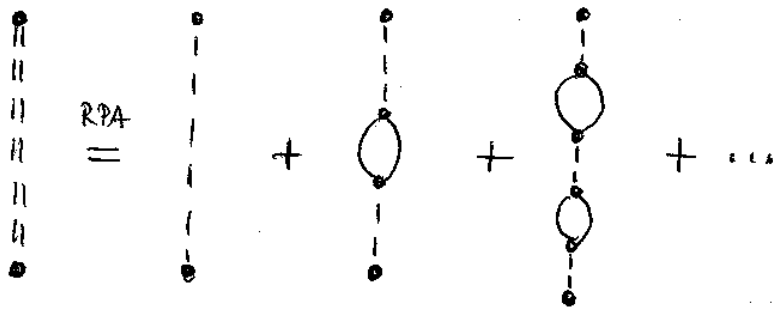


### 3) Random - Phase - Approximation

Unter der Random-Phase-Approximation versteht man i. allg. die folgende Näherung für den Polarisationspropagator (vergl. S. 115):

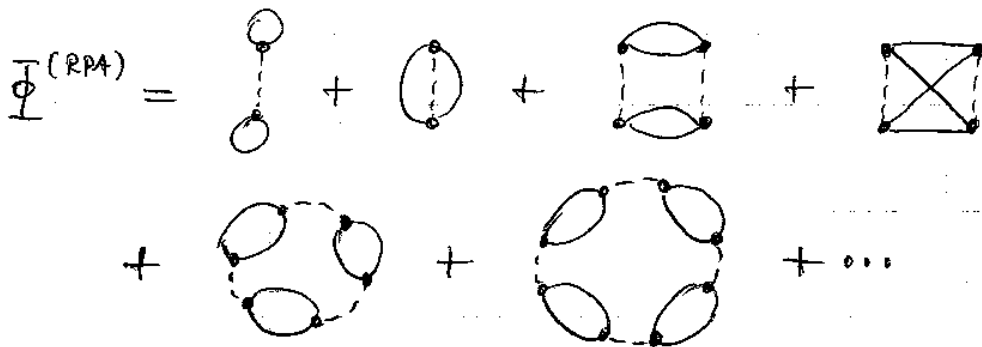


d.h. die Näherung niedrigster Ordnung. Die führt zu der folgenden Form für die effektive Wechselwirkung (S. 115):



D.h. man erhält für die effektive Wechselwirkung eine geometrische Reihe von sogenannten Ringdiagrammen, die sich formal leicht summieren lässt.

Wir versuchen, diese Idee für eine erhaltende Näherung zu benutzen. Im Rahmen der RPA sind die Propagatoren, die den Polarisationspropagator aufbauen eigentlich als freie Propagatoren zu verstehen. Wir gehen hier allerdings zu renormierten Propagatoren über, um einen Ausdruck für  $\underline{\Phi}$  zu konstruieren:



$\underline{\Phi}^{(RPA)}$  ist exakt bis zur 2. Ordnung in der Wechselwirkung. Ab der 3. Ordnung werden nur noch Ringdiagramme summiert. Die unendliche Teilreihe der Ringdiagramme ist wieder geometrisch und kann daher leicht summiert werden. Gezeichnet sind - wie vereinbart - nur die topologisch verschiedenen Diagramme. Alle Propagatoren

sind vollständig renormiert.

Die RPA-Selbstenergie ergibt sich dann als:

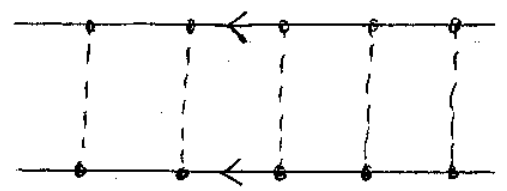
$$\Sigma^{(RPA)} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \dots$$

$$\Sigma^{(CRPA)} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3}$$

durch Funktionalableitung. Das Austauschdiagramm 2. Ordnung und das dazugehörige  $\Phi$ -Diagramm werden manchmal als nicht zur RPA gehörig betrachtet.

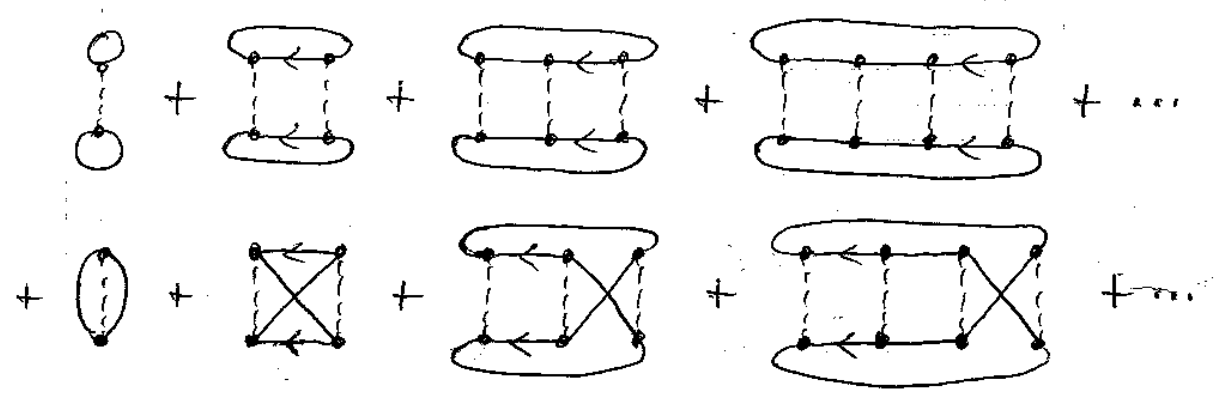
### 4) T-Matrix-Näherung

Sogenannte Leiter-Diagramme bilden ebenfalls eine geometrische Reihe und lassen sich formal leicht summieren. Die T-Matrix-Näherung betrachtet die sogenannte Teilchen-Teilchen-Leiter:

