

Vielteilchentheorie

© C. Timm

Technische Universität Dresden, Institut für Theoretische Physik

Wintersemester 2020/21

Stand 25. November 2025

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
1.1	Wozu Vielteilchentheorie?	4
1.2	Vielteilchensysteme, Emergenz und Universalität	5
1.3	Überblick	6
1.4	Danksagung	7
2	Einführung in die Quantenfeldtheorie	8
2.1	Lineare Kette	8
2.2	Quantenmechanik der linearen Kette	11
2.3	Erste Quantisierung	13
2.3.1	Einteilchensysteme	13
2.3.2	Vielteilchensysteme	15
2.3.3	Ununterscheidbarkeit	16
2.4	Zweite Quantisierung	19
2.4.1	Bosonen	20
2.4.2	Fermionen	21
2.4.3	Operatoren in zweiter Quantisierung	23
2.4.4	Quantenfeldoperatoren	24
2.4.5	Impulsdarstellung	25
2.5	Relativistisches skalares Feld	26
2.5.1	Klein-Gordon-Gleichung	26
2.5.2	Quantisierung des relativistischen skalaren Feldes	27
2.6	Komplexes skalares Feld	31
2.7	Feynman-Propagator	33
2.8	ϕ^4 -Theorie	36
2.9	Dirac-Feld	36
2.9.1	Erinnerung an die Dirac-Gleichung	36
2.9.2	Dirac-Feldtheorie	39
2.9.3	Feynman-Propagator für das Dirac-Feld	41
2.10	Elektromagnetismus	41
2.10.1	Vierervektor-Notation	43
2.10.2	Quantentheorie des Elektromagnetismus	44
2.10.3	Transversaler Propagator	47
2.10.4	Impuls und Spin	48
2.11	Quantenelektrodynamik (QED)	50
3	Vielteilchentheorie bei der Temperatur Null	53
3.1	Wechselwirkungsfreie Elektronen	53
3.1.1	Tight-Binding-Modelle	60
3.1.2	Thermodynamischer Limes für Summen im reziproken Raum	62
3.2	Elektron-Elektron-Wechselwirkung	62
3.2.1	Störungstheorie für die Coulomb-Wechselwirkung	65
3.3	Gitterschwingungen und Phononen	70
3.4	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	72

3.5	Zeitabhängige Störungstheorie	76
3.5.1	Bildwechsel in der Quantentheorie	76
3.5.2	Fermis Goldene Regel	79
3.5.3	Verallgemeinerung auf die T -Matrix	81
3.6	Green-Funktionen bei $T = 0$	82
3.6.1	Green-Funktionen für die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung	82
3.6.2	Einteilchen-Green-Funktionen für Vielteilchensysteme	85
3.6.3	Die Spektralfunktion	90
3.7	Bewegungsgleichungen für die Green-Funktion	94
3.7.1	Wechselwirkungsfreier Fall	96
3.7.2	Resonantes Niveau (resonant-level model)	96
3.7.3	Anderson-Modell für eine magnetische Störstelle	99
4	Vielteilchentheorie bei endlichen Temperaturen	102
4.1	Wechselwirkungsfreie Teilchen	102
4.2	Mean-Field-Theorie	103
4.2.1	Hartree-Fock-Näherung	105
4.2.2	Stoner-Theorie des Ferromagnetismus in Metallen	107
4.3	Lineare-Antwort-Theorie	110
4.3.1	Kubo-Formel für die dielektrische Funktion	113
4.3.2	Bewegungsgleichungen für Lineare-Antwort-Funktionen	115
4.3.3	Kubo-Formel für die Leitfähigkeit	117
4.4	Matsubara-Green-Funktionen	119
4.4.1	Imaginäre-Zeit-Formalismus	120
4.4.2	Einteilchen-Matsubara-Green-Funktionen	125
4.4.3	Rechnungen mit Matsubara-Green-Funktionen	126
	(a) Isolierte Singularitäten	126
	(b) Schnitte	128
4.4.4	Bewegungsgleichungen	130
4.5	Das Wick-Theorem	131
4.6	Potentialstreuung	133
4.6.1	Feynman-Diagramme	134
4.6.2	Elastische Streuung	135
4.6.3	Störstellenstreuung	136
4.6.4	Selbstenergie	141
4.6.5	Bornsche Näherungen	142
	(a) Die vollständige Bornsche Näherung	144
	(b) Die selbstkonsistente Bornsche Näherung	144
4.6.6	Leitfähigkeit	145
4.7	Elektron-Elektron-Wechselwirkung	149
4.7.1	Selbstenergie	152
4.7.2	Die Hartree-Selbstenergie	153
4.7.3	Die Fock-Selbstenergie	154
4.8	Das wechselwirkende Elektronengas und die RPA	154
4.8.1	Jenseits von RPA: Eliashberg-Theorie	159
4.9	Landau-Theorie der Fermi-Flüssigkeiten	160
4.10	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	161
4.10.1	Jellium-Phononen	163
4.10.2	Coulomb- und Elektron-Phonon-Wechselwirkung zusammengefasst	164
4.10.3	Abschirmung der effektiven Wechselwirkung	164
4.11	Supraleitung	166
4.11.1	Cooper-Instabilität	166
4.11.2	Der BCS-Grundzustand	169
4.11.3	BCS-Theorie	170
4.11.4	Der Isotopeneffekt	174

5	Dichtefunktionaltheorie	175
5.1	Die Hohenberg-Kohn-Theoreme	175
5.1.1	Das erste Hohenberg-Kohn-Theorem	176
5.1.2	Das zweite Hohenberg-Kohn-Theorem	177
5.2	Die Kohn-Sham-Gleichung	178
5.3	Lokale-Dichte-Näherung	179
5.4	Zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie	180
6	Diffusion und die Boltzmann-Gleichung	182
6.1	Brownsche Bewegung und Diffusion	182
6.2	Die Langevin-Gleichung	183
6.3	Die Boltzmann-Gleichung	185
6.3.1	Relaxationszeitansatz	186
6.3.2	Wigner-Funktion und Quanten-Boltzmann-Gleichung	186
A	Literatur	190

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Wozu Vielteilchentheorie?

Es ist nicht zu bestreiten, dass die Welt um uns herum aus vielen Teilchen besteht. Was bedeutet „viel“ in diesem Zusammenhang? Ein Mol einer Substanz ist typischerweise eine alltägliche Menge. Ein Mol enthält bekanntlich $N_L \approx 6,022 \times 10^{23}$ Atome oder Moleküle. Diese Loschmidt-oder Avogadro-Zahl gibt an, was wir hier mit „vielen Teilchen“ meinen. Die Atome und Moleküle bestehen ihrerseits aus Atomkernen und Elektronen.

Wir wollen verstehen, wie sich Systeme aus vielen Teilchen verhalten. Wie üblich in der Physik betrachten wir zunächst relativ einfache Systeme, z. B. saubere Kristalle. Selbst diese sind aber nicht *einfach*. Dazu ein Beispiel:

Wir betrachten ein System bestehend aus $N \approx N_L$ schweren Teilchen mit Ladung $+6e$ und Spin Null und $6N$ leichten Teilchen mit der Ladung $-e$ und Spin $1/2$. Wir lassen diese Teilchen bei einer bestimmten Temperatur T und einem bestimmten Druck p ins Gleichgewicht kommen, d. h. wir warten lange genug. Das System ist einfach in dem Sinne, dass es nur aus zwei Arten von Teilchen besteht, die jeweils ununterscheidbar und nur durch drei Größen charakterisiert sind: Masse, Ladung und Spin. Das lässt vermuten, dass wir die Eigenschaften des Systems im Gleichgewicht voraussagen können sollten. Wir haben es hier natürlich mit einem Modell für Kohlenstoff zu tun: N Kohlenstoff-12-Kerne und $6N$ Elektronen. Die innere Struktur der Kerne ist hier unerheblich, es sind für uns einfach Teilchen mit der Ladung $+6e$ und der Masse $12u$. Abhängig von p und T ist es entweder Graphit (geschichteter hexagonaler Kristall, weich, schlechtes Metall, opak) oder Diamant (kubischer Kristall, sehr hart, Isolator, durchsichtig). Es treten noch weitere langlebige, aber vermutlich metastabile, Phasen auf, z. B. Fullerene und Nanoröhren. War diese Vielfalt von Modifikationen vorauszusehen? Was passiert, wenn wir stattdessen N schwere Teilchen der Ladung $+7e$ und $7N$ leichte Teilchen der Ladung $-e$ haben?

Offenbar ergeben sich für Systeme mit vielen Teilchen neue Effekte, die aus den Eigenschaften der Konstituenten nicht unmittelbar abzulesen sind, obwohl sie aus diesen folgen. Das Ganze ist in diesem Sinne mehr als die Summe seiner Teile. Dieses Phänomen bezeichnet man als *Emergenz*.

Wir wollen solche Systeme aus vielen Teilchen verstehen. Das führt auf eine zweite Frage: Benötigen wir dafür neue Werkzeuge? Reichen die bisher betrachteten Methoden, v. a. der Quantenmechanik, nicht aus?

In der Physik der kondensierten Materie kennen wir, anders als in der Hochenergiephysik, den Hamiltonian genau, jedenfalls in der für die allermeisten Eigenschaften relevanten Vereinfachung. Er lautet für das Beispiel von Kohlenstoff-12

$$H = \frac{1}{2M_{12}} \sum_{i=1}^N P_i^2 + \frac{1}{2m_e} \sum_{j=1}^{6N} p_j^2 + \frac{(6e)^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ii', i < i'} \frac{1}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i'}|}$$

$$+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{jj', j < j'} \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}|} - \frac{6e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{ij} \frac{1}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (1.1)$$

in einer offensichtlichen Notation für die Orte und Impulse der Kerne und der Elektronen. Das elektromagnetische Feld über die Coulomb-Wechselwirkung hinaus wurde hier vernachlässigt, ebenso wie relativistische Effekte, z. B. die Spin-Bahn-Kopplung. Um zu sehen, ob wir ein Vielteilchensystem mit den Methoden der Quantenmechanik lösen können, untersuchen wir ein einfacheres Vielteilchensystem:

Wir betrachten ein Schachbrett (8×8 Plätze) mit einem elektronischen Orbital auf jedem Feld. Welche Zustände eines einzelnen Feldes sind dann möglich? Auf jedem Feld kann entweder kein Elektron sitzen oder eines mit Spin auf oder eines mit Spin ab oder zwei mit Spins auf und ab. Wir können diese Zustände schreiben als $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$. Andere Konfigurationen sind durch das Pauli-Prinzip für Fermionen ausgeschlossen. Wieviele Zustände hat also das Gesamtsystem? Antwort: Das Schachbrett-Modell hat $4^{64} = 2^{128} \approx 3,4 \times 10^{38}$ Zustände, d. h. der Hilbertraum hat 2^{128} Dimensionen. Das ist eine große Zahl! Den Hamilton-Operator kann man als Matrix der Dimension $2^{128} \times 2^{128}$ schreiben – oder auch nicht, weil man nicht genug Papier und Zeit dafür hat. Um die Eigenzustände des Systems zu erhalten, müssten wir diese Matrix diagonalisieren. Das ist unmöglich.

Das Schachbrett ist ein sehr bescheidenes Modell für ein Vielteilchensystem und dennoch i. A. viel zu groß für eine exakte Lösung. Wir werden sehen, dass man in manchen Fällen solche Systeme dennoch exakt diagonalisieren kann, z. B. wenn die Elektronen nicht wechselwirken (ziemlich einfach) oder in einer eindimensionalen Kette mit nur lokaler Wechselwirkung (schwierig). Da dies offensichtlich nicht mit roher Gewalt erfolgen kann, erfordert die Lösung Einsicht in die Physik des Systems. In den allermeisten Fällen können wir aber keine exakte Lösung finden. Wir benötigen also Methoden, die

1. Näherungen beinhalten und
2. es vermeiden, alle Zustände des Systems explizit behandeln zu müssen.

Der zweite Punkt macht klar, dass wir Konzepte aus der Thermodynamik und Statistischen Physik benötigen werden.

Es stellt sich heraus, dass Methoden der Quantenfeldtheorie, die überwiegend zur Beschreibung von Elementarteilchen entwickelt wurde, auch für Vielteilchensysteme sehr nützlich sind. (Dass das kein Zufall ist, wird kurz im folgenden Abschnitt diskutiert.) Im nächsten Kapitel folgt daher eine Einführung in die Quantenfeldtheorie.

1.2 Vielteilchensysteme, Emergenz und Universalität

Wir wollen das Thema „Das Ganze ist mehr als die Summe seiner Teile“ (Emergenz) noch etwas weiter diskutieren, in Anlehnung an das in der Literaturliste angegebene Buch von X.-G. Wen. Wir betrachten einen Kristall, sagen wir Diamant, bei niedrigen und bei hohen Energien.

Ein Experiment bei *hohen* Energien, z. B. Beschuss der Probe mit schnellen Ionen, wird Atome aus dem Kristall herausbrechen. Dafür sind offenbar die Bindungen zwischen den Atomen, also Physik auf atomaren Längenskalen, entscheidend. Bei Streuung hochenergetischer elektromagnetischer (Röntgen-) Strahlung bleibt der Kristall intakt, aber die Strahlung „sieht“ das Kristallgitter, da die Wellenlänge kürzer ist als der atomare Abstand. Die Röntgen-Strahlung wird am Gitter gestreut. Eigenschaften auf atomarer Skala sind wiederum wichtig. Diese werden bestimmt von stark miteinander wechselwirkenden Atomkernen und Elektronen und sind kompliziert und systemabhängig.

