

Vielteilchentheorie

Skript zur gleichnamigen Vorlesung
Sommersemester 2008, Universität Hamburg

Prof. Dr. Michael Potthoff

Hamburg, 4.6.2008

Inhaltsverzeichnis

1	Quantenstatistik	9
1.1	Prinzipien der Quantenmechanik	9
1.2	Quantenmechanisches N -Teilchen-System	11
1.3	Gemischter Zustand, Dichteoperator	14
1.4	Shannon-Information	17
1.5	Großkanonische Gesamtheit	19
2	Zweite Quantisierung	23
2.1	Systeme identischer Teilchen	23
2.2	Hilbert-Raum der physikalischen Zustände	25
2.3	(Anti-)symmetrisierte Produktzustände	27
2.4	Besetzungszahldarstellung	28
2.5	Erzeuger und Vernichter	33
2.6	Darstellung von Observablen	36
2.7	Spezielle Observablen	39
2.8	Unitäre Transformationen	43
2.9	Unterscheidbare Teilchen	44
2.10	Feldoperatoren	46
2.11	Quantisierung der Schrödinger-Gleichung	47
3	Ideale Quanten-Gase und Mean-Field-Theorie	51
3.1	Ideales Fermi- und Bose-Gas	51
3.2	Ideales Gas aus Quasiteilchen	58
3.3	Response-Größen und Korrelationsfunktionen	62
3.4	Verallgemeinerters Ritzsches Prinzip	65
3.5	Wick-Theorem	68
3.6	Mean-Field-Theorie	74
4	Wechselwirkende Viel-Elektronen-Systeme	81
4.1	Gittermodelle	81
4.2	Hubbard-Modell	85
4.3	Grenzfälle und Phasendiagramm	86
4.4	Symmetrien	89

4.5	Anderson-Modelle	93
4.6	Mehrband-Modelle	94
4.7	Effektive Niederenergie-Modelle	97
4.8	Heisenberg- und t - J -Modell	100
4.9	Kondo-Modell	105
4.10	Kondo-Gitter-Modell	108
5	Green-Funktionen	111
5.1	Spektroskopien	111
5.2	Spektraldichte	114
5.3	Linear-Response-Theorie	121
5.4	Frequenzabhängige Green-Funktion	125
5.5	Retardierte und avancierte Green-Funktion	130
5.6	Linear Response, statischer Limes	134
5.7	Bewegungsgleichung	140
5.8	Selbstenergie und Dyson-Gleichung	144
6	Einfache Anwendungen	149
6.1	Atomares Hubbard-Modell	149
6.2	Hubbard-I-Näherung und Mott-Isolator	153

Vielteilchentheorie

geplanter Inhalt:

- **Quantenmechanik, Quantenstatistik**
- **Zweite Quantisierung**
- **Ideale Quanten-Gase und Mean-Field-Theorie**
- **Wechselwirkende Viel-Elektronen-Systeme**
- **Effektive Niederenergie-Modelle**
- **Spontane Symmetriebrechung**
- **Anregungen von Viel-Teilchen-Systemen**
- **Green-Funktionen**
- **Diagrammatische Störungstheorie**
- **Funktionaltheoretische Methoden**
- **Dynamische Mean-Field-Theorie**
- **Korrelationsinduzierter (Mott) Isolator**

mögliche weitere Themen:

- **Pfadintegrale**
- **Magnetische Ordnung**
- **Supraleitung**
- **Numerische Verfahren**
- **Dichte-Funktional-Theorie**
- **Quanten-Cluster-Theorien**
- **Unordnung**

Literaturauswahl

umfassend, einführend:

- W. Nolting: *Grundkurs Theoretische Physik, Band 7* (Vieweg)
- E.K.U. Gross, E. Runge: *Veilteilchentheorie* (Teubner)
- A. L. Fetter, J. D. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill)
- G. D. Mahan: *Many-Particle Physics* (Plenum)

spezielle Themen:

- P. Nozières, D. Pines: *The Theory of Quantum Liquids* (Addison-Wesley)
- E. H. Lieb, D. C. Mattis: *Mathematical Physics in One Dimension* (Academic)
- F. Gebhard: *The Mott Metal-Insulator Transition* (Springer)
- A. C. Hewson: *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press)
- H. E. Stanley: *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Academic)
- W. Nolting: *Quantentheorie des Magnetismus I, II* (Teubner)
- G. Czycholl: *Theoretische Festkörperphysik* (Vieweg)

spezielle Methoden:

- A. A. Abrikosow and L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski: *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice-Hall)
- R. M. Dreizler and E. K. U. Gross: *Density Functional Theory* (Springer)
- J. W. Negele, H. Orland: *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley)
- H. Eschrig: *The Fundamentals of Density Functional Theory* (Teubner)

Viel-Teilchen-Theorie: Motivation

- **reale Systeme** sind meist als **quantenmechanische Viel-Teilchen-Systeme** aufzufassen
(z.B. Atomkerne, Atome, Moleküle, Nanostrukturen, Mesoskopische Systeme, Festkörper)
- meist Systeme mit (starker) **Wechselwirkung**
Beschreibung von Vielteilchensystemen daher i.allg. nicht reduzierbar auf Ein-Teilchen-Konzepte
Bild unabhängiger Teilchen nicht haltbar
- **Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen** erzwingt (Anti-)Symmetrisierung der Viel-Teilchen-Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2, \dots)$
Formalismus der **zweiten Quantisierung** (Erzeuger, Vernichter)
- Viel-Teilchen-Wellenfunktion von 10^{23} Teilchen uninteressant
neue Basisgrößen, z.B. Erwartungswerte, Korrelationsfunktionen, **Green-Funktionen**, zu diskutieren
- Ein-Teilchen-Problem ($H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$) im wesentlichen lösbar (ggfs. numerisch), Viel-Teilchen-Problem i.allg. nicht exakt lösbar
neue Methodik erforderlich (Mean-Field-Ansätze, Feynman-Diagramme, QMC, Pfadintegral, Funktionaltheoretische Methoden, etc.)
- qualitativ neue **Phänomene**:
Fermiflüssigkeiten, Luttinger-Flüssigkeiten, Schwerfermionenverhalten, Kondo-Effekt, Bose-Einstein-Kondensation, Supraleitung, kollektiver Magnetismus, Mott-Isolatoren, (Quanten-)Phasenübergänge, etc.

Kapitel 1

Quantenstatistik

1.1 Prinzipien der Quantenmechanik

Zustand

$$|\Psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \text{mit } \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$$

bzw.

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (\text{Projektor})$$

Zustandsraum:

$$\{|\Psi\rangle\} = \mathcal{H} \quad \text{Hilbert-Raum}$$

Observable: hermitesche Operatoren auf \mathcal{H} :

$$A = A^\dagger$$

mögliche Messwerte: Eigenwerte a_r von A

$$A|a_r, \gamma\rangle = a_r|a_r, \gamma\rangle \quad (\gamma = 1, \dots, g_r, g_r: \text{Entartung von } a_r)$$

$|a_r, \gamma\rangle$ Eigenzustand von A zum Eigenwert a_r

QM:

- keine sichere Vorhersage einzelner Messungen
- **prinzipielle** Unvorhersagbarkeit, auch bei **vollständiger Präparation** eines **reinen Zustands** $|\Psi\rangle$
- **objektive WK**
- Quantenstatistik: gemischte Zustände mit weiteren ("subjektiven") WK

Messung von A am System im Zustand $|\Psi\rangle$ liefert a_r mit WK

$$P(a_r) = |\langle a_r | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | a_r \rangle \langle a_r | \Psi \rangle = \langle \Pi(a_r) \rangle_\Psi$$

$\Pi(a_r)$: Projektor auf den Unterraum zum Eigenwert a_r

bei Entartung von a_r :

$$P(a_r) = \sum_{\gamma} |\langle a_r, \gamma | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | \sum_{\gamma=1}^{g_r} |a_r, \gamma\rangle \langle a_r, \gamma| \Psi \rangle = \langle \Pi(a_r) \rangle_\Psi$$

Systemzustand nach der Messung (mit Resultat a_r):

$$\Pi(a_r)|\Psi\rangle \quad \text{“Kollaps”, akausale Entwicklung}$$

Präparation eines reinen Zustands $|\Psi\rangle$.

Messung eines **vollständigen** Satzes kommutierender Observabler

$$|a_r, b_s, \dots\rangle = \Pi(a_r)\Pi(b_s)\dots|\Psi\rangle$$

Erwartungswert von A bei Messung im Zustand Ψ :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\Psi &= \sum_r P(a_r) a_r = \sum_{r,\gamma} |\langle a_r, \gamma | \Psi \rangle|^2 a_r \\ &= \sum_{r,\gamma} \langle \Psi | a_r, \gamma \rangle a_r \langle a_r, \gamma | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle \end{aligned}$$

zeitliche Entwicklung des Zustands:

$$|\Psi\rangle = |\Psi(t)\rangle$$

Anfangsbedingung:

$$|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi_0\rangle$$

Dynamik: Hamilton-Operator

$$H = H(q, p) \quad \text{klassische Hamilton-Fkt. aber } [q, p] = i\hbar$$

Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad \text{Schrödinger-Gleichung}$$

formale Lösung:

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)\right) |\Psi(t_0)\rangle = U(t - t_0) |\Psi(t_0)\rangle$$

mit Zeitentwicklungsoperator U (H nicht explizit zeitabhängig)

Zeitabhängigkeit eines Erwartungswerts:

$$\langle A \rangle_t = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \quad \text{Schrödinger-Bild}$$

$$\begin{aligned}
 &= \langle \Psi(0) | e^{\frac{i}{\hbar} H t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \Psi(0) \rangle \\
 &= \langle \Psi(0) | A(t) | \Psi(0) \rangle \quad \text{Heisenberg-Bild}
 \end{aligned}$$

mit: $A(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} H t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$

Schrödinger-Bild:

- $A = A(q, p)$ Operatoren zeitunabhängig
 - $|\Psi(t)\rangle$ Zustände zeitabhängig \rightarrow Schrödinger-Gleichung
-

Heisenberg-Bild

- Operatoren zeitabhängig \rightarrow Heisenberg-Gleichung
- Zustände $|\Psi\rangle$ zeitunabhängig

Heisenberg-Gleichung (A nicht explizit zeitabhängig):

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

Erhaltungsgrößen:

$$[A, H] = 0 \quad \rightarrow A = \text{const.}$$

Energieerhaltung:

$$[H, H] = 0 \quad \rightarrow H = \text{const.}$$

1.2 Quantenmechanisches N -Teilchen-System

Ein-Teilchen-Hilbert-Raum: \mathcal{H}_1

ONB von \mathcal{H}_1 :

$$\begin{aligned}
 &\{|\phi_\alpha\rangle\} \\
 &\langle \phi_\alpha | \phi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{Orthonormierung}) \\
 &\sum_\alpha |\phi_\alpha\rangle \langle \phi_\alpha| = \mathbf{1} \quad (\text{Vollständigkeit})
 \end{aligned}$$

α : diskreter Index! (konzeptionell: Teilchen in einer (makroskopischen) Box vermeidet formale Schwierigkeiten bei überabzählbaren Basis)

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

ONB von $\mathcal{H}_1^{(i)}$:

$$\{|\phi_\alpha^{(i)}\rangle\}$$

N -Teilchen-Hilbert-Raum:

$$\boxed{\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \mathcal{H}_1^{(2)} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_1^{(N)}} \quad (\text{Tensorprodukt})$$

ONB von \mathcal{H}_N :

$$\{|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle|\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle\} \quad \text{Produktzustände}$$

Index oben: Teilchen

Index unten: vollständiger Satz von Quantenzahlen

es folgt:

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

falls \mathcal{H}_1 endlichdimensional bzw. $\dim \mathcal{H}_1^{(i)} = \dim \mathcal{H}_1$

beachte: Definition von \mathcal{H}_N nur für unterscheidbare Teilchen (s.u.)

Orthogonalität:

$$\boxed{\langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \langle \phi_{\alpha_2}^{(2)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \cdot | \phi_{\beta_1}^{(1)} \rangle | \phi_{\beta_2}^{(2)} \rangle \cdots | \phi_{\beta_N}^{(N)} \rangle = \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \phi_{\beta_1}^{(1)} \rangle \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \phi_{\beta_N}^{(N)} \rangle = \delta_{\alpha_1 \beta_1} \cdots \delta_{\alpha_N \beta_N}}$$

Vollständigkeit:

$$\boxed{\sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)}| \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)}| = \mathbf{1}}$$

Bestimmung eines Energie-Eigenzustands:

→ Darstellung des Hamilton-Operators H in ONB

$$H = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N, \beta_1, \dots, \beta_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)}| \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)}| H | \phi_{\beta_1}^{(1)}\rangle \cdots | \phi_{\beta_N}^{(N)}\rangle \langle \phi_{\beta_1}^{(1)}| \cdots \langle \phi_{\beta_N}^{(N)}|$$

mit $r = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$, $s = (\beta_1, \dots, \beta_N)$ ist:

$$H = \sum_{rs} H_{rs} |r\rangle \langle s|$$

Eigenwerte/-zustände von $H \leftrightarrow$ Eigenwerte/-zustände der Matrix H_{rs}

$$H_{rs} = \langle r|H|s\rangle$$

Matrixdimension:

$$\prod_{i=1}^N \dim \mathcal{H}_1^{(i)} = (\dim \mathcal{H}_1)^N \quad (\text{bei gleichen Dimensionen})$$

für Diagonalisierung von Matrizen \propto Matrixdimension³, also:

$$\text{Aufwand} \propto (\dim \mathcal{H}_1)^{3N}$$

$$\boxed{\text{Aufwand} \propto e^N}$$

Bestimmung der Grundzustandsenergie mit Hilfe des Ritzschen Prinzips:

$$E_0 = \min \frac{\langle \Psi|H|\Psi\rangle}{\langle \Psi|\Psi\rangle}$$

mit

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

$c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}$ Variationsparameter, Anzahl $\propto e^N \rightarrow$

Minimierung der Funktion $E_0(\{c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}\})$:

$$\boxed{\text{Aufwand} \propto e^N}$$

gegeben N -Teilchen-Zustand $|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$

Berechnung des Erwartungswerte einer Observablen A :

$$\langle \Psi|A|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N, \beta_1, \dots, \beta_N} c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}^* c_{\beta_1, \dots, \beta_N} \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | A | \phi_{\beta_1}^{(1)} \rangle \cdots | \phi_{\beta_N}^{(N)} \rangle$$

$2N$ -fache Summe mit jeweils $\dim \mathcal{H}_1$ Termen $\rightarrow \propto e^N$ Summanden

$$\boxed{\text{Aufwand} \propto e^N}$$

Operieren mit N -Teilchen-Zuständen:

$$\boxed{\text{Aufwand} \propto e^N}$$

aber: reiner Zustand enthält zu viel Information

Ausweg durch quantenstatistische Beschreibung?

1.3 Gemischter Zustand, Dichteoperator

Mikrozustand:

$|\Psi\rangle$ **reiner Zustand**

bei unvollständiger Information:

$|\Psi_k\rangle$ mit WK $p(|\Psi_k\rangle) = p_k$ **gemischter Zustand**

- gemischter Zustand = Satz von reinen Zuständen mit zugehörigen WK
- Zustand $|\Psi_k\rangle$ ist eine Zufallsgröße
- **zusätzliche** statistische Beschreibung

definiere **Dichteoperator**

$$\rho = \sum_k p_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k|$$

Operator im Hilbert-Raum (aber nicht als Observable aufzufassen)

beachte: $|\Psi_k\rangle$ können als Zustände nach einer Messung einer Observablen (oder einen Satzes von Observablen) B mit paarweise exklusiven und vollständigen Messresultaten (Eigenwerten) b_k aufgefasst werden

die Aussagen A_k : "System im Zustand $|\Psi_k\rangle$ " sind daher paarweise exklusiv und vollständig (Partition)

in diesem Fall ist $\{|\Psi_k\rangle\}$ eine ONB

die wesentlichen Eigenschaften des Dichteoperators hängen aber nicht von der Orthonormalität ab

Eigenschaften:

Normierung: ($\{|\Psi_k\rangle\}$ ONB)

$$\text{Sp } \rho = \sum_k \langle \Psi_k | \rho | \Psi_k \rangle = \sum_k p_k = 1$$

$$\boxed{\text{Sp } \rho = 1}$$

Positive Definitheit: sei $|\Phi\rangle$ beliebig:

$$\langle \Phi | \rho | \Phi \rangle = \langle \Phi | \sum_k p_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| | \Phi \rangle = \sum_k p_k |\langle \Phi | \Psi_k \rangle|^2 \geq 0$$

$$\boxed{\rho \geq 0}$$

Hermitizität:

$$\rho^\dagger = \left(\sum_k p_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \right)^\dagger = \sum_k p_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| = \rho$$

$$\boxed{\rho = \rho^\dagger}$$

umgekehrt:

$\rho = \rho^\dagger, \rho \geq 0, \text{Sp } \rho = 1 \rightarrow$ Eigenwerte reell, nicht negativ, Summe: 1

\rightarrow Eigenwerte als WK interpretierbar

\rightarrow Operator mit diesen Eigenschaften charakterisiert (eindeutig!) einen gemischten Zustand $\{|\Psi_k\rangle, p_k\}$

reiner Zustand als Spezialfall:

$$p_k = \delta_{kk_0} \quad \rightarrow \quad \rho = \sum_k p_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| = |\Psi_{k_0}\rangle \langle \Psi_{k_0}|$$

weiter gilt:

$$\text{Sp}(\rho^2) = \sum_{k,l} \langle \Psi_k | \rho | \Psi_l \rangle \langle \Psi_l | \rho | \Psi_k \rangle = \sum_k p_k^2 \langle \Psi_k | \Psi_k \rangle = \sum_k p_k^2 \leq 1$$

$$\boxed{\text{Sp}(\rho^2) = 1 \Leftrightarrow \rho = |\Psi\rangle \langle \Psi| \text{ für ein } |\Psi\rangle \Leftrightarrow \rho \text{ reiner Zustand}}$$

Motivation der Definition von

$$\rho = \sum_k p_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k|$$

alle messbare Größen: direkt durch ρ darstellbar!

System mit WK p_k im Zustand $|\Psi_k\rangle$. Messung von A . WK a_r zu messen:

$$P(a_r) = \sum_k P(a_r | \text{System im Zustand } |\Psi_k\rangle) \cdot p_k$$

(Marginalisierungsregel)

beachte: "System im Zustand $|\Psi_k\rangle$ " bilden eine Partition

es ist:

$$P(a_r) = \sum_k \langle \Pi(a_r) \rangle_{\Psi_k} p_k \quad \text{mit } \Pi(a_r) = \sum_{\gamma=1}^{g_r} |a_r, \gamma\rangle \langle a_r, \gamma|$$

also:

$$\begin{aligned}
 P(a_r) &= \sum_k \sum_n \langle \Psi_k | n \rangle \langle n | \Pi(a_r) | \Psi_k \rangle p_k \\
 &= \sum_n \langle n | \Pi(a_r) \sum_k | \Psi_k \rangle p_k \langle \Psi_k | n \rangle = \text{Sp} (\Pi(a_r) \rho) = \text{Sp} (\rho \Pi(a_r))
 \end{aligned}$$

$P(a_r)$ ist also nur über den Dichteoperator von $|\Psi_k\rangle$ und p_k abhängig

Erwartungswert einer Observablen A :

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \sum_r a_r P(a_r) = \sum_r a_r \text{Sp} (\rho \Pi(a_r)) \\
 &= \text{Sp} \left(\rho \sum_r a_r \Pi(a_r) \right) = \text{Sp} (\rho A)
 \end{aligned}$$

nur über Dichteoperator von $|\Psi_k\rangle$ und p_k abhängig

somit:

$$\boxed{\langle A \rangle_\rho = \text{Sp} (\rho A)}$$

und

$$\boxed{P(a_r) = \langle \Pi(a_r) \rangle_\rho}$$

speziell für einen reinen Zustand $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$:

$$\langle A \rangle_\Psi = \text{Sp}(|\Psi\rangle\langle\Psi|A) = \sum_n \langle n | \Psi \rangle \langle \Psi | A | n \rangle = \sum_n \langle \Psi | A | n \rangle \langle n | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$$

und:

$$P(a_r) = \langle \Pi(a_r) \rangle_\Psi = \dots = \langle \Psi | \sum_\gamma | a_r, \gamma \rangle \langle a_r, \gamma | \Psi \rangle = \sum_\gamma |\langle a_r, \gamma | \Psi \rangle|^2$$

Beispiel: 2-dimensionaler Hilbert-Raum

Basis:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

normierter **reiner Zustand**:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle \quad (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$$

“kohärente” Superposition reiner Zustände

normierter **gemischter Zustand**:

$$\rho = |\alpha|^2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\beta|^2 |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \quad (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \text{Sp } \rho = 1)$$

“inkohärente” Mischung reiner Zustände

$$\rho = |\alpha|^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + |\beta|^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 \\ 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$

beachte: $\text{Sp } \rho^2 = |\alpha|^4 + |\beta|^4 < 1$ für $\alpha \neq 0, \alpha \neq 1$

→ unterschiedliche Messresultate, z.B. Observable $S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_x \rangle_\rho &= \text{Sp}(\rho \sigma_x) = \text{Sp} \left(\begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 \\ 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= \text{Sp} \begin{pmatrix} 0 & |\alpha|^2 \\ |\beta|^2 & 0 \end{pmatrix} = 0 \end{aligned}$$

dagegen:

$$\langle \sigma_x \rangle_\Psi = (\alpha^*, \beta^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (\alpha^*, \beta^*) \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \alpha^* \beta + \beta^* \alpha$$

(Interferenz von WK-Amplituden)

Dichteoperator des reinen Zustands ρ_Ψ :

$$\rho_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} (\alpha^*, \beta^*) = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \beta\alpha^* \\ \alpha\beta^* & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$

Interferenzterme fehlen auf der Nebendiagonalen von ρ

1.4 Shannon-Information

Versuch mit Elementarereignissen k

(Ereignisse paarweise exklusiv und vollständig, “Partition”)

definiere Shannon-Information:

$$\sigma = \sigma(\{p_k\}) = - \sum_k p_k \ln p_k$$

“mittlerer Informationswert” = $-\ln p_k \propto$ Anzahl der notwendigen, vorab festgelegten, binären Fragen zur Festlegung des Ereignisses $k \times \ln 2$

Bsp:

$M = 16$ gleichwahrscheinliche Elementarereignisse (4×4 -Schachbrett)

$$p_k = 1/16$$

4 binäre Fragen, also

$$4 \times \ln 2 = \ln 2^4 = -\ln \frac{1}{2^4} = -\ln p_k$$

Eigenschaften:

- $\sigma(p_1, \dots, p_M) \geq 0$
- $\sigma(p_1, \dots, p_M) = 0 \Leftrightarrow p_k = \delta_{kk_0}$ für ein k_0
(minimale Unkenntnis)
- Beitrag von k zu σ klein für
 $p_k \rightarrow 1$ (kaum neue Info)
oder
 $p_k \rightarrow 0$ (wegen $x \ln x \rightarrow 0$ unwichtig für mittlere Info)
- für $p_k = \frac{1}{M} = \text{const.}$ (Gleichverteilung) ist
$$\sigma(p_1, \dots, p_M) = -\sum_{k=1}^M \frac{1}{M} \ln \frac{1}{M} = \ln M$$
- **Monotonie**
 $\sigma_M \equiv \sigma\left(\frac{1}{M}, \dots, \frac{1}{M}\right)$ monoton wachsend
(größere Unkenntnis bei wachsender Anzahl gleichwahrscheinlicher Möglichkeiten)
- **Stetigkeit**
 $\sigma(p_1, \dots, p_M)$ stetig in allen Argumenten
- **Additivität**
$$\sigma(p_1, \dots, p_M) = \sigma(p, p_3, \dots, p_M) + p\sigma\left(\frac{p_1}{p}, \frac{p_2}{p}\right)$$

für $p = p_1 + p_2$
(folgt durch direktes Nachrechnen)
Unkenntnis unabhängig davon, ob EE in Klassen zusammengefasst werden

Monotonie, Stetigkeit und Additivität bestimmen σ eindeutig bis auf eine Konstante (Shannon)

Shannon-Information eines gemischten Zustands $\rho = \sum_k p_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|$:

$$\sigma = \sigma(\{p_k\}) = - \sum_k p_k \ln p_k$$

p_k Eigenwerte von ρ , $|\Psi_k\rangle$ Eigenzustände \rightarrow

$|\Psi_k\rangle$ Eigenzustände von $\rho \ln \rho$, Eigenwerte:

$$\rho \ln \rho |\Psi_k\rangle = p_k \ln p_k |\Psi_k\rangle$$

\rightarrow

$$p_k \ln p_k = \langle\Psi_k|\rho \ln \rho|\Psi_k\rangle$$

und somit:

$$\sigma = - \sum_k \langle\Psi_k|\rho \ln \rho|\Psi_k\rangle$$

$$\boxed{\sigma = - \text{Sp} (\rho \ln \rho)}$$

Beispiel von oben:

$$\sigma = \sigma(|\alpha|^2, |\beta|^2) = -|\alpha|^2 \ln |\alpha|^2 - |\beta|^2 \ln |\beta|^2$$

maximale Unkenntnis für $\sigma = \max.$, also für $|\alpha|^2 = |\beta|^2 = 1/2$

gemischter Zustand maximaler Unkenntnis:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1)$$

oder:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 1) + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -1)$$

System mit WK 1/2 in Zustand mit Spin in $\pm x$ -Richtung

1.5 Großkanonische Gesamtheit

typische Situation: System mit Energie- und Teilchenaustauschkontakt

Kontrollparameter:

Temperatur $T \rightarrow$ bestimmt mittlere Energie

chemisches Potenzial $\mu \rightarrow$ bestimmt mittlere Teilchenzahl

gemischter Zustand der GK Gesamtheit, $\rho = ?$

MaxEnt-Prinzip

$$\sigma(p_1, \dots, p_M) = \max$$

mit Nebenbedingungen

$$\sum_k p_k = 1$$

$$\sum_k p_k E_k = \langle H \rangle \quad (E_k = \langle \Psi_k | H | \Psi_k \rangle)$$

$$\sum_k p_k N_k = \langle \widehat{N} \rangle \quad (N_k = \langle \Psi_k | \widehat{N} | \Psi_k \rangle)$$

notwendige Bedingung für $\sigma = \max$:

$$0 = \frac{\partial}{\partial p_k} \left(- \sum_k p_k \ln p_k - \lambda_0 \sum_k p_k - \lambda_1 \sum_k p_k E_k - \lambda_2 \sum_k p_k N_k \right)$$

also:

$$0 = - \ln p_k - 1 - \lambda_0 - \lambda_1 E_k - \lambda_2 N_k$$

$$p_k = \text{const.} \exp(-\lambda_1 E_k - \lambda_2 N_k)$$

Bedeutung der Lagrange-Parameter:

$$\lambda_0 \text{ Normierung} \quad \lambda_1 = \frac{1}{k_B T} \quad \lambda_2 = -\frac{\mu}{k_B T}$$

damit:

$$p_k = \text{const.} e^{-(E_k - \mu N_k)/k_B T}$$

normierte Wahrscheinlichkeiten:

$$p_k = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_k - \mu N_k)}$$

mit

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

und der **Zustandssumme**

$$Z(T, \mu) = \sum_k e^{-\beta(E_k - \mu N_k)} = e^{-\beta \Omega}$$

großkanonisches Potenzial

$$\Omega(T, \mu) = -k_B T \ln Z(T, \mu)$$

Formulierung mit Dichteoperator:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H - \mu \hat{N})}$$

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

Berechnung des Erwartungswerts einer Observablen A

es sei (o.B.d.A.)

$$H = H_0 + \lambda A$$

dann folgt:

$$\langle A \rangle = \text{Sp} (\rho A) = \frac{1}{Z} \text{Sp} A e^{-\beta(H_0 - \lambda A)} = \frac{\partial}{\partial \lambda} (-k_B T) \ln \text{Sp} e^{-\beta(H_0 + \lambda A)}$$

also

$$\langle A \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda}$$

☞ Übung

Berechnung von $\Omega(T, \mu, \lambda)$ bzw. von $Z(T, \mu, \lambda)$:

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta H} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \dots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | e^{-\beta H} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle \dots | \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$$

$$\text{Aufwand} \propto e^N$$

Fazit Quantenstatistik:

keine "Verbesserung" bzgl. des Komplexitätsproblems

aber: angemessene Beschreibung eines Viel-Teilchen-Systems

Kapitel 2

Zweite Quantisierung

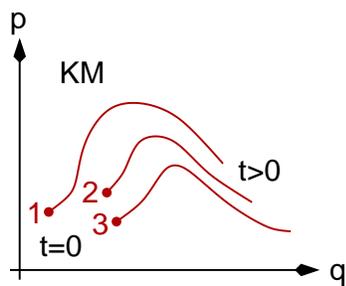
identische Teilchen: (Anti-)symmetrisierung der Zustände notwendig
Umformulierung der üblichen QM mit Erzeugern und Vernichtern
Quantisierung der Schrödinger-Gleichung als klassische Feldgleichung (s.u.)

2.1 Systeme identischer Teilchen

identische Teilchen: Teilchen mit vollständig übereinstimmenden inneren Teilcheneigenschaften (Masse, Ladung, Spin,...)

Identische Teilchen sind ununterscheidbar

- klassisch: unterscheidbar, da (prinzipiell) Trajektorie jedes einzelnen Teilchens verfolgt werden kann



- quantenmechanisch: Konzept der Trajektorie sinnlos
- Vertauschung von Teilchen darf zu keinen messbaren Konsequenzen führen

N -Teilchen-Hilbert-Raum:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \mathcal{H}_1^{(2)} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_1^{(N)} \quad \text{ONB } \{|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle\}$$

Ein-Teilchen-Hilbert-Raum:

$$\mathcal{H}_1^{(i)} \quad \text{ONB } \{|\phi_{\alpha_1}^{(i)}\rangle\}$$

identische Teilchen: $\mathcal{H}_1^{(i)}$ isomorph zu $\mathcal{H}_1^{(j)}$

definiere **Vertauschungsoperator** P_{ij} : (auf Basis)

$$P_{ij}|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_j}^{(j)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle = |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_j}^{(j)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

oder (Wirkung auf Ein-Teilchen-Zustände):

$$P_{ij}|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_j}^{(j)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle = |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_j}^{(j)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

(es wird vereinbart, dass Zustände in einem Tensorprodukt kommutieren)

es gilt:

$$P_{ij}^\dagger = P_{ij} \quad \text{und} \quad P_{ij}^2 = 1$$

Teilchenvertauschung darf Messwerte nicht ändern!

$$\rightarrow \quad \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle P_{ij} \Psi | A | P_{ij} \Psi \rangle$$

für beliebige **physikalische Observable** A und beliebigen **physikalischen Zustand** $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N$:

$$\rightarrow \quad \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | P_{ij}^\dagger A P_{ij} | \Psi \rangle$$

$$\rightarrow \quad A = P_{ij}^\dagger A P_{ij}$$

$$\rightarrow \quad \boxed{[P_{ij}, A] = 0}$$

also auch:

$$|\Psi\rangle \langle \Psi | P_{ij} = P_{ij} |\Psi\rangle \langle \Psi |$$

$$\rightarrow \quad |\Psi\rangle \langle \Psi | P_{ij} | \Psi \rangle = P_{ij} |\Psi\rangle \langle \Psi | \Psi \rangle$$

$$\rightarrow \quad P_{ij} |\Psi\rangle = \varepsilon |\Psi\rangle$$

aber $\varepsilon = \pm 1$, denn $P_{ij}^\dagger = P_{ij}$ und $P_{ij}^2 = 1$

somit:

$$\boxed{P_{ij} |\Psi\rangle = \pm |\Psi\rangle}$$

Bsp.: (für $\alpha_i \neq \alpha_j$)

$$P_{ij} \left(\cdots |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_j}^{(j)}\rangle \cdots \right) = \left(\cdots |\phi_{\alpha_i}^{(j)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_j}^{(i)}\rangle \cdots \right) \neq \pm \left(\cdots |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_j}^{(j)}\rangle \cdots \right)$$

→ Produktzustände nicht physikalisch

Bsp.:

$\mathbf{r}^{(i)}$ Ortsoperator des i -ten Teilchens

$$P_{ij}^\dagger \mathbf{r}^{(i)} P_{ij} = \mathbf{r}^{(j)} \neq \mathbf{r}^{(i)}$$

→ $\mathbf{r}^{(i)}$ nicht physikalisch

Bsp.:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}^{(i)2}}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{\alpha}{|\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{r}^{(j)}|}$$

$$P_{ij}^\dagger H P_{ij} = H$$

→ H physikalisch

Fermionen	Bosonen
$P_{ij} \Psi\rangle = - \Psi\rangle$	$P_{ij} \Psi\rangle = + \Psi\rangle$
antisymmetrische Zustände	symmetrische Zustände
symmetrische Observable	symmetrische Observable
$\varepsilon = -1$	$\varepsilon = +1$ (Vorzeichenkonvention)
halbzahliger Spin	ganzzahliger Spin (Spin-Statistik-Zusammenhang → QFT)

2.2 Hilbert-Raum der physikalischen Zustände

physikalisch erlaubte Zustände aus:

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

$|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$ ist (anti-)symmetrisch

Bsp:

$$|\phi_\alpha^{(1)}\rangle |\phi_\alpha^{(2)}\rangle \in \mathcal{H}_2^{(+)}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_\alpha^{(1)}\rangle |\phi_\beta^{(2)}\rangle \pm |\phi_\beta^{(2)}\rangle |\phi_\alpha^{(1)}\rangle \right) \in \mathcal{H}_2^{(\pm)} \quad (\text{normiert für } \alpha \neq \beta)$$

$N = 2$: (anti-)symmetrisierte Produktzustände $\in \mathcal{H}^{(\varepsilon)}$

Verallgemeinerung auf $N > 2$:

definiere **Permutationsoperator** \mathcal{P} (auf Basis)

$$\mathcal{P}|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle = |\phi_{\alpha_1}^{(i_1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(i_N)}\rangle$$

wobei (i_1, \dots, i_N) Permutation P der Zahlen $1, \dots, N$

definiere **Vorzeichen der Permutation**:

$$(-1)^{\mathcal{P}} = (-1)^p$$

mit $p =$ Anzahl der Transpositionen, aus denen sich die Permutation aufbaut

\mathcal{P} ist unitär, $\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{P}^\dagger$

definiere damit

(Anti-)Symmetrisierungsoperator $S_N^{(\varepsilon)}$

$$S_N^{(\varepsilon)} = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \mathcal{P}$$

Eigenschaften:

- $(S_N^{(\varepsilon)})^2 = S_N^{(\varepsilon)}$ (Idempotenz)
- $(S_N^{(\varepsilon)})^\dagger = S_N^{(\varepsilon)}$ (Hermitizität)
also: $S_N^{(\varepsilon)}$ Projektoren
- $S_N^{(+)} S_N^{(-)} = S_N^{(-)} S_N^{(+)} = 0$
also: orthogonale Projektoren

⇨ Übung

es gilt:

$$|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N \rightarrow S_N^{(\varepsilon)}|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$$

denn:

$$P_{ij} S_N^{(\varepsilon)}|\Psi\rangle = P_{ij} \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \mathcal{P}|\Psi\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}'} \varepsilon^{\mathcal{P}'} \mathcal{P}'|\Psi\rangle$$

mit $\mathcal{P}' = P_{ij}\mathcal{P}$

wegen $\varepsilon^{\mathcal{P}'} = \varepsilon \varepsilon^{\mathcal{P}}$ ist also:

$$P_{ij} S_N^{(\varepsilon)}|\Psi\rangle = \varepsilon \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \mathcal{P}'|\Psi\rangle = \varepsilon \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}'} \varepsilon^{\mathcal{P}'} \mathcal{P}'|\Psi\rangle = \varepsilon S_N^{(\varepsilon)}|\Psi\rangle$$

also: $S_N^{(\varepsilon)}|\Psi\rangle$ (anti-)symmetrisch

da $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_N$ beliebig war, ist auch:

$$P_{ij}S_N^{(\varepsilon)} = \varepsilon S_N^{(\varepsilon)} \quad \mathcal{P}S_N^{(\varepsilon)} = \varepsilon^{\mathcal{P}} S_N^{(\varepsilon)}$$

sei $S_N^{(0)} = \mathbf{1} - S_N^{(+)} - S_N^{(-)}$

$S_N^{(0)}$ ist ein zu $S_N^{(\varepsilon)}$ orthogonaler Projektor

☞ Übung

jetzt gilt:

$$\boxed{\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_N^{(+)} \oplus \mathcal{H}_N^{(-)} \oplus \mathcal{H}_N^{(0)}} \quad (\text{orthogonale Summe})$$

mit:

$$\mathcal{H}_N^{(+)} = S_N^{(+)} \mathcal{H}_N$$

$$\mathcal{H}_N^{(-)} = S_N^{(-)} \mathcal{H}_N$$

$$\mathcal{H}_N^{(0)} = S_N^{(0)} \mathcal{H}_N$$

2.3 (Anti-)symmetrisierte Produktzustände

Produktzustände (bilden Basis von \mathcal{H}_N)

$$|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

definiere **(anti-)symmetrisierte Produktzustände**:

$$\boxed{|\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = S_N^{(\varepsilon)} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle}$$

es ist

$$|\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} \in \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$$

beachte: $\{|\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}\}$ bilden keine Basis, sind i. allg. linear abhängig!

beachte:

$$\dim \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)} < \dim \mathcal{H}_N$$

$$|\cdots \phi_{\alpha_i} \cdots \phi_{\alpha_j} \cdots\rangle^{(\varepsilon)} = \varepsilon |\cdots \phi_{\alpha_j} \cdots \phi_{\alpha_i} \cdots\rangle^{(\varepsilon)}$$

Beispiel: $\mathcal{H}_N^{(-)}$

$$|\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(-)} = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \mathcal{P} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

$$= \frac{1}{N!} \det \begin{pmatrix} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle & \cdots & |\phi_{\alpha_1}^{(N)}\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ |\phi_{\alpha_N}^{(1)}\rangle & \cdots & |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \end{pmatrix}$$

(mit Entwicklungssatz nach Leibniz)

“Slater-Determinante”

falls $\alpha_i = \alpha_j$ für $i \neq j$, folgt $|\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(-)} = 0 \rightarrow$ **Pauli-Prinzip**

damit ist auch:

$$|||\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}||^2 \neq 1 \quad \text{i.allg.}$$

\rightarrow Zustände nicht normiert

sei $|\Psi_N\rangle^{(\varepsilon)} \in \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$

dann gilt:

$$\begin{aligned} |\Psi_N\rangle^{(\varepsilon)} &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \Psi_N \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | S_N^{(\varepsilon)} | \Psi_N \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N} | \Psi_N \rangle^{(\varepsilon)} \end{aligned}$$

nach Anwenden von $S_N^{(\varepsilon)}$ auf beiden Seiten folgt:

$$|\Psi_N\rangle^{(\varepsilon)} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N} | \Psi_N \rangle^{(\varepsilon)}$$

Zerlegung der Eins:

$$\sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N} | = \mathbf{1}_{\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}}$$

2.4 Besetzungszahldarstellung

Vereinbarung einer Anordnung der Basiszustände: $\alpha = 1, \dots, d$

$$\boxed{\text{Standardordnung: } |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_d\rangle}$$

mit

$$d = \dim \mathcal{H}_1$$

Besetzungszahldarstellung eines (anti-)symmetrisierten Produktzustands:

$$|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle = K_\varepsilon |\phi_1\phi_1 \cdots \phi_1\phi_2 \cdots \phi_2 \cdots \phi_d \cdots \phi_d\rangle^{(\varepsilon)}$$

mit Normierungskonstante K_ε ($\langle n_1, n_2, \dots, n_d | n_1, n_2, \dots, n_d \rangle = 1$)