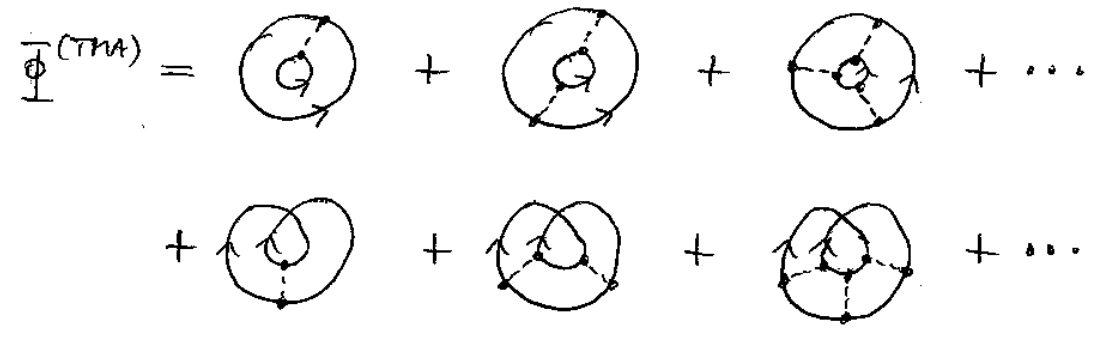


aus der sich das folgende erzeugende Funktional konstruieren lässt:

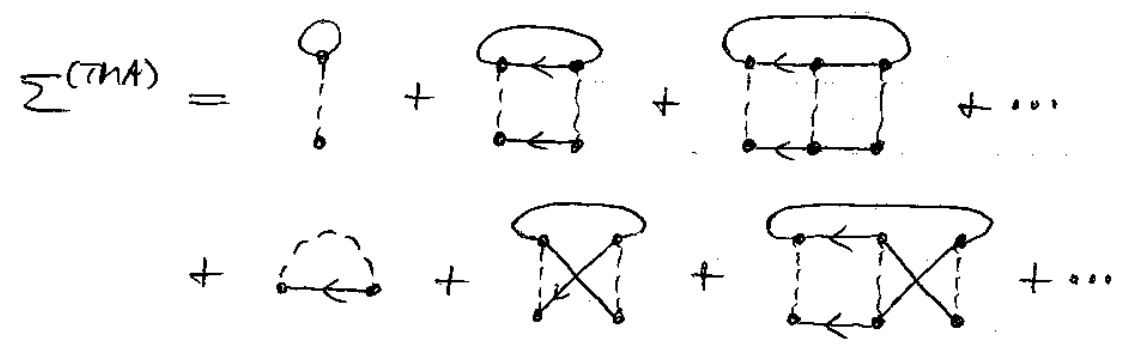
$$\bar{\Phi}^{(TMA)} =$$



Oder:



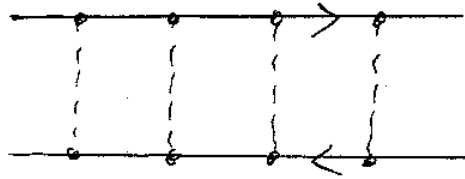
⇒ TMA-Selbstenergie



Für das Hubbard-Modell verschwinden die Diagramme der jeweils 2. Zeile (Austauschdiagramme), da die Wechselwirkung nur zwischen Elektronen mit unterschiedlichem Spin  $\uparrow, \downarrow$  auftritt.

# 5) Teilchen - Loch - Leiter

Aus der Teilchen - Loch - Leiter

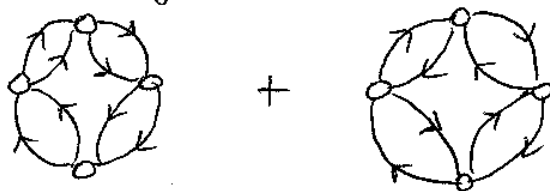


gewinnen wir die folgende erhaltende Näherung:

$$\Phi^{(TL)} = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \text{[Diagram 3]} + \text{[Diagram 4]} + \dots$$

$$\Sigma^{(TL)} = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \text{[Diagram 3]} + \text{[Diagram 4]} + \dots$$

Auf diese Weise lassen sich durch Partialsummen von  $\Phi$ -Diagrammen weitere erhaltende Näherungen konstruieren. Als letztes Beispiel sei die sogenannte fluctuation-exchange approximation genannt (FLEX). Sie kombiniert Ring-Diagramme, Teildien-Teildien- sowie Teildien-Loch-Leitern. Das allgemeine (FLEX-) Diagramm  $n$ -ter Ordnung ist (Bsp.  $n=4$ ):



wobei "o" als Abkürzung für beliebig einsetzende

Vertices steht, die mit den Pfeilrichtungen kompatibel sind.

## VI E Thermodynamische Eigenschaften

### normaler Fermi-Flüssigkeiten

Aus der Diagrammdarstellung des großkanonischen Potentials lassen sich - neben dem Luttinger-Theorem - weitere, sehr allgemeine physikalische Eigenschaften normaler Fermi-Flüssigkeiten ableiten. Die weiter unten diskutierten Ergebnisse werden von erhaltenen Näherungen respektiert.