Ganz anders bei niedrigen Energien oder niedrigen Temperaturen. Die einzigen Anregungen von Diamant bei niedrigen Temperaturen sind Gitterschwingungen des Kristalls. Es zeigt sich, dass diese quantisiert sind; die Quanten der Gitterschwingungen sind die *Phononen* (in Analogie zu den Quanten des elektromagnetischen Feldes, den *Photonen*). Phononen sind spin-lose (*skalare*) Bosonen (siehe unten) mit, bei niedrigen Energien, linearer Energie-Impuls-Relation, $E = c_s |\mathbf{k}|$. Hier ist $\mathbf{k}$ ist der Wellenvektor (wir setzen $\hbar = 1$) und c_s die Schallgeschwindigkeit. Die Wechselwirkung zwischen Phononen ist schwach. Die Physik ist die von freien, relativistischen Bosonen. Sie ist einfach und universell; wenn wir Silizium

oder Schwefel oder (festes) Xenon statt Diamant betrachten, finden wir ebensolche Phononen, nur c_s ist systemabhängig. Ähnliche Universalitäten beobachtet man z. B. für die niederenergetischen Anregungen von magnetisch geordneten Festkörpern und von Supraleitern.

Die niederenergetischen Phononen sind also einfache kollektive Anregungen eines komplexen Vielteilchensystems. Wen diskutiert die interessante Idee, dass die uns bekannten Elementarteilchen ebenfalls kollektive Anregungen eines komplexen fundamentaleren Systems sind. Wens Hauptbeitrag zu dieser Forschungsrichtung ist, dass er nicht nur skalare Bosonen (wie die Phononen), sondern auch Fermionen und ein elektromagnetisches Feld als kollektive Anregungen erklären kann. Das in diesem Fall zu Grunde liegende System, um dessen kollektive Anregungen es geht, ist ein ziemlich kompliziertes Spin-Gitter. Wichtiger ist der prinzipielle Nachweis, dass die Elementarteilchen kollektive Anregungen sein könnten – und damit nicht elementar.

Für uns wichtig ist die Erkenntnis, dass die Eigenschaften von Vielteilchensystemen bei niedrigen Energien und Temperaturen teilweise universell sind. Wir können daher mit einer einheitlichen Theorie z. B. die Gitterschwingungen *aller* Kristalle beschreiben.

1.3 Überblick

Das vorliegende Skript behandelt folgende Themen:

Einführung in die Quantenfeldtheorie

Es wird zunächst exemplarisch die klassische Feldtheorie der linearen Kette und der schwingenden Saite besprochen. Dann werden wesentliche Ideen der Quantisierung von Feldtheorien vorgestellt, von der linearen Kette fortschreitend über skalare Felder und das Dirac-Feld zum elektromagnetischen Feld. Dieser Abschnitt endet mit der Behandlung von Grundlagen der Quantenelektrodynamik (QED). Als Literatur ist z. B. Huangs Buch zu empfehlen.

Vielteilchentheorie bei der Temperatur Null

Dieses Kapitel behandelt Vielteilchentheorie für Festkörper, zunächst im Grundzustand, also bei der Temperatur $T = 0$. Die wichtige Methode der Green-Funktionen wird für diesen Fall eingeführt, sie stellt sich aber später als viel allgemeiner heraus. Als Literatur sind die Bücher von Bruus/Flensberg, Mahan und Nolting zu empfehlen.

Vielteilchentheorie bei endlichen Temperaturen

Hier gehen wir zu Systemen bei Temperaturen $T > 0$ über, in denen thermische Anregungen vorhanden sind. Dies wird der umfangreichste Abschnitt sein. Wir werden zunächst Vielteilchen-System im Gleichgewicht bei einer bestimmten Temperatur diskutieren. Mit der Behandlung von Transportphänomenen gehen wir dann konzeptionell über die Gleichgewichtsphysik hinaus. Allerdings beschränken wir uns auf Transport in schwachen angelegten Feldern, dann ist die „Antwort“ des Systems linear und kann aus den Gleichgewichtseigenschaften bestimmt werden. Die Lehrbücher von Bruus/Flensberg, Mahan und Nolting sind auch für diesen Abschnitt geeignet.

Dichtefunktionaltheorie

Hier wird kurz eine komplementäre Herangehensweise an das Vielteilchenproblem diskutiert.

Diffusion und die Boltzmann-Gleichung

Dieses kurze Kapitel verknüpft Vielteilchentheorie und Statistische Physik außerhalb des Gleichgewichts. Hauptsächlich wird dies anhand der Boltzmann-Transportgleichung durchgeführt.

1.4 Danksagung

Ich möchte Herrn Konrad Schmidt herzlich für die Erstellung der LaTeX-Datei und der Bilder für die erste Version (2008/09) dieses Skripts danken. Weiterhin danke ich Herrn André Dankert für den Hinweis auf mehrere Fehler.

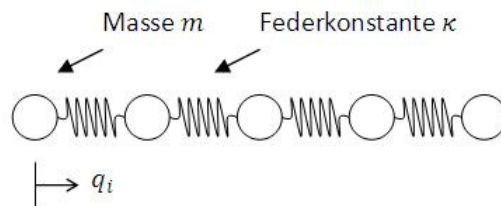
Kapitel 2

Einführung in die Quantenfeldtheorie

Zunächst betrachten wir klassische Feldtheorien, also Theorien für die Dynamik von Feldern. Ein Feld ist ganz allgemein eine Funktion des Ortes $\mathbf{r}$ und oft auch der Zeit t . Beispiele sind die Temperatur (ein skalarfeld), und das elektrische Feld (ein Vektorfeld).

2.1 Lineare Kette

Wir betrachten als einfaches Beispiel die lineare Kette.



Die Teilchen haben die Masse m , die Federn besitzen die Federkonstante κ . Wir betrachten nur Schwingungen in einer Raumrichtung, z. B. entlang der Kette (longitudinal) oder in einer der beiden möglichen Richtungen senkrecht dazu (transversal). Wie in der klassischen Mechanik wählen wir für die Beschreibung den Lagrange-Formalismus, da dieser auch in der QFT wichtig ist,

$$L = \sum_i \left[\frac{1}{2} m \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2} \kappa (q_{i+1} - q_i)^2 \right], \quad (2.1)$$

wobei q_i die eindimensionale Auslenkung von Teilchen i ist. Periodische Randbedingungen sind sinnvoll, da für große Systeme Randeffekte i. A. irrelevant sind. Sie ergeben

$$q_{i+N} = q_i \quad \forall i. \quad (2.2)$$

Die Euler-Lagrange-Gleichung für q_j lautet

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 \quad (2.3)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} m \dot{q}_j + \kappa (q_j - q_{j-1}) + \kappa (q_j - q_{j+1}) = 0 \quad (2.4)$$

$$\Rightarrow \ddot{q}_j = -\frac{\kappa}{m} (q_j - q_{j-1}) - \frac{\kappa}{m} (q_j - q_{j+1}) \quad (2.5)$$

$$\Rightarrow \ddot{q}_j = \frac{\kappa}{m} (q_{j+1} + q_{j-1} - 2q_j). \quad (2.6)$$

Die Lösung erfolgt mit Hilfe einer Fourier-Reihe, da das System periodisch ist:

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p Q(p) e^{ipj}. \quad (2.7)$$

Um herauszufinden, welche Werte von p die Summe enthält, betrachten wir die Randbedingung $q_{j+N} = q_j$. Daraus folgt

$$e^{ip(j+N)} = e^{ipj} \quad (2.8)$$

$$\Rightarrow e^{ipN} = 1 \Rightarrow pN = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.9)$$

$$\Rightarrow p = \frac{2\pi n}{N}. \quad (2.10)$$

Weiter ist q_j diskret, daher ist die Fourier-Transformierte $Q(p)$ periodisch:

$$e^{i(p+2\pi)j} = e^{ipj} \underbrace{e^{i2\pi j}}_{=1} = e^{ipj} \quad (2.11)$$

ergibt keine neuen Lösungen, daher können wir p auf $]-\pi, \pi]$, die 1. Brillouin-Zone der Kette, beschränken. Also gilt

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{n=-\frac{N}{2}+1 \\ (N \text{ gerade})}}^{\frac{N}{2}} Q_n e^{i\frac{2\pi n}{N}j} \quad \text{mit} \quad Q_n := Q(2\pi n/N). \quad (2.12)$$

Einsetzen in die Bewegungsgleichung ergibt

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \ddot{Q}_n e^{i\frac{2\pi n}{N}j} = \frac{\kappa}{m} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n Q_n e^{i\frac{2\pi n}{N}j} \left(e^{i\frac{2\pi n}{N}j} + e^{-i\frac{2\pi n}{N}j} - 2 \right) \quad (2.13)$$

für alle j . Wegen der linearen Unabhängigkeit der Exponentialfunktionen für verschiedene n gilt also für jeden Term der Reihe

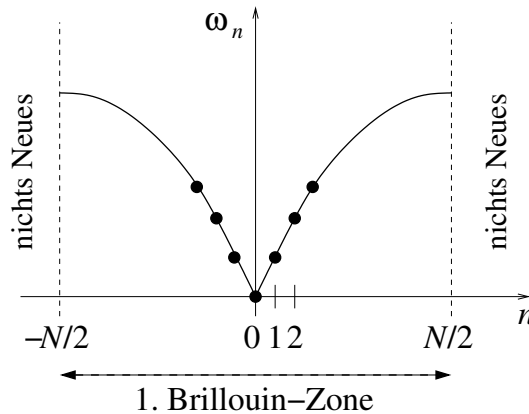
$$\ddot{Q}_n = \frac{\kappa}{m} \left(e^{i\frac{2\pi n}{N}j} + e^{-i\frac{2\pi n}{N}j} - 2 \right) Q_n = \frac{2\kappa}{m} \left(\cos \frac{2\pi n}{N} - 1 \right) Q_n = -\frac{4\kappa}{m} \sin^2 \frac{\pi n}{N} Q_n. \quad (2.14)$$

Wir erhalten entkoppelte Gleichungen für die Eigenmoden $Q_n(t)$. Die Lösung erfolgt durch den Ansatz $Q_n = e^{-i\omega t}$,

$$\Rightarrow -\omega^2 Q_n = -\frac{4\kappa}{m} \sin^2 \frac{\pi n}{N} Q_n \quad (2.15)$$

$$\Rightarrow \omega = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin \frac{\pi n}{N} \right| =: \omega_n. \quad (2.16)$$

Die ω_n sind die *Eigenfrequenzen*. Der Ansatz funktioniert offenbar. Die Dispersionsrelation für ω_n ist hier skizziert:



Die physikalischen Eigenmoden sind reell,

$$\operatorname{Re} \exp \left(i \frac{2\pi n}{N} j - i\omega t \right) = \cos \left(\frac{2\pi n}{N} j - \omega t \right), \quad (2.17)$$

$$\operatorname{Im} \exp \left(i \frac{2\pi n}{N} j - i\omega t \right) = \sin \left(\frac{2\pi n}{N} j - \omega t \right). \quad (2.18)$$

Wenn wir die Gitterkonstante a der Kette einführen, können wir den Ort entlang der Kette mit $x = ja$ bezeichnen. Dann sehen wir, dass die Wellenzahl

$$k = \frac{2\pi n}{Na} \quad (2.19)$$

lautet. Die Eigenmoden sind dann einfach $\cos(kx - \omega t)$ und $\sin(kx - \omega t)$ und die Dispersionsrelation lautet nach Gl. (2.16)

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|. \quad (2.20)$$

Da wir in diesem Kapitel Feldtheorien untersuchen wollen, ist es sinnvoll, zum Kontinuums-Limes überzugehen. Die lineare Kette wird im Kontinuums-Limes zur schwingenden Saite. (Die Schwingung realer Saiten ist durch transversale Moden dominiert.) Wir betrachten den Grenzfall $N \rightarrow \infty$ und Gitterkonstante $a \rightarrow 0$, so dass die Gesamtlänge $Na =: R$ konstant bleibt. Sei

$$q(x, t) := q_j(t) \text{ mit } x = ja. \quad (2.21)$$

In der Lagrange-Funktion erhalten wir

$$q_j(t) \rightarrow q(x, t) \quad (2.22)$$

$$\dot{q}_j(t) \rightarrow \dot{q}(x, t) \quad (2.23)$$

$$q_{j+1} - q_j \rightarrow a \frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \quad (2.24)$$

$$\sum_j \dots \rightarrow \frac{1}{a} \int_0^R dx \dots \quad (2.25)$$

(Begründung: Diese Ersetzung soll für jede Funktion gelten, wir setzen $\dots = 1$ und erhalten auf beiden Seiten dasselbe Ergebnis N .) Wir definieren die eindimensionale Massendichte $\varrho := m/a$ und die mechanische Spannung $\sigma := \kappa a$, dann ist

$$L = \frac{1}{2} \int_0^R dx \left[\varrho \left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)^2 - \sigma \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)^2 \right]. \quad (2.26)$$

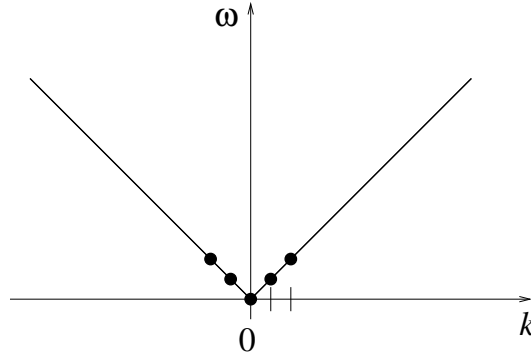
Es folgt die Bewegungsgleichung

$$\varrho \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} - \sigma \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0 \quad (2.27)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} - \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0 \quad \text{mit} \quad c_s := \sqrt{\frac{\sigma}{\varrho}}. \quad (2.28)$$

Das ist die wichtige *Wellengleichung* mit der *Schallgeschwindigkeit* c_s .