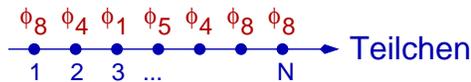
und:

$$n_i = \text{Anzahl der Teilchen im Zustand } |\phi_i\rangle \quad \text{Besetzungszahl}$$

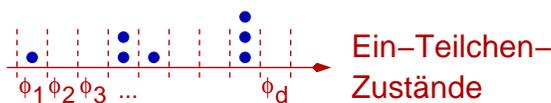
für $|\phi_{\alpha_1}, \dots, \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}$:

$$n_i = \text{Anzahl Indizes mit } \alpha_j = i$$

Produktzustand:



(anti-)symmetrisierter Produktzustand in Besetzungszahldarstellung:



(Teilchen ohne Identität)

es gilt: (Beweis s.u.)

$$\boxed{\{|n_1, n_2, \dots, n_d\rangle\} \text{ ist ONB von } \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}} \quad (\text{NB: } \sum_\alpha n_\alpha = N)$$

Orthonormalität:

$$\boxed{\langle n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots | n'_1, n'_2, \dots, n'_\alpha, \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \cdots}$$

Vollständigkeit:

$$\boxed{\sum_{n_1} \sum_{n_2} \cdots \sum_{n_\alpha} \cdots |n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots| = \mathbf{1}_{\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}}$$

Bsp.: $N = 2$ Teilchen

Produktzustand:

$$|\phi_\alpha^{(1)}\rangle |\phi_\beta^{(2)}\rangle \in \mathcal{H}_{N=2}$$

(Anti-)symmetrisierter Produktzustand:

$$S_2^{(\pm)}|\phi_\alpha^{(1)}\rangle|\phi_\beta^{(2)}\rangle = \frac{1}{2!} \left(|\phi_\alpha^{(1)}\rangle|\phi_\beta^{(2)}\rangle \pm |\phi_\alpha^{(2)}\rangle|\phi_\beta^{(1)}\rangle \right) = \pm S_2^{(\pm)}|\phi_\alpha^{(2)}\rangle|\phi_\beta^{(1)}\rangle$$

$$= K_\pm^{-1}|0 \cdots n_\alpha = 1 \cdots n_\beta = 1 \cdots 0\rangle \in \mathcal{H}_2^{(\pm)}$$

Normierung: (K_\pm reell)

$$K_\pm^{-2} = |S_N^{(\pm)}|\phi_\alpha^{(1)}\rangle|\phi_\beta^{(2)}\rangle|^2$$

$$= \frac{1}{4} \left(\langle\phi_\alpha^{(1)}|\langle\phi_\beta^{(2)}| \pm \langle\phi_\alpha^{(2)}|\langle\phi_\beta^{(1)}| \right) \left(|\phi_\alpha^{(1)}\rangle|\phi_\beta^{(2)}\rangle \pm |\phi_\alpha^{(2)}\rangle|\phi_\beta^{(1)}\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{4} \left(\langle\phi_\alpha^{(1)}|\langle\phi_\beta^{(2)}| \cdot |\phi_\alpha^{(1)}\rangle|\phi_\beta^{(2)}\rangle + \langle\phi_\alpha^{(2)}|\langle\phi_\beta^{(1)}| \cdot |\phi_\alpha^{(2)}\rangle|\phi_\beta^{(1)}\rangle \right.$$

$$\left. \pm \langle\phi_\alpha^{(1)}|\langle\phi_\beta^{(2)}| \cdot |\phi_\alpha^{(2)}\rangle|\phi_\beta^{(1)}\rangle \pm \langle\phi_\alpha^{(2)}|\langle\phi_\beta^{(1)}| \cdot |\phi_\alpha^{(1)}\rangle|\phi_\beta^{(2)}\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{4}(1 + 1 \pm \delta_{\alpha\beta} \pm \delta_{\alpha\beta}) = \frac{1}{2}(1 \pm \delta_{\alpha\beta})$$

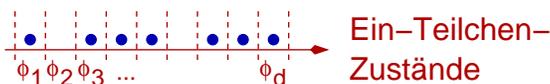
$$\rightarrow K_\pm = \sqrt{\frac{2}{1 \pm \delta_{\alpha\beta}}}$$

allgemein: (s.u.)

$$K_\varepsilon = \sqrt{\frac{N!}{\prod_\alpha n_\alpha!}} \quad K_- = \sqrt{N!}$$

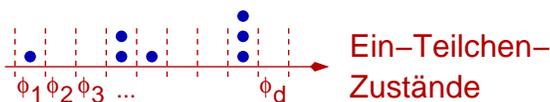
Fermionen: $n_\alpha = 0, 1$

(aufgrund des Pauli-Prinzips)



$$M = \dim \mathcal{H}_N^{(-)} = \binom{d}{N}$$

Bosonen: $n_\alpha = 0, 1, 2, \dots$



$$M = \dim \mathcal{H}_N^{(+)} = \binom{d + N - 1}{N}$$

Beispiel: $N=2$ Teilchen, $d=3$ Orbitale (also $\dim\mathcal{H}_1 = d = 3$)

$$\begin{array}{l} K_\varepsilon |\phi_1\phi_1\rangle^{(\varepsilon)} = |200\rangle \\ K_\varepsilon |\phi_1\phi_2\rangle^{(\varepsilon)} = |110\rangle \\ K_\varepsilon |\phi_1\phi_3\rangle^{(\varepsilon)} = |101\rangle \\ \varepsilon K_\varepsilon |\phi_2\phi_1\rangle^{(\varepsilon)} = |110\rangle \\ K_\varepsilon |\phi_2\phi_2\rangle^{(\varepsilon)} = |020\rangle \\ K_\varepsilon |\phi_2\phi_3\rangle^{(\varepsilon)} = |011\rangle \\ \varepsilon K_\varepsilon |\phi_3\phi_1\rangle^{(\varepsilon)} = |101\rangle \\ \varepsilon K_\varepsilon |\phi_3\phi_2\rangle^{(\varepsilon)} = |011\rangle \\ K_\varepsilon |\phi_3\phi_3\rangle^{(\varepsilon)} = |002\rangle \end{array} \left| \begin{array}{l} = 0 \text{ für Fermionen} \\ \\ \\ \\ = 0 \text{ für Fermionen} \\ \\ \\ \\ = 0 \text{ für Fermionen} \end{array} \right.$$

$$\dim\mathcal{H}_N = 9 = 3^2$$

$$\dim\mathcal{H}_N^{(+)} = 6 = \binom{3+2-1}{2}$$

$$\dim\mathcal{H}_N^{(-)} = 3 = \binom{3}{2}$$

$$\dim\mathcal{H}_N^{(0)} = 0 \text{ (nicht typisch!)}$$

Beweis der Orthonormalität:

Normierung:

es seien $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ standardgeordnet

$$\begin{aligned} & {}^{(\varepsilon)}\langle n_1, \dots, n_d | n_1, \dots, n_d \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= K_\varepsilon^2 {}^{(\varepsilon)}\langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N} | \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N} \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= K_\varepsilon^2 \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \mathcal{P} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle \cdots | \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle \end{aligned}$$

$\langle \cdot | \cdot \rangle = 1$ für $\mathcal{P} = \mathbf{1}$ (für Fermionen einzige Möglichkeit, $\rightarrow \varepsilon^{\mathcal{P}} = +1$)

$\langle \cdot | \cdot \rangle = 1$ für \mathcal{P} mit Teilchenpermutationen innerhalb von n_α gleichen Zuständen

$\langle \cdot | \cdot \rangle = 0$ sonst

Anzahl der \mathcal{P} , die 1 liefern: $\Pi_\alpha(n_\alpha!)$

$$\text{also: } {}^{(\varepsilon)}\langle n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_d | n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_d \rangle^{(\varepsilon)} = K_\varepsilon^2 \frac{1}{N!} \Pi_\alpha(n_\alpha!)$$

$$\rightarrow \boxed{K_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{N!} \prod_\alpha (n_\alpha!)}}}$$

Vollständigkeit:

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1} \sum_{n_2}^{\sum_\alpha n_\alpha = N} \cdots \sum_{n_\alpha} \cdots |N; n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle^{(\varepsilon)(\varepsilon)} \langle N; n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots| \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}^I K_\varepsilon^2 |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}| \quad (K_\varepsilon = K_\varepsilon(n_1, n_2, \dots)) \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \frac{K_\varepsilon^2}{k_\varepsilon} |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}| \\ &= \mathbf{1}_{\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}} \quad (\text{Vollständigkeitsrelation von oben}) \end{aligned}$$

$\sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}$: alle Indizes unabhängig

$\sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}^I$: nur standardgeordnete Indextupel

\rightarrow Mehrfachzählung in $\sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}$:

$k_\varepsilon =$ Anzahl der Möglichkeiten, die N Teilchen so zu verteilen, dass n_1 sich in $|\phi_1\rangle$ befinden, n_2 sich in $|\phi_2\rangle$ befinden, etc.

das sind gerade $\frac{N!}{\prod_\alpha (n_\alpha!)} = K_\varepsilon^2$ Möglichkeiten

Orthogonalität:

$$\begin{aligned} & \langle n_1, \dots, n_d | n'_1, \dots, n'_d \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= K_\varepsilon^2 \langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N} | \phi_{\alpha'_1} \cdots \phi_{\alpha'_N} \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= K_\varepsilon^2 \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}'} \varepsilon^{\mathcal{P}'} \mathcal{P}'(\delta_{\alpha_1 \alpha'_1} \cdots \delta_{\alpha_N \alpha'_N}) \\ &= \delta_{n_1 n'_1} \cdots \delta_{n_d n'_d} K_\varepsilon^2 \frac{1}{N!} \prod_\alpha (n_\alpha!) \\ &= \delta_{n_1 n'_1} \cdots \delta_{n_d n'_d} \end{aligned}$$

definiere **Fock-Raum**

$$\mathcal{H}^{(\varepsilon)} = \bigoplus_{N=0,1,\dots} \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)} \quad (\text{direkte, orthogonale Summe})$$

Hilbert-Raum aller $N = 0, N = 1, \dots$ - Zustände

$$\dim \mathcal{H}^{(\varepsilon)} = \dim \mathcal{H}_0^{(\varepsilon)} + \dim \mathcal{H}_1^{(\varepsilon)} + \dots = \infty$$

speziell: $\dim \mathcal{H}_0^{(\varepsilon)} = 1$ (Vakuuzustand), $\dim \mathcal{H}_1^{(\varepsilon)} = d$ (s.o.)

$$\boxed{\{|n_1, \dots, n_d\rangle^{(\varepsilon)}\} \quad (\text{ohne NB}) \text{ ist eine ONB des Fock-Raums!}}$$

2.5 Erzeuger und Vernichter

ONB von $\mathcal{H}^{(\varepsilon)}$: $\{|n_1 n_2 \dots n_\alpha \dots n_d\rangle^{(\varepsilon)}\}$

Definition von c_α^\dagger und c_α auf ONB

Erzeuger c_α^\dagger

$$\boxed{c_\alpha^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle^{(\varepsilon)} = \varepsilon^{N_\alpha} \sqrt{n_\alpha + 1} |N + 1; n_1, n_2, \dots, n_\alpha + 1, \dots\rangle^{(\varepsilon)}}$$

$$= \sqrt{n_\alpha + 1} |N + 1; n_1, n_2, \dots, n_\alpha + 1, \dots\rangle^{(+)} \quad (\text{Bosonen})$$

$$= (-1)^{N_\alpha} |N + 1; n_1, n_2, \dots, 1, \dots\rangle^{(-)} \quad (\text{Fermionen})$$

mit:

$$\boxed{N_\alpha = \sum_{\beta=1}^{\alpha-1} n_\beta}$$

Die Bedeutung von N_α zeigt sich z.B. bei der Herleitung der fundamentalen Antikommutatorrelationen.

$$c_\alpha^\dagger : \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)} \rightarrow \mathcal{H}_{N+1}^{(\varepsilon)}$$

es folgt (vollständige Induktion)

☞ **Übung**

$$\boxed{|n_1, \dots, n_d\rangle^{(\varepsilon)} = \frac{(c_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \dots \frac{(c_d^\dagger)^{n_d}}{\sqrt{n_d!}} |0\rangle}$$

Die Reihenfolge im Produkt ist strikt zu beachten! c_1^\dagger ist der Erzeuger für der erste Basisorbital $|\phi_1\rangle$ gemäß der Standardordnung.

$|0\rangle \in \mathcal{H}_0$ ist der Vakuuzustand, $\langle 0|0\rangle = 1$, $\dim \mathcal{H}_0 = 1$, $0 \cdot |0\rangle = 0$

Vernichter

$$c_\alpha = (c_\alpha^\dagger)^\dagger$$

es gilt:

$$\begin{aligned} & \langle N; \dots n_\alpha \dots | c_\alpha | N'; \dots n'_\alpha \dots \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \varepsilon^{N_\alpha} \sqrt{n_\alpha + 1} \langle N + 1; \dots n_\alpha + 1 \dots | N'; \dots n'_\alpha \dots \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \varepsilon^{N_\alpha} \sqrt{n_\alpha + 1} \delta_{N+1, N'} (\dots \delta_{n_\alpha+1, n'_\alpha} \dots) \\ &= \varepsilon^{N'_\alpha} \sqrt{n'_\alpha} \delta_{N, N'-1} (\dots \delta_{n_\alpha, n'_\alpha-1} \dots) \\ &= \varepsilon^{N'_\alpha} \sqrt{n'_\alpha} \langle N; \dots n_\alpha \dots | N'-1; \dots n'_\alpha-1 \dots \rangle^{(\varepsilon)} \quad \forall |N; \dots n_\alpha \dots \rangle^{(\varepsilon)} \end{aligned}$$

$$\rightarrow \boxed{c_\alpha |N; \dots n_\alpha \dots \rangle^{(\varepsilon)} = \varepsilon^{N_\alpha} \sqrt{n_\alpha} |N-1; \dots n_\alpha-1 \dots \rangle^{(\varepsilon)}}$$

$$= \sqrt{n_\alpha} |N-1; \dots n_\alpha-1 \dots \rangle^{(+)} \quad (\text{Bosonen})$$

$$= (-1)^{N_\alpha} |N-1; \dots n_\alpha-1 \dots \rangle^{(-)} \quad (\text{Fermionen})$$

$$c_\alpha : \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)} \rightarrow \mathcal{H}_{N-1}^{(\varepsilon)}$$

$c_\alpha, c_\alpha^\dagger$ sind keine Observablen!

Vertauschungsrelationen:

für Bosonen und $\alpha \neq \beta$ ist:

$$\begin{aligned} & c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger | \dots n_\alpha \dots n_\beta \dots \rangle^{(+)} \\ &= \sqrt{n_\beta + 1} c_\alpha^\dagger | \dots n_\alpha \dots n_\beta + 1 \dots \rangle^{(+)} \\ &= \sqrt{n_\beta + 1} \sqrt{n_\alpha + 1} | \dots n_\alpha + 1 \dots n_\beta + 1 \dots \rangle^{(+)} \\ &= c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger | \dots n_\alpha \dots n_\beta \dots \rangle^{(+)} \end{aligned}$$

$$\rightarrow [c_\alpha^\dagger, c_\beta^\dagger]_- = 0 \quad \text{für } \alpha \neq \beta \text{ und (trivial) für } \alpha = \beta$$

$$\text{analog: } [c_\alpha, c_\beta]_- = 0 \quad \text{für } \alpha, \beta \text{ beliebig}$$

$$\text{analog: } [c_\alpha, c_\beta^\dagger]_- = 0 \quad \text{für } \alpha \neq \beta$$

für $\alpha = \beta$ ist:

$$\begin{aligned} & c_\alpha c_\alpha^\dagger | \dots n_\alpha \dots \rangle^{(+)} \\ &= \sqrt{n_\alpha + 1} c_\alpha | \dots n_\alpha + 1 \dots \rangle^{(+)} \end{aligned}$$

$$= \sqrt{n_\alpha + 1} \sqrt{n_\alpha + 1} |\dots n_\alpha \dots\rangle^{(+)}$$

und

$$c_\alpha^\dagger c_\alpha |\dots n_\alpha \dots\rangle^{(+)}$$

$$= \sqrt{n_\alpha} c_\alpha |\dots n_\alpha - 1 \dots\rangle^{(+)}$$

$$= \sqrt{n_\alpha} \sqrt{n_\alpha} |\dots n_\alpha \dots\rangle^{(+)}$$

$$\rightarrow c_\alpha c_\alpha^\dagger - c_\alpha^\dagger c_\alpha = n_\alpha + 1 - n_\alpha = 1$$

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

analog: Fermionen

☞ Übung

für Bosonen und Fermionen gilt also:

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

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

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

($[A, B]_+ = AB + BA$ Antikommutator)

Wirkung von c_α^\dagger auf (anti-)symmetrisierte Produktzustände

es seien $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ standardgeordnet, dann ist

$$c_\alpha^\dagger |\phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}$$

$$= c_\alpha^\dagger \frac{1}{K_\varepsilon} |n_1 n_2 \dots n_\alpha \dots\rangle^{(\varepsilon)}$$

$$= \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_\alpha! \dots}{N!}} \varepsilon^{N_\alpha} \sqrt{n_\alpha + 1} |n_1 n_2 \dots n_\alpha + 1 \dots\rangle^{(\varepsilon)}$$

$$= \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_\alpha! \dots}{N!}} \varepsilon^{N_\alpha} \sqrt{n_\alpha + 1} \sqrt{\frac{(N+1)!}{n_1! n_2! \dots (n_\alpha + 1)! \dots}} |\dots \phi_\alpha \dots \phi_\alpha \dots\rangle^{(\varepsilon)}$$

($n_\alpha + 1$ -mal)

$$= \sqrt{N+1} \varepsilon^{N_\alpha} |\dots \phi_\alpha \dots \phi_\alpha \dots\rangle^{(\varepsilon)}$$

$$= \sqrt{N+1} |\phi_\alpha \phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}$$

also:

$$\boxed{c_\alpha^\dagger |\phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = \sqrt{N+1} |\phi_\alpha \phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}}$$

Mit dem Einfügen von ϕ_α an die erste Position geht evtl. die Standardordnung verloren. Bezüglich der $\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}$ ist die Standardordnung noch gegeben. Das Resultat gilt aber auch allgemein, denn bei Permutation der Orbitale tritt links und rechts in der Gleichung dasselbe Vorzeichen auf.

damit gilt auch (durch Iterieren der Formel):

$$\boxed{|\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = \frac{1}{\sqrt{N!}} c_{\alpha_1}^\dagger \cdots c_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle}$$

2.6 Darstellung von Observablen

eine allgemeine physikalische Observable besteht aus Ein- und Zwei-Teilchen-Anteilen:

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

i : Teilchenindex

beachte: $[A, \mathcal{P}]_- = 0$

(Bsp.) Hamilton-Operator

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1,\dots,N}^{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

es ist:

$$\begin{aligned} A &= \mathbf{1} \cdot A \cdot \mathbf{1} && (\mathbf{1} = \mathbf{1}_{\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}}) \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \sum_{\beta_1, \dots, \beta_N} |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N} | A | \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} \rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} | \end{aligned}$$

Matrixelement des Ein-Teilchen-Anteils:

$$\begin{aligned} &{}^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N} | \sum_{i=1}^N A_1^{(i)} | \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \sum_{i=1}^N A_1^{(i)} | \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} \rangle^{(\varepsilon)} \quad \text{denn: } \left[\sum_i A_1^{(i)}, S_N^{(\varepsilon)} \right]_- = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^N \langle \phi_{\alpha_1} \cdots A_1^{(i)} \phi_{\alpha_i} \cdots \phi_{\alpha_N} | \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} \rangle^{(\varepsilon)} \\
&= \sum_{i=1}^N \langle \phi_{\alpha_1} \cdots A_1^{(i)} \phi_{\alpha_i} \cdots \phi_{\alpha_N} | \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \mathcal{P} | \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} \rangle \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}_\beta} \varepsilon^{\mathcal{P}_\beta} \mathcal{P}_\beta \left(\langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | A_1^{(1)} | \phi_{\beta_1}^{(1)} \rangle \langle \phi_{\alpha_2}^{(2)} | \phi_{\beta_2}^{(2)} \rangle \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \phi_{\beta_N}^{(N)} \rangle \right) \\
&\quad + \\
&\quad \dots \\
&\quad + \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \phi_{\beta_1}^{(1)} \rangle \cdots \langle \phi_{\alpha_{N-1}}^{(N-1)} | \phi_{\beta_{N-1}}^{(N-1)} \rangle \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | A_1^{(N)} | \phi_{\beta_N}^{(N)} \rangle
\end{aligned}$$

\mathcal{P}_β wirkt hier (äquivalenterweise) auf β - statt auf Teilchenindizes.

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}_\beta} \varepsilon^{\mathcal{P}_\beta} \mathcal{P}_\beta \left(\langle \phi_{\alpha_1} | A_1 | \phi_{\beta_1} \rangle \delta_{\alpha_2 \beta_2} \cdots \delta_{\alpha_N \beta_N} \right. \\
&\quad + \\
&\quad \dots \\
&\quad \left. + \delta_{\alpha_1 \beta_1} \cdots \delta_{\alpha_{N-1} \beta_{N-1}} \langle \phi_{\alpha_N} | A_1 | \phi_{\beta_N} \rangle \right)
\end{aligned}$$

einsetzen ...

→ jeder der N Terme liefert gleichen Beitrag!

- z.B. letzter Term: Umbenennung der Summationsvariablen:

$$\alpha_1 \rightarrow \alpha_2 \text{ und } \beta_1 \rightarrow \beta_2$$

...

$$\alpha_N \rightarrow \alpha_1 \text{ und } \beta_N \rightarrow \beta_1$$

- $2N$ Vertauschungen, so dass ursprüngliche Ordnung von $|\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}$ und ${}^{(\varepsilon)}\langle \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} |$ wiederhergestellt wird
Faktor $\varepsilon^{2N} = 1$

→ jeder der $N!$ Terme der \mathcal{P} -Summe liefert gleichen Beitrag!

- für jedes \mathcal{P} : Umbenennung der β_i → ursprüngliche Ordnung im Matrixelement
- p Vertauschungen der ϕ_{β_i} → ursprüngliche Ordnung in ${}^{(\varepsilon)}\langle \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} |$

damit Faktor ε^p , sowieso expliziter Faktor ε^p

also: $\varepsilon^{2p} = 1$

also folgt:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N A_1^{(i)} \\ &= N \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \sum_{\beta_1, \dots, \beta_N} |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} | A_1 | \phi_{\beta_1} \rangle \delta_{\alpha_2 \beta_2} \cdots \delta_{\alpha_N \beta_N}^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\beta_1} \cdots \phi_{\beta_N} | \\ &= N \sum_{\alpha_1 \beta_1} \sum_{\alpha_2, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} | A_1 | \phi_{\beta_1} \rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\beta_1} \phi_{\alpha_2} \cdots \phi_{\alpha_N} | \end{aligned}$$

mit $c_{\alpha}^{\dagger} |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = \sqrt{N+1} |\phi_{\alpha} \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}$ (s.o.) folgt weiter:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N A_1^{(i)} \\ &= N \sum_{\alpha_1 \beta_1} \sum_{\alpha_2, \dots, \alpha_N} \frac{1}{\sqrt{N}} c_{\alpha_1}^{\dagger} |\phi_{\alpha_2} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_1} | A_1 | \phi_{\beta_1} \rangle^{(\varepsilon)} \langle \phi_{\alpha_2} \cdots \phi_{\alpha_N} | \frac{1}{\sqrt{N}} c_{\beta_1} \\ &= \sum_{\alpha_1 \beta_1} c_{\alpha_1}^{\dagger} \mathbf{1}_{\mathcal{H}_{N-1}^{(\varepsilon)}} \langle \phi_{\alpha_1} | A_1 | \phi_{\beta_1} \rangle c_{\beta_1} = \sum_{\alpha_1 \beta_1} c_{\alpha_1}^{\dagger} \langle \phi_{\alpha_1} | A_1 | \phi_{\beta_1} \rangle c_{\beta_1} \end{aligned}$$

also:

$$\boxed{\sum_{i=1}^N A_1^{(i)} = \sum_{\alpha \beta} \langle \phi_{\alpha} | A_1 | \phi_{\beta} \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}}$$

Interpretation: Teilchen hüpfert mit Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude $\langle \phi_{\alpha} | A_1 | \phi_{\beta} \rangle$ vom Orbital $|\phi_{\beta}\rangle$ nach $|\phi_{\alpha}\rangle$

analog:

↔ Übung

$$\boxed{\frac{1}{2} \sum_{i,j=1, \dots, N}^{i \neq j} A_2^{(i,j)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \beta \gamma \delta} \langle \phi_{\alpha} \phi_{\beta} | A_2 | \phi_{\gamma} \phi_{\delta} \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma}}$$

Beachte unterschiedliche Reihenfolge der Indizes!

mit

$$\langle \phi_{\alpha} \phi_{\beta} | A_2 | \phi_{\gamma} \phi_{\delta} \rangle = \langle \phi_{\alpha}^{(1)} \phi_{\beta}^{(2)} | A_2^{(1,2)} | \phi_{\gamma}^{(1)} \phi_{\delta}^{(2)} \rangle$$

Interpretation: Das Wechselwirkungsmatrixelement $\langle \phi_{\alpha} \phi_{\beta} | A_2 | \phi_{\gamma} \phi_{\delta} \rangle$ bewirkt eine Streuung zweier Teilchen aus den Orbitalen $\langle \phi_{\gamma} |, \langle \phi_{\delta} |$ in die Orbitale $\langle \phi_{\alpha} |, \langle \phi_{\beta} |$

(Bsp.) Nichtwechselwirkende Teilchen in äußerem Potenzial

$$H = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right) = \sum_i H_1^{(i)}$$

$$H_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

ONB von \mathcal{H}_1 : $\{|\varepsilon_n\rangle\}$
mit $H_1|\varepsilon_n\rangle = \varepsilon_n |\varepsilon_n\rangle$

Erzeuger, Vernichter: c_n^\dagger, c_n

$$H = \sum_{mn} \langle \varepsilon_m | H_1 | \varepsilon_n \rangle c_m^\dagger c_n = \sum_n \varepsilon_n c_n^\dagger c_n$$

(Bsp.) System mit Coulomb-Wechselwirkung

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

mit

$$t_{\alpha\beta} = \langle \phi_\alpha | H_1 | \phi_\beta \rangle \text{ "Hopping"}$$

und

$$U_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \phi_\alpha \phi_\beta | H_2 | \phi_\gamma \phi_\delta \rangle \text{ "Coulomb-WW-Parameter"}$$

(Bsp.) Nur ein Orbital:

$\dim \mathcal{H}_1 = 1$, ONB: $\{|1\rangle\}$

beliebiger Operator: $A = \omega c^\dagger c + v c^\dagger c^\dagger c c$ (ω, v reell)

Fermionen: $A = \omega c^\dagger c$

2.7 Spezielle Observablen

Besetzungszahloperator

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

es ist

$$\hat{n}_\alpha^\dagger = (c_\alpha^\dagger c_\alpha)^\dagger = \hat{n}_\alpha \quad \text{hermitesch, Observable}$$

und

$$\hat{n}_\alpha |n_1, \dots, n_d\rangle^{(\varepsilon)} = c_\alpha^\dagger c_\alpha |n_1, \dots, n_d\rangle^{(\varepsilon)}$$

$$\begin{aligned}
&= \varepsilon^{N_\alpha} \sqrt{n_\alpha} c_\alpha^\dagger |n_1, \dots, n_\alpha - 1, \dots, n_d\rangle^{(\varepsilon)} \\
&= \varepsilon^{2N_\alpha} \sqrt{n_\alpha^2} |n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_d\rangle^{(\varepsilon)}
\end{aligned}$$

also:

$$\widehat{n}_\alpha |n_1 \dots n_\alpha \dots n_d\rangle^{(\varepsilon)} = n_\alpha |n_1 \dots n_\alpha \dots n_d\rangle^{(\varepsilon)}$$

Basiszustände sind Eigenzustände von \widehat{n}_α

Teilchenzahloperator

$$\widehat{N} = \sum_\alpha \widehat{n}_\alpha$$

es ist:

$$\widehat{N} |n_1 \dots n_d\rangle^{(\varepsilon)} = \sum_\alpha n_\alpha |n_1 \dots n_d\rangle^{(\varepsilon)} = N |n_1 \dots n_d\rangle^{(\varepsilon)}$$

es gilt: (für Fermionen und Bosonen!)

☞ Übung

$$[c_\alpha, \widehat{n}_\beta]_- = \delta_{\alpha\beta} c_\alpha$$

→ c_α sind Leiteroperatoren!

(vergleiche: $[J_\pm, J_z]_- = \mp \hbar J_\pm$ für Drehimpuls, $J_\pm = J_x \pm iJ_y$)

Bosonen: mit $cc^\dagger - c^\dagger c = 1$ und $\widehat{n} = c^\dagger c$ ist

$$A = \omega c^\dagger c - v c^\dagger c + v c^\dagger c c^\dagger c = (\omega - v)\widehat{n} + v\widehat{n}^2$$

(Bsp.) Nur ein Orbital

$$\text{Bosonen: } A = \omega c^\dagger c - v c^\dagger c + v c^\dagger c c^\dagger c = (\omega - v)\widehat{n} + v\widehat{n}^2$$

$$\text{Eigenzustände: } |n\rangle^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{n!}} (c^\dagger)^n |0\rangle$$

$$\text{Eigenwerte: } a_n = (\omega - v)n + vn^2$$

$$\text{harmonischer Oszillator: } H = \omega \left(\widehat{n} + \frac{1}{2} \right)$$

Hilbert-Raum eines Spin-1/2-Teilchens ($\varepsilon = -1$, Fermion):

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_1^{(\text{Bahn})} \otimes \mathcal{H}_1^{(\text{Spin})}$$

ONB von \mathcal{H}_1 :

$$\{|\varphi_\alpha\rangle\} = \{|\psi_i\rangle|\chi_\sigma\rangle\}$$

mit $\alpha = (i, \sigma)$

i indiziert räumliche Orbitale

$\sigma = \uparrow, \downarrow$ indiziert Spin-Orbitale

$$|\chi_{\uparrow}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\chi_{\downarrow}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Erzeuger, Vernichter, Besetzungszahloperator, Teilchenzahloperator:

$$c_{i\sigma}^{\dagger}, c_{i\sigma}, \hat{n}_{i\sigma}, \hat{N} = \sum_i \sum_{\sigma} \hat{n}_{i\sigma}$$

definiere **Doppelbesetzung**

$$d_i = \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} = \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{i\uparrow}$$

es ist:

$$d_i = d_i^{\dagger} = d_i^2$$

Erwartungswert in einem beliebigen Zustand:

$$0 \leq \langle d_i \rangle \leq 1$$

⇨ Übung

beachte: $\langle d_i \rangle = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle \neq \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle$ i.allg.

definiere ("e": empty)

$$e_i = (1 - \hat{n}_{i\uparrow})(1 - \hat{n}_{i\downarrow})$$

es ist

$$\mathbf{1} = e_i + \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} - d_i$$

für Spin-1/2-Fermionen definiere:

$$\mathbf{S}_i = (S_{ix}, S_{iy}, S_{iz})$$

mit

$$S_{iz} = \frac{\hbar}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$$

$$S_{ix} = \frac{1}{2}(S_{i+} + S_{i-})$$

$$S_{iy} = \frac{1}{2i}(S_{i+} - S_{i-})$$

$$S_{i+} = \hbar c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} \quad S_{i-} = \hbar c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} = S_{i+}^{\dagger}$$

es gilt:

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_i^{\dagger} \quad S_{i\pm} = S_{ix} \pm iS_{iy}$$

kompakt:

$$S_{i\mu} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^{(\mu)} c_{i\sigma'} \quad \mu = x, y, z$$

mit den Pauli-Matrizen:

$$\sigma^{(x)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^{(y)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^{(z)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Drehimpulsalgebra:

☞ Übung

$$[S_{ix}, S_{iy}]_- = i\hbar S_{iz} \quad (\text{und zyklisch})$$

$$[S_{ix}, S_{jy}]_- = i\hbar \delta_{ij} S_{iz} \quad (\text{und zyklisch})$$

S_i : Spin des Orbitals i

falls i die Plätze eines Gitters indiziert (ein Orbital $|\psi_i\rangle$ pro Platz): **lokaler Spin**

$\mathbf{m}_i = \langle \mathbf{S}_i \rangle / \hbar$ bzw. $\boldsymbol{\mu}_i = g\mu_B \langle \mathbf{S}_i \rangle / \hbar$: "lokales magnetisches (Spin-)Moment"

Eigenwerte von $S_{iz} = \hbar(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})/2$: $0, \pm\hbar/2$

Eigenwerte von S_{iz}^2 : $0, \hbar^2/4$

Eigenwerte von $\mathbf{S}_i^2 = 3S_{iz}^2$: $0, 3\hbar^2/4$, also $S = 0$ und $S = 1/2$

☞ Übung

→ S_i ist kein Spin-1/2!

beachte:

- $\mathbf{S}^{(j)}$: Spin des j -ten Elektrons, $j = 1, \dots, N$ (keine Obs.), $(\mathbf{S}^{(j)})^2 = 3\hbar^2/4$
- \mathbf{S}_i : Spin am i -ten Gitterplatz, $i = 1, \dots, L$ (Observable), $\mathbf{S}_i^2 \neq \text{const.}$

(Def.) **Gesamtspin**

$$\mathbf{S} = \sum_{j=1}^N \mathbf{S}^{(j)}$$

2. Quantisierung:

$$\mathbf{S} = \sum_{i i' \sigma \sigma'} \langle i\sigma^{(1)} | \mathbf{S}^{(1)} | i' \sigma'^{(1)} \rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{i'\sigma'} = \sum_{i \sigma \sigma'} \langle i\sigma | \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} | i\sigma' \rangle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'} = \sum_{i \sigma \sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}$$

also:

$$\mathbf{S} = \sum_{j=1}^N \mathbf{S}^{(j)} = \sum_{i=1}^L \mathbf{S}_i$$

2.8 Unitäre Transformationen

abkürzende Schreibweise: $|\alpha\rangle \equiv |\phi_\alpha\rangle$

$\{|\alpha\rangle\}$ ONB von \mathcal{H}_1

unitäre Transformation der Ein-Teilchen-Basis:

$$|\alpha'\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} |\alpha\rangle \quad \text{mit } U \text{ unitär}$$

→ $\{|\alpha'\rangle\}$ ONB von \mathcal{H}_1

wie transformieren sich Erzeuger und Vernichter?

betrachte:

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

also:

$$\boxed{|\alpha'\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} |\alpha\rangle \quad c_{\alpha'}^\dagger = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} c_{\alpha}^\dagger \quad c_{\alpha'} = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'}^* c_{\alpha}}$$

*Ableitung der letzten Gleichung durch Adjungieren, (...) *: konjugiert komplex.*

Alternative: Die Gleichung $c_{\alpha'}^\dagger |\phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = \sqrt{N+1} |\phi_{\alpha} \phi_{\alpha_1} \cdots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}$ zeigt, dass sich $c_{\alpha'}^\dagger$ genauso transformiert wie $|\phi_{\alpha}\rangle$

es gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} |\alpha\rangle c_{\alpha} &= \sum_{\alpha} \left(\sum_{\alpha'} U_{\alpha'\alpha}^{-1} |\alpha'\rangle \right) \left(\sum_{\beta'} (U_{\beta'\alpha}^{-1})^* c_{\beta'} \right) \\ &= \sum_{\alpha'} \sum_{\beta'} \left(\sum_{\alpha} U_{\alpha'\alpha}^{-1} U_{\alpha\beta'} \right) |\alpha'\rangle c_{\beta'} = \sum_{\alpha'} |\alpha'\rangle c_{\alpha'} \end{aligned}$$

also:

$$\boxed{\sum_{\alpha} |\alpha\rangle c_{\alpha} = \sum_{\alpha'} |\alpha'\rangle c_{\alpha'} \quad \sum_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger \langle \alpha| = \sum_{\alpha'} c_{\alpha'}^\dagger \langle \alpha'|}$$

und damit:

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

forminvariant!

fundamentale Vertauschungsrelationen:

$$[c_{\alpha'}, c_{\beta'}^\dagger]_{-\varepsilon} = \delta_{\alpha'\beta'} \quad \text{etc.}$$

Transformation der Matrixelemente:

$$\langle \alpha' | A_1 | \beta' \rangle = \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha'\alpha}^{-1} \langle \alpha | A_1 | \beta \rangle U_{\beta\beta'}$$

2.9 Unterscheidbare Teilchen

betrachte System aus N **unterscheidbaren** Teilchen

Hamilton-Operator:

$$H_N = \sum_{i=1}^N H_1^{(i)}$$

Hilbert-Raum:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1^{(N)}$$

ONB:

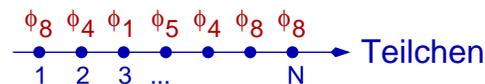
$$\{|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle\}$$

Beispiele:

1) paarweise verschiedene Teilchen

– H-Atom: 1 Elektron, 1 Proton

– 4 verschiedene Atome: H, He, Li, Be



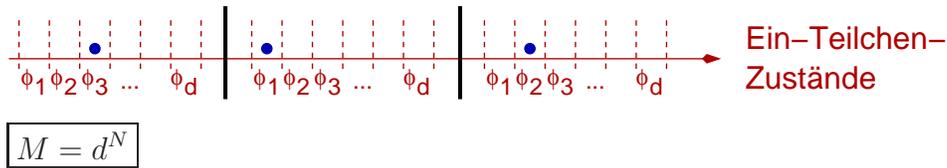
$$M = d^N$$

→ keine relevanten Beispiel-Systeme

2) identische Teilchen, aber räumlich getrennt

– qubits, Zweiniveausysteme, lokale Spins mit $S = 1/2$

– System harmonischer Oszillatoren (atomare Schwingungen)



→ physikalisch wichtige Beispiele

Begründung der Unterscheidbarkeit:

prinzipiell sind auch identische Teilchen, die räumlich getrennt sind (kein Überlapp von Wellenfunktionen), ununterscheidbar und somit als Bose-/Fermi-System zu behandeln, aber die Behandlung als unterscheidbare Teilchen liefert dieselben Ergebnisse:

betrachte Messung einer "lokalen" Observablen A , d.h.

$$A = \sum_{i=1}^N A^{(i)}$$

Erwartungswert in (anti-)symmetrisiertem Produktzustand:

$$\langle A \rangle = K_{\pm}^2 \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | S_N^{(\pm)} \sum_{i=1}^N A^{(i)} S_N^{(\pm)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle \cdots | \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$$

die Teilchen befinden sich in paarweise verschiedenen Ein-Teilchen-Zuständen

$$\dim \mathcal{H}_1 = Nd \quad \text{bei Beschreibung mit ununterscheidbaren Teilchen!}$$

→ Besetzungszahlen $n_{\alpha} = 0, 1 \rightarrow K_{\pm}^2 = N!$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= N! \sum_{i=1}^N \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | A^{(i)} S_N^{(\pm)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle \cdots | \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{\mathcal{P}} (\pm 1)^{\mathcal{P}} \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | A^{(i)} | \phi_{\alpha_{\mathcal{P}(1)}}^{(1)} \rangle \cdots | \phi_{\alpha_{\mathcal{P}(N)}}^{(N)} \rangle \end{aligned}$$

wegen $n_{\alpha} = 0, 1$ liefert nur $\mathcal{P} = 1$ einen nichtverschwindenden Beitrag:

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | A^{(i)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle \cdots | \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$$

$\langle A \rangle = \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | A | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle \cdots | \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$

Erwartungswert im Produktzustand (wie für unterscheidbare Teilchen)

Argument erweiterbar:

$$\langle \Psi | A | \Phi \rangle = \langle \Psi | S_N^{(\epsilon)} A S_N^{(\epsilon)} | \Phi \rangle$$

für

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} c_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

$$|\Phi\rangle = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} d_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

falls α_1 aus den ersten d , α_2 aus den zweiten d Zuständen, etc.