#### 1) Spezifische Wärme für kleine Temperaturen

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{N,V} = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{N,V} \quad -S = \left. \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right|_{\mu,V}$$

Wir werden im folgenden sehen, dass

$$\Omega(T, \mu, V) = \Omega^{(T=0)}(\mu, V) - \frac{1}{2} \mu(\mu, V) T^2 + \dots$$

für kleine Temperaturen. Dann folgt:

$$S = \mu(\mu, V) T + \dots$$

Halten wir  $N$  anstelle von  $\mu$  fest, um  $C_V$  zu berechnen und entwickeln  $\mu = \mu(T)$  für kleine  $T$ , so ist also

$$S = \mu(\mu^{(T=0)}, V) T + \dots$$

und



$$C_V = \mu(p^0, V) T + \dots$$

Wie für das ideale Fermi-Gas ist  $C_V$  eine lineare Funktion von  $T$  für kleine  $T$ . Es bleibt als Aufgabe, den Koeffizienten  $\mu$  zu berechnen und den Ansatz für  $\Omega$  zu begründen.

Es gilt: (S. 185)

$$\Omega = \Phi + \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE0^+} S_p \left\{ \ln(-\underline{G}(iE)) - \sum_{\underline{G}(iE)} \underline{G}(iE) \right\}$$

Weiter ist:

$$\frac{\delta \Omega}{\delta \sum_{\underline{G}(iE)} \underline{G}(iE)} = 0$$

Wenn wir also nur in der Temperaturkorrektur niedrigster Ordnung interessiert sind, können wir die explizite  $T$ -Abhängigkeit der Selbstenergie vernachlässigen!

Die einzige verbleibende  $T$ -Abhängigkeit steckt dann nur noch in den Matsubara-Energien, wir erhalten  $\Omega^{(T=0)}$  durch die

Ersetzung 
$$\frac{1}{\beta} \sum_E \mapsto \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} dE$$

aller  $E$ -Summen in  $\Phi$  und der expliziten  $E$ -Summe oben.

Sei  $\Phi = \Phi^{(T=0)} + \delta\Phi + \dots$  wobei  $\delta\Phi$  die Korrektur niedrigster Ordnung ist.

Wegen

$$\Phi = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{\beta} \sum_E S_p \left\{ \sum_{\underline{G}(iE)}^{(2n)} \underline{G}(iE) \right\}$$

ist  $\Phi^{(\tau=0)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dE \operatorname{Sp} \left\{ \sum_{\tilde{\sim}}^{(n)(\tau=0)}(E) \underline{G}^{(\tau=0)}(E) \right\}$

und

$$\delta\Phi = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\beta} \sum_E \operatorname{Sp} \left\{ \sum_{\tilde{\sim}}^{(n)(\tau=0)}(iE) \underline{G}^{(\tau=0)}(iE) \right\} \leftarrow$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_E \operatorname{Sp} \left\{ \sum_{\tilde{\sim}}^{(\tau=0)}(iE) \underline{G}^{(\tau=0)}(iE) \right\} \quad \text{Produktregel!}$$

Damit verbleibt für  $\Omega$ :

höhere T-Korrekturen

$$\Omega = \text{const.} + \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \operatorname{Sp} \left\{ \ln(-\underline{G}^{(\tau=0)}(iE)) \right\} + \dots$$

$$\Rightarrow \Omega - \text{const.} =$$

c.c! : S. 184

$$= \frac{-1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{e^{\beta E} + 1} e^{E\tau} \operatorname{Sp} \ln(-\underline{G}^{(\tau=0)}(E)) dE \quad (C \rightarrow C')$$

$$= \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \left( \underbrace{\operatorname{Sp} \ln(-\underline{G}^{(\tau=0)}(E+i0^+))}_{\operatorname{Sp}} - \underbrace{\operatorname{Sp} \ln(\underline{G}^{(\tau=0)}(E-i0^+))}_{\operatorname{Sp}} \right) dE$$

Sommerfeld-Entwicklung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta x} + 1} f(x) dx = \int_{-\infty}^0 f(x) dx + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 f'(0) + \dots$$

Also:

$$\Omega = \text{const}' - \frac{1}{2\pi i} \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial E} \left( \operatorname{Sp} \ln(-\underline{G}^{(\tau=0)}(E+i0^+)) - \operatorname{Sp} \ln(-\underline{G}^{(\tau=0)}(E-i0^+)) \right)_{E=0}$$

$$\Omega = \text{const}' + \frac{1}{2\pi i} \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial E} \text{Sp} \left( \ln \left( \underline{z} - \mu + \sum_{\tau=0}^{(\tau=0)} (E^\dagger) - E - i0^+ \right) - \ln \left( \underline{z} - \mu + \sum_{\tau=0}^{(\tau=0)} (E^-) - E + i0^+ \right) \right)_{E=0}$$

Zur Berechnung der Ableitung an der Stelle  $E=0$  benötigen wir das Argument des  $\ln$  bis in linearer Ordnung in  $E$ .  
Zur Auswertung der Spur gehen wir zudem zur Diagonal-darstellung über:

$$\eta_{pc}(\mathbb{R}, E) \text{ Eigenwerte von } \underline{z} + \sum_{\tau=0}^{(\tau=0)} (E) \quad (\text{S. 133})$$

$$\eta_{pc}(\mathbb{R}, E^\pm) = \eta_{pc}(\mathbb{R}) + E \delta \eta_{pc}(\mathbb{R}) + \dots \quad (\text{S. 139})$$

$$\text{Sp} \left( \ln \left( \underline{z} - \mu + \sum_{\tau=0}^{(\tau=0)} (E + i0^+) - E - i0^+ \right) - \ln \left( \underline{z} - \mu + \sum_{\tau=0}^{(\tau=0)} (E - i0^+) - E + i0^+ \right) \right)$$

$$= \sum_{\mathbb{R}pc} \left( \ln \left( \eta_{pc}(\mathbb{R}) + E \delta \eta_{pc}(\mathbb{R}) - E - i0^+ - \mu \right) \right)$$

$$\uparrow \text{bis } \Theta(E) \quad - \ln \left( \eta_{pc}(\mathbb{R}) + E \delta \eta_{pc}(\mathbb{R}) - E + i0^+ - \mu \right)$$