In Kürze: Lösungen sind die Eigenmoden $e^{i(kx - \omega t)}$ mit der Frequenz $\omega = c_s |\mathbf{k}|$ und der Wellenzahl $k = 2\pi n/R$ mit $n \in \mathbb{Z}$. Da das System nicht diskret ist, gibt es keine 1. Brillouin-Zone, beliebig große n und k sind erlaubt und beschreiben unabhängige Moden.



Für $n \ll N$, also $k \ll 2\pi/a$, erhalten wir für die *diskrete* lineare Kette nach Gl. (2.20)

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \cong 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \frac{ka}{2} \right| = 2\sqrt{\frac{\sigma}{\varrho a^2}} \left| \frac{ka}{2} \right| = c_s |k|. \quad (2.29)$$

Für kleine k und entsprechend große Wellenlängen $\lambda = 2\pi/k$ verhält sich die lineare Kette also wie eine kontinuierliche Saite. Das ist offensichtlich auch der Grenzfall kleiner Frequenzen ω . Die Theorie der schwingenden Saite ist also die *effektive Theorie* der linearen Kette für kleine Frequenzen, vgl. Abschnitt 1.2. In der Vielteilchentheorie spielt die Konstruktion effektiver Theorien, die gewisse Grenzfälle beschreiben, eine wichtige Rolle.

2.2 Quantenmechanik der linearen Kette

Als nächstes wollen wir zur quantenmechanischen Beschreibung der linearen Kette übergehen. Wir wollen das klassische System also „quantisieren“. Es sei daran erinnert, dass es prinzipiell unmöglich ist, die gesuchte Quantentheorie aus der klassischen Mechanik herzuleiten, da die Quantenmechanik die *allgemeinere* Theorie ist und die klassische Mechanik ihr Grenzfall. Also können verschiedene Quantentheorien denselben klassischen Grenzfall für $\hbar \rightarrow 0$ haben. Welche die richtige ist, kann letztlich nur das Experiment entscheiden. Ein Beispiel ist, dass die Quantisierung in *kartesischen* Koordinaten erfolgen muss. Würden wir sie z.B. in Kugelkoordinaten durchführen, bekämen wir eine widerspruchsfreie Quantentheorie, die aber das Wasserstoff-Atom nicht richtig beschreibt.

Für mechanische Systeme von Massenpunkten wissen wir, dass wir die kartesischen Koordinaten q_j und die zugehörigen kanonisch konjugierten Impulse $p_j = \partial L / \partial \dot{q}_j = m\dot{q}_j$ durch Operatoren ersetzen sollen, die die kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[p_j, q_k] = -i\delta_{jk}, \quad (2.30)$$

$$[p_j, p_k] = 0, \quad (2.31)$$

$$[q_j, q_k] = 0 \quad (2.32)$$

erfüllen (wir setzen hier $\hbar = 1$). Diese „Quantisierungsvorschrift“ ist als Postulat aufzufassen, dass dadurch gerechtfertigt wird, dass die Voraussagen der Theorie mit dem Experiment übereinstimmen.

Aus der Lagrange-Funktion L ergibt sich die – zunächst klassische – Hamilton-Funktion

$$H = \sum_j \left[\frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2} \kappa (q_{j+1} - q_j)^2 \right]. \quad (2.33)$$

Beim Übergang zur Quantenmechanik ersetzen wir q_j , p_j durch Operatoren mit kanonischen Vertauschungsrelationen. Dadurch wird H selbst zum Hamilton-Operator.

In Analogie zur klassischen Theorie Fourier-transformieren wir q_j , p_j : Aus

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n Q_n e^{i \frac{2\pi n}{N} j}, \quad (2.34)$$

$$p_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n P_n e^{i \frac{2\pi n}{N} j} \quad (2.35)$$

folgen die Umkehrtransformationen

$$Q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j q_j e^{-i \frac{2\pi n}{N} j}, \quad (2.36)$$

$$P_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j p_j e^{-i \frac{2\pi n}{N} j}. \quad (2.37)$$

Man kann zeigen, dass Q_n und $P_n^\dagger$ die folgenden Vertauschungsrelationen erfüllen:

$$\begin{aligned} [P_n^\dagger, Q_m] &= \frac{1}{N} \sum_{jk} \underbrace{[p_j^{(\dagger)}, q_k]}_{-i\delta_{jk}} e^{+i \frac{2\pi n}{N} j} e^{-i \frac{2\pi m}{N} j} \\ &= -i \frac{1}{N} \sum_j e^{i \frac{2\pi(n-m)}{N} j} = \frac{i}{N} N \delta_{nm} = -i \delta_{nm}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Man findet auch

$$P_n^\dagger = P_{-n}, \quad (2.39)$$

$$Q_n^\dagger = Q_{-n}. \quad (2.40)$$

Der Hamilton-Operator lautet

$$\begin{aligned} H &= \sum_j \left[\frac{p_j^\dagger p_j}{2m} + \frac{1}{2} \kappa (q_{j+1}^\dagger - q_j^\dagger) (q_{j+1} - q_j) \right] \\ &\quad (\text{da } p_j, q_j \text{ Hermitesch}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n,n'} \sum_j \left[\frac{P_n^\dagger P_{n'}}{2m} e^{-i \frac{2\pi n}{N} j + i \frac{2\pi n'}{N} j} + \frac{1}{2} \kappa Q_n^\dagger Q_{n'} \left(e^{-i \frac{2\pi n}{N} j} e^{-i \frac{2\pi n'}{N} j} - e^{-i \frac{2\pi n}{N} j} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \left(e^{i \frac{2\pi n'}{N} j} e^{i \frac{2\pi n}{N} j} - e^{i \frac{2\pi n'}{N} j} \right) \right] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n,n'} \sum_j \left[\frac{P_n^\dagger P_{n'}}{2m} e^{-i \frac{2\pi(n-n')}{N} j} + \frac{1}{2} \kappa Q_n^\dagger Q_{n'} e^{-i \frac{2\pi(n-n')}{N} j} \left(e^{-i \frac{2\pi(n-n')}{N}} - e^{-i \frac{2\pi n}{N}} - e^{i \frac{2\pi n'}{N}} + 1 \right) \right] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n,n'} N \delta_{nn'} \left[\frac{P_n^\dagger P_{n'}}{2m} + \frac{1}{2} \kappa Q_n^\dagger Q_{n'} \left(2 - e^{i \frac{2\pi n'}{N}} - e^{-i \frac{2\pi n}{N}} \right) \right] \\ &= \sum_n \left[\frac{P_n^\dagger P_n}{2m} + 2\kappa \sin^2 \frac{\pi n}{N} Q_n^\dagger Q_n \right] \\ &= \sum_n \left[\frac{1}{2m} P_n^\dagger P_n + \frac{1}{2} m \omega_n^2 Q_n^\dagger Q_n \right]. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Die durch n abgezählten Moden scheinen nun entkoppelt zu sein. Das stimmt aber noch nicht ganz: wegen Gln. (2.39) und (2.40) sind die Moden für n und $-n$ noch gekoppelt. Wir nutzen diese Relationen aus, wobei wir die Fälle $n = 0$ und $n = N/2$ separat behandeln:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} P_0^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 Q_0^2 + \frac{1}{2m} P_{N/2}^2 + \frac{1}{2} m \omega_{N/2}^2 Q_{N/2}^2 \\ &\quad + \sum_{0 < n < N/2} \left[\frac{1}{2m} P_n^\dagger P_n + \frac{1}{2} m \omega_n^2 Q_n^\dagger Q_n + \frac{1}{2m} P_n P_n^\dagger + \frac{1}{2} m \omega_n^2 Q_n Q_n^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Hier sind Q_0 und P_0 sowie $Q_{N/2}$ und $P_{N/2}$ Hermitesch. Beachte dabei, dass $n = N/2$ und $n = -N/2$ dieselbe Mode bezeichnen. Seien nun

$$\left. \begin{aligned} Q_n &=: \frac{Q_{1,n} + iQ_{2,n}}{\sqrt{2}} \\ P_n &=: \frac{P_{1,n} + iP_{2,n}}{\sqrt{2}} \end{aligned} \right\} \text{ für } 0 < n < \frac{N}{2} \quad (2.43)$$

mit Hermiteschen $Q_{\alpha,n}, P_{\alpha,n}$. Dann gilt

$$Q_{1,n} = \frac{Q_n + Q_n^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad (2.44)$$

$$Q_{2,n} = \frac{Q_n - Q_n^\dagger}{i\sqrt{2}}, \quad (2.45)$$

$$P_{1,n} = \frac{P_n + P_n^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad (2.46)$$

$$P_{2,n} = \frac{P_n - P_n^\dagger}{i\sqrt{2}}. \quad (2.47)$$

Dies entspricht der klassischen Abbildung auf reelle (Sinus- und Kosinus-) Lösungen. Es folgt

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} P_0^2 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 Q_0^2 + \frac{1}{2m} P_{N/2}^2 + \frac{1}{2} m\omega_{N/2}^2 Q_{N/2}^2 \\ &+ \sum_{0 < n < N/2} \left[\frac{1}{2m} (P_{1,n}^2 + P_{2,n}^2) + \frac{1}{2} m\omega_n^2 (Q_{1,n}^2 + Q_{2,n}^2) \right]. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Man zeigt leicht, dass $[P_{\alpha,n}, Q_{\beta,m}] = -i\delta_{\alpha\beta}\delta_{nm}$ für $\alpha, \beta = 1, 2$ und $n, m > 0$. Diese Operatoren kommutieren auch mit $Q_0, P_0, Q_{N/2}, P_{N/2}$.

Wir erhalten damit einen Satz entkoppelter harmonischer Oszillatoren. Die Lösung ist bekannt: Die Eigenenergien lauten

$$E = \underbrace{\omega_0}_{=0} \left(\nu_0 + \frac{1}{2} \right) + \omega_{N/2} \left(\nu_{N/2} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{0 < n < N/2} \omega_n \left(\nu_{1,n} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{0 < n < N/2} \omega_n \left(\nu_{2,n} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.49)$$

mit $\nu_0, \nu_{N/2}, \nu_{11}, \nu_{12}, \nu_{13}, \dots, \nu_{21}, \dots = 0, 1, 2, \dots$. Jede Mode kann also $0, 1, 2, \dots$ -fach angeregt sein. Diese quantisierten (diskreten) Anregungen sind die *Phononen*.

Im Kontinuums-Limes wird

$$H = \int_0^R dx \left[\frac{1}{2\rho} p^2(x, t) + \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (2.50)$$

mit $[p(x, t), q(x', t)] = -i\delta(x - x')$. Ansonsten ist die Diskussion analog. Der Hamilton-Operator H beschreibt eine *Quantenfeldtheorie* für das Feld $q(x, t)$ und sein kanonisch konjugiertes Feld $p(x, t)$. Wir werden dieselbe Theorie später aus einer ganz anderen Überlegung – der Betrachtung masseloser, relativistischer Bosonen – wieder erhalten.

2.3 Erste Quantisierung

Wir wiederholen zunächst Material aus der Quantentheorie von Mehrteilchensystemen. Es geht insbesondere um die wichtige Idee der „zweiten Quantisierung“. Zur Vorbereitung wiederholen wir den Schrödinger-Dirac-Formalismus der Quantentheorie, den wir in diesem Zusammenhang „erste Quantisierung“ nennen.