2.10 Feldoperatoren

ONB $\{|\alpha\rangle\}$, unendlichdimensional und kontinuierlich

ONB $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, kontinuierlich, Ortseigenzustände

Spinfreiheitsgrade werden der Einfachheit halber in diesem Abschnitt nicht berücksichtigt. Wegen der Überabzählbarkeit der Basis sind die Betrachtungen hier nur mit eventuellen Zugeständnissen an die mathematische Exaktheit durchführbar. Vorsicht ist auf jeden Fall geboten bei naiver Übertragung von Resultaten, die nur für den diskreten Fall Sinn machen (z.B. Besetzungszahldarstellung).

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$\int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = \mathbf{1}$$

Transformation:

$$|\alpha\rangle = \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle = \int d^3r U_{\mathbf{r}\alpha} |\mathbf{r}\rangle$$

mit:

$$U_{\mathbf{r}\alpha} = \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle = \phi_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (``\infty \times \infty'', \text{kontinuierlich})$$

(Def.) **Feldoperatoren**

Vernichter, Erzeuger in neuer Darstellung

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv c_{\mathbf{r}}$$

$$\psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \equiv c_{\mathbf{r}}^{\dagger}$$

(in jedem Raumpunkt sind Operatoren ψ und ψ^{\dagger} definiert)

es ist:

$$\begin{aligned}
[\psi(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\varepsilon} &= \left[\sum_{\alpha} \langle \alpha | \mathbf{r} \rangle^* c_{\alpha}, \sum_{\alpha'} \langle \alpha' | \mathbf{r}' \rangle c_{\alpha'}^\dagger \right]_{-\varepsilon} \\
&= \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \langle \alpha | \mathbf{r} \rangle^* \langle \alpha' | \mathbf{r}' \rangle \delta_{\alpha\alpha'} = \sum_{\alpha} \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle \langle \alpha | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle \\
\boxed{[\psi(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\varepsilon} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}
\end{aligned}$$

Hamilton-Operator für System mit Coulomb-WW in äußerem Potenzial ($\hbar = 1$):

$$\begin{aligned}
H &= \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) \\
&+ \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

(Def.) **Teilchendichteoperator**

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i)$$

Man beachte den Unterschied zwischen dem Ortsvektor und dem Ortsoperator des i -ten Teilchens!

$$\begin{aligned}
\hat{n}(\mathbf{r}) &= \int d^3r' \int d^3r'' \psi^\dagger(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}) | \mathbf{r}'' \rangle \psi(\mathbf{r}'') \\
&= \int d^3r' \int d^3r'' \psi^\dagger(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') | \mathbf{r}'' \rangle \psi(\mathbf{r}'') = \int d^3r' \psi^\dagger(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle \psi(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

$$\rightarrow \hat{n}(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$$

2.11 Quantisierung der Schrödinger-Gleichung

Einheiten: $\boxed{\hbar = 1}$

System wechselwirkender Teilchen (z.B. Coulomb-Wechselwirkung)

üblicher Übergang von KM zur QM:

Newton-Mechanik von Massenpunkten \rightarrow Lagrange-Formalismus \rightarrow Hamilton-Formalismus, $H = H(q_i, p_j)$ \rightarrow Quantisierung: $[q_i, p_j]_- = i\delta_{ij}$

Alternative:

klassische Feld-Theorie \rightarrow Lagrange-Formalismus \rightarrow Hamilton-Formalismus \rightarrow Quantisierung

$\Psi(\mathbf{r}, t)$ beschreibe ein klassisches Feld

Bewegungsgleichung? Ansatz: Schrödinger-Gleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{1}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right)\Psi(\mathbf{r}, t)$$

... hier gemeint als klassische dynamische Grundgleichung, die die Newton'sche Bewegungsgleichung für Punktteilchen ersetzt!

Interpretation von $\Psi(\mathbf{r}, t)$:

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \rho(\mathbf{r}, t) \quad \text{ist die Teilchendichte}$$

Aus der Schrödinger-Gleichung folgt die Kontinuitätsgleichung, die hier die Erhaltung der Teilchenzahl ausdrückt.

Geladene Materie führt (klassisch, nichtrelativistisch) zu einem elektrostatischen Potenzial

$$V_C(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Grundgleichung der klassischen Feldtheorie (nicht-linear!):

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{1}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right)\Psi(\mathbf{r}, t) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r' \frac{|\Psi(\mathbf{r}', t)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\Psi(\mathbf{r}, t)$$

Lagrange-Funktion $L = L[\Psi(\mathbf{r}), \partial_t\Psi(\mathbf{r})]$

L ist eine Funktion von (kontinuierlich) unendlich vielen generalisierten Koordinaten $\Psi(\mathbf{r})$ und Geschwindigkeiten $\partial_t\Psi(\mathbf{r})$, also ein Funktional. Für die Ableitungen (Funktionalableitungen, δ) behandeln wir die unabhängigen Variablen als diskret.

Lagrange-Gleichung:

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \partial_t \Psi(\mathbf{r})} - \frac{\delta L}{\delta \Psi(\mathbf{r})} = 0$$

äquivalent zur Bewegungsgleichung, falls

$$L = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}) i \partial_t \Psi(\mathbf{r}) - \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right) \Psi(\mathbf{r})$$

$$-\frac{1}{2} \int \int d^3r d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r})$$

Ψ und Ψ^* werden (statt Real- und Imaginärteil) als unabhängige Variablen betrachtet.

denn:

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \partial_t \Psi(\mathbf{r})} = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{r})$$

$$\frac{\delta L}{\delta \Psi(\mathbf{r})} = -\Psi^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right)$$

$$-\frac{1}{2} \int d^3r'' \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi^*(\mathbf{r}'') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \Psi(\mathbf{r}'') - \frac{1}{2} \int d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}') \Psi^*(\mathbf{r}) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \Psi(\mathbf{r}')$$

(Bewegungsgleichung folgt durch Adjungieren)

kanonisch konjugierter Impuls:

$$\Pi(\mathbf{r}) = \frac{\delta L}{\delta \partial_t \Psi(\mathbf{r})} = i \Psi^*(\mathbf{r})$$

Legendre-Transformation \rightarrow Hamilton-Funktion $H = H[\Psi(\mathbf{r}), \Pi(\mathbf{r})]$

$$H = \int d^3r \Pi(\mathbf{r}) \partial_t \Psi(\mathbf{r}) - L = \int d^3r i \Psi^*(\mathbf{r}) \partial_t \Psi(\mathbf{r}) - L$$

also:

$$H = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int \int d^3r d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r})$$

Quantisierung: $\Psi(\mathbf{r}), \Pi(\mathbf{r}) \mapsto \psi(\mathbf{r}), \pi(\mathbf{r})$ wobei $\psi(\mathbf{r}), \pi(\mathbf{r})$ Operatoren sind, die durch die kanonischen Vertauschungsrelationen festgelegt sind:

$$[\psi(\mathbf{r}), \pi(\mathbf{r}')]_- = i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

also (mit $\pi = i\psi^\dagger$):

$$[\psi(\mathbf{r}), i\psi^\dagger(\mathbf{r}')]_- = i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

oder:

$$[\psi(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{r}')]_- = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Dies definiert aber gerade die oben eingeführten Feldoperatoren! Man bekommt also den schon bekannten Hamilton-Operator.

$$H = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) \\ + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r})$$

Die Herleitung macht die Begriffe “2. Quantisierung” und “Quantenfeldtheorie” plausibel. Im Falle eines fermionischen Systems wären ad hoc Antikommutatorrelationen anzusetzen, das entspricht einer veränderten Korrespondenzregel. Spin und andere nicht-klassische Observablen können natürlich nicht aus einem klassischen Ansatz abgeleitet werden. Interessanterweise zeigt hier die klassische Feldtheorie (für Materie!) wegen der Schrödinger-Gleichung schon (fälschlicherweise) die typischen Wellenphänomene (Beugung, Tunneln). Austausch-Wechselwirkung (und Korrelationen) bleibt ein quantenmechanisches Konzept (V_C ist nur der Hartree-Anteil der Wechselwirkung).

vergl.: Hartree-Fock-Approximation:

$$\frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \rightarrow \\ \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \rangle}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}) - \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}) \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \rangle}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}') \\ = \int d^3r \int d^3r' \psi^\dagger(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}')$$

mit:

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \rangle}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \rangle}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Dies als Vorgriff auf eine spätere Diskussion.

Kapitel 3

Ideale Quanten-Gase und Mean-Field-Theorie

Einheiten: $k_B = 1, \hbar = 1$

3.1 Ideales Fermi- und Bose-Gas

allgemeines "freies" System:

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}$$

t : Matrix

H hermitesch $\rightarrow t$ hermitesch $\rightarrow \exists U$ unitär, so dass

$$U^{\dagger} t U = \varepsilon \quad \varepsilon \text{ Diagonalmatrix mit Elementen } \varepsilon_m$$

sei

$$c_m^{\dagger} = \sum_{\alpha} U_{\alpha m} c_{\alpha}^{\dagger} \quad (\text{unitäre Transformation der Ein-Teilchen-Basis})$$

dann ist:

$$H = \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} (U \varepsilon U^{\dagger})_{\alpha\beta} c_{\beta} = \sum_m \left(\sum_{\alpha} U_{\alpha m} c_{\alpha}^{\dagger} \right) \varepsilon_m \left(\sum_{\beta} U_{m\beta}^{\dagger} c_{\beta} \right) = \sum_m \varepsilon_m c_m^{\dagger} c_m$$

$\rightarrow H$ ist diagonal

\rightarrow Eigenzustände im Ein-Teilchen-Raum: $|m\rangle = c_m^{\dagger} |0\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha m} |\alpha\rangle$

oder:

wechselwirkungsfreie Teilchen in äußerem Potenzial:

H in erster Quantisierung:

$$H = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right)$$

Lösen der Schrödinger-Gleichung:

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) |\varepsilon_n\rangle = \varepsilon_n |\varepsilon_n\rangle$$

→ Ein-Teilchen-Basis $\{|n\rangle\}$

→ H in zweiter Quantisierung bereits diagonal:

$$H = \sum_m \varepsilon_m c_m^\dagger c_m$$

Ideales Quanten-Gas:

$$H = \sum_m \varepsilon_m c_m^\dagger c_m$$

- exakt lösbares Modell (für Fermionen oder Bosonen)
- Demonstrationsmodell der statistischen Physik
- insbesondere Bosonen: Phasenübergang in freiem System!
- Fermionen: approximative Beschreibung von Leitungselektronen
- Bezugspunkt für wechselwirkende (nicht-ideale) Systeme

großkanonischer Hamilton-Operator:

$$\mathcal{H} = H - \mu \hat{N}$$

Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{n_1 \dots n_d} {}^{(\varepsilon)} \langle n_1 n_2 \dots | e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} | n_1 n_2 \dots \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \sum_{n_1 n_2 \dots} {}^{(\varepsilon)} \langle n_1 n_2 \dots | e^{-\beta \sum_m (\varepsilon_m - \mu) \hat{n}_m} | n_1 n_2 \dots \rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \sum_{n_1 n_2 \dots} {}^{(\varepsilon)} \langle n_1 n_2 \dots | e^{-\beta \sum_m (\varepsilon_m - \mu) n_m} | n_1 n_2 \dots \rangle^{(\varepsilon)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n_1 n_2 \dots} \prod_m e^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)n_m} \\
&= \prod_m \sum_{n_m} e^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)n_m}
\end{aligned}$$

Fermionen:

$$\begin{aligned}
&= \prod_m \sum_{n_m=0}^1 (e^{-(\varepsilon_m - \mu)/T})^{n_m} \\
&= \prod_m (1 + e^{-(\varepsilon_m - \mu)/T})
\end{aligned}$$

großkanonisches Potenzial:

$$\boxed{\Omega = -T \ln Z = -T \sum_m \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)})}$$

→ es folgt die komplette Thermodynamik des Fermi-Gases

mittlere Besetzungszahl:

$$\begin{aligned}
n_m = \langle \hat{n}_m \rangle &= \langle c_m^\dagger c_m \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial \varepsilon_m} && (\langle A \rangle = \partial \Omega / \partial \lambda, H = H_0 + \lambda A) \\
&= -T \frac{1}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)}} (-\beta) e^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_m - \mu)} + 1} = f(\varepsilon_m - \mu)
\end{aligned}$$

Fermi-Verteilungsfunktion

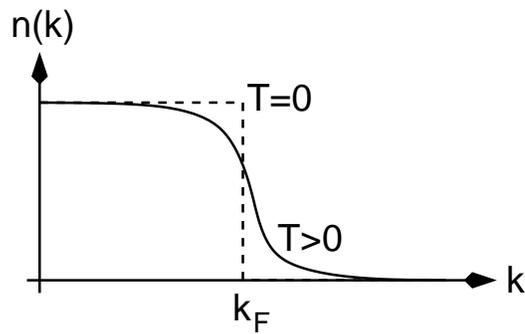
$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta E} + 1}$$

im Sommerfeld-Modell (freie Elektronen in Volumen V) ist:

$$\varepsilon_m \rightarrow \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m} \qquad n_m \rightarrow n(\mathbf{k})$$

ONB: $\{|\mathbf{k}, \sigma\rangle\}$ ebene Wellen

\mathbf{k} diskret, aber $\Delta^3 k = (2\pi)^3/V \rightarrow 0$ für $V \rightarrow \infty$



Definitionen für $T = 0$:

$$f(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) = \Theta(\mu - \varepsilon(\mathbf{k}))$$

$$\varepsilon_F \equiv \mu(T = 0): \text{Fermi-Energie}$$

$$\mathbf{k} \text{ mit } \varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_F: \text{Fermi-Wellenvektor}$$

$$\{\mathbf{k} | \varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_F\}: \text{Fermi-Fläche (Sommerfeld-M.: Kugeloberfläche)}$$

→ machen diese Konzepte Sinn für wechselwirkende Systeme?

Teilchenzahl:

$$N = \langle \hat{N} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\sigma} n(\mathbf{k}) = 2 \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k})$$

für $T = 0$ gilt:

$$N = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon(\mathbf{k})) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} V_{\text{FS}}$$

Teilchenzahl = von der Fermi-Fläche eingeschlossenes Volumen im \mathbf{k} -Raum!

→ wechselwirkende Systeme: Luttinger-Theorem

Innere Energie:

$$U = \langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{H} \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} n(\mathbf{k}) \varepsilon(\mathbf{k}) \quad (\text{mit } H \rightarrow \lambda H, \lambda = 1)$$

Temperaturabhängigkeit?

definiere Ein-Teilchen-**Zustandsdichte**

$$\begin{aligned} \rho_0(\omega) &= \text{Anzahl Zustände } m \text{ mit } \omega < \varepsilon_m < \omega + \Delta \text{ pro } \Delta \\ &= \frac{1}{\Delta} \left(\sum_m \Theta(\omega + \Delta - \varepsilon_m) - \sum_m \Theta(\omega - \varepsilon_m) \right) \end{aligned}$$

$$= \sum_m \delta(\omega - \varepsilon_m) \quad \text{für } \Delta \rightarrow 0$$

damit ist:

$$N = \int d\omega f(\omega - \mu) \rho_0(\omega)$$

$$U = \int d\omega f(\omega - \mu) \omega \rho_0(\omega)$$

Sommerfeld-Entwicklung: ($F(\omega)$): T -unabhängig, regulär in Fermi-Schicht)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega - \mu) F(\omega) = \int_{-\infty}^{\mu} d\omega F(\omega) + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n T^{2n} F^{(2n-1)}(\mu)$$

mit $\alpha_n = 2 \left(1 - \frac{1}{2^{2n-1}}\right) \zeta(2n)$ und $\zeta(n) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^n}$ (Riemannsches ζ -Fkt.)

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega - \mu) F(\omega) = \int_{-\infty}^{\mu} d\omega F(\omega) + \frac{\pi^2}{6} T^2 F'(\mu) + \mathcal{O}(T/\mu)^4}$$

damit gilt für tiefe T ($N = N(\mu) \rightarrow \mu = \mu(N)$, N fest):

$$\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} T^2 \frac{\rho'_0(\varepsilon_F)}{\rho_0(\varepsilon_F)} + \dots$$

☞ Übung

$$U = E_0 + \frac{\pi^2}{6} T^2 \rho_0(\varepsilon_F) + \dots$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{\pi^2}{3} T \rho_0(\varepsilon_F) + \dots = \gamma T + \dots$$

vergleiche klassisches ideales Gas: $U = 3N \frac{1}{2} T$, $C_V = 3N/2$

extrem starke Unterdrückung von C_V !

Abschätzung:

für $T \rightarrow 0$

$$C_V \sim \frac{\Delta U}{\Delta T} \sim \frac{\Delta U}{T}$$

Pauli-Prinzip: nur Elektronen in der Fermi-Schicht werden thermisch angeregt:

$$C_V \sim \frac{1}{T} (\text{Anzahl der Elektronen in der Fermi-Schicht} \times T)$$

Breite der Fermi-Schicht: $\sim T$, Höhe der Zustandsdichte $\sim \rho(\varepsilon_F)$

$$C_V \sim \text{Anzahl der Elektronen in der Fermi-Schicht} \sim \rho_0(\varepsilon_F) T$$

allgemeine Argumente!

→ gültig für wechselwirkende Elektronensysteme?

analog: Kompressibilität, Spin-Suszeptibilität, Schall-Geschwindigkeit, etc.

Bosonen

s.o.:

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta(H-\mu\hat{N})} = \prod_m \sum_{n_m=0}^{\infty} (e^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)})^{n_m}$$

$$= \prod_m 1/(1 - e^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)})$$

Konvergenz: $e^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)} < 1 \quad \forall m \rightarrow e^{-\beta(\varepsilon_0-\mu)} < 1 \quad (\varepsilon_0 \leq \varepsilon_m)$

$$\boxed{\mu < \varepsilon_0} \quad (\text{ansonsten unphysikalische Resultate})$$

großkanonisches Potenzial:

$$\boxed{\Omega = -T \ln Z = T \sum_m \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)})}$$

→ komplette Thermodynamik des Bose-Gases

mittlere Besetzungszahl:

$$n_m = \langle n_m \rangle = \langle c_m^\dagger c_m \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial \varepsilon_m} = b(\varepsilon_m - \mu)$$

Bose-Verteilungsfunktion

$$b(E) = \frac{1}{e^{\beta E} - 1}$$

$0 \leq b(\varepsilon_m - \mu) < \infty$ mit $\mu < \varepsilon_0 \leq \varepsilon_m$

$T = 0$: $b(\varepsilon_m - \mu) = 0$ für $m \geq 1$
für $N = \text{const}$ muss $n_0 = N$ sein, also $\mu = \varepsilon_0 - 0^+$
→ alle Teilchen im (Ein-Teilchen-)GZ $|m = 0\rangle$

$T \rightarrow \infty$: $n_m = b(\varepsilon_m - \mu) = \mathcal{O}(1)$

$T = T_C$: Phasenübergang! Bose-Einstein-Kondensation (BEC)
 $T < T_C$: $|m = 0\rangle$ makroskopisch besetzt!, $n_0 = \mathcal{O}(N)$
Exp: Rb, $T_C \sim \mu K$, 1995
→ Phasenübergang im nicht-wechselwirkenden System!

Bestimmung von T_C :

$$N = \langle \hat{N} \rangle = \sum_m n_m = \sum_m b(\varepsilon_m - \mu) = \sum_m \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_m - \mu)} - 1} = \int d\omega \frac{\rho_0(\omega)}{e^{\beta(\omega - \mu)} - 1}$$

mit der Zustandsdichte $\rho_0(\omega) = \sum_m \delta(\omega - \varepsilon_m)$

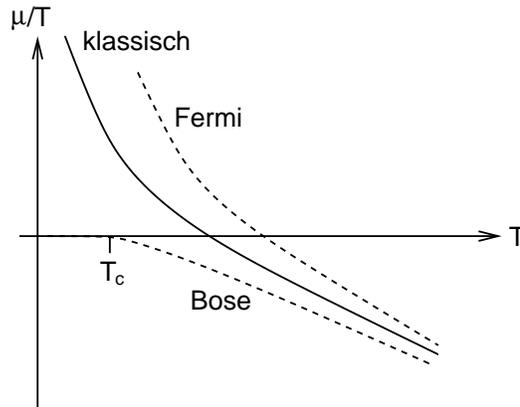
freie ($V(\mathbf{r}) = 0$) spinlose Bosonen: $m \rightarrow \mathbf{k}$, $\varepsilon(\mathbf{k}) = k^2/2m$

$$\begin{aligned} \rho_0(\omega) &= \sum_{\mathbf{k}} \delta\left(\omega - \frac{k^2}{2m}\right) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \Delta^3 k \sum_{\mathbf{k}} 2m \delta\left((k + \sqrt{2m\omega})(k - \sqrt{2m\omega})\right) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int dk k^2 2m \frac{1}{2\sqrt{2m\omega}} \delta(k - \sqrt{2m\omega}) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi 2m \omega 2m \frac{1}{2\sqrt{2m\omega}} = \frac{V}{4\pi^2} (2m)^{3/2} \omega^{1/2} \end{aligned}$$

damit:

$$N = \frac{V}{4\pi^2} (2m)^{3/2} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^{1/2}}{e^{\beta(\omega - \mu)} - 1} = N(\mu, T)$$

→ $\mu = \mu(N, T)$ bzw. (N fest) $\mu = \mu(T)$



kritische Temperatur: $\mu(T_C) = 0 = \varepsilon(\mathbf{k} = 0)$

(denn, falls $\mu > 0$, ist $n(\mathbf{k} = 0) = \mathcal{O}(1)$ für $T > 0$)

beachte:

für $T < T_C$ ist die Rechnung nicht korrekt, denn für $\omega \rightarrow 0$ und $\mu = 0$ gilt:

$\rho_0(\omega) \propto \sqrt{\omega} \rightarrow 0 \rightarrow n_0$ liefert keinen Beitrag zum Integral aber $n_0 \propto N!$

in einer oder zwei Dimensionen keine BEC!

es ist $\rho(\omega) \propto \text{const.}, 1/\sqrt{\omega}$ für $\omega \rightarrow 0$

es gilt:

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^2} (2m)^{3/2} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^{1/2}}{e^{\beta c \omega} - 1} = \frac{1}{4\pi^2} (2mT_C)^{3/2} \zeta(3/2) \Gamma(3/2)$$

→ (mit Einführung von \hbar und k_B)

$$T_C \approx 3.31 \frac{\hbar^2}{mk_B} (N/V)^{2/3}$$

Interpretation:

$$\lambda(T_C)^3 = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi m k_B T_C}} \right)^3 = \frac{\hbar^3}{(2\pi 3.31 \hbar^2 (N/V)^{2/3})^{3/2}} \sim \frac{V}{N}$$

→ bei T_C : thermische deBroglie-Wellenlänge \sim Volumen pro Teilchen

weitere einfache Rechnungen liefern:

- für $T < T_C$: $n_0 = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^{3/2} \right) = \mathcal{O}(N)$

Zwei-Phasen-Gemisch (im \mathbf{k} -Raum!)

für $T > T_C$ ist $n_0 = \mathcal{O}(1)$

- Sprung der Steigung von C_V bei T_C !
(dritte Ableitung von Ω unstetig, Ω, S, C_V)
 $C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V$

- für ${}^4\text{He}$: $T_C = 3.14\text{K}$
Exp: λ -Übergang bei $T_C = 2.2\text{K}$ (zwischen He I und He II)

→ Problem: ${}^4\text{He}$ ist stark w.w. BG! (Bose-Flüssigkeit)

→ Phasenübergänge in wechselwirkenden Fermi-Systemen?

3.2 Ideales Gas aus Quasiteilchen

betrachte ideales Quantengas aus N **unterscheidbaren** Teilchen
(identisch, aber räumlich getrennt)

- Bsp: Atome (mit Spin S) auf einem Gitter
- quantisierte Gitterschwingungen = Phononen sind Bosonen! (unabhängig von S), warum?
- ein Phononengas zeigt keine BEC! warum?

Hamilton-Operator, Hilbert-Raum, ONB:

$$H_N = \sum_{i=1}^N H_1^{(i)} \quad \mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \mathcal{H}_1^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1^{(N)} \quad \{|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle\}$$

betrachte

- qubits, Zweiniveausysteme, lokale Spins mit $S = 1/2$
- System harmonischer Oszillatoren (atomare Schwingungen)

$N = 1$ **qubit**:

Hamilton-Operator eines qubits ($\dim \mathcal{H}_1 = 2$):

$$H_1 = \varepsilon_1 |\phi_1\rangle \langle \phi_1| + \varepsilon_2 |\phi_2\rangle \langle \phi_2| \quad (|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle \text{ normiert, } \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0)$$

o.B.d.A. (Wahl des Energienullpunkts, Umnummerierung):

$$\varepsilon_1 = 0 \quad \varepsilon_2 = \varepsilon$$

damit:

$$|\phi_\alpha\rangle = |n\rangle \quad \text{mit } \alpha = 1 \leftrightarrow n = 0 \text{ und } \alpha = 2 \leftrightarrow n = 1$$

also:

$$H_1 = \varepsilon \sum_{n=0,1} n |n\rangle \langle n|$$

beachte spezielle Form der Ein-Teilchen-Energien

$N = 1$ **harmonischer Oszillator**:

Hamilton-Operator eines Oszillators ($\dim \mathcal{H}_1 = \infty$):

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$$

wähle Energienullpunkt als GZE, dann gilt für die

Eigenenergien:

$$\varepsilon_n = \varepsilon n$$

mit $\varepsilon = \hbar\omega$ und $n = 0, 1, 2, \dots, d = \infty$

Eigenzustände nicht entartet, also:

$$H_1 = \varepsilon \sum_{n=0}^{\infty} n |n\rangle\langle n|$$

beachte spezielle Form der Ein-Teilchen-Energien

System von N qubits/Oszillatoren (N unterscheidbare Teilchen)

Produktzustände:

$$|n^{(1)}\rangle |n^{(2)}\rangle \cdots |n^{(N)}\rangle \quad \text{mit } n_i = 0, 1 \text{ bzw. } n_i = 0, 1, 2, \dots$$

bilden ONB aus Eigenzuständen von $H_N = \sum_{i=1}^N H_1^{(i)}$:

$$H_N |n^{(1)}\rangle |n^{(2)}\rangle \cdots |n^{(N)}\rangle = E |n^{(1)}\rangle |n^{(2)}\rangle \cdots |n^{(N)}\rangle$$

mit

$$E = \sum_{i=1}^N n_i \varepsilon_i$$

beachte:

$n_i \varepsilon_i$ ist Ein-Teilchen-Energie des i -ten Teilchens

$\varepsilon_i = \varepsilon$ ($i = 1, \dots, N$) ist die charakteristische Energieskala des Ein-Teilchen-Hamiltonian $H_1^{(i)}$

Abbildung:

$$|n^{(1)}\rangle |n^{(2)}\rangle \cdots |n^{(N)}\rangle \longleftrightarrow |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle^{(\pm)}$$

vergleiche mit Gas von M identischen Fermionen/Bosonen

$$H_M = \sum_{m=1}^M H_1^{(m)}$$

wobei

$$N = \dim \mathcal{H}_1$$

und der i -te Ein-Teilchen-Basiszustand $|i\rangle$ ein Zustand mit Ein-Teilchen-Energie ε_i ist, also

$\{|i\rangle\}_{i=1,\dots,N}$ ONB von \mathcal{H}_1

$$H_1 = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i |i\rangle\langle i|$$

$$|i\rangle = c_i^\dagger |0\rangle$$

Eigenzustand von H_M :

$$|n_1, \dots, n_N\rangle^{(\pm)} \quad \text{mit } n_i = 0, 1 \text{ bzw. } n_i = 0, 1, 2, \dots$$

Eigenenergie von H_M :

$$E = \sum_{i=1}^N n_i \varepsilon_i$$

es ist:

$$M = \sum_{i=1}^N n_i$$

N unterscheidbare qubits/harm. Oszillatoren mit Ein-Teilchen-Energien $n_i \varepsilon_i$
($n_i = 0, 1/n_i = 0, 1, 2, \dots$) für qubit/Oszillator i

äquivalent zu

$M = \sum_{i=1}^N n_i$ freie identische Fermionen/Bosonen mit Ein-Teilchen-Energien ε_i
für $i = 1, \dots, d$ und $d = N$

beachte: Fermi-/Bose-Gas mit **nicht kontrollierbarer Teilchenzahl** M

→ **Quasiteilchen**

GK Beschreibung: $\Omega = \Omega(T)$

Lagrangeparameter μ wird nicht benötigt, Quasiteilchenzahl M nicht kontrolliert

(kein Lagrangeparameter → $\mu = 0$)

Phononen-, Photonengas

bosonische Quasiteilchen: $\langle N \rangle \rightarrow 0$ für $T = 0$, denn für $T = 0$ System im GZ,
keine Anregungen, keine Quasiteilchen

→ keine BEC

3.3 Response-Größen und Korrelationsfunktionen

betrachte quantenmechanisches Viel-Teilchen-System mit Hamiltonian:

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

großkanonischer Hamiltonian

$$\mathcal{H} = H - \mu \hat{N}$$

großkanonische Zustandssumme und großkanonisches Potenzial:

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta(H-\mu N)} \quad (\beta = 1/T)$$

$$\Omega = -T \ln Z = \Omega(T, V, \mu, \{t_{\alpha\beta}\}, \{U_{\alpha\beta\gamma\delta}\})$$

- exponentiell schnelles Anwachsen der Hilbert-Raum-Dimension → Bestimmung von $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{(\varepsilon)}$ nicht sinnvoll
- besser (relevanter, direkt aufs Experiment bezogen):
Berechnung der "Antwort" des Viel-Teilchen-Systems bei vorgegebener (schwacher) "Störung"
- hier: statische Störungen
zeitabhängige Störungen → Linear-Response-Theorie (s.u.)

Frage:

Wie ändert sich der Erwartungswert einer Observablen A bei kleiner Änderung des Hamiltonians?

$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} A e^{-\beta \mathcal{H}}$ kann stets als Ableitung von Ω geschrieben werden

betrachte dazu die Zerlegung:

$$\boxed{H = H_0 + \lambda A}$$

Der "physikalische" Hamiltonian kann z.B. für $\lambda = 1$ realisiert sein: $H = H(\lambda = 1)$ mit $H(\lambda) = H - A + \lambda A$.

es gilt:

$$\boxed{\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \langle A \rangle}$$

Beweis:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = -T \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln Z = -T \frac{1}{Z} \text{Sp} \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta(H_0 + \lambda A - \mu \hat{N})}$$

und:

$$\begin{aligned} \text{Sp} \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta(H_0 + \lambda A - \mu \hat{N})} &= \text{Sp} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-\beta)^k \frac{\partial}{\partial \lambda} (H_0 + \lambda A - \mu \hat{N})^k \\ &= \text{Sp} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-\beta)^k \sum_{r=1}^k \mathcal{H}^{k-r} A \mathcal{H}^{r-1} \\ &= \text{Sp} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-\beta)^k k \mathcal{H}^{k-1} A \\ &= \text{Sp} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k-1)!} (-\beta)^{k-1} \mathcal{H}^{k-1} (-\beta A) \\ &= -\beta \text{Sp} A e^{-\beta \mathcal{H}} \end{aligned}$$

also:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = -T \frac{1}{Z} (-\beta \text{Sp} A e^{-\beta \mathcal{H}}) = \frac{1}{Z} \text{Sp} A e^{-\beta \mathcal{H}} = \langle A \rangle$$

jetzt zur Frage: Änderung von $\langle A \rangle$ bei kleiner Änderung von λ ? $\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} = ?$

Problem:

In Ausdrücken der Form $\mathcal{H} \cdots \mathcal{H} A \mathcal{H} \cdots \mathcal{H} A \mathcal{H} \cdots \mathcal{H}$ hilft die zyklische Invarianz der Spur nicht weiter (falls $[A, H]_-$, $[A, \hat{N}]_- \neq 0$).

es ist:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{1}{Z} \text{Sp} \left(A e^{-\beta(H_0 + \lambda A - \mu \hat{N})} \right) \right) \\ &= -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \lambda} \text{Sp} A e^{-\beta \mathcal{H}} + \frac{1}{Z} \text{Sp} A \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta(H_0 + \lambda A - \mu \hat{N})} \end{aligned}$$

und mit

$$\frac{\partial Z}{\partial \lambda} = -\frac{1}{T} \text{Sp} A e^{-\beta \mathcal{H}}$$

folgt

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} = \beta \langle A \rangle^2 + \frac{1}{Z} \text{Sp} A \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta(H_0 + \lambda A - \mu \hat{N})}$$

hier hilft die **Trotter-Zerlegung**:

⇐ Übung

$$\boxed{\exp\left(\frac{1}{m}(A+B)\right) = \exp\left(\frac{1}{m}A\right) \exp\left(\frac{1}{m}B\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{m^2}\right)}$$

damit folgt:

$$\mathrm{Sp}A \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta \mathcal{H}} = \mathrm{Sp}A \frac{\partial}{\partial \lambda} \lim_{m \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{\beta}{m}(H_0 - \mu \hat{N})} e^{-\frac{\beta}{m} \lambda A} \right)^m = \lim_{m \rightarrow \infty} \mathrm{Sp}A \sum_{r=1}^m X^{m-r} \frac{\partial X}{\partial \lambda} X^{r-1} \dots X^m \dots$$

mit

$$\frac{\partial X}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(e^{-\frac{\beta}{m} \lambda A} e^{-\frac{\beta}{m}(H_0 - \mu \hat{N})} \right) = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(e^{-\frac{\beta}{m} \lambda A} \right) e^{-\frac{\beta}{m}(H_0 - \mu \hat{N})} = -\frac{\beta}{m} A X$$

ist:

$$\mathrm{Sp}A \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta \mathcal{H}} = \lim_{m \rightarrow \infty} \mathrm{Sp}A \sum_{r=1}^m X^{m-r} \left(-\frac{\beta}{m} A \right) X X^{r-1} = -\mathrm{Sp} \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{r=1}^m \frac{\beta}{m} A X^{m-r} A X^r$$

Kontinuumsmlimes:

definiere

$$\tau = r \frac{\beta}{m} \in [0, \beta] \quad m \rightarrow \infty$$

dann ist

$$d\tau = \frac{\beta}{m}$$

$$X^r = e^{-r \frac{\beta}{m} \mathcal{H}} = e^{-\mathcal{H} \tau}$$

$$X^m = e^{-\beta \mathcal{H}}$$

$$X^{m-r} = e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\mathcal{H} \tau}$$

und

$$\begin{aligned} \mathrm{Sp}A \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta \mathcal{H}} &= -\mathrm{Sp} \int_0^\beta d\tau A e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\mathcal{H} \tau} A e^{-\mathcal{H} \tau} \\ &= -\int_0^\beta d\tau \mathrm{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\mathcal{H} \tau} A e^{-\mathcal{H} \tau} A \\ &= -Z \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau) A(0) \rangle \end{aligned}$$

definiere

modifizierte Heisenberg-Darstellung

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

- Im Unterschied zum Heisenberg-Bild:
imaginäre Einheit i fehlt, keine unitäre Transformation
 \mathcal{H} statt H
- **imaginäre Zeit** τ mit $i\tau = t$ ($[\tau] = [\beta] = [1/\text{Energie}] = [\text{Zeit}]$)

damit folgt:

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} = \beta \langle A \rangle^2 - \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau) A(0) \rangle = \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda}$$

allgemeiner:

sei $\boxed{H = H_0 + \lambda_A A + \lambda_B B}$ $\rightarrow \Omega = \Omega(\lambda_A, \lambda_B)$

dann ist:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda_A} = \langle A \rangle \quad \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda_B} = \langle B \rangle$$

und:

$$\boxed{\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda_B \partial \lambda_A} = \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} = \beta \langle B \rangle \langle A \rangle - \int_0^\beta d\tau \langle B(\tau) A(0) \rangle = \frac{\partial \langle B \rangle}{\partial \lambda_A} = \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda_A \partial \lambda_B}}$$

$(\partial \langle A \rangle / \partial \lambda_B) d\lambda_B$ ist die Änderung des Erwartungswerts von A bei kleiner Störung
 $\lambda_B \rightarrow \lambda_B + d\lambda_B$

\rightarrow KM: Response-Größen sind Korrelationsfunktionen

\rightarrow QM: zeitabhängige Korrelationsfunktionen

das Resultat kann auch in folgender Form geschrieben werden:

$$\boxed{\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} = - \int_0^\beta d\tau \langle (B - \langle B \rangle)(\tau) (A - \langle A \rangle)(0) \rangle}$$

auch: "Dissipations-Fluktuations-Theorem"

3.4 Verallgemeinerters Ritzsches Prinzip

speziell für $[A, \mathcal{H}]_- = 0$ folgt $A(\tau) = A(0) = A$ und

$$\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} = \beta \langle A \rangle^2 - \beta \langle A^2 \rangle = -\beta \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \leq 0$$

Resultat gilt aber auch allgemein (auch für $[A, \mathcal{H}]_- \neq 0$):

$$\boxed{\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} \leq 0}$$

→ Ω als Funktion von λ konkav!

Aus der Konkavität von Ω ist eine zentrale Eigenschaft mit verschiedenen Implikationen. Hier soll ein wichtiges Extremalprinzip hergeleitet werden.

Beweis:

schreibe $\Delta A = A - \langle A \rangle$, dann ist (mit $A = A^\dagger$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} &= - \int_0^\beta d\tau \langle (A - \langle A \rangle)(\tau) (A - \langle A \rangle)(0) \rangle \\ &= - \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \Delta A(\tau) \Delta A(0) \right) \\ &= - \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\mathcal{H}\tau} \Delta A e^{-\mathcal{H}\tau} \Delta A \right) \\ &= - \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\mathcal{H}\tau/2} \Delta A e^{-\mathcal{H}\tau/2} e^{-\mathcal{H}\tau/2} \Delta A e^{\mathcal{H}\tau/2} \right) \\ &= - \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \Delta A(\tau/2) \Delta A(\tau/2)^\dagger \right) \\ &= - \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta \mathcal{E}_m} \langle m | \Delta A(\tau/2) | n \rangle \langle n | \Delta A(\tau/2)^\dagger | m \rangle \\ &= - \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta \mathcal{E}_m} |\langle m | \Delta A(\tau/2) | n \rangle|^2 \leq 0 \end{aligned}$$

wobei $\mathcal{H}|m\rangle = \mathcal{E}_m|m\rangle$

Hamilton-Operator:

$$H_{\mathbf{t}, \mathbf{U}} = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta$$

großkanonische Dichtmatrix:

$$\rho_{\mathbf{t}, \mathbf{U}} = \frac{\exp(-\beta(H_{\mathbf{t}, \mathbf{U}} - \mu \hat{N}))}{\text{Sp} \exp(-\beta(H_{\mathbf{t}, \mathbf{U}} - \mu \hat{N}))}$$

großkanonisches Potenzial

$$\Omega_{\mathbf{t}, \mathbf{U}} = -T \ln Z_{\mathbf{t}, \mathbf{U}} = -T \ln \text{Sp} \exp(-\beta(H_{\mathbf{t}, \mathbf{U}} - \mu \hat{N}))$$

definiere das Dichtmatrix-Funktional

$$\Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho] = \text{Sp} \left(\rho(H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N} + T \ln \rho) \right)$$

ρ ist hier als eine (Operator-)Variable aufzufassen. Für jedes ρ liefert $\Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho]$ einen Wert, der parametrisch von \mathbf{t} und \mathbf{U} abhängt. μ und T sind beliebig aber fest.