$$\uparrow = \begin{cases} (-i\pi) - (i\pi) = -2\pi i & \text{falls } E - (\eta_{pc}(\mathbb{R}) - \mu) - E \delta \eta_{pc}(\mathbb{R}) > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$= \sum_{\mathbb{R}pc} \Theta \left( E - (\eta_{pc}(\mathbb{R}) - \mu) - E \delta \eta_{pc}(\mathbb{R}) \right)$$

eingesetzt:

$$\Omega = \text{const}' - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \sum_{\mathbb{R}pc} \frac{\partial}{\partial E} \Theta \left( E - (\eta_{pc}(\mathbb{R}) - \mu) - E \delta \eta_{pc}(\mathbb{R}) \right) \Big|_{E=0}$$

$$= \text{const}' - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \sum_{\mathbb{R}pc} \delta \left( E - (\eta_{pc}(\mathbb{R}) - \mu) - E \delta \eta_{pc}(\mathbb{R}) \right) \Big|_{E=0} \times (1 - \delta \eta_{pc}(\mathbb{R}))$$

Damit folgt:

$$\Omega = \Omega^{(T=0)} - \frac{1}{2} \mu T^2 + \dots \quad C_V = \mu T + \dots$$

und

$$\mu = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \sum_{\mathcal{R} \neq 0} Z_{pc}^{-1}(\mathcal{R}) \cdot \delta(\mu^{(T=0)} - \eta_{pc}(\mathcal{R}))$$

Dies ist zu vergleichen mit dem entsprechenden Ausdruck für das ideale Fermi-Gas:

$$\mu_0 = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \sum_{\mathcal{R} \neq 0} \delta(\mu_0^{(T=0)} - \epsilon_{rc}(\mathcal{R})) \quad (\text{S. 37})$$

Beiträge kommen in beiden Fällen nur von den Fermi-Flächen  $\eta_{pc}(\mathcal{R}) = \mu^{(T=0)}$  bzw.  $\epsilon_{rc}(\mathcal{R}) = \mu_0^{(T=0)}$ . Im freien System ist  $\mu_0$  durch den Wert der Zustandsdichte an der Fermi-Energie  $\mu_0^{(T=0)}$  bestimmt. In der Fermi-Flüssigkeit übernimmt die Spektraldichte die Rolle der freien Zustandsdichte. Der wesentliche Unterschied liegt im Auftreten des Quasiteilchengewichts  $Z_{pc}(\mathcal{R})$ .  $Z_{pc}(\mathcal{R}) = 1$  im freien System. Für stark wechselwirkende Systeme kann  $Z_{pc}(\mathcal{R})$  sehr klein werden, was zu einer starken Erhöhung von  $\mu$  führt ( $\rightarrow$  "heavy fermions").

Mit Hilfe der Quasiteilchenenergie  $E_{pc}(\mathcal{R})$  (S. 141) ist auch

$$\mu = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \sum_{\mathcal{R} \neq 0} \delta(\mu^{(T=0)} - E_{pc}(\mathcal{R}))$$

Der Zusammenhang mit dem freien System ist hier noch deutlicher.

## 2) T=0-Kompressibilität

Die T=0-Kompressibilität kann sehr einfach aus dem Luttinger-Theorem hergeleitet werden:

$$\kappa = \frac{V}{\langle N \rangle^2} \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu}$$

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbb{R} \in G} \Theta(\mu - \eta_{\mathbb{R}}^{(T=0)})$$

⇒

$$\kappa = \frac{V}{\langle N \rangle^2} \sum_{\mathbb{R} \in G} \delta(\mu - \eta_{\mathbb{R}}^{(T=0)}) \left(1 - \frac{\partial}{\partial \mu} \eta_{\mathbb{R}}^{(T=0)}\right)$$

Vergleiche:

$$\kappa_0 = \frac{V}{\langle N \rangle^2} \sum_{\mathbb{R} \in G} \delta(\mu_0 - \epsilon_{\mathbb{R}}) \quad (\text{S. 36})$$

für das ideale Fermi-Gas.

## 3) Spin-Suszeptibilität

$$\chi = \mu_0 \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial B} \Big|_{T, \mu}$$

Ankopplung des Magnetfelds  $B$ :

$$H \rightarrow H - \sum_{\mathbb{C}} z_{\mathbb{C}} \rho \hat{N}_{\mathbb{C}} B \quad \left(\rho = \frac{1}{2} g \mu_B, \text{ S. 20}\right)$$

Oder:

$$\underline{t} \rightarrow \underline{t} - z_{\mathbb{C}} \rho B \underline{1}$$

Wir berechnen zunächst das magnetische Gesamtmoment  $M$  (Magnetisierung  $M/V$ ):

$$M = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{B}}$$

$$= - \frac{\partial}{\partial \mathcal{B}} \left[ \mathcal{F} + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathcal{E}} e^{i\mathcal{E}t} \text{Sp} \left\{ \ln(-\underline{G}(i\mathcal{E})) - \underline{\Sigma}(i\mathcal{E}) \underline{G}(i\mathcal{E}) \right\} \right]$$

$\mathcal{B}$ -Abhängigkeit von  $\Omega$ :

$$\Omega = \Omega[\Sigma, G[\mathcal{B}, \Sigma]] \quad (\text{analog zu S. 192})$$