2.3.1 Einteilchensysteme

Der Zustand eines Quantensystems wird beschrieben durch einen Vektor $|\psi\rangle$ aus einem Hilbertraum $\mathcal{H}$. Die Zeitentwicklung des Zustandes wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$i \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (2.51)$$

mit dem Hamilton-Operator (Hamiltonian) H bestimmt. H ist ein Hermitescher linearer Operator auf $\mathcal{H}$. Die formale Lösung lautet

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle, \quad (2.52)$$

wie man durch Einsetzen sieht. Man wählt $|\psi\rangle$ normiert:

$$\langle\psi|\psi\rangle \equiv (|\psi\rangle^\dagger) \cdot |\psi\rangle = 1. \quad (2.53)$$

Wir werden im Allgemeinen auch für ungebundene Zustände diese Normierung verwenden. Dazu nehmen wir ein großes, aber endliches Volumen $\mathcal{V}$ des Systems an. Sind $|\mathbf{r}\rangle$ die Eigenzustände des Ortsoperators $\hat{\mathbf{r}}$,

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle, \quad (2.54)$$

so ist die zu $|\psi\rangle$ gehörende Wellenfunktion

$$\psi(\mathbf{r}) := \langle\mathbf{r}|\psi\rangle. \quad (2.55)$$

Dies ist die Darstellung der Zustände in der *Basis* der $|\mathbf{r}\rangle$. Man kann jede Basis nehmen, z.B. von Impulseigenzuständen $|\mathbf{k}\rangle$, die die Gleichung

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{k}\rangle = \mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle \quad (2.56)$$

erfüllen. Die Vollständigkeitsrelationen lauten für diese Darstellungen:

$$\int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}| = 1, \quad (2.57)$$

$$\int d^3k |\mathbf{k}\rangle \langle\mathbf{k}| = 1. \quad (2.58)$$

Mit $\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = (1/\sqrt{\mathcal{V}}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ($\mathcal{V}$ ist das Volumen des Systems) folgt

$$\langle\mathbf{k}|\psi\rangle = \int d^3r \langle\mathbf{k}|\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \int d^3r \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.59)$$

Das ist offenbar die Fourier-Transformierte von $\psi(\mathbf{r})$.

Eine nützliche Basis wird von den Eigenzuständen des Hamiltonians H gebildet:

$$H|\nu\rangle = E_\nu |\nu\rangle \quad (2.60)$$

(ν sind geeignete Quantenzahlen). Die $|\nu\rangle$ sind vollständig, was sich unter der Annahme eines diskreten Spektrums als

$$\sum_\nu |\nu\rangle \langle\nu| = 1 \quad (2.61)$$

schreiben lässt. Für kontinuierliche Teile des Spektrums ist die Summe durch ein Integral zu ersetzen. Die Eigenfunktionen von H sind

$$u_\nu(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\nu\rangle. \quad (2.62)$$

Die Darstellung eines beliebigen Zustands in dieser „Eigenbasis“ lautet

$$|\psi\rangle = \sum_\nu |\nu\rangle \langle\nu|\psi\rangle = \sum_\nu \underbrace{\langle\nu|\psi\rangle}_{\text{Zahlen}} |\nu\rangle \quad (2.63)$$

oder auch

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_\nu \langle\nu|\psi\rangle \langle\mathbf{r}|\nu\rangle = \sum_\nu \langle\nu|\psi\rangle u_\nu(\mathbf{r}). \quad (2.64)$$

Die Eigenzustände ändern sich mit der Zeit nur in ihrer Phase,

$$|\nu(t)\rangle = e^{-iHt} |\nu(0)\rangle = \underbrace{e^{-iE_\nu t}}_{\text{Zahl}} |\nu(0)\rangle, \quad (2.65)$$

so dass sich die Form der Wellenfunktion nicht ändert,

$$u_\nu(\mathbf{r}, t) = \underbrace{e^{-iE_\nu t}}_{\text{unabh. von } \mathbf{r}} u_\nu(\mathbf{r}, 0). \quad (2.66)$$

Interpretation: $|\langle \nu | \psi \rangle|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im Zustand $|\nu\rangle$ befindet.

$$|\langle \mathbf{r} | \psi \rangle|^2 d^3 r = |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3 r \quad (2.67)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im Volumenelement $d^3 r$ um den Punkt $\mathbf{r}$ befindet. Für Eigenzustände (und nur für Eigenzustände) von H ist

$$|u_\nu(\mathbf{r}, t)|^2 = |e^{-iE_\nu t}|^2 |u_\nu(\mathbf{r}, 0)|^2 = |u_\nu(\mathbf{r}, 0)|^2 \quad (2.68)$$

zeitunabhängig.

2.3.2 Vielteilchensysteme

Für mehr als ein Teilchen brauchen wir eine zusätzliche Annahme darüber, wie wir Zustände beschreiben wollen. Die formale Frage lautet: Was ist der Zustandsraum für mehrere Teilchen? Eine naheliegende Antwort ist folgende: Für zwei Teilchen ist der Hilbertraum das direkte Produkt von zwei Einteilchen-Hilberträumen, $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$. (Wir haben hier angenommen, dass die beiden Einteilchen-Hilberträume identisch sind. Das ist oft der Fall, selbst wenn die Teilchen unterscheidbar sind. Zum Beispiel sind Elektronen und Protonen Spin-1/2-Teilchen, die sich im dreidimensionalen Raum bewegen. Sie haben daher dieselben Einteilchen-Hilberträume. Sind die Einteilchen-Hilberträume verschoben, so haben wir $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{\text{Teilchen 1}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Teilchen 2}}$.)

Die Verallgemeinerung auf N Teilchen lautet offenbar

$$\mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_{N \text{ Faktoren}}. \quad (2.69)$$

Diese Gleichung drückt aus, dass jedes der Teilchen in jedem Einteilchenzustand sein kann, unabhängig von den Zuständen der anderen Teilchen. Mit anderen Worten: Jedes Teilchen hat einen vollständigen Einteilchen-Raum $\mathcal{H}$ zur Verfügung.

Da die Ortseigenzustände $|\mathbf{r}\rangle$ eine Basis von $\mathcal{H}$ bilden, lautet die Ortsbasis von $\mathcal{H}_N$

$$\underbrace{|\mathbf{r}_1\rangle}_{\text{im } \mathcal{H}_1} \underbrace{|\mathbf{r}_2\rangle}_{\text{im } \mathcal{H}_2} |\mathbf{r}_3\rangle \dots |\mathbf{r}_N\rangle \equiv \begin{pmatrix} |\mathbf{r}_1\rangle \\ |\mathbf{r}_2\rangle \\ \vdots \\ |\mathbf{r}_N\rangle \end{pmatrix} =: |\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\rangle \in \mathcal{H}_N. \quad (2.70)$$

Die Ortsdarstellung von Zuständen ist definiert durch

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) := \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | \psi \rangle. \quad (2.71)$$

Dann ist

$$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^3 r_1 \dots d^3 r_N \quad (2.72)$$

die Wahrscheinlichkeit, Teilchen 1 in $d^3 r_1$ um $\mathbf{r}_1$, Teilchen 2 in $d^3 r_2$ um $\mathbf{r}_2$ usw. zu finden.

Wir können auch eine beliebige Basis von Einteilchenzuständen $|\nu\rangle$ verwenden, wobei ν ein vollständiger Satz von Einteilchenquantenzahlen ist:

$$|\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\rangle := |\nu_1\rangle |\nu_2\rangle \dots |\nu_N\rangle, \quad (2.73)$$

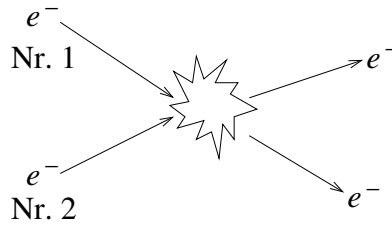
$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \langle \nu_1, \dots, \nu_N | \psi \rangle \\ &= \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \langle \nu_1, \dots, \nu_N | \psi \rangle |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \end{aligned} \quad (2.74)$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | \psi \rangle \\
&= \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \langle \nu_1, \dots, \nu_N | \psi \rangle \langle \mathbf{r}_1 | \nu_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \nu_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{r}_N | \nu_N \rangle \\
&\equiv \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \underbrace{\langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | \psi \rangle}_{\text{Zahlen}} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N)
\end{aligned} \tag{2.75}$$

mit den Einteilchenwellenfunktionen $u_\nu(\mathbf{r})$ zu den Quantenzahlen ν .

2.3.3 Ununterscheidbarkeit

Wir haben es oft mit *ununterscheidbaren* Teilchen zu tun. Zum Beispiel tragen Elektronen keine Etiketten mit sich herum. Zwei Elektronen sind daher prinzipiell nicht unterscheidbar. Man kann bei einem Streuexperiment mit zwei Elektronen nicht entscheiden, welches Elektron im Endzustand welchem im Ausgangszustand entspricht. Das ist kein praktisches, experimentelles Problem, sondern ein prinzipielles.



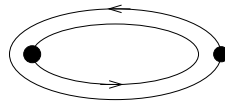
Für ununterscheidbare Teilchen muss der Zustand gleich bleiben, wenn zwei Teilchen vertauscht werden. $|\psi\rangle$ darf sich dabei also nur um einen konstanten Faktor ändern:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \lambda \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N). \tag{2.76}$$



Zweimalige Vertauschung ist, zumindest in drei (oder mehr) Raumdimensionen, die Identitätsoperation, also gilt

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = \lambda^2 \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N). \tag{2.77}$$



$$\Rightarrow \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1 \tag{2.78}$$

als einzige Möglichkeiten. Für $\lambda = +1$ nennen wir die Teilchen *Bosonen*, für $\lambda = -1$ *Fermionen*. In zwei Raumdimensionen gilt das übrigens nicht: Hier bewegt sich bei der zweimaligen Vertauschung jedes Teilchen genau einmal um das andere herum. In zwei Dimensionen kann man die Bahnen, die die beiden Teilchen beschreiben, nicht stetig so verformen, dass sie nicht mehr umeinander herum laufen. Dazu müsste man eine Bahn durch das andere Teilchen hindurch schieben, was eine qualitative Änderung der Bahnen darstellt. Daher ist in zwei Dimensionen die Anzahl der zweifachen Vertauschungen eine topologische Invariante – sie kann durch stetige Verformung der Bahnen nicht geändert werden. Das ist in drei (und mehr) Dimensionen anders, hier kann man die Bahnen immer zu einem Punkt zusammenziehen. Daher muss in zwei Dimensionen der Zustand, der durch zweifache Vertauschung entsteht, nicht mit dem ursprünglichen Zustand identisch sein. Dann folgt, dass λ zwar aufgrund der Normiertheit der Zustände den Betrag eins haben muss, aber eine beliebige Phase haben kann. Man spricht von *Anyonen*. Noch kompliziertere Fällen können auftreten, wenn mehrere Zustände entartet sind. Diese interessanten Aspekte betrachten wir hier nicht; wir haben es immer mit Bosonen oder Fermionen zu tun.

Die oben gefundene Darstellung

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | \psi \rangle u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \quad (2.79)$$

ist für ununterscheidbare Teilchen problematisch. Diese Wellenfunktion erfüllt i. A. nicht die fermionische oder bosonische Relation für Vertauschungen der $\mathbf{r}_j$. Diese Relationen führen auf Zusatzbedingungen für die Koeffizienten $\langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | \psi \rangle$. Es ist wünschenswert, diese Bedingungen gleich in die Basis einzubauen. Das kann man durch (Anti-) Symmetrisierung erreichen: Wir definieren

$$\hat{S}_{\pm} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) := \begin{vmatrix} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) & u_{\nu_1}(\mathbf{r}_2) & \cdots & u_{\nu_1}(\mathbf{r}_N) \\ u_{\nu_2}(\mathbf{r}_1) & u_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & u_{\nu_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{\nu_N}(\mathbf{r}_1) & u_{\nu_N}(\mathbf{r}_2) & \cdots & u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}_{\pm}, \quad (2.80)$$

wobei $|\dots|_{-}$ die Determinante ist:

$$\hat{S}_{-} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) = \sum_{p \in S_N} \text{sgn}(p) u_{\nu_1}(\mathbf{r}_{p_1}) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_{p_N}), \quad (2.81)$$

wobei S_N die Gruppe aller Permutationen $(p_1, p_2, \dots, p_N)$ der N Elemente $(1, 2, \dots, N)$ ist (die sogenannte *Symmetrische Gruppe*) und $\text{sgn}(p)$ das Vorzeichen der Permutation p . (Beispiel: $\text{sgn}(2, 1, 3) = -1$, da eine Vertauschung nötig ist und eins ungerade ist. Man schreibt auch $(-1)^p$.) Die Vertauschung zweier Ortsarguments $\mathbf{r}_j$ und $\mathbf{r}_k$ entspricht der Vertauschung zweier Spalten der Determinante. Diese ändert unter einer solchen Vertauschung ihr Vorzeichen. Damit sind die erhaltenen Basisfunktionen antisymmetrisch und das untere Vorzeichen $(-)$ ist für Fermionen zu wählen. Der Ausdruck in Gl. (2.81) heißt *Slater-Determinante*.

Wir sehen sofort, dass für zwei Fermionen in gleichen Einteilchenzuständen, z. B. $\nu_j = \nu_k$, die j -te und k -te Zeile der Determinante gleich sind. Die Zeilen sind also linear abhängig. Die Determinante verschwindet in diesem Fall, $|\dots|_{-} = 0$. Null ist aber kein Zustand. Es gibt also keine Zustände mit $\nu_j = \nu_k$ für $j \neq k$. Das ist die übliche Formulierung des *Pauli-Prinzips*. Sie folgt also aus der fundamentalen Bedingung der Antisymmetrie der Wellenfunktion.

Weiterhin erkennen wir, dass für zwei Fermionen am gleichen Ort, z. B. $\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_k$, die j -te und k -te Spalte der Determinante gleich sind. Also finden wir, dass sich zwei Fermionen nicht an demselben Ort befinden können, unabhängig von ihren Zuständen.