Extremalprinzip:

$$\Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho] = \min. \text{ für } \rho = \rho_{\mathbf{t},\mathbf{U}} \text{ und } \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho_{\mathbf{t},\mathbf{U}}] = \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}$$

An der Gleichgewichtsdichtematrix ist das Dichtematrix-Funktional also minimal und gleich dem großkanonischen Potenzial.

Beweis:

zunächst gilt:

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho_{\mathbf{t},\mathbf{U}}] &= \text{Sp} \left(\rho_{\mathbf{t},\mathbf{U}}(H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N} + T \ln \rho_{\mathbf{t},\mathbf{U}}) \right) \\ &= \text{Sp} \left(\rho_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N} + T(-\beta)(H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N}) - T \ln Z_{\mathbf{t},\mathbf{U}}] \right) \\ &= \text{Sp} \rho_{\mathbf{t},\mathbf{U}}(-T) \ln Z_{\mathbf{t},\mathbf{U}} = \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}} \end{aligned}$$

es bleibt zu zeigen, dass $\Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho] \geq \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}$ für beliebiges ρ

Natürlich ist ρ nicht vollständig beliebig. ρ soll eine physikalisch sinnvolle Dichtematrix darstellen, muss also insbesondere normiert sein ($\text{Sp} \rho = 1$) und positiv definit (Wahrscheinlichkeitsinterpretation). Als allgemeinsten Ansatz ist daher ρ als Dichtematrix eines beliebigen Hamiltonians H' zu wählen.

(allgemeiner) Ansatz:

$$\rho = \rho_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'} = \frac{\exp(-\beta(H_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'} - \mu\hat{N}))}{\text{Sp} \exp(-\beta(H_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'} - \mu\hat{N}))} = \frac{\exp(-\beta(H_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'} - \mu\hat{N}))}{Z_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'}}$$

damit folgt:

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'}] &= \text{Sp} \left(\rho_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'}(H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N} + T \ln \rho_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'}) \right) \\ &= \text{Sp} \left(\rho_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'}(H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N} + T(-\beta)(H_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'} - \mu\hat{N}) - T \ln Z_{\mathbf{t}',\mathbf{U}'}) \right) \end{aligned}$$

$$= \text{Sp} \left(\rho_{t,U'} (H_{t,U} - H_{t,U'}) \right) + \Omega_{t,U'}$$

betrachte die folgende Zerlegung:

$$H(\lambda) = H_{t,U'} + \lambda(H_{t,U} - H_{t,U'})$$

es ist $H(0) = H_{t,U'}$ und $H(1) = H_{t,U}$ und für

$$\Omega(\lambda) = -T \ln \text{Sp} \exp(-\beta(H(\lambda) - \mu \hat{N}))$$

ist $\Omega(0) = \Omega_{t,U'}$ und $\Omega(1) = \Omega_{t,U}$

damit gilt jetzt:

$$\Omega_{t,U}[\rho_{t,U'}] = \Omega(0) + \left. \frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0}$$

andererseits: $\Omega(\lambda)$ konkav \rightarrow

$$\Omega(0) + \left. \frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0} \cdot \lambda \geq \Omega(\lambda)$$

Eine konkave Funktion ist überall kleiner als ihre lineare Approximation in einem festen Punkt.

für $\lambda = 1$ folgt also:

$$\Omega_{t,U}[\rho_{t,U'}] = \Omega(0) + \left. \frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0} \geq \Omega(1) = \Omega_{t,U}$$

Das Extremalprinzip stellt eine Verallgemeinerung des Ritzschen Variationsprinzips auf endliche Temperaturen dar.

3.5 Wick-Theorem

- notwendig zur Auswertung des Ritz-Prinzips
Ausgangspunkt für Formulierung der statischen Mean-Field-Theorie
- zentrales Theorem für diagrammatische Störungstheorie
- Idee: Rückführung von höheren auf Ein-Teilchen-Korrelationsfunktionen für freies System

definiere für c_α mit $\alpha = 1, \dots, d$:

$$d_i = c_i \quad d_{d+i} = c_i^\dagger$$

Hamilton-Operator:

$$\boxed{H_0 = \sum_{ij} h_{ij} d_i d_j} \quad \text{freies System!}$$

mit $i, j = 1, \dots, 2d$

Der Hamilton-Operator enthält (je nach Wahl von \mathbf{h}) neben den üblichen Termen der Form $c^\dagger c$ auch nicht-teilchenzahlerhaltende Terme der Form cc und $c^\dagger c^\dagger$. Wichtig ist nur, dass H quadratisch in den d_i (und hermitesch) ist.

Ein-Teilchen -Korrelationsfunktion: $\langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle^{(0)}$

N -Teilchen -Korrelationsfunktion: $\langle c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger \cdots c_{\alpha_N}^\dagger c_{\beta_1} c_{\beta_2} \cdots c_{\beta_N} \rangle^{(0)}$

$\langle \cdots \rangle^{(0)}$: freier Erwartungswert, Erwartungswert im System H_0

mit $\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu N$ gilt:

$$\boxed{\mathcal{L}d_i = [d_i, \mathcal{H}_0]_- = \sum_j D_{ij} d_j} \quad \text{mit einer Matrix } \mathbf{D}$$

damit folgt:

☞ Übung

$$e^{\beta \mathcal{H}_0} d_i e^{-\beta \mathcal{H}_0} = e^{-\beta \mathcal{L}} d_i = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \mathcal{L}^n d_i = \sum_j \left(e^{-\beta \mathbf{D}} \right)_{ij} d_j$$

also:

$$\boxed{d_i e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \sum_j \left(e^{-\beta \mathbf{D}} \right)_{ij} e^{-\beta \mathcal{H}_0} d_j}$$

weiter gilt: (beachte, dass der (Anti-)Kommutator eine c -Zahl ist)

$$\begin{aligned} \langle d_i d_j \rangle^{(0)} &= [d_i, d_j]_{-\varepsilon} + \varepsilon \langle d_j d_i \rangle^{(0)} = [d_i, d_j]_{-\varepsilon} + \varepsilon \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(d_i e^{-\beta \mathcal{H}_0} d_j \right) \\ &= [d_i, d_j]_{-\varepsilon} + \varepsilon \frac{1}{Z} \sum_k \left(e^{-\beta \mathbf{D}} \right)_{ik} \text{Sp} \left(e^{-\beta \mathcal{H}_0} d_k d_j \right) \end{aligned}$$

der (Anti-)Kommutator kann also als Erwartungswert geschrieben werden:

$$\boxed{[d_i, d_j]_{-\varepsilon} = \sum_k M_{ik} \langle d_k d_j \rangle^{(0)} \quad \text{mit} \quad M_{ij} = \delta_{ij} - \varepsilon \left(e^{-\beta \mathbf{D}} \right)_{ij}}$$

N -Teilchen-Korrelationsfunktion ($s = 2N$ ist gerade):

$$\begin{aligned} \langle d_{i_1} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} &= \langle [d_{i_1}, d_{i_2}]_{-\varepsilon} d_{i_3} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} + \varepsilon \langle d_{i_2} d_{i_1} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &= \langle [d_{i_1}, d_{i_2}]_{-\varepsilon} d_{i_3} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &+ \varepsilon^1 \langle d_{i_2} [d_{i_1}, d_{i_3}]_{-\varepsilon} d_{i_4} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &\dots \\ &+ \varepsilon^{s-2} \langle d_{i_2} \cdots d_{i_{s-1}} [d_{i_1}, d_{i_s}]_{-\varepsilon} \rangle^{(0)} \\ &+ \varepsilon^{s-1} \langle d_{i_2} \cdots d_{i_s} d_{i_1} \rangle^{(0)} \end{aligned}$$

letzter Summand:

$$\varepsilon^{s-1} \langle d_{i_2} \cdots d_{i_s} d_{i_1} \rangle^{(0)} = \varepsilon \frac{1}{Z} \text{Sp} \left(d_{i_1} e^{-\beta \mathcal{H}_0} d_{i_2} \cdots d_{i_s} \right) = \sum_{j_1} \left(e^{-\beta \mathbf{D}} \right)_{i_1 j_1} \langle d_{j_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)}$$

Zusammenfassen mit Term auf der linken Seite:

$$\begin{aligned} &\sum_{j_1} M_{i_1 j_1} \langle d_{j_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &= \langle [d_{i_1}, d_{i_2}]_{-\varepsilon} d_{i_3} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &+ \varepsilon^1 \langle d_{i_2} [d_{i_1}, d_{i_3}]_{-\varepsilon} d_{i_4} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &\dots \\ &+ \varepsilon^{s-2} \langle d_{i_2} \cdots d_{i_{s-1}} [d_{i_1}, d_{i_s}]_{-\varepsilon} \rangle^{(0)} \end{aligned}$$

(Anti-)Kommutatoren als Erwartungswerte schreiben:

$$\begin{aligned} &\sum_{j_1} M_{i_1 j_1} \langle d_{j_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &= \left\langle \sum_k M_{i_1 k} \langle d_k d_{i_2} \rangle^{(0)} d_{i_3} \cdots d_{i_s} \right\rangle^{(0)} \\ &+ \dots + \\ &+ \varepsilon^{s-2} \langle d_{i_2} \cdots d_{i_{s-1}} \sum_k M_{i_1 k} \langle d_k, d_{i_s} \rangle^{(0)} \rangle^{(0)} \end{aligned}$$

Multiplikation mit $M_{i_1}^{-1}$, Summation über i_1 , Umbenennen $l \rightarrow i_1$:

$$\begin{aligned} &\langle d_{i_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &= \langle \langle d_{i_1} d_{i_2} \rangle^{(0)} d_{i_3} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &+ \dots + \\ &+ \varepsilon^{s-2} \langle d_{i_2} \cdots d_{i_{s-1}} \langle d_{i_1} d_{i_s} \rangle^{(0)} \rangle^{(0)} \end{aligned}$$

Jetzt stören nur noch die Vorzeichen. Eine elegante Formulierung gelingt mit der Definition von Ordnungsoperator und Kontraktion. Ein Ordnungsoperator wird so definiert, dass Erzeuger und Vernichter sich wie (anti-)kommutierende Zahlen verhalten.

Ordnungsoperator:

$$\mathcal{T}(d_i d_j) = \varepsilon d_j d_i \quad \text{falls } d_i \text{ Vernichter, } d_j \text{ Erzeuger}$$

$$\mathcal{T}(d_i d_j) = d_i d_j \quad \text{sonst}$$

\mathcal{T} ordnet die Erzeuger links von den Vernichtern an (beachte: ε)

es gilt:

$$\boxed{\mathcal{T}(d_i d_j) = \varepsilon \mathcal{T}(d_j d_i)}$$

... wie man leicht für die verschiedenen Fälle verifiziert. Diese Eigenschaft besagt, dass sich Erzeuger und Vernichter in dem Argument von \mathcal{T} wie (anti-)kommutierende Zahlen verhalten!

Verallgemeinerung auf Produkte von s Erzeugern oder Vernichtern:

$$\mathcal{T}(d_{i_1} \cdots d_{i_s}) = \varepsilon^p d_{k_1} \cdots d_{k_s}$$

wobei $d_{k_1} \cdots d_{k_s}$ geordnet ist (alle Erzeuger links von allen Vernichtern)

p : Anzahl der Vertauschungen für $(i_1, \dots, i_s) \rightarrow (k_1, \dots, k_s)$

Verallgemeinerung auf Linearkombinationen aus Produkten mit s Erzeugern oder Vernichtern:

$$\mathcal{T} \left(\sum_{i_1, \dots, i_s} \lambda_{i_1, \dots, i_s} d_{i_1} \cdots d_{i_s} \right) = \sum_{i_1, \dots, i_s} \lambda_{i_1, \dots, i_s} \mathcal{T}(d_{i_1} \cdots d_{i_s})$$

beachte:

in \mathcal{T} gelten nicht die üblichen (Anti-)Vertauschungsrelationen

Bsp: $(c^\dagger c = -\varepsilon + \varepsilon c c^\dagger)$

$$c^\dagger c = \mathcal{T}(c^\dagger c) \neq \mathcal{T}(-\varepsilon + \varepsilon c c^\dagger) = \mathcal{T}(-\varepsilon) + \varepsilon \mathcal{T}(c c^\dagger) = -\varepsilon + c^\dagger c$$

definiere **Kontraktion** zweier Erzeuger/Vernichter:

$$\boxed{\underline{d_i d_j} = \langle \mathcal{T}(d_i d_j) \rangle^{(0)}}$$

die Kontraktion ist eine c -Zahl

es gilt:

$$\underline{d_i d_j} = \varepsilon \underline{d_j d_i}$$

für ein Produkt aus k Erzeugern oder Vernichtern $A = d_{i_1} \cdots d_{i_k}$ sei

$$\underline{d_i A d_j} = \varepsilon^k \underline{d_i d_j A} = \varepsilon^k \underline{A d_i d_j}$$

Im Falle von Teilchenzahlerhaltung sind nur Kontraktionen zwischen Erzeugern und Vernichtern ungleich Null.

betrachte Erwartungswert von s bereits geordneten Erzeugern/Vernichtern:

$$\langle \mathcal{T}(d_{i_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s}) \rangle^{(0)} = \langle d_{i_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)}$$

mit den Überlegungen weiter oben ist:

$$\langle d_{i_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} = \langle \underline{d_{i_1} d_{i_2}} d_{i_3} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} + \cdots + \varepsilon^{s-2} \langle d_{i_2} \cdots d_{i_{s-1}} \underline{d_{i_1} d_{i_s}} \rangle^{(0)}$$

denn die kontrahierten Operatoren sind geordnet

also:

$$\begin{aligned} & \langle \mathcal{T}(d_{i_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s}) \rangle^{(0)} \\ &= \langle \underline{d_{i_1} d_{i_2}} d_{i_3} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &+ \langle \underline{d_{i_1} d_{i_2} d_{i_3}} \cdots d_{i_s} \rangle^{(0)} \\ &+ \cdots + \\ &+ \langle \underline{d_{i_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s}} \rangle^{(0)} \end{aligned}$$

nach Herausziehen der Kontraktionen (c -Zahlen!) und Iteration ist:

$$\boxed{\langle \mathcal{T}(d_{i_1} d_{i_2} \cdots d_{i_s}) \rangle^{(0)} = \{\text{Summe über alle vollständig kontrahierten Terme}\}}$$

Wick Theorem

- gültig auch falls Operatoren links nicht bereits geordnet sind, denn Ordnung führt links und rechts zu gleichem Vorzeichenfaktor
- Voraussetzungen sind:

- 1) s gerade
 - 2) H_0 quadratisch in Erzeugern und Vernichtern
- Anzahl Terme: $(s-1)(s-3)\cdots 3\cdot 1$
 - Anzahl der Terme bei Teilchenzahlerhaltung: $(s/2)!$

Bsp. (Fermionen, $H_0 = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta$, Teilchenzahlerhaltung):

$$\begin{aligned}
\langle n_\alpha n_\beta \rangle^{(0)} &= \langle c_\alpha^\dagger c_\alpha c_\beta^\dagger c_\beta \rangle^{(0)} = \langle c_\alpha^\dagger (\delta_{\alpha\beta} - c_\beta^\dagger c_\alpha) c_\beta \rangle^{(0)} = \delta_{\alpha\beta} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle^{(0)} - \\
&\langle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\alpha c_\beta \rangle^{(0)} \\
&= \delta_{\alpha\beta} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle^{(0)} - \langle \mathcal{T}(c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\alpha c_\beta) \rangle^{(0)} \\
&= \delta_{\alpha\beta} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle^{(0)} - (-\underline{c_\alpha^\dagger c_\alpha} \underline{c_\beta^\dagger c_\beta} + \underline{c_\alpha^\dagger c_\beta} \underline{c_\beta^\dagger c_\alpha}) \\
&= \delta_{\alpha\beta} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle^{(0)} + \langle \mathcal{T}(c_\alpha^\dagger c_\alpha) \rangle^{(0)} \langle \mathcal{T}(c_\beta^\dagger c_\beta) \rangle^{(0)} - \langle \mathcal{T}(c_\alpha^\dagger c_\beta) \rangle^{(0)} \langle \mathcal{T}(c_\beta^\dagger c_\alpha) \rangle^{(0)} \\
&= \delta_{\alpha\beta} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle^{(0)} + \langle c_\alpha^\dagger c_\alpha \rangle^{(0)} \langle c_\beta^\dagger c_\beta \rangle^{(0)} - \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle^{(0)} \langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle^{(0)}
\end{aligned}$$

Das Wicksche Theorem kann auf den Fall zeitabhängiger Erzeuger und Vernichter verallgemeinert werden. Die wird vor allem bei der diagrammatischen Störungstheorie wichtig. Die Zeitabhängigkeit entsteht im (modifizierten) Heisenberg-Bild mit einem in den Erzeugern und Vernichtern quadratischem Hamilton-Operator.

betrachte:

$$d_i(\tau) = \exp(\mathcal{H}_0\tau) d_i \exp(-\mathcal{H}_0\tau)$$

wegen

$$[d_i(\tau), \mathcal{H}_0]_- = \exp(\mathcal{H}_0\tau) [d_i, \mathcal{H}_0]_- \exp(-\mathcal{H}_0\tau) = \sum_j D_{ij} d_j(\tau)$$

laufen alle Rechnungen analog

Die Art der vereinbarten Ordnung ist für die Gültigkeit des Wickschen Theorems nicht wichtig. Üblich ist bei zeitabhängigen Erzeugern/Vernichtern aber die Zeitordnung im tatsächlichen Wortsinn.

definiere den **Zeitordnungsoperator**:

$$\mathcal{T}(d_1(\tau_1)d_2(\tau_2)) = \Theta(\tau_1 - \tau_2)d_1(\tau_1)d_2(\tau_2) + \varepsilon \Theta(\tau_2 - \tau_1)d_2(\tau_2)d_1(\tau_1)$$

Merksatz:

$$\boxed{\text{Frühere Operatoren operieren früher.}}$$

bei Gleichzeitigkeit: Erzeuger links vom Vernichter (konsistent mit Def. oben)

alternativ:

$$\boxed{\tau_{\text{Erzeuger}} = \tau_{\text{Vernichter}} + 0^+}$$

0^+ : positives Infinitesimal

Das Wicksche Theorem gilt jetzt für zeitabhängige und zeitgeordnete N -Teilchen-Korrelationsfunktion ($s = 2N$):

$$\langle \mathcal{T}(d_{i_1}(\tau_1) \cdots d_{i_s}(\tau_s)) \rangle^{(0)} = \{\text{Summe über alle vollständig kontrahierten Terme}\}$$

mit der Kontraktion:

$$\begin{aligned} \underline{d_i(\tau_i)d_j(\tau_j)} &= \langle \mathcal{T}(d_i(\tau_i)d_j(\tau_j)) \rangle^{(0)} \\ &= \Theta(\tau_i - \tau_j) \langle d_i(\tau_i)d_j(\tau_j) \rangle^{(0)} + \varepsilon \Theta(\tau_j - \tau_i) \langle d_j(\tau_j)d_i(\tau_i) \rangle^{(0)} \end{aligned}$$

man nennt

$$\underline{-c_\alpha(\tau)c_\beta^\dagger(\tau')} = -\langle \mathcal{T}(c_\alpha(\tau)c_\beta^\dagger(\tau')) \rangle^{(0)} \equiv G_{\alpha\beta}(\tau, \tau')$$

Ein-Teilchen-Green-Funktion

(auch: Matsubara-Funktion, thermische Green-Funktion, imaginär zeitabhängige Green-Funktion)

3.6 Mean-Field-Theorie

Konstruktion von Näherungen:

- Variationsprinzip $\delta\Omega_{t,U}[\rho] = 0$
- allgemeinsten Ansatz $\rho = \rho_{t',U'}$ mit t' und U' beliebig
→ exakte Lösung $\rho = \rho_{t,U}$
- (eingeschränkter) Ansatz $\rho = \rho_\lambda$ mit Parameter(n) λ liefert gemäß

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \Omega_{t,U}[\rho_\lambda] = 0 \quad \text{für } \lambda = \lambda_0$$

ein optimales ρ_{λ_0} mit

$$\Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho_{\lambda_0}] \geq \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}$$

- Ansatz für ρ durch Wahl eines Referenzsystems: $H' = H'_\lambda$
 $\rho_x = \exp(-\beta(H'_x - \mu\hat{N}))/Z_x$
- Berechnung von Korrelationsfunktionen für H'_{λ_0} (statt H) als Approximation sinnvoll, falls H'_{λ_0} einfach (lösbar)

Dieses Approximationsschema ist naheliegend, hat aber den ernstzunehmenden Nachteil, dass eine gute Approximation für ρ noch lange keine gute Approximation für eine Korrelationsfunktion impliziert. Für Korrelationsfunktionen ist daher stets unabhängig zu diskutieren, wie weit die Näherung trägt.

Mean-Field-(Hartree-Fock-)Näherung:

$$H' = H_{\mathbf{t}',0} = \sum_{\alpha\beta} t'_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta \quad \mathbf{t}' \text{ beliebig}$$

Es wird also derjenige Ein-Teilchen-Hamiltonian H' gesucht, der zum optimalen großkanonischen Potenzial für $H = H_{\mathbf{t},\mathbf{U}}$ führt. Dabei sind sämtliche Ein-Teilchen-Parameter \mathbf{t}' frei und als Variationsparameter aufzufassen.

sei $\rho' = \frac{1}{Z'} e^{-\beta(H' - \mu\hat{N})}$ und $\langle \dots \rangle' = \text{Sp}(\rho' \dots)$

Bestimmung von \mathbf{t}' :

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho_{\mathbf{t}'}] \\ &= \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \text{Sp} \left(\rho_{\mathbf{t}'} (H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N} + T \ln \rho_{\mathbf{t}'}) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \left(\langle H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N} \rangle' + \text{Sp} [\rho_{\mathbf{t}'} T (-\beta)(H' - \mu\hat{N}) - \ln Z'] \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \left(\langle H_{\mathbf{t},\mathbf{U}} - \mu\hat{N} \rangle' - \langle H' - \mu\hat{N} \rangle' + \Omega_{\mathbf{t}',0} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \left\langle \sum_{\alpha\beta} t'_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\delta\gamma} U_{\alpha\beta\delta\gamma} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta - \sum_{\alpha\beta} t'_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta \right\rangle' + \langle c_\mu^\dagger c_\nu \rangle' \end{aligned}$$

denn $\partial\Omega_{t',0}/\partial t'_{\mu\nu} = \langle c_\mu^\dagger c_\nu \rangle'$

definiere:

$$K'_{\alpha\nu\mu\beta} = \frac{\partial \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle'}{\partial t'_{\mu\nu}} = \frac{1}{T} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle' \langle c_\mu^\dagger c_\nu \rangle' - \int_0^\beta d\tau \langle c_\alpha^\dagger(\tau) c_\beta(\tau) c_\mu^\dagger c_\nu \rangle'$$

dann ist:

$$0 = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} K'_{\alpha\nu\mu\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta \rangle' - \sum_{\alpha\beta} t'_{\alpha\beta} K'_{\alpha\nu\mu\beta}$$

H' bilinear \rightarrow Wick-Theorem anwendbar:

$$\langle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta \rangle' = \langle c_\alpha^\dagger c_\delta \rangle' \langle c_\beta^\dagger c_\gamma \rangle' + \varepsilon \langle c_\alpha^\dagger c_\gamma \rangle' \langle c_\beta^\dagger c_\delta \rangle'$$

also:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta \rangle' \\ &= \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \left(\langle c_\alpha^\dagger c_\delta \rangle' \langle c_\beta^\dagger c_\gamma \rangle' + \varepsilon \langle c_\alpha^\dagger c_\gamma \rangle' \langle c_\beta^\dagger c_\delta \rangle' \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial t'_{\mu\nu}} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\beta\delta\gamma} + \varepsilon U_{\alpha\beta\gamma\delta}) \langle c_\alpha^\dagger c_\delta \rangle' \langle c_\beta^\dagger c_\gamma \rangle' \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\beta\delta\gamma} + \varepsilon U_{\alpha\beta\gamma\delta}) \left(\langle c_\alpha^\dagger c_\delta \rangle' K'_{\beta\nu\mu\gamma} + K'_{\alpha\nu\mu\delta} \langle c_\beta^\dagger c_\gamma \rangle' \right) \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\gamma\alpha\delta\beta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle' K'_{\alpha\nu\mu\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\alpha\gamma\delta\beta}) K'_{\alpha\nu\mu\beta} \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle' \end{aligned}$$

mit $(\alpha\beta\gamma) \rightarrow (\gamma\alpha\beta)$ (1.Term) und $(\beta\gamma\delta) \rightarrow (\gamma\delta\beta)$ (2.Term)

$$\begin{aligned} &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \left((U_{\gamma\alpha\delta\beta} + U_{\alpha\gamma\beta\delta}) + \varepsilon (U_{\gamma\alpha\beta\delta} + U_{\alpha\gamma\delta\beta}) \right) \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle' K'_{\alpha\nu\mu\beta} \\ &= 2 \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle' K'_{\alpha\nu\mu\beta} \end{aligned}$$

mit $U_{\alpha\beta\delta\gamma} = U_{\beta\alpha\gamma\delta}$

also folgt insgesamt:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} K'_{\alpha\nu\mu\beta} - \sum_{\alpha\beta} t'_{\alpha\beta} K'_{\alpha\nu\mu\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle' K'_{\alpha\nu\mu\beta} \\ 0 &= \sum_{\alpha\beta} \left(t_{\alpha\beta} - t'_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle' \right) K'_{\alpha\nu\mu\beta} \end{aligned}$$

Invertierbarkeit von K vorausgesetzt, bedeutet dies:

$$t'_{\alpha\beta} = t_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} \rangle'$$

der optimale Ein-Teilchen-Hamiltonian ist also:

$$H' = \sum_{\alpha\beta} \left(t_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{HF})} \right) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}$$

mit

$$\Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{HF})} = \sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} \rangle'$$

→ $\Sigma^{(\text{HF})}$ **Hartree-Fock-Selbstenergie**, effektives Potenzial

beachte: die Bestimmung von $\Sigma^{(\text{HF})}$ muss selbstkonsistent erfolgen:

$$\Sigma^{(\text{HF})} \rightarrow H' \rightarrow \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle' \rightarrow \Sigma^{(\text{HF})}$$

Kochrezept: Entkopplung des Wechselwirkungsterms

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \mapsto \sum_{\alpha\beta} \left(\sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} \rangle' \right) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}$$

ergibt sich aus der Ersetzung:

$$c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \mapsto \underline{c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta}} + c_{\alpha}^{\dagger} \underline{c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta}} + c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} \underline{c_{\gamma} c_{\delta}} + c_{\alpha}^{\dagger} \underline{c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta}}$$

(ala Wick-Theorem, aber nicht ganz vollständige Kontraktion)

Die Hartree-Fock-Selbstenergie ist hermitesch und frequenzunabhängig, ist also als ein (effektives) Ein-Teilchen-Potenzial zu interpretieren. Der erste Term ist das Hartree-Potenzial, der zweite das Austausch-Potenzial. Dies wird deutlich beim Übergang zur kontinuierlichen Ein-Teilchen-ONB $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ (Ortseigenzustände).

U: Coulomb-Wechselwirkung, spinlose Teilchen →

$$\Sigma^{(\text{HF})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int \int d^3r'' d^3r''' \left(\langle \mathbf{r} |^{(2)} \langle \mathbf{r}'' | \frac{1}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|} | \mathbf{r}' \rangle^{(1)} | \mathbf{r}''' \rangle^{(2)} \right. \\ \left. + \varepsilon \langle \mathbf{r}'' |^{(2)} \langle \mathbf{r} | \frac{1}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|} | \mathbf{r}' \rangle^{(1)} | \mathbf{r}''' \rangle^{(2)} \right) \langle \Psi(\mathbf{r}'')^{\dagger} \Psi(\mathbf{r}''') \rangle$$

$\Psi(\mathbf{r})$: Feldoperator (Vernichter am Ort \mathbf{r})

$\mathbf{r}^{(i)}$: Ortsoperatoren der Teilchen $i = 1, 2$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(\text{HF})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \int d^3r'' d^3r''' \left(\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}''') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \right) \langle \Psi(\mathbf{r}'')^\dagger \Psi(\mathbf{r}''') \rangle \end{aligned}$$

also:

$$\Sigma^{(\text{HF})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int d^3r'' \frac{\langle n(\mathbf{r}'') \rangle}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} + \varepsilon \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \langle \Psi(\mathbf{r}')^\dagger \Psi(\mathbf{r}) \rangle$$

Der erste Term ist das (lokale) Hartree-Potenzial und ist als elektrostatisches Potenzial der Ladungsdichteverteilung $\langle n(\mathbf{r}'') \rangle$ interpretierbar. Der Austausch-Term ist nicht klassisch interpretierbar.

Darstellung des Dichteoperators in 1.Quantisierung:

$$n(\mathbf{r}'') = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}^{(i)})$$

→ Hartree-Term:

$$\Sigma^{(\text{H})}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}^{(i)}|}$$

Nach der Bestimmung der optimalen Ein-Teilchen-Variationsparameter \mathbf{t}' steht noch die Berechnung des großkanonischen Potenzials in der Hartree-Fock-Näherung aus.

es ist:

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{t},U}[\rho_{\mathbf{t}}] &= \text{Sp} \left(\rho_{\mathbf{t}} (H_{\mathbf{t},U} - \mu \hat{N} + T \ln \rho_{\mathbf{t}}) \right) \\ &= \Omega_{\mathbf{t}',0} + \left\langle \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\delta\gamma} U_{\alpha\beta\delta\gamma} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta - \sum_{\alpha\beta} t'_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta \right\rangle' \\ &= \Omega_{\mathbf{t}',0} + \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle' + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\beta\delta\gamma} + \varepsilon U_{\alpha\beta\gamma\delta}) \langle c_\alpha^\dagger c_\delta \rangle' \langle c_\beta^\dagger c_\gamma \rangle' - \sum_{\alpha\beta} t'_{\alpha\beta} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle' \end{aligned}$$

und mit $t'_{\alpha\beta} = t_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} \rangle'$ folgt:

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho_{\mathbf{t}'}] &= \Omega_{\mathbf{t}',0} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\beta\delta\gamma} + \varepsilon U_{\alpha\beta\gamma\delta}) \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} \rangle' \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle' \\ &\quad - \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} \rangle' \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle' \end{aligned}$$

2.Term: $(\alpha\beta\gamma) \rightarrow (\beta\gamma\alpha) \rightarrow$

$$\Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho_{\mathbf{t}'}] = \Omega_{\mathbf{t}',0} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\beta\delta\gamma} + \varepsilon U_{\alpha\beta\gamma\delta}) \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} \rangle' \langle c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} \rangle'$$

der Zusatzterm ist: $-(1/2) \sum_{\alpha\beta} \Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{HF})} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle'$

Wick-Theorem, aber "invers" \rightarrow

$$\boxed{\Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\rho_{\mathbf{t}'}] = \Omega_{\mathbf{t}',0} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \rangle' = \Omega_{\mathbf{t}',0} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{HF})} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle'}$$

Der erste Term ist das großkanonische Potenzial des effektiven Modells unabhängiger Teilchen und beinhaltet über die Renormierung der Ein-Teilchen-Energien, $\mathbf{t} \rightarrow \mathbf{t}'$, schon Wechselwirkungseffekte. Der zweite Term ist als eine Korrektur aufzufassen, mit der Doppelzählungen vermieden werden.

man gewinnt eine exakte obere Schranke für das großkanonisches Potenzial:

$$\Omega_{\mathbf{t}',0} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \rangle' \geq \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}$$

setze $U_{\alpha\beta\delta\gamma} \rightarrow \lambda U_{\alpha\beta\delta\gamma}$

Entwicklung des großkanonischen Potenzials in der Wechselwirkungsstärke λ :

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}} &= \Omega_{\mathbf{t},0} + \lambda \frac{\partial \Omega_{\mathbf{t},0}}{\partial \lambda} + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \Omega_{\mathbf{t},0} + \lambda \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \rangle' + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \Omega_{\mathbf{t}',0} + \sum_{\alpha\beta} (t_{\alpha\beta} - t'_{\alpha\beta}) \frac{\partial \Omega_{\mathbf{t}',0}}{\partial t_{\alpha\beta}} + \mathcal{O}(\lambda^2) + \lambda \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \rangle' + \mathcal{O}(\lambda^2) \end{aligned}$$

$$\text{denn } t_{\alpha\beta} - t'_{\alpha\beta} = - \sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} \rangle' = \mathcal{O}(\lambda)$$

mit $\partial\Omega_{t',0}/\partial t_{\alpha\beta} = \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle'$ (und $\lambda = 1$) folgt also:

$$\begin{aligned} \Omega_{t,U} &= \Omega_{t',0} + \sum_{\alpha\beta} (t_{\alpha\beta} - t'_{\alpha\beta}) \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle' + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \rangle' + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \Omega_{t',0} - \sum_{\alpha\beta} \Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{HF})} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle' + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \rangle' + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \Omega_{t',0} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\delta\gamma} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta} \rangle' + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ &= \Omega_{t,U}[\rho_{t'}] + \mathcal{O}(\lambda^2) \end{aligned}$$

Hartree-Fock liefert also das bis auf $\mathcal{O}(\lambda^2)$ korrekte großkanonische Potenzial

Kapitel 4

Wechselwirkende Viel-Elektronen-Systeme

$S = 1/2$ -Gitter-Fermi-Modelle

4.1 Gittermodelle

Gitterplätze: $i = 1, \dots, L$

Ortsvektoren zu Gitterplätzen:

$$\mathbf{R}_i = \sum_{k=1}^D i_k \mathbf{a}_k \quad \text{mit } i_k \in \mathbb{Z}$$

Basis $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_D$ spannen Einheitszelle (EZ) auf

Volumen der Einheitszelle:

$$V_{EZ} = |\det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_D)|$$

Systemvolumen $V = LV_{EZ}$

reziprokes Gitter:

$$\mathbf{G}_i = \sum_{k=1}^D i_k \mathbf{b}_k \quad \text{mit } i_k \in \mathbb{Z}$$

Basis $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_D$ spannen reziproke Einheitszelle (rEZ) auf

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

spezielle rEZ: 1. Brillouin-Zone (1BZ)

$$V_{1BZ} = |\det(\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_D)|$$

es ist

$$V_{\text{EZ}} V_{1\text{BZ}} = (2\pi)^D$$

periodische Randbedingungen auf dem Volumen $V \rightarrow$

$$\frac{V_{1\text{BZ}}}{\Delta k} = \frac{(2\pi)^D / V_{\text{EZ}}}{(2\pi)^D / V} = \frac{V}{V_{\text{EZ}}} = L$$

Anzahl der \mathbf{k} -Punkte in der 1BZ: L

(diskrete) Fourier-Transformation zwischen realem und reziprokem Raum:

$$\boxed{U_{i\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}} \quad \mathbf{k} \in 1\text{BZ}$$

U ist quadratisch!

U ist unitär:

$$\sum_{\mathbf{k}} U_{i\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}j}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} U_{i\mathbf{k}} U_{j\mathbf{k}}^* = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} = \delta_{ij}$$

$$\sum_{\mathbf{i}} U_{\mathbf{k}i}^\dagger U_{i\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{i}} U_{i\mathbf{k}}^* U_{i\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{i}} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

mit der Darstellung des Kronecker-Deltas:

$$\boxed{\delta_{ij} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{i}} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}_i}}$$

Diese Relationen gelten mit der Vereinbarung, alle Wellenvektoren stets auf die 1BZ zu beschränken.

☞ Übung

Gittermodell: Ein-Teilchen-ONB $\{|\alpha\rangle\}$ mit $\alpha = (i, m, \sigma)$, wobei

i : Gitterplatz

m : orbitaler Freiheitsgrad am Platz i

σ : Spinfreiheitsgrad ($\sigma = \uparrow, \downarrow$ für Spin-1/2-Teilchen)

es ist

$$|im\sigma\rangle = |im\rangle|\sigma\rangle \in \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_1^{(B)} \otimes \mathcal{H}^{(S)}$$

Orbital $|im\rangle$ zentriert am Platz i

Hopping-Matrixelemente:

$$t_{im\sigma, i'm'\sigma'} = \langle im\sigma | \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) | i'm'\sigma' \rangle$$

V spinunabhängig:

$$t_{ii'mm'\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'} t_{ii'mm'}$$

V gitterperiodisch:

$$t_{im\sigma, i'm'\sigma'} = t_{mm'}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}'_i)$$

also:

$$H_0 = \sum_{ii'mm'\sigma} t_{ii'mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{i'm'\sigma}$$

Fourier-Transformation der Ein-Teilchen-Basis:

$$|im\sigma\rangle \leftrightarrow |\mathbf{k}m\sigma\rangle \quad (m \text{ und } \sigma \text{ fest})$$

damit (hier der Einfachheit halber nur ein Orbital pro Platz, m weglassen):

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

H_0 "forminvariant" unter unitären Transformationen der Ein-Teilchen-Basis

Ein-Teilchen-Matrixelement:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ij} U_{ki}^{-1} t_{ij} U_{jk'} = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} t_{ij} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}_j} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}_j} \\ &\stackrel{i \rightarrow i+j}{=} \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} t(\mathbf{R}_i) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}_j} = \sum_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} t(\mathbf{R}_i) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} t(\mathbf{R}_i) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \stackrel{i \rightarrow i-j}{=} \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{ij} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\ &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \varepsilon(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{ij} \quad t_{ij} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \varepsilon(\mathbf{k})$$

(diskrete) Fourier-Transformation diagonalisiert H_0 :

$$H_0 = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

unter Ausnutzung der Translationsinvarianz ist:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{ij} = \sum_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} t_{i0}$$

Tight-Binding-Näherung: nur nächst-Nachbar-Hüpfen $t_{i0} = -t$ (kubisches Gitter, $D = 3$):

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -t \sum_{n.n.} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

Wahl des Energienullpunkts: $t_{ii} = 0$

mehrere Orbitale:

$$H_0 = \sum_{ii'mm'\sigma} t_{ii'mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{i'm'\sigma} = \sum_{\mathbf{k}mm'\sigma} \varepsilon_{mm'}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}m\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}m'\sigma}$$

eine weitere unitäre Transformation (\mathbf{k} -abhängig) zur Diagonalisierung der Matrix $\varepsilon_{mm'}(\mathbf{k})$ wird notwendig

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}r\sigma} \varepsilon_r(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}r\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}r\sigma}$$

r : Bandindex

Für ein gitterperiodisches Potenzial, $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i) = V(\mathbf{r})$, vertauscht H_0 mit den diskreten Translationsoperatoren $T_i = \exp(i\mathbf{R}_i \mathbf{p})$. Eigenzustände können daher durch die Eigenwerte der T_i , also durch $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_i)$, bzw. durch \mathbf{k} charakterisiert werden. Eigenzustände mit \mathbf{k} und $\mathbf{k} + \mathbf{G}_i$ liegen im gleichen gemeinsamen Eigenraum von H und von allen T_i . Also Beschränkung auf $\mathbf{k} \in 1BZ$ möglich. Eigenzustände sind also charakterisierbar durch $\mathbf{k} \in 1BZ$ und Bandindex r (Bloch-Theorem).