Wegen  $\delta\Omega/\delta\Sigma = 0$  braucht nur die explizite  $\mathcal{B}$ -Abhängigkeit berücksichtigt zu werden:

$$\begin{aligned} M &= - \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{\delta \mathcal{F}[\mathcal{G}]}{\delta G_{\alpha\beta}(i\mathcal{E})} \frac{\partial G_{\alpha\beta}(i\mathcal{E})}{\partial \mathcal{B}} \\ &\quad - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathcal{E}} e^{i\mathcal{E}t} \frac{\partial}{\partial \mathcal{B}} \text{Sp} \ln(-\underline{G}(i\mathcal{E})) \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathcal{E}} e^{i\mathcal{E}t} \text{Sp} \left( \underline{\Sigma}(i\mathcal{E}) \frac{\partial}{\partial \mathcal{B}} \underline{G}(i\mathcal{E}) \right) \end{aligned}$$

Weil  $\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta G_{\alpha\beta}(i\mathcal{E})} = \frac{1}{\beta} \Sigma_{\beta\alpha}(i\mathcal{E})$

hebt sich der erste gegen den dritten Term weg. Es bleibt:

$$M = - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathcal{E}} e^{i\mathcal{E}t} \frac{\partial}{\partial \mathcal{B}} \sum_{\mathcal{G}} \text{Sp} \ln(-\underline{G}_{\mathcal{G}}(i\mathcal{E}))$$

wobei ab jetzt der Spinindex in den Zuständen der Ein-Teilchen-ONB explizit dargestellt wird:  $\{ | \alpha \sigma \rangle \}$ .  $\underline{G}_\sigma(iE)$  ist als eine Matrix bzgl. des Index  $\alpha$  aufzufassen. Weiter:

$$\begin{aligned}
(*) \quad M &= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_c \text{Sp} \ln \left( \underline{t} - \mu - z_{\sigma p} \beta + \sum_c \underline{G}_\sigma(iE) - iE \right) \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \sum_c (-z_{\sigma p}) \text{Sp} (-\underline{G}_\sigma(iE)) \\
&= p \sum_c z_c \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \text{Sp} \underline{G}_\sigma(iE) \\
&= p \sum_c z_c \langle \hat{N}_c \rangle = p (\langle \hat{N}_\uparrow \rangle - \langle \hat{N}_\downarrow \rangle)
\end{aligned}$$

Das Ergebnis ist nicht überraschend. Wir können aber auch (analog zu der Rechnung auf S. 193) wie folgt weiterrechnen:

$$\begin{aligned}
M &\stackrel{(*)}{=} \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_c \text{Sp} \ln \left( \underline{t} - \mu - z_{\sigma p} \beta + \sum_c \underline{G}_\sigma(iE) - iE \right) \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \sum_c z_{\sigma p} \frac{\partial}{\partial (z_{\sigma p} \beta)} \text{Sp} \ln (\dots) \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \sum_c z_{\sigma p} \frac{\partial}{\partial (iE)} \text{Sp} \ln \left( \underline{t} - \mu - z_{\sigma p} \beta + \sum_c \underline{G}_\sigma(iE) - iE \right) \\
&\quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\text{(wirkt nur auf...)}} \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_E e^{iE\tau} \sum_c z_{\sigma p} \frac{\partial}{\partial (iE)} \text{Sp} \ln \left( \underline{t} - \mu - z_{\sigma p} \beta + \sum_c \underline{G}_\sigma(iE) - iE \right) \\
&\quad + R
\end{aligned}$$

Analog zur Rechnung auf S. 194 ff. sieht man, daß der Restterm

$$R \equiv \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbb{E}} e^{i\mathbb{E}t} \sum_{\mathbb{G}} p z_{\mathbb{G}} \text{Sp} \left( \underline{G}_{\mathbb{G}}(i\mathbb{E}) \frac{\partial \underline{\Sigma}_{\mathbb{G}}(i\mathbb{E})}{\partial (i\mathbb{E})} \right)$$

für  $T=0$  verschwindet.

Wieder analog zur Rechnung auf S. 197 ff. ist für  $T=0$  also:

$$M = p \sum_{\mathbb{G}} z_{\mathbb{G}} \cdot \sum_{\mathbb{R}_p} \Theta(\mu - \eta_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R}))$$

Die  $\uparrow$  und  $\downarrow$ -Fermi-Flächen  $\mu = \eta_{p\uparrow,\downarrow}(\mathbb{R})$  sind jetzt für  $\mathbb{B} \neq 0$  verschieden voneinander. Das Luttinger-Theorem gilt für jede Spinrichtung separat:

$$\langle N_{\mathbb{G}} \rangle = \sum_{\mathbb{R}_p} \Theta(\mu - \eta_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R}))$$

Wie üblich ist  $\eta_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R}) \equiv \eta_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R}, i\omega^+)$ , und  $\eta_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R}, E)$  sind die Eigenwerte von  $\underline{t} + \underline{\Sigma}_{\mathbb{G}}(E) - z_{\mathbb{G}} p \mathbb{B} \underline{1}$ . Wir schreiben  $\eta_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R}) = \bar{\eta}_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R}) - z_{\mathbb{G}} p \mathbb{B}$ .  $\eta_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R})$  sind also die Eigenwerte von  $\underline{t} + \underline{\Sigma}_{\mathbb{G}}(i\omega^+)$ .

Für die  $T=0$ -Suszeptibilität folgt damit:

$$\chi(T=0) = \mu_0 \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial \mathbb{B}} = \frac{\mu_0}{V} p \sum_{\mathbb{G}} z_{\mathbb{G}} \sum_{\mathbb{R}_p} \frac{\partial}{\partial \mathbb{B}} \Theta(\mu^{(T=0)} - \eta_{p\mathbb{G}}(\mathbb{R}))$$



$$= \frac{\mu_0}{V} \rho \sum_c z_c \sum_{\mathbb{R}^c} \delta(\mu^{(T=0)} - \eta_{pc}(\mathbb{R})) \cdot \frac{\partial(-\eta_{pc}(\mathbb{R}))}{\partial \beta} \quad (223)$$

$$= z_0 \rho \left( 1 - \frac{1}{z_0 \rho} \frac{\partial \bar{\eta}_{pc}(\mathbb{R})}{\partial \beta} \right)$$

$$\chi(T=0) = \frac{\mu_0}{V} \rho^2 \sum_{\mathbb{R}^c} \delta(\mu^{(T=0)} - \eta_{pc}(\mathbb{R})) \cdot \left( 1 - \frac{1}{z_0 \rho} \frac{\partial \bar{\eta}_{pc}(\mathbb{R})}{\partial \beta} \right)$$

Kann verglichen mit

$$\chi_0(T=0) = \frac{\mu_0}{V} \rho^2 \sum_{\mathbb{R}^c} \delta(\mu_0^{(T=0)} - \epsilon_{rc}(\mathbb{R})) \quad (S. 38)$$

für das freie System.