Andererseits ist $|\dots|_{+}$ die sogenannte *Permanente*:

$$\hat{S}_{+} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) = \sum_{p \in S_N} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_{p_1}) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_{p_N}), \quad (2.82)$$

d. h. die „vorzeichenlose Determinante“. Die Definition zeigt, dass die Permanente symmetrisch unter Vertauschung zweier Orte, also zweier Spalten, ist. Sie gilt somit für Bosonen. Obwohl die Determinante und die Permanente sehr ähnlich definiert sind, ist der für ihre Berechnung notwendige Aufwand interessanterweise sehr unterschiedlich. Die Determinante einer (nicht sehr kleinen) Matrix berechnet man am günstigsten, indem man zunächst ihre Eigenwerte bestimmt. Die Determinante ist dann einfach das Produkt dieser Eigenwerte. Der Aufwand skaliert mit N^3 wegen der Bestimmung der Eigenwerte. Für die Permanente gibt es aber keine analoge Methode! I. A. muss man die Summe in Gl. (2.82) wirklich ausrechnen, diese hat aber $N!$ Terme. Der Aufwand wächst mit $N! \sim e^{N \ln N}$, also etwas schneller als exponentiell.

Wir können jetzt nach diesen (anti-) symmetrisierten Basiszuständen entwickeln:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \underbrace{C_{\nu_1, \dots, \nu_N}}_{\text{Zahlen}} \hat{S}_{\pm} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N). \quad (2.83)$$

Die Wellenfunktionen $\hat{S}_{\pm} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N)$ sind noch nicht normiert. Eine einfache Rechnung zeigt, dass die Wellenfunktionen

$$\frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \cdots}} \hat{S}_{\pm} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \quad (2.84)$$

normiert sind. Hier ist n_ν die Besetzungszahl des Einteilchenzustands $|\nu\rangle$, d. h., n_ν gibt an, wie oft ν in $\{\nu_1, \nu_2, \dots\}$ vorkommt. Für Fermionen kann das natürlich nur gar nicht oder einmal sein, so dass sich der Vorfaktor zu $1/\sqrt{N!}$ vereinfacht.

Für Rechnungen benötigen wir nicht nur die Darstellung der Zustände in Produktbasen, sondern auch die der Operatoren, insbesondere des Hamiltonians. Wir betrachten den Hamiltonian jetzt konkreter:

$$H = T + V, \quad (2.85)$$

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \quad \text{mit } \mathbf{p}_i \stackrel{\text{in Ortsdarstellung}}{=} -i\nabla_i \equiv -i\partial/\partial\mathbf{r}. \quad (2.86)$$

Wir haben hier angenommen, dass kein Vektorpotential vorliegt. Für ununterscheidbare Teilchen muss V *symmetrisch* unter Vertauschung von Teilchen sein, sonst wären sie ja experimentell unterscheidbar. V kann i. A. Beiträge enthalten, die von $1, 2, 3, \dots$ Einteilchenzuständen abhängen. Wir schreiben

$$V = V_1 + V_2 + V_3 + \dots \quad (2.87)$$

Physikalisch ist V_1 das äußere Potential, V_2 ist die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung, V_3 die Drei-Teilchen-Wechselwirkung usw. Wir schreiben in Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &:= \langle \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N | V | \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \rangle \\ &= \sum_i V_1(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \frac{1}{3!} \sum_{\substack{ijk \\ i \neq j \neq k \neq i}} V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots, \end{aligned} \quad (2.88)$$

was explizit symmetrisch ist. Beachte, dass wir z. B. Terme der Art $V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i)$ ausschließen. Solche Terme sind bereits in V_1 enthalten. Beispiel: Die Coulomb-Wechselwirkung lautet

$$V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.89)$$

Wir wollen den Hamiltonian auch bezüglich beliebiger Einteilchenbasen $\{|\nu\rangle\}$ ausdrücken:

$$V_1 \equiv \sum_i V_i^{(1)} = \sum_i \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \langle \nu_1, \dots, \nu_N| V_i^{(1)} \sum_{\nu'_1, \dots, \nu'_N} |\nu'_1, \dots, \nu'_N\rangle \langle \nu'_1, \dots, \nu'_N|. \quad (2.90)$$

Für Fermionen sollen die Summen über Einteilchenzustände nur mit dem Pauli-Prinzip vereinbare Kombinationen enthalten, d. h. $\nu_i \neq \nu_j$ und $\nu'_i \neq \nu'_j$ für $i \neq j$. $V_i^{(1)}$ wirkt hier nur auf den Zustand des i -ten Teilchens, also auf $|\nu_i\rangle, |\nu'_i\rangle$. Die anderen Summen können daher ausgeführt werden:

$$\dots = \sum_i \sum_{\nu_i} |\nu_i\rangle \langle \nu_i| V_i^{(1)} \sum_{\nu'_i} |\nu'_i\rangle \langle \nu'_i|. \quad (2.91)$$

Unsere Notation ist hier ein bisschen unsauber: $V_i^{(1)}$ ist jetzt plötzlich ein Operator auf $\mathcal{H}$, nicht mehr auf $\mathcal{H}_N$. Die Bedeutung ist aber klar, da $V_i^{(1)}$ in allen Faktorräumen für andere Teilchen $j \neq i$ „nichts tut“, d. h. die Identität ist. Weiter ergibt sich

$$\dots = \sum_i \sum_{\nu_i \nu'_i} |\nu_i\rangle \langle \nu_i| V_i^{(1)} |\nu'_i\rangle \langle \nu'_i| = \sum_i \sum_{\nu_i \nu'_i} V_{\nu_i \nu'_i}^{(1)} |\nu_i\rangle \langle \nu'_i| \quad (2.92)$$

mit

$$V_{\nu_i \nu'_i}^{(1)} := \langle \nu_i | V_i^{(1)} | \nu'_i \rangle = \int d^3r u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) V_1(\mathbf{r}) u_{\nu'_i}(\mathbf{r}). \quad (2.93)$$

Das funktioniert für alle Einteilchen-Terme, auch für die kinetische Energie:

$$T = \sum_i \sum_{\nu_i \nu'_i} |\nu_i\rangle \langle \nu_i| T_i |\nu'_i\rangle \langle \nu'_i| = \sum_i \sum_{\nu_i \nu'_i} T_{\nu_i \nu'_i} |\nu_i\rangle \langle \nu'_i| \quad (2.94)$$

mit

$$T_{\nu_i \nu'_i} := \langle \nu_i | T_i | \nu'_i \rangle = \int d^3 r u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) T(\mathbf{r}, -i\nabla) u_{\nu'_i}(\mathbf{r}). \quad (2.95)$$

In Abwesenheit eines Vektorpotentials gilt einfach $T(\mathbf{r}, -i\nabla) = -\nabla^2/2m$, also

$$T_{\nu_i \nu'_i} = -\frac{1}{2m} \int d^3 r u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) \nabla^2 u_{\nu'_i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \int d^3 r \nabla u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) \cdot \nabla u_{\nu'_i}(\mathbf{r}), \quad (2.96)$$

wobei wir im letzten Schritt eine partielle Integration ausgeführt haben, um einen symmetrischeren Ausdruck zu erhalten.

Für 2, 3, ...-Teilchen-Terme bleiben 2, 3, ... Bra- und Ket-Vektoren übrig. Zum Beispiel ist

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} \sum_{\nu_i \nu_j \nu'_i \nu'_j} |\nu_i\rangle |\nu_j\rangle \langle \nu_j| \langle \nu_i| V_{ij}^{(2)} |\nu'_i\rangle |\nu'_j\rangle \langle \nu'_j| \langle \nu'_i| = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} \sum_{\nu_i \nu_j \nu'_i \nu'_j} V_{\nu_i \nu_j \nu'_i \nu'_j}^{(2)} |\nu_i\rangle |\nu_j\rangle \langle \nu'_j| \langle \nu'_i| \quad (2.97)$$

mit

$$V_{\nu_i \nu_j \nu'_i \nu'_j}^{(2)} := \langle \nu_j | \langle \nu_i | V_{ij}^{(2)} | \nu'_i \rangle | \nu'_j \rangle = \int d^3 r_i d^3 r_j u_{\nu_j}^*(\mathbf{r}_j) u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}_i) V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) u_{\nu'_i}(\mathbf{r}_i) u_{\nu'_j}(\mathbf{r}_j). \quad (2.98)$$

Beachte die Reihenfolge der Indizes ν_i, ν_j (Konvention). Entsprechende Ausdrücke findet man für V_3 usw.

2.4 Zweite Quantisierung

Die bisherige Notation ist ungünstig, wenn mehr als ein Wert der Teilchenzahl N vorkommen kann. Das ist der Fall, wenn sich die Teilchenzahl ändert, aber auch, wenn die Teilchenzahl zwar erhalten ist, wir aber statistische Mittelwerte über mehrere Werte der Teilchenzahl ausrechnen wollen (großkanonische Ensembles). Dann wäre eine Darstellung nützlich, die explizit die Zahl von Teilchen in bestimmten (Einteilchen-) Zuständen angibt. Das ist die *Zweite Quantisierung*, in der im Übrigen gar nichts zweimal quantisiert wird. Es handelt sich um eine etwas irreführende historische Bezeichnung. Die zweite Quantisierung ist auch nützlich, nämlich kompakter als der bisherige Formalismus, wenn nur ein Wert der Teilchenzahl betrachtet wird.

Der Zustandsraum soll Zustände mit Teilchenzahlen $N = 0, 1, \dots$ enthalten, $\mathcal{H}_N$ für festes N reicht also nicht. Wir führen den *Fock-Raum* ein:

$$\mathcal{F} := \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \quad (2.99)$$

Der Fock-Raum ist die *direkte Summe* der $\mathcal{H}_N$, d. h. die Basis von $\mathcal{F}$ ist die Vereinigungsmenge der Basen der $\mathcal{H}_N$, $\bigcup_{N=0}^{\infty} (\text{Basis von } \mathcal{H}_N)$.

Wir definieren Teilchenzahloperatoren $\hat{n}_\nu$ durch ihre Darstellung in der Basis der (anti-) symmetrisierten Vielteilchenzustände. Diese Zustände sollen sämtlich Eigenzustände von $\hat{n}_\nu$ sein und die folgende Eigenwertgleichung erfüllen:

$$\hat{n}_\nu \hat{S}_\pm u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) = n_\nu \hat{S}_\pm u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \quad (2.100)$$

und n_ν gibt an, wie oft ν in $\{\nu_1, \dots, \nu_N\}$ enthalten ist. Mit anderen Worten, n_ν beschreibt, wieviele Teilchen im Einteilchenzustand $|\nu\rangle$ sind. Wegen der (Anti-) Symmetrisierung ist der Basiszustand $\hat{S}_\pm u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N)$ durch Angabe der Besetzungszahlen für *alle* Einteilchenzustände eindeutig bestimmt. Ein Phasen- oder allgemeiner ein Normierungsfaktor ist dadurch nicht festgelegt, ändert aber nicht den Zustand. Wir schreiben für die (normierten) Basiszustände

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \quad \text{mit } n_1 + n_2 + \dots = N. \quad (2.101)$$

Diese nennt man *Besetzungszustände* und die Darstellung von Operatoren usw. in dieser Basis *Besetzungszahldarstellung*. Es ist sinnvoll, Operatoren einzuführen, die die Teilchenzahlen ändern.

2.4.1 Bosonen

Wir definieren den *Erzeugungsoperator* $b_\nu^\dagger$ durch

$$b_\nu^\dagger |\dots, n_\nu, \dots\rangle = B_{n_\nu+1}^* |\dots, n_\nu + 1, \dots\rangle, \quad (2.102)$$

wobei wir den Zahlenfaktor $B_{n_\nu+1}^*$ etwas später festlegen werden. $b_n^\dagger$ erhöht offensichtlich die Besetzungszahl n_ν um eins. Wir definieren außerdem den *Vernichtungsoperator* durch $b_\nu := (b_\nu^\dagger)^\dagger$. Es folgt

$$\langle \dots, n'_\nu, \dots | b_\nu^\dagger | \dots, n_\nu, \dots \rangle = B_{n_\nu+1}^* \delta_{n'_\nu, n_\nu+1} \quad (2.103)$$

$$\Rightarrow \langle \dots, n_\nu, \dots | b_\nu | \dots, n'_\nu, \dots \rangle = B_{n_\nu+1} \delta_{n'_\nu, n_\nu+1} \quad (2.104)$$

$$\Rightarrow b_\nu | \dots, n_\nu + 1, \dots \rangle = B_{n_\nu+1} | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.105)$$

Weiter folgt

$$b_\nu^\dagger b_\nu | \dots, n_\nu, \dots \rangle = B_{n_\nu}^* B_{n_\nu} | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.106)$$

$| \dots, n_\nu, \dots \rangle$ ist also ein Eigenzustand von $b_\nu^\dagger b_\nu$ mit Eigenwert $B_{n_\nu}^* B_{n_\nu}$.

b_ν muss den Zustand zerstören, wenn kein Teilchen im Einteilchenzustand $|\nu\rangle$ ist, weil negative Teilchenzahlen keinen Sinn haben:

$$b_\nu | \dots, n_\nu = 0, \dots \rangle = 0 \Rightarrow B_0 = 0. \quad (2.107)$$

Es ist nützlich, als Bestandteil der Definition von $b_\nu^\dagger$ zu verlangen, dass gilt $B_n^* B_n := n$ und $B_n \in \mathbb{R}^+$. Dann folgt $B_n = \sqrt{n}$ und

$$b_\nu^\dagger | \dots, n_\nu, \dots \rangle = \sqrt{n_\nu + 1} | \dots, n_\nu + 1, \dots \rangle, \quad (2.108)$$

$$b_\nu | \dots, n_\nu, \dots \rangle = \sqrt{n_\nu} | \dots, n_\nu - 1, \dots \rangle, \quad (2.109)$$

$$b_\nu^\dagger b_\nu | \dots, n_\nu, \dots \rangle = n_\nu | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.110)$$

$b_\nu^\dagger b_\nu$ ist demnach der Teilchenzahloperator $\hat{n}_\nu$. Weiter folgt

$$[b_\nu, b_\nu^\dagger] | \dots, n_\nu, \dots \rangle \equiv (b_\nu b_\nu^\dagger - b_\nu^\dagger b_\nu) | \dots, n_\nu, \dots \rangle = [(n_\nu + 1) - n_\nu] | \dots, n_\nu, \dots \rangle = | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.111)$$

Da dies für alle Zustände gilt, folgt

$$[b_\nu, b_\nu^\dagger] = 1. \quad (2.112)$$

Weiterhin gilt trivial

$$[b_\nu, b_\nu] = [b_\nu^\dagger, b_\nu^\dagger] = 0, \quad (2.113)$$

da jeder Operator mit sich selbst kommutiert. Soweit haben wir Vertauschungsrelationen für Erzeuger und Vernichter desselben Einteilchenzustandes betrachtet.