Wechselwirkungsterm:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma$$

mit $\alpha = (i\sigma)$:

$$U_{\alpha\beta\gamma\delta} = U_{i\sigma, j\sigma', k\sigma'', l\sigma'''} = \langle \phi_{i\sigma}^{(1)} \phi_{j\sigma'}^{(2)} | H_{\text{int}}^{(1,2)} | \phi_{k\sigma''}^{(1)} \phi_{l\sigma'''}^{(2)} \rangle$$

$H_{\text{int}}^{(1,2)}$ spin-unabhängig (z.B. Coulomb-WW) \rightarrow

$$U_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \phi_{i\sigma}^{(1)} \phi_{j\sigma'}^{(2)} | H_{\text{int}}^{(1,2)} | \phi_{k\sigma}^{(1)} \phi_{l\sigma'}^{(2)} \rangle \delta_{\sigma\sigma''} \delta_{\sigma'\sigma'''} = U_{ijkl} \delta_{\sigma\sigma''} \delta_{\sigma'\sigma'''}$$

also:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} U_{ijkl} \delta_{\sigma\sigma''} \delta_{\sigma'\sigma'''} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma''} c_{k\sigma'''}$$

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} U_{ijkl} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} c_{k\sigma}$$

Translationsinvarianz → Matrix-Elemente der Wechselwirkung im k-Raum:

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}'''}$$

☞ Übung

mit $U_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = U_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mathbf{p}-\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{p}}$ (\mathbf{q} : Impulsübertrag) ist:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} U_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

für $U_{ijkl} = \delta_{ij} \delta_{ik} \delta_{il} U$ (lokale Wechselwirkung) folgt:

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{k}''+\mathbf{k}'''} \frac{U}{L} \quad U_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \frac{U}{L}$$

$$H_1 = \frac{U}{2L} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

☞ Übung

4.2 Hubbard-Modell

spinunabhängiges, gitterperiodisches Potenzial

nur ein Orbital m pro Platz (m weglassen)

tight-binding-Näherung

$$H_0 = \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = -t \sum_{ij} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

lokale Wechselwirkung $U_{ijkl} = \delta_{ij} \delta_{ik} \delta_{il} U$

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} U \delta_{ij} \delta_{ik} \delta_{il} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} c_{k\sigma} = \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i\sigma} = \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}$$

$$H_1 = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Hubbard-Modell

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

- 1963: J. Hubbard, J. Kanamori, M.C. Gutzwiller
- qualitative Beschreibung von:
 - Magnetismus, Mott-Isolatoren, unkonventionelle Supraleitung, etc.
- Motivation der Approximationen:
 - stark lokalisierte 3d- oder 4f-Orbitale
 - möglichst starke Vereinfachung
 - Beibehaltung des nichttrivialen Wechselspiels zwischen H_0 und H_1
- für $H_0 \neq 0$ und $H_1 \neq 0$ nicht allgemein lösbar
- **das** Demonstrationsmodell der VT-Theorie
- einfachstes nicht-triviales Gitter-Modell

4.3 Grenzfälle und Phasendiagramm

Parameter:

- Wechselwirkungsstärke $\boxed{U/t}$ ("Hubbard- U ")
- Teilchenzahl $N = 1, \dots, 2L$ bzw. μ (konjugierte Variablen)
 - TD Limes: $N, L \rightarrow \infty, N/L = n = \text{const.}$
 - n : "Füllung", $\boxed{n = 0 - 2}$
 - $n = 1$: Halbfüllung
- Temperatur \boxed{T}
- Gitter-Dimension D und -Struktur

U - n - T -Phasendiagramm? Anregungen (Spektroskopien)?

Liste der Grenzfälle des Hubbard-Modells, Spekulationen zum Phasendiagramm:

1) Band-Limes $U = 0$

$$H = -t \sum_{ij\sigma}^{n.N.} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

→ Fermi-Gas (tight-binding-Bild)

2) **Atomarer Limes** $t_{ij} = \delta_{ij}\varepsilon_0$

$$H = \varepsilon_0 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}$$

→ $H = \sum_i H_i$, exakt lösbar

☞ Übung

3) **Leeres Band** $n = 0$

$$|E_0\rangle = |0, 0, \dots\rangle^{(-)}$$

4) **Volles Band** $n = 2$

$$|E_0\rangle = |1, 1, \dots\rangle^{(-)}$$

$$E_0 = \langle E_0 | H | E_0 \rangle = \sum_{i\sigma} \varepsilon_0 + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} 1 = L(2\varepsilon_0 + U)$$

5) N **klein**

$$\dim \mathcal{H}_N^{(-)} = \binom{2L}{N}$$

→ kleiner Hilbert-Raum für $N = 0, 1, 2, \dots$ und $N = 2L, 2L - 1, 2L - 2, \dots$

6) $D = 1$ (siehe unten: Luttinger-Flüssigkeit)

nicht-trivialer Grenzfall, viele Größen exakt berechenbar

7) $D = \infty$ (siehe unten: dynamische Mean-Field-Theorie)

nicht-trivialer Grenzfall

Abbildung auf einfacheres Modell möglich (Störstellen-Anderson-Modell)

sehr gut numerisch zu behandeln

8) niedrige Gitterdimension

$D = 1$: keine LRO

$D = 2$: keine LRO für $T > 0$

9) $n = 1, U \rightarrow \infty$

Abbildung auf das einfachere Heisenberg-Modell möglich (s.u.)

→ antiferromagnetische Ordnung (nicht-frustriertes Gitter!)

$n \rightarrow 1$: t - J -Modell

10) $n = 1, U \rightarrow 0$

Störungstheorie in U → antiferromagnetische Instabilität

11) $n = 1, T > T_N$

crossover Metall ↔ Isolator (s.u.)

Phasenübergang in metastabiler PM Phase bei $T = 0$ und $U = U_c$
(Mott-Übergang)

12) U klein: schwach korreliertes System

Störungstheorie in U (s.u.)

Fermi-Flüssigkeit

13) U groß, $n \neq 1$

Konkurrenz verschiedener langreichweitiger Ordnungen (LRO), normaler und "seltsamer" metallischer Phasen:

- magnetische Phasen (dimensionsabhängig!!): AF, F
- inhomogene Phasen: Streifen, CDW
- (Hochtemperatur-)Supraleitung? ($D = 2$)
- Spinglas
- Pseudogap

4.4 Symmetrien

Def: **Symmetrie, Symmetrietransformation**

Transformation \mathcal{T} von Observablen und Zuständen, so dass Messresultate unverändert bleiben.

$$\mathcal{T} : A \rightarrow A'$$

$$\mathcal{T} : |\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle$$

Wigner: \mathcal{T} ist eine (anti-)unitäre Transformation!

$$\exists U \text{ unitär: } A' = UAU^\dagger \text{ und } |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$$

Antiunitäre Transformationen treten in Verbindung mit der Zeitumkehr auf und werden hier nicht weiter betrachtet.

$$\text{es ist: } A = A[c_\alpha, c_\alpha^\dagger] \rightarrow A' = UA[c_\alpha, c_\alpha^\dagger]U^\dagger = A[Uc_\alpha U^\dagger, Uc_\alpha^\dagger U^\dagger] = A[c'_\alpha, c'_\alpha^\dagger]$$

$$\text{und: } A'^\dagger = UA^\dagger U^\dagger = (UAU^\dagger)^\dagger = A'^\dagger$$

$$\text{und: } |\Psi\rangle\langle\Psi| \rightarrow |\Psi'\rangle\langle\Psi'| = U|\Psi\rangle\langle\Psi|U^\dagger$$

→ Angabe von $c_\alpha \rightarrow c'_\alpha$ ist hinreichend zur Def. von \mathcal{T}

... aber nicht notwendig, d.h. die Unitarität der Transformation muss dann noch nachgewiesen werden.

Beispiel: **Teilchen-Loch-Transformation**

$$c_\alpha \rightarrow c'_\alpha = c_\alpha^\dagger$$

$$\text{es folgt: } c_\alpha^\dagger \rightarrow c_\alpha$$

$$\text{Symmetrietransformation? } \exists U \text{ unitär mit } c_\alpha^\dagger = Uc_\alpha U^\dagger, c_\alpha = Uc_\alpha^\dagger U^\dagger, \quad \forall \alpha ?$$

$$\text{es gilt: } \hat{N}' = (\sum_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha)' = \sum_\alpha c_\alpha c_\alpha^\dagger = \sum_\alpha (1 - c_\alpha^\dagger c_\alpha) = d - \hat{N}$$

mit d : Anzahl der Orbitale (HM: $d = 2L$)

$$\text{also: } |0\rangle = |0, 0, \dots\rangle^{(-)} \rightarrow |0'\rangle = |1, 1, \dots\rangle^{(-)} \equiv |1\rangle$$

Wenn $|0\rangle$ der (nichtentartete) Eigenzustand von N zum Eigenwert 0 ist, dann ist $|0\rangle'$ der (nichtentartete) Eigenzustand von N' (U ändert den Entartungsgrad nicht) zum gleichen Eigenwert (U ändert Eigenwerte nicht).

also:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle'^{(-)} = (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle' = c_1^{n_1} c_2^{n_2} \dots |1\rangle = \pm |1 - n_1, 1 - n_2, \dots\rangle^{(-)}$$

→ \mathcal{T} permutiert die Basiszustände in $\mathcal{H}^{(-)}$

→ \mathcal{T} ist eine unitäre Transformation!

Beispiel: $U(1)$ -Eichtransformation

$$c_\alpha \rightarrow e^{-i\phi} c_\alpha \quad \text{mit reeller Zahl } \phi$$

$$\text{es ist } c_\alpha^\dagger \rightarrow c_\alpha'^\dagger = e^{i\phi} c_\alpha^\dagger$$

$\mathcal{T} = \mathcal{T}_\phi$ (kontinuierliche, abelsche) Transformationsgruppe $U(1)$

Symmetrietransformation, denn:

$$- U = U_\phi = e^{i\phi \hat{N}}$$

- U unitär: klar

$$- U c_\alpha U^\dagger = e^{-i\phi} c_\alpha$$

letzteres folgt aus dem Baker-Hausdorff-Theorem:

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = e^{-\lambda L_A} B \quad \text{mit } L_A(X) = [X, A]_-$$

$$\text{denn es ist: } [c_\alpha, \hat{N}]_- = \sum_\beta [c_\alpha, \hat{n}_\beta] = c_\alpha$$

also: $L_{\hat{N}} c_\alpha = c_\alpha$ und somit

$$\begin{aligned} U c_\alpha U^\dagger &= e^{i\phi \hat{N}} c_\alpha e^{-i\phi \hat{N}} = e^{-i\phi L_{\hat{N}}} c_\alpha = \sum_k \frac{1}{k!} (-i\phi)^k L_{\hat{N}}^k c_\alpha \\ &= \sum_k \frac{1}{k!} (-i\phi)^k c_\alpha = e^{-i\phi} c_\alpha \end{aligned}$$

Beispiel: lokale $U(1)$ -Eichtransformation

$$c_\alpha \rightarrow e^{-i\phi_\alpha} c_\alpha \quad \text{mit reeller Zahl } \phi_\alpha$$

analog mit $U = e^{i \sum_\alpha \phi_\alpha \hat{n}_\alpha}$

beachte: Symmetrietrfsf. $\mathcal{H}^{(-)} \rightarrow \mathcal{H}^{(-)} \neq$ unitäre Trsf. der 1-T-Basis $\mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1!$

$\mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$: Wechsel der "Darstellung" (Ort \leftrightarrow Impuls \leftrightarrow Energie $\leftrightarrow \dots$)
 Übergang zwischen zwei 1-T-ONB's: $\{|\alpha\rangle\} \rightarrow \{|\alpha'\rangle\}$ bzw. $c_\alpha \rightarrow c'_\alpha$
 H in zweiter Quantisierung dargestellt durch $c_\alpha, c_\alpha^\dagger$
 Forminvarianz bei Darstellungswechsel

$\mathcal{H}^{(-)} \rightarrow \mathcal{H}^{(-)}$: feste Darstellung, feste 1-T-ONB $\{|\alpha\rangle\}$
 $t_{\alpha\beta}, U_{\alpha\beta\gamma\delta}$ fest, aber $c_\alpha \rightarrow c'_\alpha = U c_\alpha U^\dagger$
 unitäre Transformation im gesamten $\mathcal{H}^{(-)}$ bei fester Darstellung
 allgemeiner! (s. T-L-Transformation: c'_α ist ein Erzeuger!)
 es gilt immer: $[c'_\alpha, c'_\beta]_+ = [U c_\alpha U^\dagger, U c_\beta U^\dagger]_+ = \delta_{\alpha\beta}$

Beispiel **Spinrotation**

$$c_\alpha \rightarrow U c_\alpha U^\dagger \quad \text{mit } U = U(\varphi) = e^{i\varphi \mathcal{S}}$$

\mathcal{S} : Gesamtspin

U ist unitär, SU(2)-Transformationsgruppe (nicht-abelsch)

SU(2): $c_\alpha \rightarrow U c_\alpha U^\dagger$ mit $U = e^{i\varphi \mathcal{S}}$

mit dem Baker-Hausdorff-Theorem folgt für $\alpha = (i\sigma)$:

$$U c_{i\sigma} U^\dagger = e^{-iL\varphi \mathcal{S}} c_{i\sigma}$$

und mit

$$L\varphi \mathcal{S} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix}, \varphi \mathcal{S} \right]_- = \varphi \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix}$$

ist

$$\begin{pmatrix} c'_{i\uparrow} \\ c'_{i\downarrow} \end{pmatrix} = e^{i\varphi \mathcal{S}} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix} e^{-i\varphi \mathcal{S}} = e^{-i\varphi \sigma / 2} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix}$$

☞ **Übung**

analog:

$$(c'_{i\uparrow}^\dagger, c'_{i\downarrow}^\dagger) = e^{+i\varphi \sigma / 2} (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)$$

Invarianz von H unter Symmetrietransformationen?

H ist invariant unter \mathcal{T} (beschrieben durch U), falls

$$H \rightarrow H' = U H U^\dagger = H \quad \text{bzw.} \quad [U, H]_- = 0$$

Invarianz \rightarrow Generatoren sind Erhaltungsgrößen (für kontinuierliche Gruppen!)

- U(1): $c_\alpha \rightarrow e^{-i\phi} c_\alpha, \quad c_\alpha^\dagger \rightarrow e^{i\phi} c_\alpha^\dagger$
 \rightarrow (falls $H \sim c^\dagger c + c^\dagger c^\dagger c c$) $H \rightarrow U H U^\dagger = H$
 $\rightarrow 0 = [U, H]_- = [e^{i\phi \hat{N}}, H]_- \quad \forall \phi$
 $\rightarrow [\hat{N}, H]_- = 0$
 $\rightarrow \hat{N}$ Erhaltungsgröße

- SU(2): $c_\alpha \rightarrow U c_\alpha U^\dagger$ mit $U = e^{i\phi S}$
für das Hubbard-Modell gilt: $[S, H]_- = 0$ \Leftarrow Übung
(direkte Rechnung oder manifest SU(2)-invariante Umformulierung)
 $\rightarrow S$ Erhaltungsgröße!

- Teilchen-Loch-Transformation: $c_{i\sigma} \leftrightarrow c_{i\sigma}^\dagger$ (diskrete Trsf.!).

$$\begin{aligned}
 H \rightarrow H' &= \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma} c_{j\sigma}^\dagger + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} c_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger \\
 &= 2L\varepsilon_0 - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} (1 - n_{i\sigma})(1 - n_{i-\sigma}) \\
 &= - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} + U(L - \hat{N}) + 2L\varepsilon_0 \\
 &\neq H \quad \text{nicht invariant!}
 \end{aligned}$$

- Spezialfall: bipartites Gitter, n.N.-Hopping, $\varepsilon_0 = 0$, Halbfüllung: $N = L$

Ein Gitter heisst bipartit, falls es zwei Untergitter A, B gibt, in die es zerlegt werden kann, so dass jeder nächste Nachbar von A in B liegt und umgekehrt. Bsp: sc, Gegenbsp: fcc, Dreiecksgitter.

Symmetrietransformation \mathcal{T} mit

$$c_{i\sigma} \rightarrow c_{i\sigma}, \text{ falls } i \in A, \quad c_{i\sigma} \rightarrow -c_{i\sigma}, \text{ falls } i \in B$$

$$\text{es gilt: } n_{i\sigma} \rightarrow n_{i\sigma} \text{ und für n.N. } i, j \text{ ist: } c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rightarrow -c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

$\rightarrow H$ invariant unter kombinierter Trsf. \mathcal{T} und T-L-Trsf.!

- H invariant unter Gittertranslationen, -rotationen, -spiegelungen, falls dies Symmetrien des Gitters selbst sind.

$$\text{z.B.: } c_{i\sigma} \rightarrow c_{i+i_0\sigma}, \text{ Translation um } \mathbf{R}_{i_0}$$

$$H \text{ invariant, falls } t_{ij} = t_{i+i_0, j+i_0}$$

4.5 Anderson-Modelle

oft mehr als ein Orbital pro Platz für qualitative Beschreibung wichtig

Bsp Ce:

Elektronenkonfiguration von Ce: $[\text{Xe}]4f^1 5d^1 6s^2 \rightarrow 2$ Gruppen von Orbitalen:

4f: stark lokalisiert, großes U : Erzeuger $f_{i\sigma}^\dagger$

5d, 6s: breites Band, $U \sim 0$: Erzeuger $c_{i\sigma}^\dagger$

Modell (ohne Entartungen):

$$H = \sum_{i\sigma} \varepsilon_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^{(f)} n_{i-\sigma}^{(f)} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H_{sf}$$

H_{sf} ist eine Kopplung zwischen den f - und s -Subsystemen

- H_{sf} Hybridisierung \rightarrow periodisches Anderson-Modell
- H_{sf} Interband-Austausch \rightarrow Kondo-Gitter-Modell
- denkbar ist auch eine Dichte-Dichte-Interband-WW

periodisches Anderson-Modell (PAM):

$$H = \sum_{i\sigma} \varepsilon_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^{(f)} n_{i-\sigma}^{(f)} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{ij\sigma} V_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + \text{H.c.})$$

oft: $V_{ij} = V \delta_{ij}$ als Modellannahme

Beschreibung von seltenen Erden und Aktiniden

Valenzfluktuationen:

$$\varepsilon_f \sim \varepsilon_F$$

\rightarrow Hybridisierung sehr effektiv

Kondo-Limes:

$$\varepsilon_f \ll \varepsilon_F \ll \varepsilon_f + U$$

\rightarrow stabiles lokales f -Moment

Kondo-Gitter-Modell (KLM):

$$H = \sum_{i\sigma} \varepsilon_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^{(f)} n_{i-\sigma}^{(f)} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \sum_i J \mathbf{S}_i^{(f)} \cdot \mathbf{S}_i^{(s)}$$

mit $J < 0$: (antiferromagnetisches) KLM

Letzteres kann als ein effektives Niederenergiemodell zum periodischen Anderson-Modell aufgefasst werden, wie weiter unten gezeigt wird.

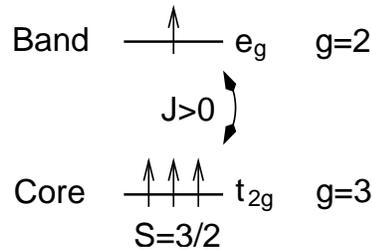
mit $J > 0$: ferromagnetisches KLM

(Bsp.) LaMnO_3

atomare Elektronenkonfigurationen: La $5d^1 6s^2$, Mn $3d^5 4s^2$, O $2p^4$

Festkörper: $\text{La}^{3+} \text{Mn}^{3+} \text{O}_3^{2-}$

→ Mn $3d^4$ -Konfiguration



Störstellenmodelle → keine Translationsinvarianz

Störstellen Anderson-Modell (SIAM):

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_f f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{\sigma}^{(f)} n_{-\sigma}^{(f)} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} V_i (c_{i\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \text{H.c.})$$

korrelierte ($U > 0$) Störstelle (f_i^\dagger) an einem (Zwischen-)Gitterplatz gekoppelt (V_i) an ein Band (t_{ij}) von Leitungselektronen ($c_{i\sigma}^\dagger$)

4.6 Mehrband-Modelle

mehrere Orbitale pro Platz: ONB $\{|im\sigma\rangle\}$

Ein-Teilchen-Anteil des Hamilton-Operators $H = H_0 + H_1$:

$$H_0 = \sum_{ii'mm'} \sum_{\sigma} t_{ii'mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{i'm'\sigma}$$

(spinunabhängiges äußeres Potenzial)

Wechselwirkungsterm H_1 :

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^\dagger c_{\beta}^\dagger c_{\delta} c_{\gamma}$$

mit $\alpha = (im\sigma)$:

$$U_{\alpha\beta\gamma\delta} = U_{im\sigma, i'm'\sigma', i''m''\sigma'', i''m''\sigma''} = \langle \phi_{im\sigma}^{(1)} \phi_{i'm'\sigma'}^{(2)} | H_{\text{int}}^{(1,2)} | \phi_{i''m''\sigma''}^{(1)} \phi_{i''m''\sigma''}^{(2)} \rangle$$

$H_{\text{int}}^{(1,2)}$ spin-unabhängig (Coulomb-WW) $\rightarrow \sigma = \sigma'', \sigma' = \sigma'''$

stark abgeschirmte, lokale Wechselwirkung $\rightarrow i = i' = i'' = i'''$

$$U_{\alpha\beta\gamma\delta} = U_{iiii, mm'm''m''} \delta_{ii'} \delta_{i'i''} \delta_{i''i'''} \delta_{\sigma\sigma''} \delta_{\sigma'\sigma'''} = U_{mm'm''m''}$$

Translationsinvarianz $\rightarrow U_{iiii, mm'm''m''} = U_{mm'm''m''}$

also:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{mm'm''m''} \sum_{\sigma\sigma'} U_{mm'm''m''} c_{im\sigma}^\dagger c_{im'\sigma'}^\dagger c_{im''\sigma''} c_{im''\sigma''}$$

Für Modellbildungen werden meist nur direkte und Austauschsterme berücksichtigt.

Terme mit nur zwei orbitalen Indizes:

$$\begin{array}{lll} m = m'' & m' = m''' & \text{“direkt”} \\ m = m''' & m' = m'' & \text{“Austausch”} \\ m = m' & m'' = m''' & \text{(wird nicht weiter betrachtet)} \end{array}$$

also:

$$U_{mm'm''m''} \approx \delta_{mm''} \delta_{m'm'''} U_{mm'} + \delta_{mm'''} \delta_{m'm''} J_{mm'} (1 - \delta_{mm'})$$

Der Fall $m = m' = m'' = m'''$ darf natürlich nicht doppelt gezählt werden.

mit direkten WW-Parametern:

$$\begin{aligned} U_{mm'} &= U_{mm'mm'} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iint d^3r_1 d^3r_2 \phi_{im\sigma}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{im'\sigma'}^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_{im\sigma}(\mathbf{r}_1) \phi_{im'\sigma'}(\mathbf{r}_2) \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iint d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\phi_{im\sigma}(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_{im'\sigma'}(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \end{aligned}$$

und Austausch-Parametern:

$$J_{mm'} = U_{mm'm'm} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \iint d^3r_1 d^3r_2 \phi_{im\sigma}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{im'\sigma'}^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_{im'\sigma}(\mathbf{r}_1) \phi_{im\sigma'}(\mathbf{r}_2)$$

damit:

$$H_1 = H_1^{(\text{dir})} + H_1^{(\text{ex})}$$

wobei:

$$\begin{aligned} H_1^{(\text{dir})} &= \frac{1}{2} \sum_{i\sigma\sigma'} \sum_{mm'} U_{mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{im'\sigma'}^\dagger c_{im'\sigma} c_{im\sigma} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'} U_{mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{im'\sigma}^\dagger c_{im'\sigma} c_{im\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'} U_{mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{im'-\sigma}^\dagger c_{im'-\sigma} c_{im\sigma} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} U_{mm'} n_{im\sigma} n_{im'\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} U_{mm'} n_{im\sigma} n_{im'-\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_m U_{mm} n_{im\sigma} n_{im-\sigma} \end{aligned}$$

$$H_1^{(\text{dir})} = \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_m U_{mm} n_{im\sigma} n_{im-\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} U_{mm'} (n_{im\sigma} n_{im'\sigma} + n_{im\sigma} n_{im'-\sigma})$$

und

$$\begin{aligned} H_1^{(\text{ex})} &= \frac{1}{2} \sum_{i\sigma\sigma'} \sum_{mm'} (1 - \delta_{mm'}) J_{mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{im'\sigma'}^\dagger c_{im\sigma'} c_{im'\sigma} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{im'\sigma}^\dagger c_{im\sigma} c_{im'\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{im'-\sigma}^\dagger c_{im-\sigma} c_{im'\sigma} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} n_{im\sigma} n_{im'\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} c_{im\sigma}^\dagger c_{im-\sigma}^\dagger c_{im'-\sigma} c_{im'\sigma} \end{aligned}$$

jetzt gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} c_{im\sigma}^\dagger c_{im-\sigma}^\dagger c_{im'-\sigma}^\dagger c_{im'\sigma} &= S_{im+} S_{im'-} + S_{im-} S_{im'+} \\ &= 2(S_{imx} S_{im'x} + S_{imy} S_{im'y}) = 2(\mathbf{S}_{im} \cdot \mathbf{S}_{im'} - S_{imz} S_{im'z}) \end{aligned}$$

und:

$$\begin{aligned} S_{imz} S_{im'z} &= \frac{1}{2} (n_{im\uparrow} - n_{im\downarrow}) \frac{1}{2} (n_{im'\uparrow} - n_{im'\downarrow}) \\ S_{imz} S_{im'z} &= \frac{1}{4} (n_{im\uparrow} n_{im'\uparrow} + n_{im\downarrow} n_{im'\downarrow} - n_{im\uparrow} n_{im'\downarrow} - n_{im\downarrow} n_{im'\uparrow}) \\ S_{imz} S_{im'z} &= \frac{1}{4} \sum_{\sigma} (n_{im\sigma} n_{im'\sigma} - n_{im\sigma} n_{im'-\sigma}) \end{aligned}$$

also:

$$H_1^{(\text{ex})} = -\frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} n_{im\sigma} n_{im'\sigma} - \sum_i \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} \mathbf{S}_{im} \mathbf{S}_{im'}$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} (n_{im\sigma} n_{im'\sigma} - n_{im\sigma} n_{im'-\sigma})$$

bzw:

$$H_1^{(\text{ex})} = - \sum_i \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} \mathbf{S}_{im} \mathbf{S}_{im'} - \frac{1}{4} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} (n_{im\sigma} n_{im'\sigma} + n_{im\sigma} n_{im'-\sigma})$$

insgesamt ist also:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_m U_{mm} n_{im\sigma} n_{im-\sigma}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_{mm'}^{m \neq m'} \left(U_{mm'} - \frac{1}{2} J_{mm'} \right) (n_{im\sigma} n_{im'\sigma} + n_{im\sigma} n_{im'-\sigma})$$

$$- \sum_i \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} \mathbf{S}_{im} \mathbf{S}_{im'}$$

oder mit $U'_{mm'} = U_{mm'} - J_{mm'}/2$ und $n_{im} = \sum_{\sigma} n_{im\sigma}$:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \sum_m U_{mm} n_{im\sigma} n_{im-\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{mm'}^{m \neq m'} U'_{mm'} n_{im} n_{im'} - \sum_i \sum_{mm'}^{m \neq m'} J_{mm'} \mathbf{S}_{im} \mathbf{S}_{im'}$$

4.7 Effektive Niederenergie-Modelle

Hubbard-Modell, $n = 1$, $U \rightarrow \infty$:

- hopping der Elektronen unterdrückt
- Spinprojektion an jedem Platz als einziger dynamischer Freiheitsgrad

Idee:

$$H_{\text{Hubbard}} \mapsto H_{\text{eff}}$$

für Energien, Temperaturen $\ll U$

Idee der Renormierungsgruppe

$$H \mapsto H' \mapsto H'' \mapsto \dots H_{\text{fix}}$$

- iteratives “Ausintegrieren unwichtiger Freiheitsgrade”
- Analyse des Fixpunkt-Hamiltonians H_{fix} liefert Niederenergiephysik von H
- bestimmt Phasenübergänge 2. Ordnung
- charakterisiert Niederenergieanregungen

→ NRG, DMRG, funRG, ...

hier nur ein Schritt: Hubbard-Modell $\mapsto H_{\text{eff}} = ?$

Hubbard-Modell: $H = T + V$ mit

$$T = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad V = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

definiere $\hat{d} = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$

Eigenwertgleichung:

$$\hat{d}|d, r\rangle = d|d, r\rangle$$

d : Anzahl doppelt besetzter Gitterplätze, hochgradig entartet

definiere:

$$P_d = \sum_r |d, r\rangle \langle d, r| \quad (\text{Projektor auf den } d\text{-Unterraum})$$

Orthogonalität und Vollständigkeit

$$P_d P_{d'} = \delta_{dd'} P_d \quad \sum_{d=0}^L P_d = \mathbf{1}$$

betrachte Schrödinger-Gleichung

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

Zerlegung von H :

$$H = \left(\sum_d P_d \right) H \left(\sum_{d'} P_{d'} \right)$$

$$T_{\Delta d} = \sum_d P_{d+\Delta d} T P_d$$

$T_{\Delta d}$ ändert d um Δd , hier: $\Delta d = 0, \pm 1$

$$H = T_0 + T_1 + T_{-1} + V$$

Zerlegung von $|\Psi\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_{d=0}^{\infty} P_d |\Psi\rangle = |\Psi_0\rangle + |\Psi_1\rangle + \dots$$

Schrödinger-Gleichung:

$$(T_0 + V + T_{-1} + T_1) (|\Psi_0\rangle + |\Psi_1\rangle + \dots) = E (|\Psi_0\rangle + |\Psi_1\rangle + \dots)$$

in Matrixform:

$$\begin{pmatrix} T_0 & T_{-1} & & & \\ T_1 & T_0 + U & T_{-1} & & \\ & T_1 & T_0 + 2U & \dots & \\ & & \dots & \dots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \\ \dots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_1\rangle \\ |\Psi_2\rangle \\ \dots \end{pmatrix}$$

hier:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_0\rangle + |\Psi_{>}\rangle \quad |\Psi_{>}\rangle = |\Psi_1\rangle + \dots$$

also:

$$\begin{pmatrix} T_0 & T_{-1} \\ T_1 & H_{>} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_{>}\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_{>}\rangle \end{pmatrix}$$

2. Gleichung:

$$T_1 |\Psi_0\rangle + H_{>} |\Psi_{>}\rangle = E |\Psi_{>}\rangle$$

$$|\Psi_{>}\rangle = \frac{1}{E - H_{>}} T_1 |\Psi_0\rangle$$

1. Gleichung:

$$T_0 |\Psi_0\rangle + T_{-1} |\Psi_{>}\rangle = E |\Psi_0\rangle$$

$$\left(T_0 + T_{-1} \frac{1}{E - H_{>}} T_1 \right) |\Psi_0\rangle = E |\Psi_0\rangle$$

also:

$$H_{\text{eff}} = T_0 + T_{-1} \frac{1}{E - H_{>}} T_1$$

es ist $U \gg t \rightarrow$ Störungstheorie in t/U

Ψ_0

$H_{>}$ wirkt im $d = 1$ -Unterraum

im $d = 1$ -Unterraum ist $H_{>} = U + \mathcal{O}(t)$

für $E = \mathcal{O}(t)$ ($d = 0$ -Unterraum) ist also:

$$\boxed{H_{\text{eff}} = T_0 - \frac{1}{U} T_{-1} T_1 + \mathcal{O}(t^3)}$$

- gleiches Resultat wie Brillouin-Wigner-Störungstheorie oder Methode der kanonischen Transformationen
- algebraisch am wenigsten aufwändig
- Behandlung höherer Ordnungen: Chernyshev et al, cond-mat/0407255 (www.arxiv.org)

setze $U = 1$, es ist:

$$H_{\text{eff}}^{(4)} = T_0 - T_{-1}T_1 + T_{-1}T_0T_1 - \frac{1}{2}(T_{-1}T_1T_0 + T_0T_{-1}T_1) + (T_{-1}T_1)^2 - \frac{1}{2}T_{-1}^2T_1^2 - T_{-1}T_0^2T_1 + T_{-1}T_0T_1T_0 + T_0T_{-1}T_0T_1 - \frac{1}{2}(T_{-1}T_1T_0^2 + T_0^2T_{-1}T_1) + \mathcal{O}(t^5)$$

was ist mit $T_0T_{-1}T_1T_0$? verschiedene Resultate der 3 Methoden für $H_{\text{eff}}^{(4)}$!

→ verbunden durch unitäre Symmetrie!

4.8 Heisenberg- und t - J -Modell

Startpunkt: Hubbard-Modell

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

Wie sieht für das Hubbard-Modell und für $N \leq L$ der effektive Hamilton-Operator $T_0 - \frac{1}{U} T_{-1} T_1$ in 2. Quantisierung aus?

erster Term:

$$T_0 = P_0 T P_0 = P_0 \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} P_0$$

es ist:

$$P_0 c_{i\sigma}^\dagger = P_0 c_{i\sigma}^\dagger n_{i-\sigma} + P_0 c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i-\sigma}) = P_0 c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i-\sigma})$$

$c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i-\sigma})$ ändert Doppelbesetzungen nicht:

$$[c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i-\sigma}), n_{i\sigma} n_{i-\sigma}]_- = 0$$

im $d = 0$ -Unterraum ist also:

$$T_0 = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i-\sigma}) (1 - n_{j-\sigma}) c_{j\sigma}$$

für Halbfüllung $N = L$ ist $T_0 = 0$

Anschaulich: Hopping ist bei Halbfüllung unmöglich ohne doppelt besetzte Gitterplätze zu erzeugen.

zweiter Term:

$$\begin{aligned} T_{-1}T_1 &= P_0 T P_1^2 T P_0 = P_0 \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} P_1 \sum_{kl\sigma'} t_{kl} c_{k\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} P_0 \\ &= \sum_{ij\sigma} \sum_{\substack{k \neq l \\ kl\sigma'}} t_{ij} t_{kl} P_0 c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} P_1 c_{k\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} P_0 \end{aligned}$$

für $k \neq l$ ist

$$P_1 c_{k\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} P_0 |\Psi\rangle = n_{k-\sigma'} c_{k\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} P_0 |\Psi\rangle \quad \forall |\Psi\rangle$$

und für beliebige $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle$:

$$\langle \Phi | P_0 c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} \cdot n_{k-\sigma'} c_{k\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} P_0 | \Psi \rangle \neq 0 \quad \text{nur für } j = k$$

also:

$$T_{-1}T_1 = \sum_{ijl\sigma} \sum_{\substack{i \neq j, j \neq l \\ \sigma\sigma'}} t_{ij} t_{jl} P_0 c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} n_{j-\sigma'} c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} P_0 = A + B$$

A: Terme mit $i = l$

B: Terme mit $i \neq l$

es gilt:

$$B = \sum_{ijl} \sum_{\substack{i \neq j, j \neq l, i \neq l \\ \sigma\sigma'}} t_{ij} t_{jl} P_0 c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} n_{j-\sigma'} c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} P_0$$

Man sieht, dass B für Halbfüllung verschwindet, denn das durch $c_{l\sigma'}$ erzeugte Loch müsste durch $c_{i\sigma}^\dagger$ wieder besetzt werden, was aber wegen $i \neq l$ nicht möglich ist. Damit ist der Beitrag von B zu H_{eff} sowohl klein von der Ordnung $\mathcal{O}(t^2/U)$ als auch klein bei geringer Abweichung von Halbfüllung ("Dotierung") und wird deshalb vernachlässigt. Ein einfacher effektiver Hamiltonian kann demnach nur im Limes geringer Dotierung erreicht werden.

es bleiben die Terme mit $i = l$:

$$\begin{aligned}
T_{-1}T_1 &= \sum_{ij\sigma}^{i \neq j} \sum_{\sigma\sigma'} t_{ij}t_{ji} P_0 c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} n_{j-\sigma'} c_{j\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} P_0 \\
&= \sum_{ij\sigma}^{i \neq j} \sum_{\sigma} t_{ij}t_{ji} P_0 (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} n_{j-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} n_{j\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}) P_0 \\
&= \sum_{ij\sigma}^{i \neq j} \sum_{\sigma} t_{ij}t_{ji} P_0 (c_{i\sigma}^\dagger n_{j-\sigma} c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}) P_0
\end{aligned}$$

dies kann mit Hilfe des lokalen Spins einfacher geschrieben werden:

$$\mathbf{S}_{i\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^{(\mu)} c_{i\sigma'} \quad \mu = x, y, z$$

es ist ($i \neq j$):

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} &= - \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \\
&= -c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \\
&= -S_{i+} S_{j-} - S_{i-} S_{j+} \\
&= -(S_{ix} + iS_{iy})(S_{jx} - iS_{jy}) - (S_{ix} - iS_{iy})(S_{jx} + iS_{jy}) \\
&= -2(S_{ix}S_{jx} + S_{iy}S_{jy})
\end{aligned}$$

und:

$$\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger n_{j-\sigma} c_{i\sigma} = \sum_{\sigma} n_{i\sigma} n_{j-\sigma} = n_{i\uparrow} n_{j\downarrow} + n_{i\downarrow} n_{j\uparrow}$$

mit $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ und $n_{i\uparrow} = \frac{1}{2}(n_i + 2S_{iz})$ und $n_{i\downarrow} = \frac{1}{2}(n_i - 2S_{iz})$ folgt:

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger n_{j-\sigma} c_{i\sigma} &= \frac{1}{4} ((n_i + 2S_{iz})(n_j - 2S_{jz}) + (n_i - 2S_{iz})(n_j + 2S_{jz})) \\
&= \frac{1}{4} (2n_i n_j - 8S_{iz} S_{jz}) = \frac{1}{2} n_i n_j - 2S_{iz} S_{jz}
\end{aligned}$$

einsetzen:

$$T_{-1}T_1 = \sum_{ij}^{i \neq j} t_{ij}t_{ji} P_0 \left(\frac{1}{2} n_i n_j - 2S_{iz} S_{jz} - 2(S_{ix} S_{jx} + S_{iy} S_{jy}) \right) P_0$$

→

$$-\frac{1}{U} T_{-1}T_1 = \sum_{ij}^{i \neq j} \frac{2t_{ij}^2}{U} P_0 \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) P_0$$

n_i und \mathbf{S}_i ändern Doppelbesetzungen nicht → im $d = 0$ -Unterraum ist also:

$$-\frac{1}{U}T_{-1}T_1 = -\sum_{ij}^{i \neq j} J_{ij} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right)$$

mit

$$J_{ij} = -\frac{2t_{ij}^2}{U}$$

für $N = L$ kann $n_i = 1$ gesetzt werden

insgesamt folgt:

$$H_{\text{eff}} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i-\sigma})(1 - n_{j-\sigma}) c_{j\sigma} - \sum_{ij}^{i \neq j} J_{ij} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right)$$

(t-J-Modell)

Dieser effektive Hamilton-Operator hat im $d = 0$ -Unterraum die gleiche Wirkung wie der Hubbard-Hamiltonian bis auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(t^3/U^2)$ für $N = L$ und Terme der Ordnung $\mathcal{O}(t^2/U)$ für $N < L$.

für Halbfüllung ($N = L$) ist:

$$H_{\text{eff}} = -\sum_{ij}^{i \neq j} J_{ij} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right)$$

(Heisenberg-Modell)

Diskussion:

- Herausprojizieren hochenergetischer Zustände
→ einfachere effektive Modelle mit weniger Freiheitsgraden

Idee der Renormierungsgruppe: Systematisierung dieses Verfahrens, "Fluss" der Wechselwirkungsparameter: $U \rightarrow J$

- $N = L$: Niederenergiesektor des Hubbard-Modells: nur Spindynamik
Hopping wegen "Energistrafe" $U/t \rightarrow \infty$ unterdrückt
- für $N = L$ ist $\mathbf{S}_i^2 = 3S_{iz}^2 = 3(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 2d_i)/4 = 3/4$ im $d = 0$ -Unterraum
→ $\mathbf{S}_i^2 = S(S + 1)$ mit $S = 1/2$
- Abbildung auf antiferromagnetisches Heisenberg-Modell, $J < 0$

→ Hubbard-Modell bei Halbfüllung ist ein Antiferromagnet
mit Néel-Temperatur $T_N \sim 1/U$

- kinetische Energie + spinunabhängige Coulomb-WW + Pauli-Prinzip → effektive Spin-Spin-Wechselwirkung

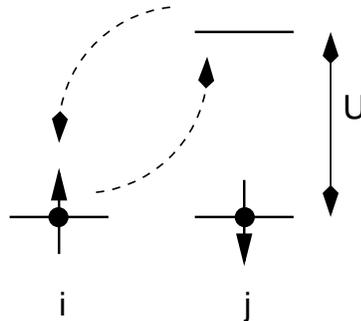
Vergleiche Heisenbergs Idee zur Erklärung von Ferromagnetismus, hier allerdings Antiferromagnetismus.