Für ein Ein-Band-Modell (z.B. Hubbard-Modell) ist

$$\eta_{pc}(\mathbb{R}) \rightarrow \epsilon(\mathbb{R}) + \Sigma_{\mathbb{R}^c}(i\omega^+) = \epsilon(\mathbb{R}) + \Sigma_{\mathbb{R}}(i\omega^+)$$

$$Z_{pc}^{-1}(\mathbb{R}) \rightarrow Z_c^{-1}(\mathbb{R}) = 1 - \frac{\partial}{\partial E} \Sigma_{\mathbb{R}^c}(E) \Big|_{E=i\omega^+} \quad \uparrow \beta=0$$

Mit

$$A_{\mathbb{R}^c}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{E - (\epsilon(\mathbb{R}) - \mu) - \Sigma_{\mathbb{R}^c}(E + i0^+) + z_0 \rho \beta}$$

$$A_{\mathbb{R}}(E) = \sum_c A_{\mathbb{R}^c}(E)$$

gilt zusammenfassend:

$$\mu = \frac{\hbar^2}{3} k_B^2 \sum_{\mathbb{R}} \left( 1 - \frac{\partial \Sigma_{\mathbb{R}}(\omega^+)}{\partial E} \right) A_{\mathbb{R}}(0)$$

$$\kappa(T=0) = \frac{V}{\langle N \rangle^2} \sum_{\mathbb{R}} \left( 1 - \frac{\partial \Sigma_{\mathbb{R}}(\omega^+)}{\partial \mu} \right) A_{\mathbb{R}}(0)$$

$$\chi(T=0) = \frac{\mu_0}{V} \rho^2 \sum_{\mathbb{R}_C} \left( 1 - \frac{1}{z_{\mathbb{R}_C}} \frac{\partial \Sigma_{\mathbb{R}_C}(\omega^+)}{\partial \mathcal{B}} \right) A_{\mathbb{R}_C}(0)$$

Diese Relationen sind denen des idealen Fermi-Gases (Sommerfeld-Modell) sehr ähnlich. Ein System (evtl. sogar stark) wechselwirkender Fermionen ist also in seinen physikalischen Eigenschaften nicht qualitativ von einem System nicht-wechselwirkender Fermionen verschieden – solange man sich auf kleine Anregungsenergien  $E \rightarrow 0$  und auf kleine Temperaturen  $T \rightarrow 0$  beschränkt. Die Abweichung der jeweiligen Vorfaktoren von 1 spiegelt die Quasiteilchen-Wechselwirkung in der Fermi-Flüssigkeit wider.

Es versteht sich, dass die Relationen nur für Fermi-Flüssigkeiten Gültigkeit haben – ihre Ableitung basiert wesentlich auf der Annahme, dass die Diagrammentwicklung stirn macht (konvergiert). Zusammen mit dem fundamentalen Luttinger-Theorem können wir sie in die Reihe der Fermi-Flüssigkeits-Eigenschaften mit aufnehmen (vergl. S. 148 ff.).

Es kann passieren, daß eine starke Anasiteildom-  
Wechselwirkung zur Divergenz einer der Vorfaktoren  
führt:

$(1 - \frac{\partial \Sigma(\omega)}{\partial E}) \rightarrow \infty$  : Lokalisierung, Mott-Übergang

$(1 - \frac{\partial \Sigma(\omega)}{\partial \mu}) \rightarrow \infty$  : spontane Ladungsordnung

$(1 - \frac{\partial \Sigma(\omega)}{\partial B}) \rightarrow \infty$  : spontane magnetische Ordnung

Spätestens dann bricht das Fermi-Flüssigkeits-Bild  
zusammen. Für Mott-Isolatoren und spontan  
ordnende Systeme ist die "diagrammatische Methode"  
somit fragwürdig und muß strenggenommen neu  
begründet werden.

# Korrekturen

①

1) Einheiten, so dass  $t_1 = 1$

2) S. 20, unten  $|N_i, n_{k_1}, \dots\rangle \rightarrow |N_i, n_{k_1}, \dots\rangle^{(E)}$   
(3x) und S. 21 oben

3) S. 24/25 Endzustand  $\dots |E_0\rangle \rightarrow \dots |E_m\rangle$   
(z.B.  $c^\dagger |E_0\rangle \rightarrow c^\dagger |E_m\rangle$ )

4) S. 32  $A_{\alpha\beta}^{(0)}(E) = \sum_{kk'} U_{kk'} U_{k'p}^{-1} S_{kk'} A_k^{(0)}(E)$   
 $A_{\alpha\beta}^{(0)}(E) = \sum_k U_{kk} U_{kp}^{-1} \delta(E - (E_k - \mu))$  } ohne  $\frac{1}{2\pi}$ !