Operatoren für verschiedene Einteilchenzustände $|\nu\rangle, |\nu'\rangle$ kommutieren, da der Vielteilchenzustand symmetrisch unter Vertauschung von Teilchen ist. Das wollen wir am Beispiel von $b_\nu^\dagger$ und $b_{\nu'}^\dagger$, $\nu' \neq \nu$, zeigen. Wir erinnern uns an die Symmetrie des Vielteilchenzustandes unter Vertauschung: Wir hatten

$$\psi(\dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots) = \psi(\dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots) \quad (2.114)$$

für Bosonen. Das können wir auch schreiben als

$$\langle \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots | \psi \rangle = \langle \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots | \psi \rangle. \quad (2.115)$$

Aber diese Symmetrie gilt für jede Basis – die Ortsbasis ist nicht bevorzugt – also auch für die Produktbasis gebildet aus einem vollständigen Satz von Einteilchenzuständen $|\nu\rangle$. Die Basisvektoren sind (vgl. S. 15)

$$|\nu_1\rangle |\nu_2\rangle \cdots |\nu_N\rangle \equiv \begin{pmatrix} |\nu_1\rangle \\ \vdots \\ |\nu_N\rangle \end{pmatrix} = |\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\rangle \in \mathcal{H}_N. \quad (2.116)$$

Für Bosonen gilt also

$$\langle \dots, \nu_j, \dots, \nu_k, \dots | \psi \rangle = \langle \dots, \nu_k, \dots, \nu_j, \dots | \psi \rangle. \quad (2.117)$$

Nun ist

$$\begin{aligned} b_\nu^\dagger |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle &= b_\nu^\dagger |\nu_1\rangle \cdots |\nu_N\rangle \\ &= \sqrt{n_\nu + 1} |\nu\rangle |\nu_1\rangle \cdots |\nu_N\rangle \\ &= \sqrt{n_\nu + 1} |\nu, \nu_1, \dots, \nu_N\rangle \quad \in \mathcal{H}_{N+1} \end{aligned} \quad (2.118)$$

und

$$b_\nu^\dagger b_{\nu'}^\dagger |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle = \sqrt{n_\nu + 1} \sqrt{n_{\nu'} + 1} |\nu, \nu', \nu_1, \dots, \nu_N\rangle. \quad (2.119)$$

Aber für Bosonen kommt es nicht auf die Reihenfolge der ν an:

$$\begin{aligned} \dots &= \sqrt{n_{\nu'} + 1} \sqrt{n_\nu + 1} |\nu', \nu, \nu_1, \dots, \nu_N\rangle \\ &= b_{\nu'}^\dagger b_\nu^\dagger |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \quad \forall |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \end{aligned} \quad (2.120)$$

$$\Rightarrow b_\nu^\dagger b_{\nu'}^\dagger = b_{\nu'}^\dagger b_\nu^\dagger \quad (2.121)$$

$$\Rightarrow [b_\nu^\dagger, b_{\nu'}^\dagger] = 0 \quad (2.122)$$

und ähnlich für $[b_\nu, b_{\nu'}]$ und $[b_\nu, b_{\nu'}^\dagger]$.

Wir erhalten schließlich die fundamentalen Vertauschungsrelationen für Bosonen:

$$[b_\nu, b_{\nu'}^\dagger] = \delta_{\nu\nu'}, \quad (2.123)$$

$$[b_\nu, b_{\nu'}] = 0, \quad (2.124)$$

$$[b_\nu^\dagger, b_{\nu'}^\dagger] = 0. \quad (2.125)$$

2.4.2 Fermionen

Für Fermionen hatten wir gesehen, dass jeder Einteilchenzustand ν höchstens einfach besetzt sein kann. Also gilt

$$n_\nu = 0, 1 \quad \forall \nu. \quad (2.126)$$

Wir definieren zunächst analog zu Bosonen den Erzeugungsoperator $c_\nu^\dagger$ durch

$$c_\nu^\dagger |\dots, n_\nu, \dots\rangle = C_{n_\nu+1}^* |\dots, n_\nu + 1, \dots\rangle \quad (2.127)$$

und den Vernichtungsoperator durch $c_\nu := (c_\nu^\dagger)^\dagger$. Es folgt

$$\langle \dots, n'_\nu, \dots | c_\nu^\dagger | \dots, n_\nu, \dots \rangle = C_{n_\nu+1}^* \delta_{n'_\nu, n_\nu+1} \quad (2.128)$$

$$\Rightarrow \langle \dots, n_\nu, \dots | c_\nu | \dots, n'_\nu, \dots \rangle = C_{n_\nu+1} \delta_{n'_\nu, n_\nu+1} \quad (2.129)$$

$$\Rightarrow c_\nu | \dots, n_\nu + 1, \dots \rangle = C_{n_\nu+1} | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.130)$$

Es folgt

$$c_\nu^\dagger c_\nu | \dots, n_\nu, \dots \rangle = C_{n_\nu}^* C_{n_\nu} | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.131)$$

Offenbar ist $C_0 = 0$. Für Fermionen gilt aber außerdem

$$c_\nu^\dagger | \dots, n_\nu = 1, \dots \rangle = 0 \quad (2.132)$$

$$\Rightarrow C_2^* = 0. \quad (2.133)$$

Wir können praktischerweise $C_1 = 1$ definieren und erhalten dann

$$c_\nu^\dagger | \dots, n_\nu = 0, \dots \rangle = | \dots, n_\nu = 1, \dots \rangle, \quad (2.134)$$

$$c_\nu^\dagger | \dots, n_\nu = 1, \dots \rangle = 0, \quad (2.135)$$

$$c_\nu | \dots, n_\nu = 0, \dots \rangle = 0, \quad (2.136)$$

$$c_\nu | \dots, n_\nu = 1, \dots \rangle = | \dots, n_\nu = 0, \dots \rangle \quad (2.137)$$

und

$$c_\nu^\dagger c_\nu | \dots, n_\nu = 0, \dots \rangle = 0, \quad (2.138)$$

$$c_\nu^\dagger c_\nu |\dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = |\dots, n_\nu = 1, \dots\rangle, \quad (2.139)$$

$$\Rightarrow c_\nu^\dagger c_\nu = \hat{n}_\nu \quad (2.140)$$

wie für Bosonen. Für den *Antikommutator* $\{c_\nu, c_\nu^\dagger\} := c_\nu c_\nu^\dagger + c_\nu^\dagger c_\nu$ folgt

$$\begin{aligned} \{c_\nu, c_\nu^\dagger\} |\dots, n_\nu, \dots\rangle &= (c_\nu c_\nu^\dagger + c_\nu^\dagger c_\nu) |\dots, n_\nu, \dots\rangle \\ &= |\dots, n_\nu, \dots\rangle \quad \forall |\dots, n_\nu, \dots\rangle \end{aligned} \quad (2.141)$$

$$\Rightarrow \{c_\nu, c_\nu^\dagger\} = 1. \quad (2.142)$$

In Gl. (2.141) haben wir ausgenutzt, dass immer einer der beiden Terme eins und der andere Null ergibt. Für den Antikommutator schreibt man auch $[A, B]_+ := AB + BA$.

Für Fermionen macht es, anders als für Bosonen, einen Unterschied, welches Teilchen zuerst erzeugt wird. Mit der Produktbasis

$$|\nu_1, \dots, \nu_N\rangle := |\nu_1\rangle |\nu_2\rangle \cdots |\nu_N\rangle \quad (2.143)$$

gilt nämlich wegen der Antisymmetrie des Vielteilchenzustands

$$\langle \dots, \nu_j, \dots, \nu_k, \dots | \psi \rangle = -\langle \dots, \nu_k, \dots, \nu_j, \dots | \psi \rangle. \quad (2.144)$$

Also folgt für $\nu' \neq \nu$

$$\begin{aligned} c_\nu^\dagger c_{\nu'}^\dagger |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle &= C_{n_\nu+1}^* C_{n_{\nu'}+1}^* |\nu, \nu', \nu_1, \dots, \nu_N\rangle \\ &= -C_{n_{\nu'}+1}^* C_{n_\nu+1}^* |\nu', \nu, \nu_1, \dots, \nu_N\rangle \\ &= c_{\nu'}^\dagger c_\nu^\dagger |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \quad \forall |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \end{aligned} \quad (2.145)$$

$$\Rightarrow c_\nu^\dagger c_{\nu'}^\dagger = -c_{\nu'}^\dagger c_\nu^\dagger \quad (2.146)$$

$$\Rightarrow \{c_\nu^\dagger, c_{\nu'}^\dagger\} = 0. \quad (2.147)$$

Für den Fall $\nu' = \nu$ gilt dies aber auch, denn $\{c_\nu^\dagger, c_\nu^\dagger\} = 2c_\nu^\dagger c_\nu^\dagger = 0$. Analoge Ergebnisse folgen für $\{c_\nu, c_{\nu'}\}$ und, für $\nu' \neq \nu$, für $\{c_\nu, c_{\nu'}^\dagger\}$. Insgesamt erhalten wir die *Anti*-Vertauschungsrelationen

$$\{c_\nu, c_{\nu'}^\dagger\} = \delta_{\nu\nu'}, \quad (2.148)$$

$$\{c_\nu, c_{\nu'}\} = 0, \quad (2.149)$$

$$\{c_\nu^\dagger, c_{\nu'}^\dagger\} = 0. \quad (2.150)$$

Die letzte Gleichung enthält das Pauli-Prinzip: $c_\nu^\dagger c_\nu^\dagger = \frac{1}{2} \{c_\nu^\dagger, c_\nu^\dagger\} = 0$, man kann keine zwei Fermionen in demselben Zustand $|\nu\rangle$ erzeugen.

Für Bosonen und Fermionen definieren wir den *Vakuum-Zustand* $|0\rangle \equiv |\text{vac}\rangle$ dadurch, dass er von allen b_ν bzw. c_ν vernichtet wird:

$$b_\nu |0\rangle = 0, \quad c_\nu |0\rangle = 0 \quad \forall \nu. \quad (2.151)$$

$|0\rangle$ ist nicht mit dem Nullvektor 0 im Fock-Raum zu verwechseln. $|0\rangle$ hat die Norm eins, $\langle 0|0\rangle = 1$. $|0\rangle$ ist der einzige Basisvektor des Null-Teilchen-Hilbertraums $\mathcal{H}_0$. In der Vielteilchentheorie wird $|0\rangle$ oft nicht das echte Vakuum ohne Teilchen bezeichnen, sondern den Grundzustand eines Systems.

Damit schreiben wir die Besetzungszustände nun als

$$(b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \cdots |0\rangle \quad (\text{Bosonen}), \quad (2.152)$$

$$(c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \cdots |0\rangle \quad (\text{Fermionen}), \quad (2.153)$$

wobei wir uns gleich um die Normierung kümmern werden. Für Fermionen kommt es auf die Reihenfolge an, wir müssen eine Ordnung von Einteilchenzuständen festlegen und dann konsistent verwenden. Die Eigenschaften der b_ν, c_ν stellen sicher, dass diese Zustände die korrekten (Anti-) Symmetrie-Eigenschaften haben.

Die fermionischen Zustände sind bereits normiert: Wir betrachten $\langle 0 | \cdots c_2^{n_2} c_1^{n_1} (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \cdots | 0 \rangle$. Hierin ist

$$c_1^{n_1} (c_1^\dagger)^{n_1} = \begin{cases} 1 & \text{für } n_1 = 0, \\ 1 - c_1^\dagger c_1 & \text{für } n_1 = 1. \end{cases} \quad (2.154)$$

Im Fall $n_1 = 1$ wirkt dieser Operator auf den Zustand $(c_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle$, der keine Teilchen im Zustand $|1\rangle$ enthält. Daher kann der Teilchenzahloperator $c_1^\dagger c_1$ durch Null ersetzt werden und der Operator $c_1^{n_1} (c_1^\dagger)^{n_1}$ kann durch eins ersetzt werden. Dasselbe Argument lässt sich für die Zustände $|2\rangle$, $|3\rangle$, etc. wiederholen, so dass sich am Ende

$$\langle 0 | \dots c_2^{n_2} c_1^{n_1} (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle = 1 \quad (2.155)$$

ergibt.