Beispiel für (Anderson) Superaustausch-Mechanismus!

Direkte Rechnung für Zwei-Platz-HM

☞ Übung

Anschauliches Bild: Bei AF-Ordnung ist (virtuelles) nächst-Nachbar-Hopping (hin und zurück) möglich (siehe Störungstheorie 2. Ordnung) und führt zu einem Gewinn an kinetischer Energie. Ferro- und paramagnetische Zustände sind dagegen energetisch ungünstiger.

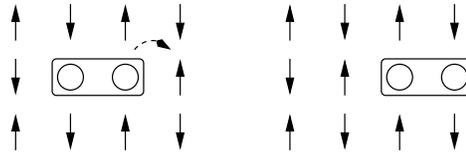


- t - J -Modell: Hopping möglich

$N = L - 1$: Hopping führt zu Frustration des AF → String-Potenzial



gepaarte Löcher sind mobiler → Supraleitung ?



4.9 Kondo-Modell

gesucht: effektiver Niederenergie-Hamiltonian zum Störstellen-Anderson-Modell

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{d\sigma} n_{d-\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} V_i (c_{i\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma})$$

$$n_{d\sigma} = d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$$

es ist

$$H = T + W \quad W = \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{d\sigma} n_{d-\sigma}$$

und

$$[W, \hat{d}]_{-} = [W, \hat{n}_d]_{-} = 0 \quad \hat{n}_d = n_{d\sigma} + n_{d-\sigma}, \quad \hat{d} = n_{d\sigma} n_{d-\sigma}$$

Im Unterschied zum Hubbard-Modell liegt hier nur ein korreliertes ($U \neq 0$) Orbital vor. Dessen Doppelbesetzung kann 0 oder 1 sein.

Zerlegung von H gemäß $\mathbf{1} = P_0 + P_1$:

$$H = T_0 + T_1 + T_{-1} + W = H_0 + H_1$$

mit

$$H_0 = T_0 + W \quad \text{gelöst}$$

$$H_1 = T_1 + T_{-1} = \mathcal{O}(V) \quad \text{kleine Störung}$$

im $d = 0$ -Unterraum kann H durch H_{eff} ersetzt werden:

$$H_{\text{eff}} = T_0 - \frac{1}{U} T_{-1} T_1 + \mathcal{O}(V^3)$$

Ein in zweiter Quantisierung einfacher effektiver Hamilton-Operator ergibt sich nur für $\hat{n}_d = 1$ (analog zu $N = L$ im Hubbard-Modell). Hier ist allerdings $[\hat{n}_d, H]_{-} \neq 0$, so dass $\hat{n}_d = 1$ nur erreicht werden kann im sogenannten Kondo-Limes.

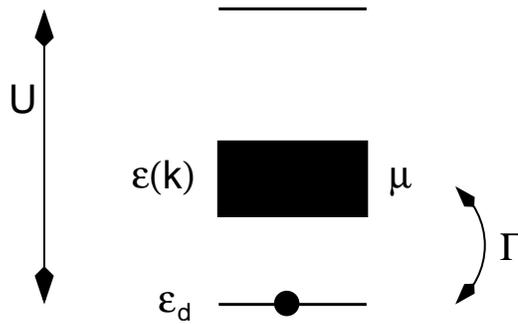
Kondo-Limes

$$\boxed{\varepsilon_d \ll \varepsilon(\mathbf{k}) \ll \varepsilon_d + U \quad |\varepsilon_d - \varepsilon(\mathbf{k})|, |\varepsilon_d + U - \varepsilon(\mathbf{k})| \gg \Gamma \quad \mu \sim \varepsilon(\mathbf{k})}$$

mit $\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{ij}$ und

$$\Gamma = \pi \left(\frac{1}{L} \sum_i V_i^2 \right) \rho_0(0)$$

Mit der mittleren Hybridisierungsstärke und der Zustandsdichte der Leitungselektronen $\rho_0(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \varepsilon(\mathbf{k}))$ lässt sich ein Maß für die "Breite" der Niveaus ε_d bzw. $\varepsilon_d + U$ definieren. Im Kondo-Limes ist für niederenergetische Viel-Teilchen-Zustände $\hat{n}_d = 1$.



im $\hat{n}_d = 1$ - und damit auch $d = 0$ -Unterraum (Projektor P'_0) ist:

$$\begin{aligned} T_{-1} T_1 &= P'_0 T P_1 T P'_0 = P'_0 \sum_{ij\sigma\sigma'} V_i V_j (c_{i\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger c_{i\sigma}) P_1 (c_{j\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} + d_{\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'}) P'_0 \\ &= \sum_{ij\sigma\sigma'} V_i V_j P'_0 c_{i\sigma}^\dagger d_\sigma n_{d-\sigma} n_{d-\sigma'} d_{\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} P'_0 \\ &= \sum_{ij\sigma} V_i V_j P'_0 (c_{i\sigma}^\dagger d_{-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} c_{j\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger d_\sigma d_{-\sigma}^\dagger c_{j-\sigma}) P'_0 \end{aligned}$$

definiere:

$$\mathbf{s}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{j\sigma'}$$

s_{ii} ist der lokale Spin der Leitungselektronen am Platz i

$$s_{\mathbf{k}} = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \mathbf{s}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma'}$$

ist ein Spin für jedes \mathbf{k}

damit gilt:

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} d_{-\sigma}^{\dagger} c_{j-\sigma} &= -\sum_{\sigma} d_{-\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j-\sigma} = -(S_{-} s_{ij+} + S_{+} s_{ij-}) \\ &= -2(S_x s_{ijx} + S_y s_{ijy})\end{aligned}$$

wobei \mathbf{S} der lokale Spin der Störstelle ist:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} d_{\sigma}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} d_{\sigma'}$$

weiter gilt:

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} d_{-\sigma}^{\dagger} d_{-\sigma} c_{j\sigma} &= \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} d_{-\sigma}^{\dagger} d_{-\sigma} = c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \\ &= \frac{1}{4} \left(\left(\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + 2s_{ijz} \right) (\hat{n}_d - 2S_z) + \left(\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - 2s_{ijz} \right) (\hat{n}_d + 2S_z) \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \hat{n}_d - 2S_z s_{ijz}\end{aligned}$$

einsetzen:

$$T_{-1} T_1 = P'_0 \sum_{ij} V_i V_j \left(\frac{1}{2} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - 2\mathbf{S} \mathbf{s}_{ij} \right) P'_0$$

damit:

$$\begin{aligned}T_0 &= P'_0 T P'_0 = P'_0 \left(\sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \right) P'_0 \\ &= \text{const.} + P'_0 \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} P'_0\end{aligned}$$

und damit insgesamt:

$$\begin{aligned}H_{\text{eff}} &= \text{const.} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \sum_{ij} J_{ij} \left(\mathbf{S} \mathbf{s}_{ij} - \frac{1}{4} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \right) \\ &= \text{const.} + \sum_{ij\sigma} t'_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S} \mathbf{s}_{ij}\end{aligned}$$

wobei

$$J_{ij} = -\frac{2V_i V_j}{U} \quad t'_{ij} = t_{ij} + \frac{1}{4} J_{ij}$$

für lokale Hybridisierung $V_i = V \delta_{i i_0}$ (i_0 ist der Störstellenplatz) gilt:

$$\boxed{H_{\text{eff}} = \text{const.} + \sum_{ij\sigma} t'_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - J \mathbf{S} \mathbf{s}_{i_0}}$$

mit

(Kondo-Modell)

$$J = -\frac{2V^2}{U}$$

→ antiferromagnetische Austausch-Wechselwirkung zwischen Störstellen-Spin und lokalem Spin der Leitungselektronen am Störstellenplatz

Ist der Kondo-Limes realisiert, so hat dieser effektive Hamilton-Operator im $\hat{n}_d = 1$ -Unterraum die gleiche Wirkung wie der Hamiltonian des Störstellen-Anderson-Modells bis auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(V^3/U^2)$. Der Kondo-Limes kann erreicht werden für $V = \text{const.}$ und $U \rightarrow \infty \rightarrow J \rightarrow 0$. Kondo konnte allerdings zeigen, dass das Modell nicht mit Störungstheorie in J behandelt werden kann. Für $J \rightarrow 0$ treten hier Divergenzen auf, die erst bei Aufsummation von Störtermen beliebig hoher Ordnung verschwinden.

4.10 Kondo-Gitter-Modell

Weitgehend analog verlaufen die Überlegungen zum periodischen Anderson-Modell.

periodisches Anderson-Modell mit lokaler Hybridisierung:

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

$$(n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma})$$

Gesamt-Doppelbesetzung:

$$\hat{d} = \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}$$

Zerlegung von H mit $\mathbf{1} = \sum_d P_d$:

$$H = T + W = T_0 + T_1 + T_{-1} + W = H_0 + H_1$$

$$H_0 = T + W \quad H_1 = T_1 + T_{-1} = \mathcal{O}(V)$$

Kondo-Limes

$$\varepsilon_d \ll \varepsilon(\mathbf{k}) \ll \varepsilon_d + U \quad |\varepsilon_d - \varepsilon(\mathbf{k})|, |\varepsilon_d + U - \varepsilon(\mathbf{k})| \gg \Gamma \quad \mu \sim \varepsilon(\mathbf{k})$$

mit $\Gamma = \pi V^2 \rho_0(0)$

→ $n_{i\sigma} + n_{i-\sigma} = 1$ für niederenergetische Zustände

$$\begin{aligned} T_{-1} T_1 &= P'_0 T P_1 T P'_0 = \sum_{ij\sigma\sigma'} V^2 P'_0 c_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} P_1 d_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} P'_0 \\ &= \sum_{i\sigma} V^2 P'_0 \left(c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i\sigma}) c_{i\sigma} - d_{i\sigma}^\dagger d_{i-\sigma} c_{i-\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) P'_0 \\ &= 2V^2 \sum_i P'_0 \left(\frac{1}{2} n_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \mathbf{S}_i \mathbf{s}_i \right) P'_0 \end{aligned}$$

→

$$H_{\text{eff}} = \text{const.} + \sum_{ij\sigma} t'_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \sum_i J \mathbf{S}_i \mathbf{s}_i$$

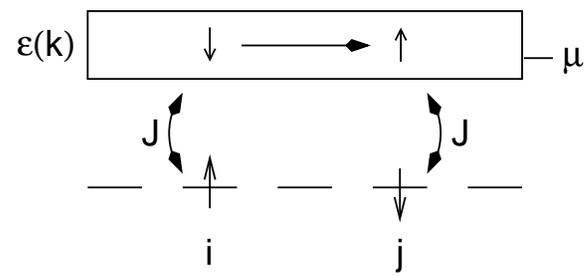
mit

(Kondo-Gitter-Modell)

$$J = -\frac{2V^2}{U}$$

→ lokale antiferromagnetische Austausch-Wechselwirkung zwischen den d - und den c -Spins an jedem Gitter-Platz

Eine Ausrichtung des d -Spins an einem Platz i bewirkt via J eine dazu antiparallele Ausrichtung des lokalen Leitungselektronenspin am gleichen Platz. Durch Hopping-Prozesse führt diese zu einer Polarisation der lokalen Leitungselektronenspins in der Umgebung, so dass an einem anderen Gitterplatz j wiederum durch die Austausch-Wechselwirkung J eine Ausrichtung des d -Spins erfolgen kann (parallel oder antiparallel zur Ausgangsrichtung). Dieser RKKY-Mechanismus begünstigt eine magnetische Ordnung des Systems. Die Curie- bzw. Néel-Temperatur wird für kleine J von der Ordnung $\mathcal{O}(J^2)$ sein.



Kapitel 5

Green-Funktionen

5.1 Spektroskopien

(großkanonischer) Hamiltonian des Systems:

$$\mathcal{H} = H - \mu N = \mathcal{H}_0 + H_1$$

Eigenenergien, -zustände:

$$\mathcal{H}|m\rangle = E_m|m\rangle \quad \text{ONB: } \{|m\rangle\}$$

$|m\rangle$: Viel-Teilchen-Zustand, zu viel Information

Idee:

(schwache) Störung \rightarrow Antwort des Systems

Anregungsprozess $R \rightarrow$ Wirkungsquerschnitt, Intensität I

Anregungen liefern komprimierte und messbare Information über das System

Photoemission:

$$R = c_\alpha$$

winkel- und spinaufgelöst: $\alpha = (\mathbf{k}, \sigma)$

inverse Photoemission:

$$R = c_\alpha^\dagger$$

komplementäre Spektroskopie

Auger-Prozess:

$$R = c_\alpha c_\beta$$

Auftrittspotenzialspektroskopie:

$$R = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger$$

Transport, Raman, Neutronenstreuung, etc.:

$$R = c_\alpha^\dagger c_\beta$$

dies sind **elementare Anregungsprozesse**

Ein-Teilchen-Anregungen: $c_\alpha^\dagger, c_\alpha$

Zwei-Teilchen-Anregungen: $c_\alpha c_\beta, c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger, c_\alpha^\dagger c_\beta$

dazu kommen muss eine "Spektroskopie-Theorie"

z.B. für die Photoemission in etwa so:

- elektronischer Übergang induziert durch Ankopplung an Strahlungsfeld:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$$

- Vernachlässigung des \mathbf{A}^2 -Terms, Coulomb-Eichung, Dipol-Approximation:

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} + V, \quad V_1 = \mathbf{A}_0 \mathbf{p}$$

- zweite Quantisierung:

$$V = \sum_{\beta\gamma} \langle \beta | \mathbf{A}_0 \mathbf{p} | \gamma \rangle a_\beta^\dagger c_\gamma + \text{h.c.} = \sum_{\beta\gamma} M_{\beta\gamma} a_\beta^\dagger c_\gamma + \text{h.c.}$$

mit: $a \sim$ hochenergetische Zustände, $c \sim$ Valenzzustände

- Endzustand in "sudden approximation"
(keine Wechselwirkung zwischen Photoelektron und Restsystem):

$$|f\rangle \approx a_\alpha^\dagger |m\rangle \quad E_f = E_m + \varepsilon_\alpha$$

- Anfangszustand:

$$|i\rangle = |n\rangle \quad E_i = E_n + h\nu$$

mit

$$a_\alpha |n\rangle \approx 0$$

- also:

$$\langle f | V | i \rangle = \langle m | a_\alpha \sum_{\beta\gamma} (M_{\beta\gamma} a_\beta^\dagger c_\gamma + \text{h.c.}) | n \rangle = \langle m | \sum_{\gamma} M_{\alpha\gamma} c_\gamma | n \rangle$$

- ohne Matrixelemente:

$$\langle f|V|i\rangle = \langle m|c_\gamma|n\rangle$$

d.h.

$$\boxed{R = c_\gamma}$$

als elementarer Baustein der Photoemission

Berechnung der Intensität für schwache Störung R :

zunächst $T = 0$: System im GZ $|0\rangle$

Wahrscheinlichkeit für Übergang $|0\rangle \rightarrow |m\rangle$

$$|\langle m|R|0\rangle|^2 \quad (\text{Störungstheorie 1. Ordnung in } R)$$

Anregungsenergie:

$$\omega = E_m - E_0$$

Intensität \sim spektrale Dichte der Übergänge mit Anregungsenergie zwischen ω und $\omega + d\omega$:

$$I_R(\omega) = \sum_m |\langle m|R|0\rangle|^2 \delta(\omega - (E_m - E_0))$$

(es ist $\omega \geq 0$, $E_m = E_{m'}$ möglich)

Dies ist letztlich Fermis goldener Regel, zeitabhängige Störungstheorie 1. Ordnung in R , gültig für schwache Störung

für $T \geq 0$ ist das System anfänglich mit Wahrscheinlichkeit

$$p_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$$

im Zustand $|n\rangle \rightarrow$

$$\boxed{I_R(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} |\langle m|R|n\rangle|^2 \delta(\omega - (E_m - E_n))}$$

$\omega < 0$ möglich

für die komplementäre Spektroskopie mit Operator R^\dagger ist:

$$I_{R^\dagger}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} |\langle m|R^\dagger|n\rangle|^2 \delta(\omega - (E_m - E_n))$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} |\langle n|R|m\rangle|^2 \delta(\omega - (E_m - E_n)) \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} |\langle m|R|n\rangle|^2 \delta(\omega - (E_n - E_m)) \quad (m \leftrightarrow n) \\
&= e^{\beta\omega} \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} |\langle m|R|n\rangle|^2 \delta(-\omega - (E_m - E_n))
\end{aligned}$$

$$\rightarrow I_{R^\dagger}(\omega) = e^{\beta\omega} I_R(-\omega)$$

$$\text{bzw. } \boxed{I_R(\omega) = e^{\beta\omega} I_{R^\dagger}(-\omega)}$$

Diskussion für $R = c_\alpha$ (Photoemission), $R^\dagger = c_\alpha^\dagger$ (inverse PE)

- $I_{R^\dagger}(\omega)$ ist für $\omega > 0$ das normale (IPE) Spektrum
- $I_{R^\dagger}(-\omega)$ ist für $\omega > 0$ exponentiell unterdrückt, aber messbar
- Multiplikation mit Exponentialfaktor liefert das normale PE Spektrum $I_R(\omega) = e^{\beta\omega} I_{R^\dagger}(-\omega)$
- aber: die Messfehler werden ebenfalls exponentiell größer, Methode nur geeignet für $\omega \rightarrow 0$

5.2 Spektraldichte

Zusammenfassen von Spektroskopie und komplementärer Spektroskopie durch

Spektraldichte:

$$\boxed{S_{AB}(\omega) = \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \delta(\omega - (E_n - E_m))}$$

für beliebige Operatoren A, B (hier meist $A = R, B = R^\dagger$)

Lehmann-Darstellung

$\bar{\varepsilon} = +1$: Kommutator-Spektraldichte

$\bar{\varepsilon} = -1$: Antikommutator-Spektraldichte

übliche Wahl:

$$\boxed{\bar{\varepsilon} = \varepsilon^k}$$

k : die Anzahl der Erzeuger/Vernichter sind, aus denen sich A bzw. B aufbaut

es gilt ($A = R, B = R^\dagger$):

$$S_{RR^\dagger}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} \langle n|R|m\rangle \langle m|R^\dagger|n\rangle \delta(\omega - (E_m - E_n))$$

$$- \bar{\varepsilon} \frac{1}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} \langle n|R|m\rangle \langle m|R^\dagger|n\rangle \delta(\omega - (E_m - E_n))$$

(nach Umbenennung $m \leftrightarrow n$)

und somit:

$$S_{RR^\dagger}(\omega) = I_{R^\dagger}(\omega) - \bar{\varepsilon} e^{-\beta\omega} I_{R^\dagger}(\omega) = (1 - \bar{\varepsilon} e^{-\beta\omega}) I_{R^\dagger}(\omega)$$

→

$$I_{R^\dagger}(\omega) = \frac{e^{\beta\omega}}{e^{\beta\omega} - \bar{\varepsilon}} S_{RR^\dagger}(\omega)$$

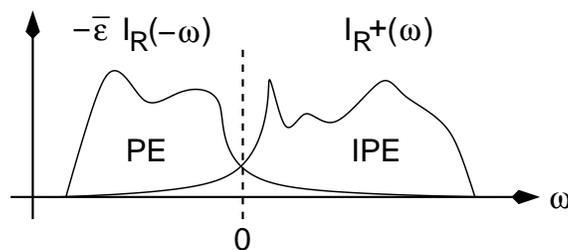
mit $I_R(-\omega) = e^{-\beta\omega} I_{R^\dagger}(\omega)$ ist

$$I_R(-\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - \bar{\varepsilon}} S_{RR^\dagger}(\omega)$$

und

$$S_{RR^\dagger}(\omega) = I_{R^\dagger}(\omega) - \bar{\varepsilon} I_R(-\omega)$$

Spektraldichte



Diskussion Spektraldichte:

- zentrale formale Größe (äquivalent zur Green-Funktion)
- notwendig für diagrammatische Störungstheorie
- Bezug zum Experiment
- elementare Anregungen des Systems aus dem Gleichgewicht

(prinzipiell also NichtgleichgröÙe, für schwache Störung aber gemäß Störungstheorie 1. Ordnung (Fermis goldener Regel) ein thermodynamischer Erwartungswert)

weitere Eigenschaften folgen unmittelbar aus der Lehmann-Darstellung:

$$S_{AB}(\omega) = -\bar{\varepsilon} S_{BA}(-\omega)$$

für die Antikommutator-Spektraldichte:

$$S_{AA^\dagger}(\omega) \text{ reell und nicht-negativ} \quad (\bar{\varepsilon} = -1)$$

für die Kommutator-Spektraldichte ($\text{sign}(\omega) = \pm 1$ für $\omega > 0, \omega < 0$):

$$\text{sign}(\omega) S_{AA^\dagger}(\omega) \text{ reell und nicht-negativ} \quad (\bar{\varepsilon} = 1)$$

Fourier-Transformation:

$$X(\omega) = \int \exp(i\omega t) X(t) dt \quad X(t) = \frac{1}{2\pi} \int \exp(-i\omega t) X(\omega) d\omega$$

mit der Lehmann-Darstellung ist:

$$S_{AB}(\omega) = \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \frac{1}{2\pi} \int e^{i(\omega - (E_n - E_m))t} dt$$

→

$$\begin{aligned} S_{AB}(t) &= \frac{1}{2\pi} \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle e^{-iE_n t} e^{iE_m t} \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t}|n\rangle \langle n|B|m\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{Z} \sum_{mn} \left(e^{-\beta E_m} \langle m|A(t)|n\rangle \langle n|B|m\rangle - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n} \langle m|A(t)|n\rangle \langle n|B|m\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} (\langle A(t)B(0)\rangle - \bar{\varepsilon} \langle B(0)A(t)\rangle) \end{aligned}$$

$$S_{AB}(t) = \frac{1}{2\pi} \langle [A(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle \quad (\text{zeitabh. Korrelationsfunktion})$$

mit:

$$A(t) = \exp(i\mathcal{H}t) A \exp(-i\mathcal{H}t) \quad (\text{großkanonische Heisenberg-Darstellung})$$

- S_{AB} hat in Zeitdarstellung einfache Form
- zeitabhängige Korrelationsfunktionen sind Fourier-transformierte Spektren
- (Anti-)Kommutator-Spektraldichte: Namensgebung offensichtlich

Hier sieht man, dass die oben getroffene Vereinbarung $\bar{\varepsilon} = \varepsilon^k$ Sinn macht, denn damit kann der auftretende (Anti-)Kommutator auf die fundamentalen (Anti-)Vertauschungsrelationen zurückgeführt werden.

Beispiel: Fermi-Gas

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} (\varepsilon_{\alpha} - \mu) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}$$

Ein-Teilchen-(Antikommutator)Spektraldichte

$$A_{\alpha\beta}(\omega) = S_{c_{\alpha}c_{\beta}^{\dagger}}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} S_{c_{\alpha}c_{\beta}^{\dagger}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \langle [c_{\alpha}(t), c_{\beta}^{\dagger}(0)]_{+} \rangle$$

es ist ($\mathcal{L}c_{\alpha} = [c_{\alpha}, \mathcal{H}]_{-} = (\varepsilon_{\alpha} - \mu)c_{\alpha}$)

$$c_{\alpha}(t) = e^{i\mathcal{H}t} c_{\alpha} e^{-i\mathcal{H}t} = e^{-it\mathcal{L}} c_{\alpha} = e^{-i(\varepsilon_{\alpha} - \mu)t} c_{\alpha}$$

und somit

$$\langle [c_{\alpha}(t), c_{\beta}^{\dagger}(0)]_{+} \rangle = e^{-i(\varepsilon_{\alpha} - \mu)t} \langle [c_{\alpha}, c_{\beta}^{\dagger}]_{+} \rangle = e^{-i(\varepsilon_{\alpha} - \mu)t} \delta_{\alpha\beta}$$

also:

$$A_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} e^{-i(\varepsilon_{\alpha} - \mu)t} \delta_{\alpha\beta}$$

und

$$\boxed{A_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\omega - (\varepsilon_{\alpha} - \mu))}$$

für $\alpha = \beta = \mathbf{k}$, $H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}$:

$$\boxed{A_{\mathbf{k}}(\omega) = \delta(\omega - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu))}$$

freies System (keine Wechselwirkung H_1) \rightarrow ein δ -Peak

mit $H_1 \neq 0$ ist allgemein (gemäß Lehmann-Darstellung):

$$A_{\mathbf{k}}(\omega) = S_{c_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}}^{\dagger}}(\omega) = \sum_r z_r(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_r(\mathbf{k}))$$

$\omega_r(\mathbf{k})$: Anregungsenergie

$z_r(\mathbf{k})$: **spektrales Gewicht**

für $V \rightarrow \infty$:

$$A_{\mathbf{k}}(\omega) \rightarrow \int dr z_r(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega_r(\mathbf{k}))$$

evtl. glatte Funktion von ω \rightarrow Lebensdauer verbreiterung von Bändern

Lehmann-Darstellung für $T = 0$:

$$S_{AB}(\omega) = S_{AB}^>(\omega) - \bar{\varepsilon} S_{AB}^<(\omega)$$

mit

$$S_{AB}^>(\omega) = \sum_m \langle 0|A|m\rangle \langle m|B|0\rangle \delta(\omega - (E_m - E_0)) \quad (\omega > 0)$$

$$S_{AB}^<(\omega) = \sum_m \langle 0|B|m\rangle \langle m|A|0\rangle \delta(\omega - (E_0 - E_m)) \quad (\omega < 0)$$

es gilt:

δ -Peak in Spektraldichte ($B = A^\dagger$) \leftrightarrow unendliche Lebensdauer

“Beweis”: in einer Umgebung von $\omega_0 > 0$ sei $S_{RR^\dagger}(\omega) = z_0 \delta(\omega - \omega_0)$

\rightarrow

$R|0\rangle$ hat nichtverschwindenden Überlapp nur mit Eigenzuständen der Energie $E_0 + \omega_0$

(denn sonst ist das Matrixelement endlich und weitere δ -Peaks entstehen; hierzu muss allerdings die (plausible) Annahme gemacht werden, dass keine “hochenergetischen” Zustände außerhalb der Umgebung von ω_0 reinmischen)

\rightarrow

$R|0\rangle$ ist ein Eigenzustand zur Energie $E_0 + \omega_0$

\rightarrow

die Anregung R zerfällt zeitlich nicht, das System verbleibt (bis auf einen Phasenfaktor $\exp(i(E_0 + \omega_0)t)$) im angeregten Zustand $R|0\rangle$

globale Eigenschaften der Spektraldichte:

mit $\mathcal{L}A = [A, \mathcal{H}]_-$ ist $i(d/dt)A(t) = \mathcal{L}A(t)$ \rightarrow

k -tes Moment der Spektraldichte:

$$\int d\omega \omega^k S_{AB}(\omega) = \int d\omega \left(i \frac{d}{dt} \right)^k e^{-i\omega t} \Big|_{t=0} S_{AB}(\omega)$$

$$\begin{aligned}
&= 2\pi \left(i \frac{d}{dt} \right)^k \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} S_{AB}(\omega) \Big|_{t=0} \\
&= 2\pi \left(i \frac{d}{dt} \right)^k S_{AB}(t) \Big|_{t=0} \\
&= 2\pi \left(i \frac{d}{dt} \right)^k \frac{1}{2\pi} \langle [A(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle \Big|_{t=0} \\
&= \langle [\mathcal{L}^k A(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle \Big|_{t=0}
\end{aligned}$$

→

$$\int d\omega \omega^k S_{AB}(\omega) = \langle [\mathcal{L}^k A, B]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle$$

0-tes Moment:

$$\int d\omega S_{AB}(\omega) = \langle [A, B]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle$$

Beispiel: $A = c_{i\sigma}$, $B = c_{j\sigma}^\dagger$ →

Ein-Teilchen-Spektraldichte $S_{c_{i\sigma}c_{j\sigma}^\dagger}(\omega) = A_{ij\sigma}(\omega)$

$$\int d\omega A_{ij\sigma}(\omega) = \langle [c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle = \delta_{ij}$$

Die Spektraldichte erfüllt eine wichtige Summenregel.

Lehmann-Darstellung:

$$S_{AB}(\omega) = \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \delta(\omega - (E_n - E_m))$$

$$S_{AB}(\omega) = S'_{AB}(\omega) + S_{AB}^{(D)}(\omega)$$

wobei:

$$S'_{AB}(\omega) = \sum_{mn}^{E_m \neq E_n} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \delta(\omega - (E_n - E_m))$$

$$S_{AB}^{(D)}(\omega) = \sum_{mn}^{E_m = E_n} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \delta(\omega - (E_n - E_m))$$

es ist:

$$\begin{aligned}
S'_{AB}(\omega) &= \sum_{mn}^{E_m \neq E_n} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \delta(\omega - (E_n - E_m)) \\
&= (e^{\beta\omega} - \bar{\varepsilon}) \frac{1}{Z} \sum_{mn}^{E_m \neq E_n} e^{-\beta E_n} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \delta(\omega - (E_n - E_m))
\end{aligned}$$

→

$$\int d\omega \frac{1}{e^{\beta\omega} - \bar{\varepsilon}} S'_{AB}(\omega) = \sum_{mn}^{E_m \neq E_n} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle = \langle BA \rangle - D_{AB}$$

mit

$$D_{AB} = \sum_{mn}^{E_m = E_n} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle$$

Wegen $(\exp(\beta\omega) - 1)\delta(\omega) = \omega\delta(\omega) = 0$ sind die Diagonalterme mit $E_m = E_n$ gesondert zu behandeln.

es ist

$$S_{AB}^{(D)}(\omega) = \sum_{mn}^{E_m = E_n} \frac{e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_m}}{Z} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \delta(\omega)$$

damit folgt für

$$\bar{\varepsilon} = +1 : \quad S_{AB}^{(D)}(\omega) = 0, \quad S_{AB}(\omega) = S'_{AB}(\omega)$$

und für

$$\bar{\varepsilon} = -1 : \quad S_{AB}^{(D)}(\omega) = 2D_{AB}\delta(\omega)$$

$$\bar{\varepsilon} = -1 : \quad \int d\omega \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} S_{AB}^{(D)}(\omega) = \int d\omega \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} 2D_{AB}\delta(\omega) = D_{AB}$$

→

$$\boxed{\langle BA \rangle = \int d\omega \frac{1}{e^{\beta\omega} - \bar{\varepsilon}} S_{AB}(\omega) + \frac{1 + \bar{\varepsilon}}{2} D_{AB}} \quad (\text{Spektraltheorem})$$

Für $\bar{\varepsilon} = +1$ treten die Diagonalelemente D_{AB} als Korrekturterm auf!

- vergleiche freies Fermi-Gas:

$$\langle N \rangle = \int d\omega f(\omega - \mu) \rho_0(\omega)$$

- Bedeutung der Fermi(Bose)-Funktion für wechselwirkende Systeme
- Zustandsdichte $\rho_0(\omega) \mapsto S_{AB}(\omega)$ Spektraldichte
aber für allgemeine A, B

5.3 Linear-Response-Theorie

$\partial^2 \Omega / \partial \lambda_A \partial \lambda_B$:

– statische Störung → statische Antwort → imag. zeitabh. Korrelationsfunktion

Theorie elementarer Spektroskopien:

– elementare Anregung R → Intensität I → Spektraldichte

linear-response-Theorie:

– zeitabhängige Störung → zeitabhängige Antwort → Green-Funktion

betrachte

$$\boxed{\tilde{\mathcal{H}}_t = \mathcal{H} + \lambda_B(t)B} \quad \text{mit } \lambda_B(t) \text{ klein und } \mathcal{H} \text{ zeitunabhängig}$$

gesucht: Antwort $\langle A \rangle_t$ bis zu erster Ordnung in $\lambda_B(t)$ (“linear response”):

$$\left. \frac{\delta \langle A \rangle_t}{\delta \lambda_B(t')} \right|_{\lambda_B(t')=0}$$

offensichtlich ist

$$\langle A \rangle_t \Big|_{\lambda_B(t')=0} = \langle A \rangle_0 \quad \text{zeitunabhängig}$$

→ explizit zeitabhängiger Hamiltonian $\tilde{H} = \tilde{H}_t$

Gleichgewichts-Dichteoperator

$$\rho(t) \neq \frac{1}{Z} e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}_t}$$

erfüllt nicht die **von Neumannsche Differenzialgleichung**:

$$\boxed{i \frac{d}{dt} \rho(t) = [\tilde{\mathcal{H}}_t, \rho(t)]_-}$$

beachte:

$$i \frac{d}{dt} \rho(t) = i \frac{d}{dt} \sum_m p_m |m\rangle \langle m| = \sum_m p_m (\tilde{\mathcal{H}}_t |m\rangle \langle m| - |m\rangle \langle m| \tilde{\mathcal{H}}_t) = [\tilde{\mathcal{H}}_t, \rho(t)]_-$$

→ System nicht im thermischen Gleichgewicht

→ (gemischter) Zustand $\rho = ??$

aber: bei *schwacher* Zeitabhängigkeit (langsam oder schnell) ist zeitabhängige Störungstheorie (1. Ordnung) zur Bestimmung des Systemzustands möglich

Bestimmung des (gemischten) Systemzustands

(hinreichend allgemeiner) Ansatz für $\rho(t)$:

$$\rho(t) = e^{-i\mathcal{H}t} \rho_1(t) e^{i\mathcal{H}t}$$

damit ist:

$$i \frac{d}{dt} \rho(t) = \mathcal{H} \rho(t) - \rho(t) \mathcal{H} + e^{-i\mathcal{H}t} \left(i \frac{d}{dt} \rho_1(t) \right) e^{i\mathcal{H}t}$$

und:

$$[\widetilde{\mathcal{H}}_t, \rho(t)]_- = [\mathcal{H}, \rho(t)]_- + \lambda_B(t) [B, \rho(t)]_-$$

mit der von Neumannschen DGL für $\rho(t)$ folgt:

$$e^{-i\mathcal{H}t} \left(i \frac{d}{dt} \rho_1(t) \right) e^{i\mathcal{H}t} = \lambda_B(t) [B, \rho(t)]_- = \lambda_B(t) [B, e^{-i\mathcal{H}t} \rho_1(t) e^{i\mathcal{H}t}]_-$$

also:

$$i \frac{d}{dt} \rho_1(t) = e^{i\mathcal{H}t} [\lambda_B(t) B, e^{-i\mathcal{H}t} \rho_1(t) e^{i\mathcal{H}t}]_- e^{-i\mathcal{H}t}$$

$$i \frac{d}{dt} \rho_1(t) = [\lambda_B(t) e^{i\mathcal{H}t} B e^{-i\mathcal{H}t}, \rho_1(t)]_-$$

Dies ist die Bewegungsgleichung für $\rho_1(t)$. Die Idee zu dieser Ableitung ist im Wesentlichen der Übergang vom Schrödinger- zum Dirac-Bild.

Umwandeln in Integralgleichung

Anfangsbedingung?

es sei: $\lambda_B(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow -\infty$ ("Einschalten der Störung")

dann folgt: $\rho(t) \rightarrow e^{-\beta\mathcal{H}}/Z$ und $\rho_1(t) \rightarrow e^{-\beta\mathcal{H}}/Z$ für $t \rightarrow -\infty$

also:

$$\rho_1(t) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}} - i \int_{-\infty}^t dt' [\lambda_B(t') e^{i\mathcal{H}t'} B e^{-i\mathcal{H}t'}, \rho_1(t')]_-$$

Iterieren und Abbrechen nach 1. Ordnung:

$$\rho_1(t) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}} - i \int_{-\infty}^t dt' [\lambda_B(t') e^{i\mathcal{H}t'} B e^{-i\mathcal{H}t'}, \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}}]_- + \mathcal{O}(\lambda_B^2)$$

nach der Bestimmung von $\rho_1(t)$ folgt für $\rho(t)$:

$$\rho(t) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}} - i \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\mathcal{H}t} [\lambda_B(t') e^{i\mathcal{H}t'} B e^{-i\mathcal{H}t'}, \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}}]_- e^{i\mathcal{H}t} + \mathcal{O}(\lambda_B^2)$$

$$\rho(t) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}} - i \int_{-\infty}^t dt' \lambda_B(t') [e^{-i\mathcal{H}(t-t')} B e^{i\mathcal{H}(t-t')}, \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}}]_- + \mathcal{O}(\lambda_B^2)$$

jetzt ist der Zustand bekannt, es folgt die Brechnung von $\langle A \rangle_t$:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= \text{Sp } \rho(t) A \\ &= \frac{1}{Z} \text{Sp } e^{-\beta\mathcal{H}} A - i \int_{-\infty}^t dt' \lambda_B(t') \text{Sp} \left([e^{-i\mathcal{H}(t-t')} B e^{i\mathcal{H}(t-t')}, \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}}]_- A \right) \end{aligned}$$

Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\lambda_B^2)$ sind vernachlässigt.

$$\langle A \rangle_t = \langle A \rangle_0 - i \int_{-\infty}^t dt' \lambda_B(t') \text{Sp} \left([e^{-i\mathcal{H}(t-t')} B e^{i\mathcal{H}(t-t')}, \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}}]_- A \right)$$

Ausnutzen der zyklischen Invarianz der Spur:

$$\begin{aligned} &Z \text{Sp} (\dots) \\ &= \text{Sp} \left(e^{-i\mathcal{H}(t-t')} B e^{i\mathcal{H}(t-t')} e^{-\beta\mathcal{H}} A \right) - \text{Sp} \left(e^{-\beta\mathcal{H}} e^{-i\mathcal{H}(t-t')} B e^{i\mathcal{H}(t-t')} A \right) \\ &= \text{Sp} \left(e^{-\beta\mathcal{H}} A e^{-i\mathcal{H}(t-t')} B e^{i\mathcal{H}(t-t')} \right) - \text{Sp} \left(e^{-\beta\mathcal{H}} e^{-i\mathcal{H}(t-t')} B e^{i\mathcal{H}(t-t')} A \right) \\ &= \text{Sp} \left(e^{-\beta\mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} e^{i\mathcal{H}t'} B e^{-i\mathcal{H}t'} \right) - \text{Sp} \left(e^{-\beta\mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t'} B e^{-i\mathcal{H}t'} e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} \right) \\ &= Z \langle A(t) B(t') \rangle - Z \langle B(t') A(t) \rangle \\ &= Z \langle [A(t) B(t')]_- \rangle \end{aligned}$$

beachte:

$A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t}$: "freie" (Heisenbergsche) Zeitabhängigkeit

$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp } e^{-\beta\mathcal{H}} A = \langle A \rangle_0$: "freier" Erwartungswert

damit folgt (bis auf Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\lambda_B^2)$):

$$\boxed{\langle A \rangle_t = \langle A \rangle_0 - i \int_{-\infty}^t dt' \lambda_B(t') \langle [A(t) B(t')]_- \rangle}$$

oder:

$$\boxed{\left. \frac{\delta \langle A \rangle_t}{\delta \lambda_B(t')} \right|_{\lambda_B(t') \equiv 0} = -i \Theta(t-t') \langle [A(t) B(t')]_- \rangle = G_{AB}^{(\text{ret})}(t, t')}$$

(Kubo-Formel)

(Nichtgleichgewichts-)Eigenschaften des gestörten Systems $\mathcal{H} + \lambda_B(t)B$ werden bis zu linearer Ordnung in $\lambda_B(t)$ durch Gleichgewichtseigenschaften des Systems \mathcal{H} bestimmt!

der lineare Response ist gegeben durch die:

retardierte Kommutator-Green-Funktion

$$G_{AB}^{(\text{ret})}(t, t') = -i\Theta(t - t')\langle [A(t)B(t')]_- \rangle = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^{(\text{ret})}$$

da \mathcal{H} nicht explizit zeitabhängig ist, gilt

$$G_{AB}^{(\text{ret})}(t, t') = G_{AB}^{(\text{ret})}(t - t')$$

(Homogenität der Green-Funktion)

☞ Übung

der Faktor $\Theta(t - t')$ ist Ausdruck des Kausalitätsprinzips:

Die Reaktion des Systems zur Zeit t kann nicht von einer zur Zeit $t' > t$ vorliegenden Störung verursacht werden.