5) S. 33  $\rho_0(E) = \sum_k A_{\alpha k} \delta(E - \mu)$  nicht:  $\sum_c$

6) S. 35

$$\frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} = \int_{-\infty}^{\infty} f(E - \mu) \rho^{(0)'}(E) dE$$

$$= \int_{-\infty}^{\mu} \rho^{(0)'}(E) dE + \frac{\bar{u}^2}{6} (k_B T)^2 \rho^{(0)''}(\mu) + O(T^4)$$

= ... analog zu S. 37, 3. letzte Zeile ...

$$= \rho^{(0)}(E_F) \left[ 1 + \frac{\bar{u}^2}{6} (k_B T)^2 \left( \frac{\rho^{(0)''}(E_F)}{\rho^{(0)}(E_F)} - \left( \frac{\rho^{(0)'}(E_F)}{\rho^{(0)}(E_F)} \right)^2 \right) \right] + O(T^4)$$

$$\Rightarrow k_0 = \frac{V}{\langle N \rangle_0^2} \rho^{(0)}(E_F) \cdot [\dots]$$

## Reelle Spektraltheorie

(2)

Sei  $\{|r\rangle\}$  eine ONB aus Eigenzuständen von  $\mathcal{H}$ ,  $\mathcal{H}|r\rangle = E_r|r\rangle$

Entwicklung von  $|r\rangle$  in Basiszustände der Besetzungszahldarstellung

$$|r\rangle = \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots} x_{\alpha_1 \alpha_2 \dots} |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots\rangle^{(\mathcal{E})}$$

Definiere Operator  $K$  durch Festlegung seiner Wirkungsweise auf ONB  $\{|r\rangle\}$ :

$$K|r\rangle \equiv \sum_{\alpha_1 \dots} x_{\alpha_1 \dots}^* |n_{\alpha_1} \dots\rangle^{(\mathcal{E})}$$

$K$  ist antilinear, d.h.  $(x_1, x_2 \in \mathbb{C})$ :

$$K(x_1|\psi_1\rangle + x_2|\psi_2\rangle) = x_1^* K|\psi_1\rangle + x_2^* K|\psi_2\rangle$$

Es gilt:

$$[K, \mathcal{H}]_- = 0$$

Beweis:

$$KH|n_{\alpha_1} \dots\rangle^{(\mathcal{E})} = K \left[ \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v(\alpha\beta\gamma\delta) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \right] |n_{\alpha_1} \dots\rangle^{(\mathcal{E})}$$

$$= K \sum_{\beta_1 \beta_2 \dots} y_{\beta_1 \beta_2 \dots} |n_{\beta_1} n_{\beta_2} \dots\rangle^{(\mathcal{E})} = \sum_{\beta_1 \beta_2 \dots} y_{\beta_1 \beta_2 \dots} |n_{\beta_1} \dots\rangle^{(\mathcal{E})}$$

$\uparrow$  reell! (\*)

$$= H|n_{\alpha_1} \dots\rangle^{(\mathcal{E})} = HK|n_{\alpha_1} \dots\rangle^{(\mathcal{E})} \quad \text{q.e.d.}$$

(\*) :  $t_{\alpha\beta}, v(\alpha\beta\gamma\delta)$  per def. reell und  $c_{\alpha}^{(\dagger)} |n_{\alpha_1} \dots\rangle^{(\mathcal{E})}$  erzeugt nur reelle Koeffizienten in der Besetzungszahldarstellung

(S. 11)

Analog:  $[c_{\alpha}, K]_- = 0$

Sei  $\{|r\rangle\}$  eine ONB aus Eigenzuständen von  $\mathcal{H}$ ,  $\mathcal{H}|r\rangle = E_r|r\rangle$

Mit  $|r\rangle$  ist auch  $|r^*\rangle \equiv K|r\rangle$  Eigenvektor von  $\mathcal{H}$ ,  
denn  $\mathcal{H}|r^*\rangle = \mathcal{H}K|r\rangle = K\mathcal{H}|r\rangle = KE_r|r\rangle = E_r^*|r^*\rangle$   
 $= E_r|r\rangle$  (c.A = A c\* f. antilineare Operatoren A  
und  $c \in \mathbb{C}$ )

$c|r\rangle + K(c|r\rangle) \equiv |\tilde{r}\rangle$  kann mit geeignetem  $c \in \mathbb{C}$   
auf 1 normiert werden,  $|\tilde{r}\rangle$  ist Eigenvektor zum Eigenwert  
 $E_r$  und  $K|\tilde{r}\rangle = |\tilde{r}\rangle$  ( $K|\tilde{r}\rangle = K(c|r\rangle + Kc|r\rangle)$   
 $= c^*K|r\rangle + Kc^*K|r\rangle = c^*K|r\rangle + Kc^*|r^*\rangle$   
 $= Kc|r\rangle + cK|r^*\rangle = Kc|r\rangle + c|r\rangle = |\tilde{r}\rangle$ )

Analog ist  $|\tilde{r}^*\rangle \equiv c|r\rangle - Kc|r\rangle$  Eigenvektor zum  
Eigenwert  $E_r$  und  $K|\tilde{r}^*\rangle = -|\tilde{r}^*\rangle$

So kann eine ONB bestehend aus gemischten  
Eigenvektoren von  $\mathcal{H}$  und  $K$  konstruiert werden!  
(s. auch Messiah: "Quantummechanik" Bd. II S. 131 ff.)

Sei  $\{|r\rangle\}$  diese ONB, d.h.  $\mathcal{H}|r\rangle = E_r|r\rangle$  und  
 $K|r\rangle = \pm|r\rangle$

In der Entwicklung  $|r\rangle = \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots} x_{\alpha_1 \alpha_2 \dots} |n_{\alpha_1 \alpha_2 \dots}\rangle^{(s)}$  sind  
wegen  $K|r\rangle = \pm|r\rangle \Leftrightarrow \sum_{\dots} x_{\dots}^* | \dots \rangle^{(s)} = \sum_{\dots} (\pm x_{\dots}) | \dots \rangle^{(s)}$

$\Leftrightarrow x_{\dots}^* = \pm x_{\dots}$  alle Koeffizienten entweder reell oder  
rein imaginär.