Für Bosonen betrachten wir $\langle 0 | \dots b_2^{n_2} b_1^{n_1} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle$. Es gilt

$$b_\nu^{n_\nu} (b_\nu^\dagger)^{n_\nu} = b_\nu^{n_\nu-1} (1 + b_\nu^\dagger b_\nu) (b_\nu^\dagger)^{n_\nu-1}. \quad (2.156)$$

Der Teilchenzahloperator $b_\nu^\dagger b_\nu$ wirkt auf einen Zustand, der $n_\nu - 1$ Teilchen enthält und kann daher durch $n_\nu - 1$ ersetzt werden. Damit kann im obigen Skalarprodukt $b_\nu^{n_\nu} (b_\nu^\dagger)^{n_\nu}$ durch $n_\nu b_\nu^{n_\nu-1} (b_\nu^\dagger)^{n_\nu-1}$ ersetzt werden. Iteration ergibt den Faktor $n_\nu!$. Dies wird erst für Zustand $|1\rangle$, dann für $|2\rangle$ usw. ausgeführt und ergibt schließlich

$$\langle 0 | \dots b_2^{n_2} b_1^{n_1} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle = n_1! n_2! \dots \quad (2.157)$$

Damit erhalten wir für die normierten Besetzungszustände

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle \quad (\text{Bosonen}), \quad (2.158)$$

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle \quad (\text{Fermionen}). \quad (2.159)$$

Der Ausdruck für Bosonen gilt im Übrigen auch für Fermionen, da $0! = 1! = 1$.

Nun sind die Besetzungszustände $|n_1, n_2, \dots\rangle$ per Konstruktion eine Abkürzung für die Permanente bzw. Slater-Determinante, bis auf die Normierung. Wir können daher für Bosonen schreiben

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \dots b_{\nu_N}^\dagger | 0 \rangle &\sim \hat{S}_+ u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \dots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \\ &= \hat{S}_+ \langle \mathbf{r}_1 | \nu_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \nu_2 \rangle \dots \langle \mathbf{r}_N | \nu_N \rangle \end{aligned} \quad (2.160)$$

und damit

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | n_1, n_2, \dots \rangle &\sim \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle \\ &\sim \hat{S}_+ \underbrace{u_1(\mathbf{r}_1) u_1(\mathbf{r}_2) \dots}_{n_1 \text{ Terme}} \underbrace{u_2(\mathbf{r}_{n_1+1}) u_2(\mathbf{r}_{n_1+2}) \dots}_{n_2 \text{ Terme}} \times \dots \end{aligned} \quad (2.161)$$

Das Proportionalitätszeichen deutet an, dass Normierungsfaktoren weggelassen wurden. Für Fermionen gilt entsprechend

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | c_{\nu_1}^\dagger c_{\nu_2}^\dagger \dots c_{\nu_N}^\dagger | 0 \rangle &\sim \hat{S}_- u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \dots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \\ &= \hat{S}_- \langle \mathbf{r}_1 | \nu_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \nu_2 \rangle \dots \langle \mathbf{r}_N | \nu_N \rangle \end{aligned} \quad (2.162)$$

und

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | n_1, n_2, \dots \rangle &= \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle \\ &\sim \hat{S}_- \underbrace{u_1(\mathbf{r}_1)}_{\text{wenn } n_1=1} \underbrace{u_2(\mathbf{r}_{n_1+1})}_{\text{wenn } n_2=1} \dots \end{aligned} \quad (2.163)$$

2.4.3 Operatoren in zweiter Quantisierung

Wir wollen den Hamiltonian durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken. Zunächst für Einteilchen-Terme (T und V_1): Wir hatten, siehe S. 18,

$$V_1 = \sum_i \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'}^{(1)} \underbrace{|\nu\rangle\langle\nu'|}_{\text{wirkt auf Teilchen } i}. \quad (2.164)$$

Offenbar trägt der Operator unter der Summe nur bei, wenn Teilchen i im Zustand $|\nu'\rangle$ war, der Operator verschiebt es dann in den Zustand $|\nu\rangle$. Demnach gilt für Bosonen

$$V_1 b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle = \sum_i \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'}^{(1)} \delta_{\nu'\nu_i} b_{\nu_1}^\dagger \cdots \underbrace{b_{\nu'}^\dagger}_{i\text{-tes Teilchen}} \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.165)$$

Das nächste Ziel ist, die rechte Seite als Operator, ausgedrückt durch die $b, b^\dagger$, angewandt auf $b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ zu schreiben. Also soll $b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ ganz rechts stehen. Um das zu erreichen, betrachten wir den Einteilchenzustand $|\nu'\rangle$ genauer. In $b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ sei dieser n' -mal besetzt ($n' = 1, 2, 3, \dots$; $n' = 0$ ergibt Null). Dieser Zustand enthält also $(b_{\nu'}^\dagger)^{n'}$, angewandt auf das Vakuum. Um die Erzeuger so zusammenzufassen, nutzen wir aus, dass bosonische Erzeugungsoperatoren miteinander kommutieren. Der Summand in Gl. (2.165) enthält stattdessen $b_{\nu'}^\dagger (b_{\nu'}^\dagger)^{n'-1}$. Dies wollen wir in eine ähnliche Form bringen:

$$\begin{aligned} b_{\nu'}^\dagger (b_{\nu'}^\dagger)^{n'-1} &= b_{\nu'}^\dagger \underbrace{\frac{b_{\nu'} b_{\nu'}^\dagger}{n'}}_{=1} (b_{\nu'}^\dagger)^{n'-1} \\ &= \frac{1}{n'} b_{\nu'}^\dagger b_{\nu'} (b_{\nu'}^\dagger)^{n'} \end{aligned} \quad (2.166)$$

$$\Rightarrow V_1 b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle = \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'}^{(1)} \sum_i \delta_{\nu'\nu_i} \frac{1}{n'} b_{\nu'}^\dagger b_{\nu'} b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.167)$$

Da $|\nu'\rangle$ nun n' -fach besetzt ist, enthält die i -Summe n' identische, nicht verschwindende Terme, wodurch sich der Faktor $1/n'$ weghebt. Also ist

$$\dots = \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'}^{(1)} b_{\nu'}^\dagger b_{\nu'} b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.168)$$

Dies gilt für alle Zustände $b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ und daher folgt die Operatoridentität

$$V_1 = \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'}^{(1)} b_{\nu'}^\dagger b_{\nu'}. \quad (2.169)$$

Ebenso erhält man

$$T = \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} b_{\nu'}^\dagger b_{\nu'}. \quad (2.170)$$

Entsprechend zeigt man

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4} V_{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4}^{(2)} \underbrace{b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger b_{\nu_3}^\dagger b_{\nu_4}^\dagger}_{\text{beachte Konvention}}. \quad (2.171)$$

Dieselben Darstellungen (mit $b \rightarrow c$) ergeben sich für Fermionen, wenn man die Antikommutatoren korrekt behandelt.

2.4.4 Quantenfeldoperatoren

Das bisher gesagte gilt im Wesentlichen für jede beliebige Basis $\{|\nu\rangle\}$ von Einteilchenzuständen. Ein wichtiger Spezialfall ist die Ortsbasis $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ (Erinnerung: $\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$). Wir definieren den *Quantenfeldoperator*

$$\Psi(\mathbf{r}) := \sum_{\nu} \langle \mathbf{r} | \nu \rangle a_{\nu} = \sum_{\nu} u_{\nu}(\mathbf{r}) a_{\nu}. \quad (2.172)$$

Hier ist

$$a_{\nu} := \begin{cases} b_{\nu} & \text{für Bosonen,} \\ c_{\nu} & \text{für Fermionen} \end{cases} \quad (2.173)$$

ein Vernichtungsoperator, $\Psi(\mathbf{r})$ ist also eine Linearkombination von Vernichtungsoperatoren. Beachte die Schreibung mit einem Großbuchstaben Ψ . Dies hat die normale Form eines Basiswechsels. Es folgt durch Bildung des Hermitesch konjugierten

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} \langle \mathbf{r} | \nu \rangle^* a_{\nu}^\dagger = \sum_{\nu} u_{\nu}^*(\mathbf{r}) a_{\nu}^\dagger. \quad (2.174)$$

Wir finden für Bosonen

$$[\Psi(\mathbf{r}_1), \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2)] = \sum_{\nu_1 \nu_2} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_2}^*(\mathbf{r}_2) \underbrace{[b_{\nu_1}, b_{\nu_2}^\dagger]}_{=\delta_{\nu_1 \nu_2}} = \sum_{\nu_1} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_1}^*(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (2.175)$$

unter Verwendung der Vollständigkeitsrelation. Für Fermionen ergibt sich analog

$$\{\Psi(\mathbf{r}_1), \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2)\} = \sum_{\nu_1 \nu_2} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_2}^*(\mathbf{r}_2) \underbrace{\{c_{\nu_1}, c_{\nu_2}^\dagger\}}_{=\delta_{\nu_1 \nu_2}} = \sum_{\nu_1} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_1}^*(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (2.176)$$

Das oben für die Darstellung von Operatoren durch Erzeuger und Vernichter gesagte gilt entsprechend auch für die Ortsdarstellung. Die kinetische Energie

$$T = \sum_{\nu \nu'} T_{\nu \nu'} a_\nu^\dagger a_{\nu'} \quad \text{mit} \quad T_{\nu \nu'} = \langle \nu | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \nu' \rangle \quad (2.177)$$

wird z. B. zu

$$T = \int d^3 r d^3 r' T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \quad \text{mit} \quad T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (2.178)$$

In den letzten beiden Gleichungen ist $\hat{\mathbf{p}}$ natürlich der Impulsoperator. Die kinetische Einteilchenenergie in Ortsdarstellung lautet

$$T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left(-\frac{1}{2m} \right) \nabla_{\mathbf{r}'}^2 \quad (2.179)$$

$$\Rightarrow T = \int d^3 r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \Psi(\mathbf{r}). \quad (2.180)$$

Analog gilt

$$V_1 = \int d^3 r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) V_1(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.181)$$

$$V_2 = \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1). \quad (2.182)$$

Zumindest die Gleichungen (2.180) und (2.181) sehen so aus wie die Erwartungswerte der entsprechenden Energiebeiträge in erster Quantisierung. Ψ ist jetzt aber ein Operator. Es scheint so, als ob wir die Einteilchenwellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ zu $\Psi(\mathbf{r})$ „quantisiert“ haben. Daher die Bezeichnung „Zweite Quantisierung“. Wir haben aber nur einmal quantisiert, nämlich als wir $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ postuliert haben, der Rest folgte aus der Konstruktion des Fock-Raums und linearer Algebra.

Die Ähnlichkeit mit Einteilchenenerwartungswerten kann zu einem weiteren Missverständnis führen, das hier ausgeräumt werden soll: Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ charakterisiert den Zustand eines Systems, nämlich in der Ortsdarstellung. Der Quantenfeldoperator $\Psi(\mathbf{r})$ charakterisiert dagegen *nicht* den Zustand eines Systems, sondern ist ein Operator, der auf (Vielteilchen-) Zustände wirkt. Genauer ist $\Psi(\mathbf{r})$ ein Vernichtungsoperator, der versucht, ein Teilchen am Ort $\mathbf{r}$ zu vernichten. Die Kombination $\Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$ ist ein Operator, der prüft, ob am Ort $\mathbf{r}$ ein Teilchen vorhanden ist.

2.4.5 Impulsdarstellung

Für translationsinvariante Systeme ist, wie in der Einteilchen-Quantenmechanik, der Übergang zu Fourier-transformierten Größen nützlich. Wir führen zur späteren Verwendung ein:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} a_{\mathbf{k}} \quad (2.183)$$

$$\Rightarrow a_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3 r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}). \quad (2.184)$$

Dann folgt z. B. für die bilinearen Terme

$$\begin{aligned}
T &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d^3r a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}'} \\
&= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d^3r a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \frac{(\mathbf{k}')^2}{2m} a_{\mathbf{k}'} \\
&\quad \text{mit } \int d^3r e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} = \mathcal{V} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \\
&= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{V} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{(\mathbf{k}')^2}{2m} a_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{2.185}$$

und analog

$$V_1 = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d^3r e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} V_1(\mathbf{r}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} =: \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{(1)} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \tag{2.186}$$

sowie

$$\begin{aligned}
V_2 &= \frac{1}{2\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2} \int d^3r_1 d^3r_2 e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}'_1)\cdot\mathbf{r}_1} e^{-i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}'_2)\cdot\mathbf{r}_2} V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}'_2} a_{\mathbf{k}'_1} \\
&=: \frac{1}{2\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2} V_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_2-\mathbf{k}'_2}^{(2)} a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}'_2} a_{\mathbf{k}'_1}.
\end{aligned} \tag{2.187}$$

Die letztere Form vereinfacht sich, wenn $V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ nur vom Abstand der Teilchen abhängt.