Diskussion:

- Zusammenhang mit Spektraldichte:

$$G_{AB}^{(\text{ret})}(t, t') = -i\Theta(t - t')\langle [A(t)B(t')]_- \rangle = -2\pi i\Theta(t - t')S_{AB}(t - t')$$

- $G_{AB}^{(\text{ret})}(t, t')$ und $S_{AB}(t - t')$ haben gleichen Informationsgehalt (Formel zur Berechnung von S bei gegebenem G s.u.)
- linear-response-Theorie "formal sauberer" als Theorie der elementaren Anregungen oben
- linear-response-Theorie motiviert $G_{AB}^{(\text{ret})}(t, t')$ nur für hermitesche A, B , nicht für $A = c_\alpha, B = c_\beta^\dagger$

definiere: $\Delta A(t) = \langle A \rangle_t - \langle A \rangle$

Fourier-Transformation:

$$\Delta A(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \Delta A(\omega)$$

$$\lambda_B(t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t'} \lambda_B(\omega)$$

$$G_{AB}^{(\text{ret})}(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)$$

damit gilt:

$$\begin{aligned}\Delta A(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' G_{AB}^{(\text{ret})}(t-t') \lambda_B(t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' G_{AB}^{(\text{ret})}(t-t') \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t'} \lambda_B(\omega)\end{aligned}$$

mit der Substitution $t' \rightarrow t - t'$

$$\begin{aligned}&= \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \lambda_B(\omega) \int dt' e^{i\omega t'} G_{AB}^{(\text{ret})}(t') \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) \lambda_B(\omega)\end{aligned}$$

→

$$\boxed{\Delta A(\omega) = G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) \lambda_B(\omega)}$$

also: Im linear-response-Bereich bewirkt eine mit ω oszillierende zeitabhängige Störung eine Antwort des Systems, die mit *gleicher Frequenz* oszilliert!

bzw.: Ein response bei anderen Frequenzen als ω zeigt, dass die Störung zu stark ist, um in erster Ordnung behandelt werden zu können (Bsp.: Spektroskopien mit starken Laser-Feldern, Frequenzverdopplung, nichtlineare Optik).

5.4 Frequenzabhängige Green-Funktion

Hier soll mit der Green-Funktion die zentrale Größe der Viel-Teilchen-Theorie systematisch diskutiert werden. Ausgangspunkt der Diskussion ist die retardierte Green-Funktion.

Berechnung von $G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)$:

$$\begin{aligned}G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) &= \int dt e^{i\omega t} G_{AB}^{(\text{ret})}(t) = \int dt e^{i\omega t} (-2\pi i) \Theta(t) S_{AB}(t) \\ &= \int dt e^{i\omega t} (-2\pi i) \Theta(t) \frac{1}{2\pi} \int d\omega' e^{-i\omega' t} S_{AB}(\omega') \\ &= \int d\omega' S_{AB}(\omega') \int dt e^{i(\omega-\omega')t} (-i) \Theta(t)\end{aligned}$$

das t -Integral ist eine Distribution:

$$\begin{aligned}\int dt e^{i(\omega-\omega')t} (-i) \Theta(t) &= \lim_{\eta \searrow 0} \int dt e^{i(\omega-\omega'+i\eta)t} (-i) \Theta(t) \\ &= \lim_{\eta \searrow 0} (-i) \frac{1}{i(\omega-\omega'+i\eta)t} e^{i(\omega-\omega'+i\eta)t} \Big|_0^{\infty}\end{aligned}$$

$$= \lim_{\eta \searrow 0} \frac{1}{\omega - \omega' + i\eta}$$

$$= \frac{1}{\omega - \omega' + i0^+}$$

damit folgt:

$$G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) = \int d\omega' \frac{S_{AB}(\omega')}{\omega - \omega' + i0^+}$$

(Spektraldarstellung der retardierten Green-Funktion)

Verallgemeinerung:

zu beliebigem A, B definiere **(Anti-)Kommutator-Green-Funktion**

$$G_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{S_{AB}(\omega')}{\omega - \omega'}$$

$\omega' \in \mathbb{R}, \omega \notin \mathbb{R} !$

(Spektraldarstellung der Green-Funktion)

dies ist **die** Green-Funktion, sie umfasst:

retardierte Green-Funktion

$$G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) = G_{AB}(\omega + i0^+) \quad (\omega \text{ reell})$$

avancierte Green-Funktion

$$G_{AB}^{(\text{av})}(\omega) = G_{AB}(\omega - i0^+) \quad (\omega \text{ reell})$$

thermische Green-Funktion, Matsubara-Funktion

$$G_{AB}^{(\text{M})}(\omega_n) = G_{AB}(i\omega_n)$$

mit

$$\omega_n = (2n + 1)\pi T \quad n \in \mathbb{Z} \quad (\text{Fermionen})$$

$$\omega_n = 2n\pi T \quad n \in \mathbb{Z} \quad (\text{Bosonen})$$

Eigenschaften von $G_{AB}(\omega)$?

es ist:

$$S_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} (e^{-\beta E_m} - \bar{\epsilon} e^{-\beta E_n}) \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \delta(\omega - (E_n - E_m))$$

durch Einsetzen folgt unmittelbar:

$$G_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} (e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}) \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \frac{1}{\omega - (E_n - E_m)}$$

(Lehmann-Darstellung der Green-Funktion)

analytische Eigenschaften von $G_{AB}(\omega)$

- $G_{AB}(\omega)$ ist eine analytische Funktion auf $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$
- $L < \infty$ (vor dem thermodynamischen Limes) \rightarrow
diskrete Eigenenergien E_n , diskrete Anregungsenergien $\omega_{nm} = E_n - E_m$
 $G_{AB}(\omega)$ besitzt Pole 1. Ordnung bei $\omega = \omega_{nm} \in \mathbb{R}$

Im thermodynamischen Limes hat man ggfs. ein kontinuierliches Anregungsspektrum.

- Pole von $G_{AB}(\omega)$: Anregungsenergien des Systems
- Residuum von $G_{AB}(\omega)$ in $\omega = E_n - E_m$:

$$a_{nm} = \lim_{\omega \rightarrow E_n - E_m} (\omega - E_n - E_m) G_{AB}(\omega)$$

$$a_{nm} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}) \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle$$
 \rightarrow nur bestimmte Pole besitzen ein nichtverschwindendes Residuum und sind nicht hebbar

- $G_{AB}(\omega) = \sum_{nm} \frac{a_{nm}}{\omega - \omega_{nm}}$

- häufiger Spezialfall: $B = A^\dagger$

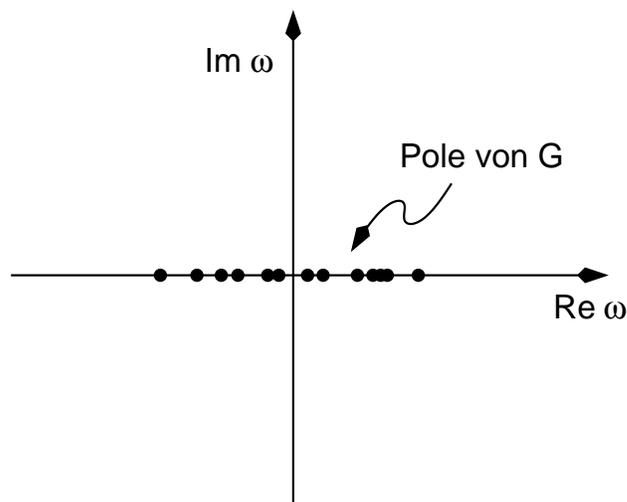
$$a_{nm} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}) |\langle m|A|n\rangle|^2$$

Antikommutator-GF ($\bar{\varepsilon} = -1$): $a_{nm} \geq 0$

Kommutator-GF ($\bar{\varepsilon} = +1$):

$$a_{nm} \geq 0 \text{ für } \omega_{nm} \geq 0 \text{ (} E_n \geq E_m \text{)}$$

$$a_{nm} \leq 0 \text{ für } \omega_{nm} \leq 0 \text{ (} E_m \geq E_n \text{)}$$



→ Anwendungen der Funktionentheorie möglich

Schreibweise: $G_{AB}(\omega) = \langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega$

Bilinearität der Green-Funktion bezüglich der Operatoren A und B :

$$\langle\langle c_1 A_1 + c_2 A_2; B \rangle\rangle_\omega = c_1 \langle\langle A_1; B \rangle\rangle_\omega + c_2 \langle\langle A_2; B \rangle\rangle_\omega$$

$$\langle\langle A; c_1 B_1 + c_2 B_2 \rangle\rangle_\omega = c_1 \langle\langle A; B_1 \rangle\rangle_\omega + c_2 \langle\langle A; B_2 \rangle\rangle_\omega$$

A, B Erhaltungsgrößen → Green-Funktion trivial; z.B. $[B, H]_- = 0$ impliziert:

$$\begin{aligned} \langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{Z} \sum_{mn} (e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}) \langle m|A|n \rangle b_m \langle n|m \rangle \frac{1}{\omega - (E_n - E_m)} \\ &= \frac{1}{Z} (1 - \bar{\varepsilon}) \sum_m e^{-\beta E_m} \langle m|AB|m \rangle \frac{1}{\omega} \\ &= (1 - \bar{\varepsilon}) \frac{\langle AB \rangle}{\omega} = (1 - \bar{\varepsilon}) \frac{\langle BA \rangle}{\omega} \end{aligned}$$

mit $\varepsilon = +1$ für die Kommutator-GF bedeutet das, dass der linear response verschwindet

beachte:

$\mathcal{H} + \lambda_B(t')B$ und \mathcal{H} haben gemeinsamen Satz von Eigenzuständen
insbesondere ist also für $T = 0$ $\langle A \rangle_t = \langle GZ|A|GZ \rangle$ unabhängig von $\lambda_B(t')$!

es gilt:

$$\begin{aligned}
G_{BA}(\omega) &= \frac{1}{Z} \sum_{mn} (e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}) \langle m|B|n\rangle \langle n|A|m\rangle \frac{1}{\omega - (E_n - E_m)} \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{mn} (e^{-\beta E_n} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_m}) \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \frac{1}{\omega - (E_m - E_n)} \\
&= -\bar{\varepsilon} \frac{1}{Z} \sum_{mn} (\bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \frac{1}{-\omega - (E_n - E_m)} \\
&= \bar{\varepsilon} \frac{1}{Z} \sum_{mn} (e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}) \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \frac{1}{-\omega - (E_n - E_m)}
\end{aligned}$$

also:

$$\boxed{G_{BA}(\omega) = \bar{\varepsilon} G_{AB}(-\omega)}$$

Verhalten von $G_{AB}(\omega)$ für $\omega \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}
G_{AB}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{S_{AB}(\omega')}{\omega - \omega'} \\
&= \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S_{AB}(\omega') \frac{1}{1 - \omega'/\omega} \\
&= \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S_{AB}(\omega') \sum_{k=0}^{\infty} (\omega'/\omega)^k \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\omega^{k+1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S_{AB}(\omega') \omega'^k
\end{aligned}$$

k -tes Moment der Spektraldichte: $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S_{AB}(\omega') \omega'^k = \langle [\mathcal{L}^k A, B]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle$

mit $\mathcal{L}A = [A, \mathcal{H}]_-$

also:

$$\boxed{G_{AB}(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle [\mathcal{L}^k A, B]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle}{\omega^{k+1}}}$$

insbesondere:

$$\boxed{G_{AB}(\omega) \rightarrow \frac{\langle [A, B]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle}{\omega} \quad \text{für } \omega \rightarrow \infty}$$

Verhalten von $G_{AB}(\omega)$ für $\omega \rightarrow 0$

$$G_{AB}(\omega) = G'_{AB}(\omega) + G_{AB}^{(D)}(\omega)$$

wobei:

$$G'_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn}^{E_m \neq E_n} (e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}) \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \frac{1}{\omega - (E_n - E_m)}$$

$$G_{AB}^{(D)}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn}^{E_m = E_n} (e^{-\beta E_m} - \bar{\varepsilon} e^{-\beta E_n}) \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \frac{1}{\omega - (E_n - E_m)}$$

es ist:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} G'_{AB}(\omega) = G'_{AB}(0) \quad \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega G'_{AB}(\omega) = 0 \quad (\text{kein Pol bei } \omega = 0)$$

andererseits ist für $\omega \neq 0$:

$$G_{AB}^{(D)}(\omega) = (1 - \bar{\varepsilon}) \frac{1}{Z} \sum_{mn}^{E_m = E_n} e^{-\beta E_n} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle \frac{1}{\omega} = \frac{1 - \bar{\varepsilon}}{\omega} D_{AB}$$

insgesamt:

$$\boxed{\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega G_{AB}(\omega) = (1 - \bar{\varepsilon}) D_{AB}}$$

Antikommutator-Green-Funktion ($\bar{\varepsilon} = -1$):

$G_{AB}(\omega)$ hat bei $\omega = 0$ einen Pol 1. Ordnung mit Residuum $2D_{AB}$

Kommutator-Green-Funktion ($\bar{\varepsilon} = +1$):

$G_{AB}(\omega)$ ist analytisch bei $\omega = 0$

5.5 Retardierte und avancierte Green-Funktion

Für gegebene Spektraldichte ist die Green-Funktion über die Spektraldarstellung gegeben. Diese Relation lässt sich (zumindest für reelle Spektraldichte) auch invertieren. Damit besitzen Green-Funktion und Spektraldichte den gleichen Informationsgehalt.

Dirac-Identität:

$$\boxed{\frac{1}{x + i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)} \quad \text{analog: } \frac{1}{x - i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{x} + i\pi\delta(x)$$

beachte:

$$\int dx \frac{1}{x + i0^+} f(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int dx \frac{1}{x + i\eta} f(x)$$

$$\int dx \mathcal{P} \frac{1}{x} f(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{-\eta} + \int_{\eta}^{\infty} \right) dx \frac{1}{x} f(x)$$

$$\int dx \delta(x) f(x) = f(0)$$

für $\omega \in \mathbb{R}$ und $S_{AB}(\omega)$ reell gilt:

$$-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{AB}(\omega + i0^+) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int d\omega' \frac{S_{AB}(\omega')}{\omega + i0^+ - \omega'} = \int d\omega' S_{AB}(\omega') \delta(\omega - \omega')$$

also:

$$\boxed{S_{AB}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{AB}(\omega + i0^+) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)} \quad (\omega \text{ reell})$$

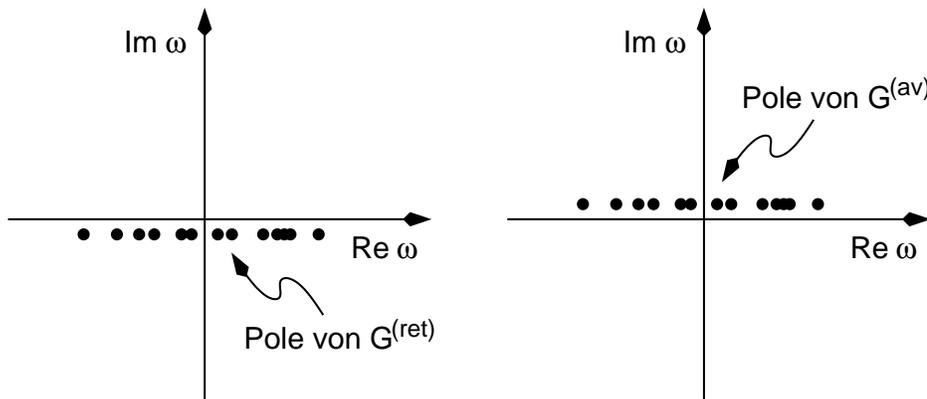
(Darstellung von S mit retardierter Green-Funktion)

und:

$$\boxed{S_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{AB}(\omega - i0^+) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{AB}^{(\text{av})}(\omega)} \quad (\omega \text{ reell})$$

(Darstellung von S mit avancierter Green-Funktion)

$G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)$ ($G_{AB}^{(\text{av})}(\omega)$) kann in die obere (untere) komplexe Halbebene analytisch fortgesetzt werden (und ist dort mit $G_{AB}(\omega)$ identisch)

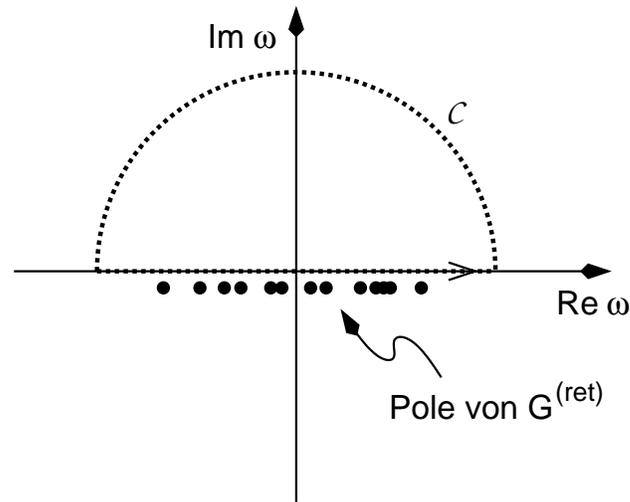


Man kann die analytischen Eigenschaften von retardierter und avancierter Green-Funktion ausnutzen, um eine Relation zwischen ihren Real- und Imaginärteilen herzuleiten.

$G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)$ analytisch für $\operatorname{Im} \omega \geq 0 \rightarrow$

$$0 = \oint_C d\omega' \frac{G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega')}{\omega' - \omega - i0^+} \quad (\omega' \text{ reell})$$

(Pole von $G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)$ unterhalb der reellen Achse, weiterer Pol bei $\omega = \omega' - i0^+$)



wegen $G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) \rightarrow \frac{\langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle}{\omega}$ für $\omega \rightarrow \infty$ folgt:

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega')}{\omega' - \omega - i0^+}$$

Ausnutzen der Dirac-Identität

$$0 = \mathcal{P} \int d\omega' \frac{G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega')}{\omega' - \omega} + i\pi G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)$$

somit:

$$G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) = \frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega')}{\omega - \omega'} \quad (\omega \text{ reell})$$

und:

$$\text{Re } G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{\text{Im } G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega')}{\omega - \omega'}$$

$$\text{Im } G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{\text{Re } G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega')}{\omega - \omega'} \quad (\text{Kramers-Kronig-Relationen})$$

avancierte Green-Funktion: analoge Relationen

Fourier-Transformation

$$G(\omega) = \int dt e^{i\omega t} G(t)$$

$$G(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} G(\omega)$$

ω reelle Variable! \rightarrow Fourier-Transformation nur für $G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)$ und $G_{AB}^{(\text{av})}(\omega)$

es gilt:

$$\frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \omega' \pm i0^+} = \mp i\Theta(\pm t)e^{-i\omega' t}$$

Beweis (für oberes Vorzeichen):

schon oben wurde gezeigt:

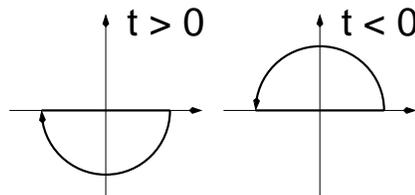
$$-i\Theta(t) \implies \frac{1}{\omega + i0^+}$$

also auch:

$$\frac{1}{\omega + i0^+} \implies -i\Theta(t)$$

direkter Beweis:

Integrationswege:



sei $t > 0$, $\text{Im } \omega < 0$ auf dem Integrationsweg \rightarrow

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \omega' + i0^+} &= \frac{1}{2\pi} \oint_C d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \omega' + i0^+} \\ &= \frac{1}{2\pi} 2\pi i (-1) \text{res}_{\omega'} \left(e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \omega'} \right) \\ &= -i e^{-i\omega' t} \end{aligned}$$

sei $t < 0$, $\text{Im } \omega > 0$ auf dem Integrationsweg \rightarrow

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \omega' + i0^+} = \frac{1}{2\pi} \oint_C d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \omega' + i0^+} = 0$$

insgesamt:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \omega' + i0^+} = -i\Theta(t)e^{-i\omega' t}$$

zweites Vorzeichen: analog

damit gilt:

$$G_{AB}^{(\text{ret})}(t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} \int d\omega' \frac{S_{AB}(\omega')}{\omega + i0^+ - \omega'} \\
&= \int d\omega' S_{AB}(\omega') (-i) \Theta(t) e^{-i\omega' t} \\
&= (-i) \Theta(t) 2\pi S_{AB}(t) \\
&= -i \Theta(t) \langle [A(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle
\end{aligned}$$

unter Ausnutzung der Homogenität der Green-Funktion:

$$\boxed{G_{AB}^{(\text{ret})}(t-t') = -i \Theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle}$$

analog:

$$\boxed{G_{AB}^{(\text{av})}(t-t') = i \Theta(t'-t) \langle [A(t), B(t')]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle}$$

5.6 Linear Response, statischer Limes

statischer Response auf statische Störung?

Kubo-Formel:

$$\langle A \rangle_t = \langle A \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \lambda_B(t') G_{AB}^{(\text{ret})}(t-t')$$

es muss gelten:

$$\lambda_B(t') \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad t' \rightarrow -\infty$$

daher sei

$$\lambda_B(t') = \lambda_B e^{\eta t'}$$

mit einem positiven Infinitesimal η (bzw. statischer Limes: $\eta \rightarrow 0$)

dann gilt:

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle_t - \langle A \rangle &= \int dt' G_{AB}^{(\text{ret})}(t-t') \lambda_B e^{\eta t'} \\
&= \lambda_B e^{\eta t} \int dt' G_{AB}^{(\text{ret})}(t-t') e^{-\eta(t-t')} \\
&= \lambda_B e^{\eta t} \int d(t-t') G_{AB}^{(\text{ret})}(t-t') e^{i\omega(t-t')} \quad \text{mit } \omega = i\eta \\
&= \lambda_B e^{\eta t} G_{AB}^{(\text{ret})}(i\eta)
\end{aligned}$$

im Limes $\eta \rightarrow 0$ ist:

$$\langle A \rangle_t - \langle A \rangle = G_{AB}^{(\text{ret})}(0) \lambda_B$$

Beachte, dass hier die frequenzabhängige Green-Funktion gemeint ist!

System z.Zt. $t = -\infty$: $\mathcal{H} \rightarrow$ Erwartungswert $\langle A \rangle$

System z.Zt. $t = 0$: $\mathcal{H} + d\lambda_B B \rightarrow$ Erwartungswert $\langle A \rangle + G_{AB}^{(\text{ret})}(0)d\lambda_B$

Diese Schreibweise deutet an, dass das Ergebnis natürlich nur bis zu erster Ordnung in λ_B gelten kann.

also:

$$\boxed{\left. \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} \right|_{\text{einschalt.}}} = G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega = 0) \quad (\text{Störung langsam eingeschaltet})$$

Vergleich mit Resultat für zeitunabhängige Störung:

System: $\mathcal{H} \rightarrow$ Erwartungswert $\langle A \rangle$

System: $\mathcal{H} + d\lambda_B B \rightarrow$ Erwartungswert $\langle A \rangle + \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} d\lambda_B$

linear response:

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} = \beta \langle B \rangle \langle A \rangle - \int_0^\beta d\tau \langle B(\tau) A(0) \rangle$$

weitere Auswertung mit Eigenzuständen von \mathcal{H} :

$$\mathcal{H}|m\rangle = E_m|m\rangle$$

es ist:

$$\begin{aligned} & - \int_0^\beta d\tau \langle B(\tau) A(0) \rangle \\ &= - \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\mathcal{H}\tau} B e^{-\mathcal{H}\tau} | m \rangle \langle m | A | n \rangle \\ &= - \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \int_0^\beta d\tau e^{(E_n - E_m)\tau} \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle \end{aligned}$$

falls $E_m = E_n$, ist:

$$e^{-\beta E_n} \int_0^\beta d\tau e^{(E_n - E_m)\tau} = \beta e^{-\beta E_n}$$

falls $E_m \neq E_n$, ist:

$$e^{-\beta E_n} \int_0^\beta d\tau e^{(E_n - E_m)\tau} = e^{-\beta E_n} \frac{1}{E_n - E_m} (e^{\beta(E_n - E_m)} - 1) = \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m}$$

→

$$\begin{aligned} - \int_0^\beta d\tau \langle B(\tau)A(0) \rangle &= -\beta \frac{1}{Z} \sum_{m,n}^{E_m=E_n} e^{-\beta E_n} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \\ &+ \frac{1}{Z} \sum_{m,n}^{E_m \neq E_n} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_n - E_m} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \end{aligned}$$

mit (s.o.)

$$D_{AB} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n}^{E_m=E_n} e^{-\beta E_n} \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle$$

ist der erste Terme durch $-\beta D_{AB}$ gegeben

mit dem rein imaginären Infinitesimal $i0^+$ gilt für den zweiten Term:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{Z} \sum_{m,n}^{E_m \neq E_n} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_n - E_m} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n}^{E_m \neq E_n} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{i0^+ - (E_n - E_m)} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{i0^+ - (E_n - E_m)} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \end{aligned}$$

Die Terme mit $E_m = E_n$ können ergänzt werden, da der Nenner nie verschwinden kann.

damit ist:

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} = \beta \langle A \rangle \langle B \rangle - \beta D_{AB} + G_{AB}^{(\text{ret})}(\omega = 0)$$

oder:

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} = \langle \langle A - \langle A \rangle; B - \langle B \rangle \rangle \rangle_{\omega=i0^+} - \beta D_{A-\langle A \rangle, B-\langle B \rangle}$$

denn:

$$\langle \langle 1; B \rangle \rangle_{\omega=i0^+} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{i0^+ - (E_n - E_m)} \langle m|1|n \rangle \langle n|B|m \rangle$$

also:

$$\langle\langle \text{const.}; B \rangle\rangle_{\omega=i0^+} = \langle\langle A; \text{const.} \rangle\rangle_{\omega=i0^+} = 0$$

und

$$D_{A-\langle A \rangle, B-\langle B \rangle} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n}^{E_m=E_n} e^{-\beta E_n} \langle m|A - \langle A \rangle|n \rangle \langle n|B - \langle B \rangle|m \rangle$$

$$D_{A-\langle A \rangle, B-\langle B \rangle} = D_{AB} - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

→ im allgemeinen sind also die Antworten verschieden!

es ist:

$$\boxed{\left. \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} \right|_{\text{einschalt.}} = \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda_B} \Leftrightarrow D_{AB} = \langle A \rangle \langle B \rangle}$$

betrachte System ohne Energieentartungen, d.h. $E_m = E_n \Rightarrow m = n$

dann ist

$$D_{AB} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n}^{E_m=E_n} e^{-\beta E_n} \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n|A|n \rangle \langle n|B|n \rangle$$

und es folgt für $T \rightarrow 0$:

$$D_{AB} = \langle 0|A|0 \rangle \langle 0|B|0 \rangle = \langle A \rangle \langle B \rangle$$

Dies ist plausibel, denn in diesem Fall entwickelt sich der (nichtentartete) Grundzustand für $t \rightarrow -\infty$ kontinuierlich in den (nichtentarteten) Grundzustand für $t = 0$, ohne dass sich Zustände kreuzen. Bei Systemen mit Entartung, sieht dies anders aus.

Beispiel: verschobener harmonischer Oszillator

$$H = \omega_0 \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} \right) + \lambda(b + b^\dagger)$$

zunächst direkte Berechnung von $\partial \langle A \rangle / \partial \lambda$ mit $A = b + b^\dagger$

Änderung des Ortserwartungswerts bei Veränderung des äußeren linearen Potentials.

definiere

$$c = b + \lambda/\omega_0 \quad \rightarrow \quad [c, c^\dagger]_- = 1$$

damit:

$$\begin{aligned} H &= \omega_0 \left((c^\dagger - \lambda/\omega_0)(c - \lambda/\omega_0) + \frac{1}{2} \right) + \lambda(c + c^\dagger - 2\lambda/\omega_0) \\ &= \omega_0 \left(c^\dagger c + \frac{1}{2} + \lambda^2/\omega_0^2 \right) - 2\lambda^2/\omega_0 \end{aligned}$$

also:

$$H = \omega_0 \left(c^\dagger c + \frac{1}{2} - \frac{\lambda^2}{\omega_0^2} \right)$$

ONB von H : $\{|n\rangle\}$ mit $|n\rangle = (c^\dagger)^n |0\rangle / \sqrt{n!}$, Energien: $E_n = \omega_0(n+1/2 - \lambda^2/\omega_0^2)$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle$$

*Chemisches Potenzial $\mu = 0$ (Phononen).
Bei trivialer Verallgemeinerung auf (unendlich großes) System entkoppelter Oszillatoren macht (groß)kanonische Gesamtheit Sinn.*

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\beta\omega_0})^n e^{\beta(\lambda^2/\omega_0 - \omega_0/2)}$$

$$\Omega = -T \ln Z = T \ln(1 - e^{-\beta\omega_0}) + \omega_0/2 - \lambda^2/\omega_0$$

$$\langle A \rangle = \langle b + b^\dagger \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = -2 \frac{\lambda}{\omega_0}$$

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda} = \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} = -\frac{2}{\omega_0}$$

jetzt Auswertung gemäß

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda} = \beta \langle A \rangle^2 - \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau) A(0) \rangle$$

wegen $[c, H]_- = \omega_0 c$ ist $\mathcal{L}c = \omega_0 c$ und

$$c(\tau) = e^{H\tau} c e^{-H\tau} = e^{-\tau \mathcal{L}} c = e^{-\omega_0 \tau} c \quad c^\dagger(\tau) = e^{\omega_0 \tau} c^\dagger$$

Beachte: $c^\dagger(\tau) \neq (c(\tau))^\dagger!$

also:

$$\begin{aligned} \langle A(\tau) A(0) \rangle &= \langle (b + b^\dagger)(\tau) (b + b^\dagger) \rangle \\ &= \langle (c + c^\dagger - 2\lambda/\omega_0)(\tau) (c + c^\dagger - 2\lambda/\omega_0) \rangle \\ &= \langle c(\tau) c^\dagger \rangle + \langle c^\dagger(\tau) c \rangle + 4\lambda^2/\omega_0^2 \end{aligned}$$

$$= e^{-\omega_0\tau} \langle cc^\dagger \rangle + e^{\omega_0\tau} \langle c^\dagger c \rangle - 4\lambda^2/\omega_0^2$$

denn: $\langle c \rangle = \langle c(\tau) \rangle = 0$

$$\int_0^\beta d\tau e^{-\omega_0\tau} = \frac{1}{\omega_0}(1 - e^{-\beta\omega_0}) \quad \int_0^\beta d\tau e^{\omega_0\tau} = \frac{1}{\omega_0}(e^{\beta\omega_0} - 1)$$

also:

$$\begin{aligned} \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau)A(0) \rangle &= \frac{1}{\omega_0} \left((1 - e^{-\beta\omega_0}) \langle cc^\dagger \rangle + (e^{\beta\omega_0} - 1) \langle c^\dagger c \rangle \right) + 4\lambda^2/\omega_0^2 \\ &= \frac{1}{\omega_0} (1 + 1) + 4\lambda^2/\omega_0^2 = \frac{2}{\omega_0} + 4\lambda^2/\omega_0^2 \end{aligned}$$

und:

$$\beta \langle A \rangle^2 - \int_0^\beta d\tau \langle A(\tau)A(0) \rangle = \beta \left(-2\frac{\lambda}{\omega_0} \right)^2 - \frac{2}{\omega_0} - 4\lambda^2/\omega_0^2 = -\frac{2}{\omega_0}$$

Beispiel: verschobener harmonischer Oszillator

$$H = \omega_0 \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} \right) + \lambda(b + b^\dagger) = \omega_0 \left(c^\dagger c + \frac{1}{2} - \frac{\lambda^2}{\omega_0^2} \right) \quad (c = b + \lambda/\omega_0)$$

es gilt:

$$\langle A \rangle = \langle b + b^\dagger \rangle = -2\frac{\lambda}{\omega_0} \quad \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda} = -\frac{2}{\omega_0}$$

zeitabhängige Störung:

$$H_t = H + f(t)(b + b^\dagger)$$

Berechnung der retardierten Green-Funktion:

$$A(t) = c(t) + c^\dagger(t) - 2\frac{\lambda}{\omega_0} \quad c(t) = e^{-i\omega_0 t} c$$

$$\langle [A(t), A(0)]_- \rangle = \langle [c(t) + c^\dagger(t) - 2\frac{\lambda}{\omega_0}, c + c^\dagger - 2\frac{\lambda}{\omega_0}]_- \rangle$$

$$= \langle [c(t), c^\dagger]_- \rangle + \langle [c^\dagger(t), c]_- \rangle = e^{-i\omega_0 t} - e^{i\omega_0 t}$$

$$G^{(\text{ret})}(t) = +i\Theta(t)(e^{i\omega_0 t} - e^{-i\omega_0 t})$$

$$G^{(\text{ret})}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} i\Theta(t)(e^{i\omega_0 t} - e^{-i\omega_0 t})$$

$$= i \int_0^\infty dt \left(e^{i(\omega+\omega_0)t} - e^{i(\omega-\omega_0)t} \right)$$

$$= i \frac{1}{i(\omega + \omega_0)} e^{i(\omega+\omega_0)t} \Big|_0^\infty - i \frac{1}{i(\omega - \omega_0)} e^{i(\omega-\omega_0)t} \Big|_0^\infty$$

für $\omega = i\eta$ mit $\eta > 0$ ist

$$G^{(\text{ret})}(i\eta) = -\frac{1}{(i\eta + \omega_0)} + \frac{1}{(i\eta - \omega_0)}$$

$\eta \rightarrow 0$:

$$G^{(\text{ret})}(0) = -\frac{2}{\omega_0}$$

also:

$$G^{(\text{ret})}(0) = \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \lambda}$$

in der Tat ist:

$$D_{AA} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n}^{E_m=E_n} e^{-\beta E_n} \langle m|A|n \rangle \langle n|A|m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n|A|n \rangle \langle n|A|n \rangle$$

$$\langle n|A|n \rangle = \langle n|c + c^\dagger - 2\frac{\lambda}{\omega_0}|n \rangle = -2\frac{\lambda}{\omega_0}$$

also:

$$D_{AA} = \langle n|A|n \rangle \langle n|A|n \rangle = 4\frac{\lambda^2}{\omega_0^2} = \langle A \rangle^2$$

5.7 Bewegungsgleichung

Heisenberg-Gleichung \rightarrow

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}G_{AB}^{(\text{ret/av})}(t) &= i\frac{d}{dt} [\mp i\Theta(\pm t)\langle [A(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle] \\ &= \pm \left[\frac{d}{dt}\Theta(\pm t) \right] \langle [A(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle \mp i\Theta(\pm t) \left[i\frac{d}{dt}\langle [A(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle \right] \\ &= \delta(t)\langle [A(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle \mp i\Theta(\pm t)\langle [[A, \mathcal{H}]_-(t), B(0)]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle \end{aligned}$$

also:

$$\boxed{i\frac{d}{dt}\langle \langle A(t); B(0) \rangle \rangle^{(\text{ret/av})} = \delta(t)\langle [A, B]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle + \langle \langle [A, \mathcal{H}]_-(t); B(0) \rangle \rangle^{(\text{ret/av})}}$$

(Bewegungsgleichung der Green-Funktion)

Randbedingung: $\langle \langle A(t); B(0) \rangle \rangle^{(\text{ret/av})} = 0$ für $t < 0/t > 0$

$\langle \langle [A, \mathcal{H}]_-(t); B(0) \rangle \rangle^{(\text{ret/av})}$: "höhere" Green-Funktion

Die "höhere" Green-Funktion ist i.allg. (nämlich wenn \mathcal{H} nicht nur bilinear ist) aus mehr Erzeugern/Vernichtern aufgebaut als $\langle\langle[A(t); B(0)]_{-\bar{\varepsilon}}\rangle\rangle^{(\text{ret/av})}$.

Fourier-Transformation:

$$\begin{aligned}\langle\langle A(t); B(0) \rangle\rangle^{(\text{ret/av})} &\leftrightarrow \langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega}^{(\text{ret/av})} \\ \delta(t) &\leftrightarrow 1 \\ i \frac{d}{dt} &\leftrightarrow \omega\end{aligned}$$

Bewegungsgleichung für frequenzabhängige Green-Funktion:

$$\omega \langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega}^{(\text{ret/av})} = \langle[A, B]_{-\bar{\varepsilon}}\rangle + \langle\langle[A, \mathcal{H}]_{-}; B\rangle\rangle_{\omega}^{(\text{ret/av})}$$

rein algebraisch!

Beachte, dass sowohl der Kommutator als auch der Kommutator/Antikommutator auftritt!