Analog die  $y_{\dots}$  in der Entwicklung  $|s\rangle = \sum_{\dots} y_{\dots} | \dots \rangle^{(E)}$  (F)

Also ist

$$\langle r | c | s \rangle \langle s | c^\dagger | r \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{\delta} \langle n_{\alpha} | c | n_{\beta} \rangle \langle n_{\gamma} | c^\dagger | n_{\delta} \rangle$$

$\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$   
 $x_{\alpha}^* \quad y_{\beta} \quad y_{\gamma}^* \quad x_{\delta}$

auf jeden Fall reell!

Durch Vergleich mit der Lehmann-Darstellung der Spektraldichte folgt also, daß die Spektraldichte  $A_{rs}(E)$  reell ist.

- S. 67,  $z < 0$

$$\begin{aligned}
 \square G_{\alpha\beta}(z) &= -\text{Sp} \left( e^{-\beta \mathcal{H}} T_z (c_{\alpha,H}(z) c_{\beta,H}^\dagger(0)) \right) \\
 &= -\text{Sp} \left( e^{-\beta \mathcal{H}_0} S(\beta, 0) T_z (c_{\alpha,H}(z) c_{\beta,H}^\dagger(0)) \right) \\
 &= -\text{Sp} \left( e^{-\beta \mathcal{H}_0} S(\beta, 0) T_z (S(0, z) c_\alpha(z) S(z, 0) c_\beta^\dagger(0)) \right) \\
 &= -\text{Sp} \left( e^{-\beta \mathcal{H}_0} T_z \left( \underbrace{S(\beta, 0) S(0, z)}_{S(\beta, z)} c_\alpha(z) S(z, 0) c_\beta^\dagger(0) \right) \right) \\
 &= -\text{Sp} \left( e^{-\beta \mathcal{H}_0} T_z (S(\beta, 0) c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(0)) \right) \quad \checkmark
 \end{aligned}$$

- S. 69, Anzahl der Summenden in der totalen Paarung von  $n_0$  Konstruktionsoperatoren:  $(n_0-1)(n_0-3)(n_0-5) \cdots 3 \cdot 1$  (mitgezählt werden hier auch Kontraktionen zwischen zwei Vermiditern und zwischen zwei Erzeugern, die wegen Teilchenzahlerhaltung keinen Beitrag liefern)
- S. 70, unten: 2)  $\alpha_u = c_u^\dagger$  und  $\alpha_v = c_u$
- Wir definieren für  $a \in \mathbb{C}$ :  $T_z(a) = a$   
( $\Rightarrow$  konsistente Darstellung der S-Matrix als  $S(z_2, z_1) = T_z \exp(-\int_{z_1}^{z_2} V(z^n) dz^n)$ )
- für gleichzeitige Operatoren gilt:  $c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z) - \varepsilon c_\beta^\dagger(z) c_\alpha(z) = \delta_{\alpha\beta}$   
Die Umformung  $T_z(c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z)) \stackrel{?}{=} T_z(\delta_{\alpha\beta} + \varepsilon c_\beta^\dagger(z) c_\alpha(z))$  ist aber dennoch nicht erlaubt, da sie zu Widersprüchen führen würde. Wir vereinbaren / definieren, daß ein Argument von  $T_z$  nur das "direkte Vertauschen" erlaubt ist:  
 $T_z(c_\alpha(z) c_\beta^\dagger(z)) = \varepsilon T_z(c_\beta^\dagger(z) c_\alpha(z)) \stackrel{\text{Def}}{=} \varepsilon c_\beta^\dagger(z) c_\alpha(z).$



(Korrekturen Forts.)

⑥

- S. 96: 2.-Letzte Gleichung  $G_k^{(0)}(z) = \dots$  statt  $G_k(z) = \dots$
- S. 97:  $z_k \leftarrow z_k'$  und  $z \leftarrow z_1$  (Pfeile!)
- S. 121: 3.-Letzte Zeile  $1/\beta^2$  statt  $1/\beta$
- S. 122 unten rechts: der Weg ist:  $C'$
- S. 139 ... Also:  $\eta_C(\mathbb{R}) = \int_C^+ (\mathbb{R}, i\sigma) [\underline{\xi}(\mathbb{R}) + A_{\mathbb{R}C}] \underline{\xi}_C(\mathbb{R}, i\sigma)$   
...
- S. 140: 1. Formel  $G_{\mathbb{R}C}(E^+) \rightarrow \underline{G}_{\mathbb{R}C}(E^+)$
- S. 151:  $[f(x)f(-y)f(y-x) + f(-x)f(y)f(x-y)]$   
↑
- S. 154, 2. gerahmte Formel:  $-\beta \Delta \Omega = \langle S(\beta, 0) \rangle_{\text{aus.}}^{(0)} - 1$
- S. 170 unten: Wie oben diskutiert  $\mathbb{I} \neq \Omega$  (bzw.  $\mathbb{I} \neq \Delta \Omega$ )
- S. 173, 4. Bsp.:  $\frac{\delta F_1}{\delta \dots}$  ...
- S. 174:  $2X_{\text{px}}(iE) + \textcircled{6} \sum_{\mu} X_{\dots}$  ...
- S. 193: ... umwandeln:  $\frac{\partial}{\partial \mu} \text{Sp} \ln(-Q(iE)) \dots$
- S. 200: Für ein Ein-Band-Modell ... ist  $\langle \bar{N} \rangle = \frac{(2\pi)^3}{V} 2 V^{(F_2)}$
- S. 200: Luttinger-Theorem: ... im  $\mathbb{R}^3$ -Raum  $\propto \frac{(2\pi)^3}{V}$

(n.v.a.)