Bewegungsgleichung für höhere Green-Funktion:

$$\omega \langle\langle[A, \mathcal{H}]_{-}; B\rangle\rangle_{\omega}^{(\text{ret/av})} = \langle[[A, \mathcal{H}], B]_{-\bar{\varepsilon}}\rangle + \langle\langle[[A, \mathcal{H}], \mathcal{H}]_{-}; B\rangle\rangle_{\omega}^{(\text{ret/av})}$$

Dies ergibt eine Kette von immer komplexeren Bewegungsgleichungen. In Spezialfällen kann die Hierarchie der Bewegungsgleichungen abrechnen; dann liefert das Lösen der Bewegungsgleichungen ein einfaches und elegantes Verfahren zur Bestimmung von Green-Funktionen.

retardierte und avancierte Green-Funktion erfüllen dieselbe Bewegungsgleichung der Unterschied liegt in den spezifischen Randbedingungen

$$\omega \rightarrow \omega \pm i0^+ \quad \rightarrow \text{retardierte/avancierte Green-Funktion}$$

die Green-Funktion $G_{AB}(\omega)$ ist die analytische Fortsetzung von $G_{AB}^{(\text{ret/av})}(\omega)$ in die obere bzw. untere komplexe Halbebene, also:

$$\omega \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \quad \rightarrow \text{Green-Funktion } G_{AB}(\omega)$$

Beispiel: Ein-Teilchen-Green-Funktion $G_{\alpha\beta}(\omega) = \langle\langle c_{\alpha}; c_{\beta}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega}$

$\bar{\varepsilon} = \varepsilon !$

Bewegungsgleichung:

$$\omega \langle \langle c_\alpha; c_\beta^\dagger \rangle \rangle_\omega = \langle [c_\alpha, c_\beta^\dagger]_{-\varepsilon} \rangle + \langle \langle [c_\alpha, \mathcal{H}]_-; c_\beta^\dagger \rangle \rangle_\omega$$

betrachte bilinearen Hamiltonian ohne Wechselwirkung:

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta$$

dann ist:

$$[c_\alpha, \mathcal{H}]_- = \sum_{\alpha'\beta'} (t_{\alpha'\beta'} - \mu \delta_{\alpha'\beta'}) [c_\alpha, c_{\alpha'}^\dagger c_{\beta'}]_-$$

für $\varepsilon = -1$ (Fermionen) und $\varepsilon = 1$ (Bosonen) ist gleichermaßen:

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

also:

$$[c_\alpha, \mathcal{H}]_- = \sum_{\beta'} (t_{\alpha\beta'} - \mu \delta_{\alpha\beta'}) c_{\beta'}$$

und

$$\omega \langle \langle c_\alpha; c_\beta^\dagger \rangle \rangle_\omega = \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\beta'} (t_{\alpha\beta'} - \mu \delta_{\alpha\beta'}) \langle \langle c_{\beta'}; c_\beta^\dagger \rangle \rangle_\omega$$

Die Kette der Bewegungsgleichungen bricht also ab. Wegen des fehlenden Wechselwirkungsterms tritt keine neue höhere Green-Funktion auf.

Matrixschreibweise:

$$\omega \mathbf{G}(\omega) = \mathbf{1} + (\mathbf{t} - \mu \mathbf{1}) \mathbf{G}(\omega)$$

Lösen der Gleichung durch Matrixinversion:

$$\boxed{\mathbf{G}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \mathbf{t}}} \quad (\text{Green-Funktion für } \omega \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R})$$

retardierte/avancierte Green-Funktion:

$$\boxed{\mathbf{G}(\omega)^{(\text{ret/av})} = \frac{1}{\omega \pm i0^+ + \mu - \mathbf{t}}}$$

Diese besonders einfache Form für die Green-Funktion ohne Temperaturabhängigkeit und mit triviale μ -Abhängigkeit ist eine Konsequenz der nicht betrachteten Wechselwirkung.

unitäre Transformation der Ein-Teilchen-ONB:

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

damit:

$$\begin{aligned} \langle\langle c_{\alpha'}; c_{\beta'}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} &= \langle\langle \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'}^* c_{\alpha}; \sum_{\beta} U_{\beta\beta'} c_{\beta}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} \\ &= \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha'\alpha}^{\dagger} \langle\langle c_{\alpha}; c_{\beta}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} U_{\beta\beta'} \end{aligned}$$

also:

$$\boxed{\mathbf{G}'(\omega) = \mathbf{U}^{\dagger} \mathbf{G}(\omega) \mathbf{U}}$$

Die Ein-Teilchen-Green-Funktion transformiert sich bei unitärer Transformation der ONB genauso wie die Hopping-Matrix \mathbf{t} .

Konsistenzcheck:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}'(\omega) &= \frac{1}{\omega + \mu - \mathbf{t}'} = \frac{1}{\omega + \mu - \mathbf{U}^{\dagger} \mathbf{t} \mathbf{U}} \\ &= \frac{1}{\mathbf{U}^{\dagger} (\omega + \mu - \mathbf{t}) \mathbf{U}} = \frac{1}{\mathbf{U}} \frac{1}{\omega + \mu - \mathbf{t}} \frac{1}{\mathbf{U}^{\dagger}} \\ &= \mathbf{U}^{\dagger} \frac{1}{\omega + \mu - \mathbf{t}} \mathbf{U} = \mathbf{U}^{\dagger} \mathbf{G}(\omega) \mathbf{U} \end{aligned}$$

Beachte: $1/(ABC) = (1/C)(1/B)(1/A)$ für Matrizen A, B, C .

sei \mathbf{U} die Transformation, die \mathbf{t} diagonalisiert:

(bei translationsinvariantem Gitter: Fourier-Transformation $i \leftrightarrow \mathbf{k}$)

$\varepsilon = \mathbf{U}^{\dagger} \mathbf{t} \mathbf{U}$ diagonal $\rightarrow \mathbf{G}'$ diagonal mit Elementen

$$G_m(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon_m}$$

retardierte Green-Funktion:

$$G_m^{(\text{ret})}(\omega) = G_m(\omega + i0^+) = \frac{1}{\omega + i0^+ + \mu - \varepsilon_m}$$

Ein-Teilchen-Spektraldichte:

$$A_m(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_m^{(\text{ret})}(\omega) = \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m)$$

Die übliche Bezeichnung für die Ein-Teilchen-Spektraldichte: $A_{\dots}(\omega)$

Bilinearität der Spektraldichte $S_{AB}(\omega)$ bzgl. $A, B \rightarrow$

$$A_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_m U_{\alpha m} \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m) U_{m\beta}^\dagger$$

5.8 Selbstenergie und Dyson-Gleichung

Ein Wechselwirkungsterm im Hamiltonian führt i.allg. dazu, dass die Kette der Bewegungsgleichungen nicht mehr abbricht, dass also die höhere Green-Funktion sich nicht durch die Ausgangs-Green-Funktion ausdrücken lässt. Für die Ein-Teilchen-Green-Funktion kann dieses Problem auf die sogenannte Selbstenergie verschoben werden, die hier kurz diskutiert werden soll. Die volle Bedeutung der Selbstenergie zeigt sich aber erst in Zusammenhang mit der diagrammatischen Störungstheorie.

Hamiltonian $H = H_0 + H_1$:

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

Ein-Teilchen-Green-Funktion $\langle\langle c_\alpha; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega$, Bewegungsgleichung:

$$\omega \langle\langle c_\alpha; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega = \delta_{\alpha\beta} + \langle\langle [c_\alpha, \mathcal{H}_0]_-; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega + \langle\langle [c_\alpha, \mathcal{H}_1]_-; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega$$

$$(\mathcal{H} = H_0 - \mu \hat{N} + H_1)$$

es ist:

$$[c_\alpha, \mathcal{H}]_- = \sum_\gamma (t_{\alpha\gamma} - \mu \delta_{\alpha\gamma}) c_\gamma$$

Dieser Term bereitet also keine Schwierigkeiten und führt wieder auf die Ein-Teilchen-Green-Funktion.

(Def.) **Selbstenergie** $\Sigma_{\alpha\beta}(\omega)$

$$\langle\langle [c_\alpha, \mathcal{H}_1]_-; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega = \sum_\gamma \Sigma_{\alpha\gamma}(\omega) \langle\langle c_\gamma; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega$$

für $\omega \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$

retartierte Selbstenergie $\Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{ret})}(\omega) = \Sigma_{\alpha\beta}(\omega + i0^+)$

avancierte Selbstenergie $\Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{av})}(\omega) = \Sigma_{\alpha\beta}(\omega - i0^+)$

damit ist:

$$\omega \langle\langle c_\alpha; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega = \delta_{\alpha\beta} + \sum_\gamma (t_{\alpha\gamma} - \mu \delta_{\alpha\gamma}) \langle\langle c_\gamma; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega + \sum_\gamma \Sigma_{\alpha\gamma}(\omega) \langle\langle c_\gamma; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega$$

Matrix-Schreibweise (Matrix $\mathbf{G}(\omega)$ mit Elementen $G_{\alpha\beta}(\omega) = \langle\langle c_\alpha; c_\beta^\dagger \rangle\rangle_\omega$):

$$\omega \mathbf{G}(\omega) = \mathbf{1} + (\mathbf{t} - \mu \mathbf{1}) \mathbf{G}(\omega) + \boldsymbol{\Sigma}(\omega) \mathbf{G}(\omega)$$

auflösen:

$$\boxed{\mathbf{G}(\omega) = \frac{\mathbf{1}}{\omega + \mu - \mathbf{t} - \boldsymbol{\Sigma}(\omega)}}$$

$$H_1 = 0 \rightarrow \mathbf{G}(\omega) = \mathbf{G}^{(0)}(\omega) = \frac{\mathbf{1}}{\omega + \mu - \mathbf{t}} \rightarrow \boldsymbol{\Sigma}(\omega) = 0$$

Die Selbstenergie beschreibt also sämtliche Wechselwirkungseffekte. Die wechselwirkende Green-Funktion erscheint als freie Green-Funktion eines effektiven Hamiltonians $H_0^{(\text{eff})}$, der aus H_0 durch die Ersetzung $\mathbf{t} \rightarrow \mathbf{t} + \boldsymbol{\Sigma}(\omega)$ hervorgeht. Diese Sichtweise ist allerdings wegen der ω -Abhängigkeit und vor allem wegen der für nicht-reelle ω vorliegenden Nicht-Hermitizität von $H_0^{(\text{eff})}$ problematisch.

mit $\mathbf{G}^{(0)} = 1/(\omega + \mu - \mathbf{t})$ folgt:

$$\mathbf{G}(\omega) = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{G}^{(0)}(\omega)^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}(\omega)}$$

also:

$$\boxed{\boldsymbol{\Sigma}(\omega) = \mathbf{G}^{(0)}(\omega)^{-1} - \mathbf{G}(\omega)^{-1}}$$

(alternative Definitionsmöglichkeit für die Selbstenergie)

Multiplikation mit $\mathbf{G}^{(0)}$ (von links) und mit \mathbf{G} (von rechts):

$$\mathbf{G}^{(0)}(\omega) \boldsymbol{\Sigma}(\omega) \mathbf{G}(\omega) = \mathbf{G}(\omega) - \mathbf{G}^{(0)}(\omega)$$

und damit:

$$\boxed{\mathbf{G}(\omega) = \mathbf{G}^{(0)}(\omega) + \mathbf{G}^{(0)}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}(\omega)\mathbf{G}(\omega)} \quad (\text{Dyson-Gleichung})$$

iterieren:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\omega) &= \mathbf{G}^{(0)}(\omega) + \mathbf{G}^{(0)}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}(\omega) \left(\mathbf{G}^{(0)}(\omega) + \mathbf{G}^{(0)}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}(\omega)\mathbf{G}(\omega) \right) \\ &= \mathbf{G}^{(0)}(\omega) + \mathbf{G}^{(0)}(\omega)\boldsymbol{\Sigma}(\omega)\mathbf{G}^{(0)}(\omega) + \dots \end{aligned}$$

Die Entwicklung zeigt, dass sich die volle Green-Funktion aus der freien Green-Funktion durch wiederholte "Wechselwirkungsprozesse" ergibt. Dies hat in der Diagrammtheorie eine tiefere Bedeutung.

Verhalten von $\boldsymbol{\Sigma}(\omega)$ für große $|\omega|$?

es ist:

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle [\mathcal{L}^k c_\alpha, c_\beta^\dagger]_{-\bar{\varepsilon}} \rangle}{\omega^{k+1}}$$

$k = 0$:

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

$k = 1$:

$$\mathcal{L}c_\alpha = [c_\alpha, \mathcal{H}_0]_- + [c_\alpha, H_1]_-$$

es ist (für $\varepsilon = \pm 1$):

$$[c_\alpha, \mathcal{H}_0]_- = \sum_{\gamma} (t_{\alpha\gamma} - \mu\delta_{\alpha\gamma})c_\gamma$$

und:

$$[c_\alpha, H_1]_- = \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma\delta} (U_{\alpha\beta\delta\gamma} + \varepsilon U_{\beta\alpha\delta\gamma}) c_\beta^\dagger c_\gamma c_\delta$$

$$[[c_\alpha, H_1]_-, c_\beta^\dagger]_{-\bar{\varepsilon}} = \sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) c_\gamma^\dagger c_\delta$$

☞ Übung

und somit:

$$\boxed{G_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\omega} + \frac{1}{\omega^2} \left(t_{\alpha\beta} - \mu\delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_\gamma^\dagger c_\delta \rangle \right) + \mathcal{O}(\omega^{-3})}$$

definiere:

$$\Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{HF})} = \sum_{\gamma\delta} (U_{\alpha\gamma\beta\delta} + \varepsilon U_{\gamma\alpha\beta\delta}) \langle c_{\gamma}^{\dagger} c_{\delta} \rangle$$

$\Sigma_{\alpha\beta}^{(\text{HF})}$ war im Zusammenhang mit statischer Mean-Field-Theorie als effektives Potenzial im Referenzsystem eingeführt worden

damit ist:

$$\mathbf{G}(\omega) = \frac{1}{\omega} + \frac{1}{\omega^2} (\mathbf{t} - \mu + \Sigma^{(\text{HF})}) + \mathcal{O}(\omega^{-3})$$

und es folgt:

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega) &= \omega + \mu - \mathbf{t} - \frac{1}{\mathbf{G}(\omega)} \\ &= \omega + \mu - \mathbf{t} - \frac{1}{\omega^{-1} + \omega^{-2} (\mathbf{t} - \mu + \Sigma^{(\text{HF})}) + \mathcal{O}(\omega^{-3})} \\ &= \omega + \mu - \mathbf{t} - \frac{\omega}{1 + \omega^{-1} (\mathbf{t} - \mu + \Sigma^{(\text{HF})}) + \mathcal{O}(\omega^{-2})} \\ &= \omega + \mu - \mathbf{t} - \omega (1 - \omega^{-1} (\mathbf{t} - \mu + \Sigma^{(\text{HF})}) + \mathcal{O}(\omega^{-2})) \end{aligned}$$

also:

$$\Sigma(\omega) = \Sigma^{(\text{HF})} + \mathcal{O}(\omega^{-1})$$

statische Mean-Field-Theorie approximiert also die Selbstenergie durch ihren statischen Hochfrequenzanteil $\Sigma^{(\text{HF})}$

man kann zeigen:

$$\Sigma(\omega) \text{ analytisch in } \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}, \text{ Pole 1. Ordnung auf } \mathbb{R}$$

→ Definition der retardierten/avancierten Selbstenergie sinnvoll

Kramers-Kronig-Relationen für die retardierte Selbstenergie:

Für den Beweis hat man lediglich $G_{AB}(\omega)$ durch $\Sigma^{(\text{ret})}(\omega) - \Sigma^{(\text{HF})}$ zu ersetzen.

$$\text{Re } \Sigma^{(\text{ret})}(\omega) = \Sigma^{(\text{HF})} - \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{\text{Im } \Sigma^{(\text{ret})}(\omega')}{\omega - \omega'}$$

$$\text{Im } \Sigma^{(\text{ret})}(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int d\omega' \frac{\text{Re } \Sigma^{(\text{ret})}(\omega') - \Sigma^{(\text{HF})}}{\omega - \omega'} \quad (\text{falls } \Sigma^{(\text{HF})} \text{ reell})$$

Analoge Relationen gelten für die avancierte Selbstenergie.

Kapitel 6

Einfache Anwendungen

Hier sollen einige Anwendungen des Formalismus der Green-Funktionen vorgestellt werden, um zu zeigen, wie man (lösbare) Probleme effizient lösen kann und einfache Approximationen (für nicht lösbare Probleme) konstruiert werden können. Im Vordergrund stehen dabei die Bewegungsgleichungsmethode und Entkopplungsschemata. Weitere methodische Zugänge zur Berechnung von Green-Funktionen (Pfadintegral, Diagrammtechnik, Funktionaltheoretische Methoden) werden erst später diskutiert.

6.1 Atomares Hubbard-Modell

atomares Hubbard-Modell (Fermionen, $\varepsilon = -1$):

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{\sigma} n_{-\sigma}$$

Streng genommen ist ein Modell $H = \sum_i H_i$ voneinander unabhängiger atomarer Modelle H_i mit $i = 1, \dots, L$ zu betrachten, wobei $L \rightarrow \infty$, um sinnvollerweise Statistik für $T > 0$ diskutieren zu können bzw. um den großkanonischen Dichteoperator als (gemischten) Zustand des Systems rechtfertigen zu können. Die Ergebnisse sind aber trivial von H_i auf $H = \sum_i H_i$ zu übertragen.

Ein-Teilchen-Green-Funktion:

$$G_\sigma(\omega) = \langle\langle c_\sigma; c_\sigma^\dagger \rangle\rangle_\omega$$

Kommutator: ($n_\sigma = c_\sigma^\dagger c_\sigma$)

$$[c_\sigma, \mathcal{H}]_- = (\varepsilon_0 - \mu)c_\sigma + U c_\sigma n_{-\sigma}$$

Bewegungsgleichung:

$$\omega G_\sigma(\omega) = 1 + (\varepsilon_0 - \mu)G_\sigma(\omega) + U \Gamma_\sigma(\omega)$$

höhere Green-Funktion

$$\Gamma_\sigma(\omega) = \langle\langle c_\sigma n_{-\sigma}; c_\sigma^\dagger \rangle\rangle_\omega$$

Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} \omega \Gamma_\sigma(\omega) &= \langle\langle [c_\sigma n_{-\sigma}, c_\sigma^\dagger]_+ \rangle\rangle + \langle\langle [c_\sigma n_{-\sigma}, \mathcal{H}]_-; c_\sigma^\dagger \rangle\rangle_\omega \\ &= \langle n_{-\sigma} \rangle + (\varepsilon_0 - \mu) \langle\langle c_\sigma n_{-\sigma}; c_\sigma^\dagger \rangle\rangle_\omega + U \langle\langle c_\sigma n_{-\sigma}^2; c_\sigma^\dagger \rangle\rangle_\omega \\ &= \langle n_{-\sigma} \rangle + (\varepsilon_0 - \mu + U) \Gamma_\sigma(\omega) \end{aligned}$$

Kette der Bewegungsgleichungen bricht ab!

also:

$$\Gamma_\sigma(\omega) = \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - \varepsilon_0 - U}$$

einsetzen:

$$\omega G_\sigma(\omega) = 1 + (\varepsilon_0 - \mu)G_\sigma(\omega) + U \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - \varepsilon_0 - U}$$

mit Partialbruchzerlegung folgt:

$$\boxed{G_\sigma(\omega) = \frac{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - \varepsilon_0} + \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - \varepsilon_0 - U}}$$

Die Green-Funktion und damit die Spektraldichte sind also abhängig von der Besetzung der Störstelle und von der Temperatur (über den Erwartungswert $\langle n_{-\sigma} \rangle$)! Solche Abhängigkeiten sind durch die Wechselwirkung induziert und in einem freien System nicht möglich, wo die Form der Spektraldichte stets unverändert bleibt. Dies ist typisch für Viel-Teilchen-Systeme.

Ein-Elektronen-Spektraldichte: $A_{\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_{\sigma}(\omega + i0^+)$

$$A_{\sigma}(\omega) = (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_0) + \langle n_{-\sigma} \rangle \delta(\omega + \mu - \varepsilon_0 - U)$$

Es bleibt noch die Bestimmung des Erwartungswerts.

Spektaltheorem (mit Fermi-Funktion $f(\omega) = 1/(\exp(\beta\omega) + 1)$):

$$\langle c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} \rangle = \int d\omega f(\omega) A_{\sigma}(\omega)$$

also:

$$\langle n_{\sigma} \rangle = (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) f(\varepsilon_0 - \mu) + \langle n_{-\sigma} \rangle f(\varepsilon_0 - \mu + U)$$

Dies sind für $\sigma = \uparrow, \downarrow$ zwei lineare Gleichungen für die Unbekannten $\langle n_{\sigma} \rangle$ und $\langle n_{-\sigma} \rangle$.

lösen:

$$\langle n_{\sigma} \rangle = \langle n_{-\sigma} \rangle = \frac{f(\varepsilon_0 - \mu)}{1 + f(\varepsilon_0 - \mu) - f(\varepsilon_0 - \mu + U)}$$

Keine magnetische Ordnung in einem endlichen oder sogar atomaren System, daher spinunabhängige Green-Funktion.

$$G_{\sigma}(\omega) = G_{-\sigma}(\omega) \quad \text{spinunabhängig}$$

Interpretation der Spektraldichte

$$A(\omega) = (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_0) + \langle n_{-\sigma} \rangle \delta(\omega + \mu - \varepsilon_0 - U)$$

- Ein-Elektronen-Spektraldichte:
Photoemission (PES), inverse Photoemission (IPE)

allgemein ist:

$$I_R(\omega) = \frac{e^{\beta\omega}}{e^{\beta\omega} - \bar{\varepsilon}} S_{RR^\dagger}(\omega) \quad \text{und} \quad I_{R^\dagger}(-\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - \bar{\varepsilon}} S_{RR^\dagger}(\omega)$$

hier: ($R = c^\dagger$, Fermionen)

$$I_{\text{IPE}}(\omega) = \frac{e^{\beta\omega}}{e^{\beta\omega} + 1} A(\omega) \quad \text{und} \quad I_{\text{PES}}(-\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} A(\omega)$$

für $T = 0$:

$$I_{\text{IPE}}(\omega) = \Theta(\omega)A(\omega) \quad \text{und} \quad I_{\text{PES}}(\omega) = \Theta(\omega)A(-\omega)$$

also:

$\omega > 0$: IPE-Spektrum und $\omega < 0$: PES-Spektrum

- $\mu < \varepsilon_0$
 - $\langle n_{-\sigma} \rangle = 0$
 - $A(\omega) = \delta(\omega + \mu - \varepsilon_0) \quad \omega = \varepsilon_0 - \mu > 0$
 - nur IPE-Spektrum
- $\mu > \varepsilon_0 + U$
 - $\langle n_{-\sigma} \rangle = 1$
 - $A(\omega) = \delta(\omega + \mu - \varepsilon_0 - U) \quad \omega = \varepsilon_0 - \mu + U < 0$
 - nur PES-Spektrum
- $\varepsilon_0 < \mu < \varepsilon_0 + U$
 - $\langle n_{-\sigma} \rangle = 1/2$
 - $A(\omega) = (1/2)\delta(\omega + \mu - \varepsilon_0) + (1/2)\delta(\omega + \mu - \varepsilon_0 - U)$
 - IPE- und PES-Spektrum

Berechnung der Selbstenergie:

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega) &= G^{(0)}(\omega)^{-1} - G(\omega)^{-1} \\ &= \omega + \mu - \varepsilon_0 - \left(\frac{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - \varepsilon_0} + \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - \varepsilon_0 - U} \right)^{-1} \end{aligned}$$

nach kurzer Rechnung:

$$\boxed{\Sigma(\omega) = U\langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{U^2\langle n_{-\sigma} \rangle(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{\omega + \mu - \varepsilon_0 - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}}$$

Der erste Term ist die Hartree-Fock-Selbstenergie. Der zweite Term ist von der Ordnung $\mathcal{O}(1/\omega)$. Der Imaginärteil der retardierten Selbstenergie ist, bis auf den Faktor $-1/\pi$, eine Delta-Funktion: $\delta(\omega + \mu - \varepsilon_0 - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle))$. Eine retardierte Selbstenergie, deren Imaginärteil aus einer endlichen Anzahl von Delta-Peaks besteht, ist typisch für endliche Systeme. Fermi-Flüssigkeitsverhalten, d.h. $\text{Im}\Sigma(\omega + i0^+) \propto \omega^2$ kann sich erst im thermodynamischen Limes ergeben.

6.2 Hubbard-I-Näherung und Mott-Isolator

Die Einfachheit der Rechnung für das atomare Problem verführt zu einer einfachen Näherung für das entsprechende Gitter-Modell.

Idee der **Hubbard-I-Näherung**:

- freie ($U = 0$) Ein-Teilchen-Green-Funktion des Hubbard-Modells:

$$\mathbf{G}^{(0)}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \mathbf{t}}$$

- volle Green-Funktion: $\mathbf{G}(\omega)$ gegeben mittels Dyson-Gleichung:
 $\mathbf{G}(\omega) = \mathbf{G}^{(0)}(\omega) + \mathbf{G}^{(0)}(\omega)\Sigma(\omega)\mathbf{G}(\omega)$

- Approximation: $\boxed{\Sigma(\omega) \approx \Sigma_{\text{atom.}}(\omega)}$

$$\Sigma_{\text{atom.,ij}}(\omega) = \delta_{ij}\Sigma_{\text{atom.}}(\omega)$$

$$\Sigma_{\text{atom.}}(\omega) = U\langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{U^2\langle n_{-\sigma} \rangle(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{\omega + \mu - \varepsilon_0 - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}$$

wobei $\varepsilon_0 = t_{ii}$

- selbstkonsistente Bestimmung von $\langle n_{-\sigma} \rangle$:

$$\langle n_{-\sigma} \rangle = -\frac{1}{\pi} \int f(\omega) \text{Im}G_{ii}(\omega + i0^+)$$

mit $G_{ii}(\omega) = (\mathbf{G}(\omega))_{ii}$

Es fragt sich natürlich, wie eine solche Näherung zu rechtfertigen ist. Antwort: Die Hubbard-I-Näherung kann als erster Schritt in einem systematischen Verfahren verstanden werden, das letztlich zur exakten Lösung für $\mathbf{G}(\omega)$ konvergieren muss.

Idee der **Cluster-Störungstheorie**:

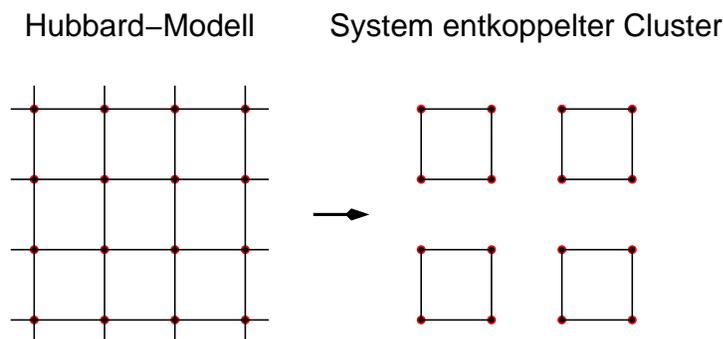
Verallgemeinerung der Hubbard-I-Näherung für endliche Cluster:

$$\mathbf{G}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{G}^{(0)}(\omega)^{-1} - \Sigma(\omega)}$$

mit

$$\Sigma(\omega) \approx \Sigma_{\text{cluster}}(\omega)$$

$\Sigma_{\text{cluster}}(\omega)$ ist die Selbstenergie eines Systems entkoppelter Cluster:



$\Sigma_{\text{cluster}}(\omega)$ kann exakt berechnet werden:

$$\Sigma_{\text{cluster}}(\omega) = \mathbf{G}_{\text{cluster}}^{(0)}(\omega)^{-1} - \mathbf{G}_{\text{cluster}}(\omega)^{-1}$$

Es versteht sich, dass $\mathbf{G}_{\text{cluster}}^{(0)}(\omega)$, bzw. $\mathbf{G}_{\text{cluster}}(\omega)$ für ein endliches (und nicht zu großes) System exakt aus der Lehmann-Darstellung berechenbar sind, wenn nötig mit numerischer Bestimmung der Eigenenergien und Eigenzustände des einzelnen Clusters.

Hubbard-Modell: $H = H_0(\mathbf{t}) + H_1(\mathbf{U})$

Cluster-System: $H' = H_0(\mathbf{t}') + H_1(\mathbf{U})$ mit $\mathbf{t}' = \mathbf{t} - \mathbf{V}$, \mathbf{V} : Inter-Cluster-Hopping

einsetzen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{G}(\omega) &= \frac{1}{\mathbf{G}^{(0)}(\omega)^{-1} - \mathbf{G}_{\text{cluster}}^{(0)}(\omega)^{-1} + \mathbf{G}_{\text{cluster}}(\omega)^{-1}} \\
&= \frac{1}{\omega + \mu - \mathbf{t} - (\omega + \mu - \mathbf{t}') + \mathbf{G}_{\text{cluster}}(\omega)^{-1}} \\
&= \frac{1}{\mathbf{G}_{\text{cluster}}(\omega)^{-1} - \mathbf{t} + \mathbf{t}'}
\end{aligned}$$

also:

$$\boxed{\mathbf{G}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{G}_{\text{cluster}}(\omega)^{-1} - \mathbf{V}}}$$

→ korrekt im Limes großer Cluster $N_c \rightarrow \infty$ (N_c : Anzahl Plätze pro Cluster)

→ $N_c = 1$: Hubbard-I-Näherung

Ein Nachteil des Verfahrens ist, dass offensichtlich (für $N_c \neq 1$ und $N_c \neq \infty$) die Translationssymmetrie der Green-Funktion durch die Näherung gebrochen wird. Denkbar sind aber Verfahren, die direkt im reziproken Raum arbeiten. Offen ist weiterhin, wie das Verfahren (außer für $N_c = 1$) selbstkonsistent gemacht werden kann. Dies ist wichtig, um z.B. magnetische Ordnung beschreiben zu können. Ohne Selbstkonsistenz können magnetische Phasen nicht erfasst werden, da $\mathbf{G}(\omega)$ aus der Cluster-Green-Funktion für $N_c < \infty$ konstruiert wird, und für $N_c < \infty$ keine spontane Symmetriebrechung möglich ist.

Diskussion für $N_c = 1$:

mit der Hubbard-I-Näherung ist:

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \Sigma_{ij}(\omega) = \Sigma_{\text{atom.}}(\omega)$$

→ \mathbf{k} -unabhängige Selbstenergie in dieser Näherung

$$\begin{aligned}
G_{\mathbf{k}}(\omega) &= \frac{1}{G_{\mathbf{k}}^{(0)-1} - \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)} \\
&= \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - U\langle n_{-\sigma} \rangle - \frac{U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{\omega + \mu - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}}
\end{aligned}$$

(mit $\varepsilon_0 = t_{ii} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) = 0$ durch Wahl des Energie-Nullpunkts)

mit Partialbruchzerlegung folgt:

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{\alpha_1(\mathbf{k})}{\omega - \omega_1(\mathbf{k})} + \frac{\alpha_2(\mathbf{k})}{\omega - \omega_2(\mathbf{k})}$$

mit

$$\omega_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(U + \varepsilon(\mathbf{k})) \mp \sqrt{\frac{1}{4}(U - \varepsilon(\mathbf{k}))^2 + U\langle n_{-\sigma} \rangle \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}$$

$$\alpha_{1,2}(\mathbf{k}) = \mp \frac{\omega_{1,2}(\mathbf{k}) - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{\omega_2(\mathbf{k}) - \omega_1(\mathbf{k})}$$

beachte: exaktes Resultat für Grenzfälle:

$U = 0$ (Band-Limes) und $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 = 0$ (atomarer Limes)
und $\langle n_{-\sigma} \rangle = 0$ $\langle n_{-\sigma} \rangle = 1$

vereinfachte Diskussion für $U \rightarrow \infty$:

$$\omega_1(\mathbf{k}) = (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$$

$$\omega_2(\mathbf{k}) = U + \langle n_{-\sigma} \rangle\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$$

$$\alpha_1(\mathbf{k}) = 1 - \langle n_{-\sigma} \rangle = 1 - \alpha_2(\mathbf{k})$$

also:

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)\varepsilon(\mathbf{k})} + \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega + \mu - \langle n_{-\sigma} \rangle\varepsilon(\mathbf{k}) + U}$$

lokale Spektraldichte:

$$A_{ii}(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}(\omega) = \int dz \rho_0(z) A_z(\omega)$$

$$\text{wobei } \rho_0(z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \delta(z - \varepsilon(\mathbf{k}))$$

... denn die \mathbf{k} -Abhängigkeit von $A_{\mathbf{k}}(\omega)$ ist nur mittels $z = \varepsilon(\mathbf{k})$ gegeben.

also:

$$A_{ii}(\omega) = \int dz \rho_0(z) (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \delta(\omega + \mu - (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)z)$$

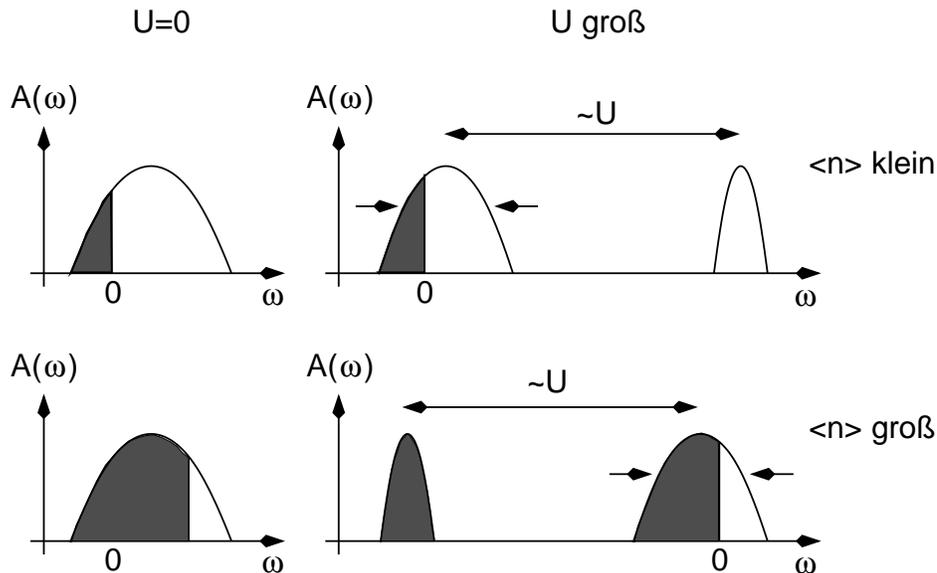
$$+ \int dz \rho_0(z) \langle n_{-\sigma} \rangle \delta(\omega + \mu - \langle n_{-\sigma} \rangle z + U)$$

und somit:

$$A_{ii}(\omega) = \int dz \rho_0(z) \left[\delta \left(z - \frac{\omega + \mu}{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle} \right) + \delta \left(z - \frac{\omega + \mu - U}{\langle n_{-\sigma} \rangle} \right) \right]$$

also:

$$A_{ii}(\omega) = \rho_0 \left(\frac{\omega + \mu}{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle} \right) + \rho_0 \left(\frac{\omega + \mu - U}{\langle n_{-\sigma} \rangle} \right)$$



Viel-Teilchen-Effekte:

- **band-narrowing**
- **Satellit** → oberes und unteres “Hubbard-Band”
- **füllungsabhängige Zustanddichte** “spectral-weight transfer”
- **temperaturabhängige Zustanddichte** (via $\langle n_{-\sigma} \rangle$)
- **korrelationsinduzierter Mott-Isolator bei Halfüllung**

$\langle n_{-\sigma} \rangle = 1/2$ für $\mu = U/2$ →

$$A_{ii}(\omega) = \rho_0 \left(\frac{\omega + U/2}{1/2} \right) + \rho_0 \left(\frac{\omega - U/2}{1/2} \right) = 0 \quad \text{für } \omega = 0$$

$\langle n_{-\sigma} \rangle = 0, \langle n_{-\sigma} \rangle = 1$: Band-Isolator

$\langle n_{-\sigma} \rangle = 1/2$: Mott-Isolator

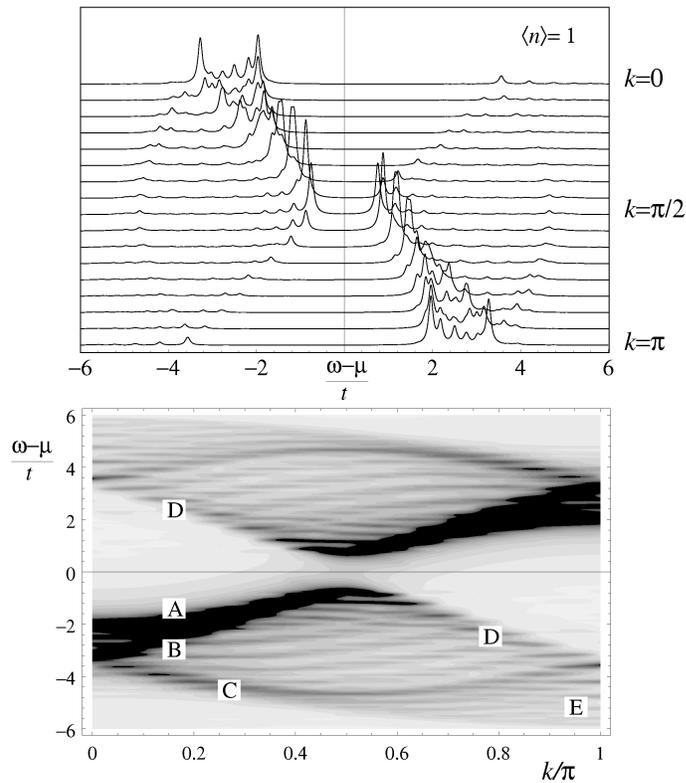
Dies ist eine qualitativ korrekte Vorhersage der Hubbard-I-Näherung, die in besseren Approximationen bestätigt werden kann. Ein Defekt der Näherung ist aber, dass der Mott-isolierende Zustand bei Halbfüllung für alle U , also insbesondere für kleine $U \neq 0$ bestehen bleibt. Plausibler ist, dass es einen kritischen Wert $U_c > 0$ gibt, an dem der Übergang zum Metall stattfindet. Die Hubbard-I-Näherung liefert (fälschlicherweise) $U_c = 0$.

Resultate der Cluster-Störungstheorie:

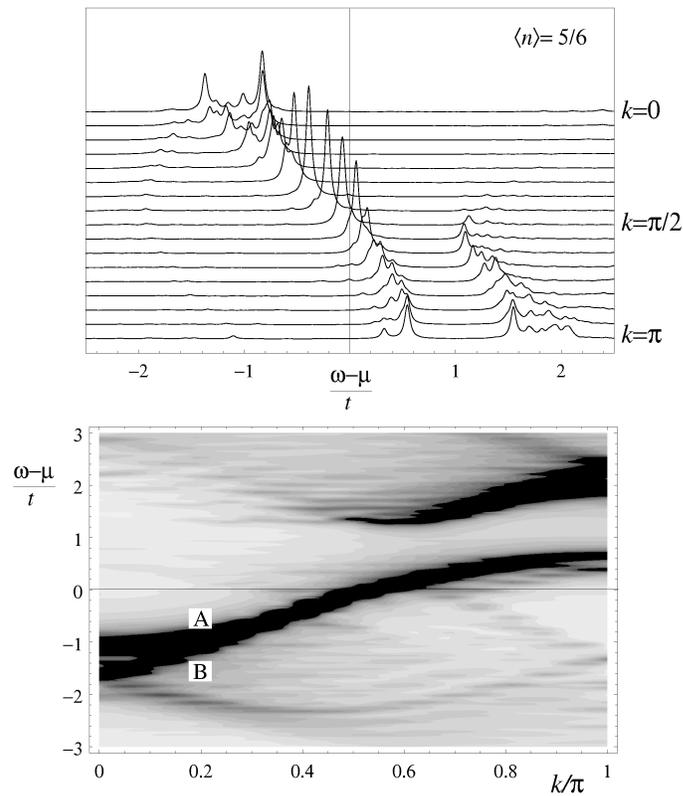
(D. Senechal, D. Perez, M. Pioro-Ladriere, Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 522)

Hubbard-Modell, $D = 1$, n.n.-Hopping t , $U = 4t$, $N_c = 12$

$n = 1$:



$n = 5/6$:



- $n = 1$: Mott-Isolator, $n \neq 1$: Metall
- freie Dispersion: $\varepsilon(k) = -2t \cos k$
- A: Spinon, B: Holon (D: Spiegelband), C: Hubbard-Band (kein LL-Feature!)