2.5 Relativistisches skalares Feld

2.5.1 Klein-Gordon-Gleichung

Erinnerung an die Vorlesung Quantentheorie 2: Man motiviert die Klein-Gordon- (KG-) Gleichung durch die Ersetzung $\mathbf{p} \rightarrow -i\nabla$, $E \rightarrow i\partial/\partial t$ in der relativistischen Relation $E^2 = p^2 + m^2$ (das stellt sicher, dass der klassische Grenzfall korrekt herauskommt – Bohrsches Korrespondenzprinzip):

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\nabla^2 \psi + m^2 \psi \quad (c = \hbar = 1!) \tag{2.188}$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right)}_{=: \square} \psi + m^2 \psi = 0 \quad \text{Klein-Gordon-Gleichung.} \tag{2.189}$$

Relativistische Notation: Vierervektoren v mit kovarianten Komponenten v_μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$, und kontravarianten Komponenten v^μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$. Diese hängen zusammen über

$$v^\mu = \sum_{\nu} g^{\mu\nu} v_\nu \overset{\uparrow}{=} g^{\mu\nu} v_\nu \tag{2.190}$$

(Einsteinsche Summenkonvention)

und die Größen $g^{\mu\nu}$ bzw. $g_{\mu\nu}$ bilden die Matrix

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{2.191}$$

die sogenannte *Metrik*.

x^μ hat die Komponenten $(t, \mathbf{x})$. x_μ hat dann die Komponenten $(t, -\mathbf{x})$. Der Gradient

$$\partial^\mu := \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad \Rightarrow \quad \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \tag{2.192}$$

wird so definiert, dass gilt

$$\partial^\mu x_\mu = \sum_\mu \frac{\partial x_\mu}{\partial x_\mu} = 4. \quad (2.193)$$

Dann ist

$$\square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 = \partial^\mu \partial_\mu \quad (2.194)$$

und die KG-Gleichung lautet:

$$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2) \psi = 0 \quad (2.195)$$

Ohne Beweis sei hier wiederholt, dass die KG-Gleichung einen erhaltenen Strom

$$j^\mu := i (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) \quad (2.196)$$

hat, d. h. es gilt

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{\partial j^0}{\partial x^0} + \frac{\partial j^1}{\partial x^1} + \dots = \frac{\partial j^0}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial j^0}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}, \quad (2.197)$$

also die *Kontinuitätsgleichung*. Der Vorfaktor i sorgt dafür, dass j^μ reell ist, ansonsten ist der Vorfaktor beliebig.

Anders als in der nicht relativistischen Schrödinger-Quantenmechanik ist die 0-Komponente nicht positiv semidefinit:

$$j^0 = i \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) \quad (2.198)$$

kann kleiner als Null werden. (j^0 ist erster Ordnung in $\partial/\partial t$, aber die Klein-Gordon-Gleichung ist eine Differentialgleichung 2. Ordnung, sie erlaubt daher *beliebige* $\psi(\mathbf{r})$ und $\partial\psi(\mathbf{r})/\partial t$ zu fester Zeit t .) Wie in der Quantentheorie 2 sicherlich erwähnt wurde, macht dieses Problem eine Einteilchen-KG-Theorie inkonsistent. Zum anderen leidet sie auch unter dem Problem eines nach unten unbeschränkten Spektrums. Die Lösung für beide Probleme liegt im Übergang zur Vielteilchentheorie, am besten mittels zweiter Quantisierung.

2.5.2 Quantisierung des relativistischen skalaren Feldes

Wir gehen nach demselben Schema vor wie oben im nicht relativistischen Fall, d. h. wir bestimmen zunächst eine geeignete *Einteilchenbasis* und bauen daraus eine *Basis des Fock-Raums* auf. Wir betrachten zunächst den etwas einfacheren Fall des *reellen* skalaren Feldes. Den an sich natürlicheren Fall des komplexen skalaren Feldes werden wir anschließend diskutieren.

Für die Lösung der KG-Gleichung machen wir den Ansatz

$$\psi_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.199)$$

Wir fordern in diesem Abschnitt, dass $\psi(\mathbf{r}, t)$ reell sein soll. Dann muss in der Fourier-Transformation

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \psi_{\mathbf{k}}(t) \quad (2.200)$$

gelten, dass $\psi_{\mathbf{k}}^*(t) = \psi_{-\mathbf{k}}(t)$ ist. Mit der KG-Gleichung erhalten wir

$$\ddot{\psi}_{\mathbf{k}} + k^2 \psi_{\mathbf{k}} + m^2 \psi_{\mathbf{k}} = 0 \quad (2.201)$$

$$\Rightarrow \quad \ddot{\psi}_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^2 \psi_{\mathbf{k}} = 0 \quad (2.202)$$

mit $\omega_{\mathbf{k}}^2 := k^2 + m^2$. Dies ist die Gleichung für klassische, unabhängige harmonische Oszillatoren. Wir werden von dieser Erkenntnis später noch Gebrauch machen. Die Lösung erfolgt mittels des Ansatzes $\psi_{\mathbf{k}} = e^{\mp i\omega_{\mathbf{k}} t}$ mit $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{k^2 + m^2}$:

$$\ddot{\psi}_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^2 \psi_{\mathbf{k}} = -\omega_{\mathbf{k}}^2 \psi_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^2 \psi_{\mathbf{k}} = 0. \quad (2.203)$$

Wir sehen hier, dass die Energie positive und negative Werte $\pm\omega_{\mathbf{k}}$ annehmen kann. $\omega_{\mathbf{k}}$ wächst aber für $k \rightarrow \infty$ unbeschränkt an, so dass das Energiespektrum der Klein-Gordon-Gleichung betragsmäßig beliebig große negative Eigenwerte enthält. Es existiert daher kein Grundzustand. Das ist einer der Punkte, an denen die Einteilchen-Klein-Gordon-Theorie versagt.

Da wir reelle Lösungen suchen, schreiben wir

$$\psi_{\mathbf{k}} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}}}_{\text{konventionelle Normierung}} \left(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{komplexe Amplituden}}}{A_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + A_{-\mathbf{k}}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}} \right), \quad (2.204)$$

da dann gilt

$$\psi_{\mathbf{k}}^* = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} (A_{\mathbf{k}}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} + A_{-\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}) = \psi_{-\mathbf{k}}. \quad (2.205)$$

Die allgemeine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung lautet also, in Ortsdarstellung,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} (A_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + A_{-\mathbf{k}}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}). \quad (2.206)$$

Dies können wir auch schreiben als

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \mathbf{k} | \psi \rangle, \quad (2.207)$$

so dass offenbar gilt

$$\langle \mathbf{k} | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} (A_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + A_{-\mathbf{k}}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}) \equiv \psi_{\mathbf{k}}. \quad (2.208)$$

Die allgemeine Lösung (2.206) ist offenbar eine Superposition ebener Wellen, aber mit einer Nebenbedingung an die Koeffizienten, die aus der Forderung der Realität resultiert.

In der zweiten Quantisierung werden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Einteilchen-Zustände eingeführt. Die geeigneten Einteilchen-Zustände sind hier ebene Wellen, aber die Nebenbedingung macht die Herleitung schwierig. Wir führen die sich als zielführend erweisenden Feldoperatoren daher ohne vollständigen Beweis ein.

Die Einteilchen-Zustände bezeichnen wir mit $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$, versuchen aber zunächst nicht, sie direkt durch die $\psi_{\mathbf{k}}$ auszudrücken. Eine Basis des N -Teilchen-Hilbertraums $\mathcal{H}_N$ wird dann durch die Zustände

$$|\psi_{\mathbf{k}_1}\rangle |\psi_{\mathbf{k}_2}\rangle \cdots |\psi_{\mathbf{k}_N}\rangle \quad (2.209)$$

realisiert. Wie führen nun Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger$, $\Psi_{\mathbf{k}}$ für die Einteilchenzustände ein, d. h. wir schreiben

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \quad \text{etc.} \quad (2.210)$$

Die Forderung $\psi(\mathbf{r}, t) \in \mathbb{R}$ sollte zu einer Bedingung an die Operatoren $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger$, $\Psi_{\mathbf{k}}$ führen. Ohne Beweis stellen wir fest, dass diese

$$\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \Psi_{-\mathbf{k}} \quad (2.211)$$

lautet. Diese Beziehung ist offensichtlich ähnlich zur Bedingung $\psi_{\mathbf{k}}^* = \psi_{-\mathbf{k}}$ bei der Lösung der Einteilchen-Klein-Gordon-Gleichung.

Aus Gl. (2.211) folgt

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger(t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Psi_{-\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{k}}(t) = \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.212)$$

$\Psi(\mathbf{r}, t)$ ist also Hermitesch. Weiter folgt, dass wir $\Psi_{\mathbf{k}}$ in der Form

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \right) \quad (2.213)$$

schreiben können, wobei $a_{\mathbf{k}}, a_{-\mathbf{k}}^\dagger$ Operatoren sind. Wir können Gl. (2.212) nun auch schreiben als

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right). \quad (2.214)$$

Wir müssen jetzt noch über die Vertauschungseigenschaften von $\Psi_{\mathbf{k}}$ bzw. $a_{\mathbf{k}}$ entscheiden – beschreiben wir Bosonen oder Fermionen? Wir versuchen hier nicht, ganz allgemein alle Vertauschungs- oder Anti-vertauschungsrelationen zu ermitteln, die mit der Klein-Gordon-Feldtheorie vereinbar sind. Stattdessen zeigen wir, dass bosonische Vertauschungsrelationen der $a_{\mathbf{k}}$ zu einer widerspruchsfreien Theorie führen.

Unser Argument verwendet eine Analogie mit der klassischen Bewegungsgleichung von unabhängigen harmonischen Oszillatoren. Dies macht den physikalischen Gehalt klarer, ist aber für die Herleitung nicht erforderlich; wir könnten auch die bosonischen Vertauschungsrelationen postulieren und die Widerspruchsfreiheit der Theorie zeigen. Gleichung (2.202) ist die Bewegungsgleichung für unabhängige *klassische* harmonische Oszillatoren. Identifiziere $q_{\mathbf{k}} = \psi_{\mathbf{k}}$ als Auslenkung und $p_{\mathbf{k}} = \dot{\psi}_{\mathbf{k}}$ als Impuls. $q_{\mathbf{k}}$ und $p_{\mathbf{k}}$ sind kanonisch konjugierte Variablen im Sinne der klassischen Mechanik. In Analogie mit der Einteilchen-Quantenmechanik fordern wir daher (siehe Seite 12)

$$[p_{\mathbf{k}}, q_{\mathbf{k}'}] = [\dot{\psi}_{\mathbf{k}}, \psi_{\mathbf{k}'}] = -i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (2.215)$$

Analog zu Seite 25 folgt für das Quantenfeld $\Psi(\mathbf{r}, t)$ im Ortsraum

$$[\dot{\Psi}^{(\dagger)}(\mathbf{r}, t), \Psi(\mathbf{r}', t)] = -i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.216)$$

Beachte, dass die Zeit-Argumente beider Operatoren gleich sind. Wir suchen den Kommutator $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger]$. Zunächst gilt

$$\dot{\Psi}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(-i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} + i\omega_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} \right), \quad (2.217)$$

$$\dot{\Psi}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} - i\omega_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \right). \quad (2.218)$$

Wir haben damit ein lineares Gleichungssystem von vier Gleichungen für $a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}}^\dagger, a_{-\mathbf{k}}, a_{-\mathbf{k}}^\dagger$ das wir lösen können:

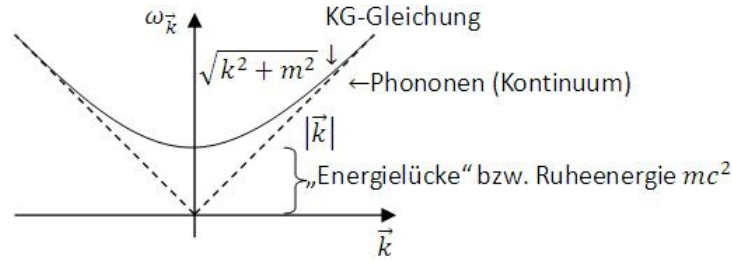
$$a_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2}} e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} \Psi_{\mathbf{k}} + i \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} \dot{\Psi}_{\mathbf{k}}, \quad (2.219)$$

$$a_{\mathbf{k}}^\dagger = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger - i \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \dot{\Psi}_{\mathbf{k}}^\dagger. \quad (2.220)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] &= \frac{1}{2} e^{i\omega_{\mathbf{k}} t - i\omega_{\mathbf{k}'} t} \left(\sqrt{\omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}'}} \underbrace{[\Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger]}_{\substack{= [\Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{-\mathbf{k}'}] = 0 \\ \text{(unter Vernachlässigung der uniformen Mode } \mathbf{k}=0)}} - i \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}'}}} \underbrace{[\Psi_{\mathbf{k}}, \dot{\Psi}_{\mathbf{k}'}^\dagger]}_{= i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} \right. \\ &\quad \left. + i \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}}}} \underbrace{[\dot{\Psi}_{\mathbf{k}}, \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger]}_{= [\Psi_{\mathbf{k}}, \dot{\Psi}_{\mathbf{k}'}^\dagger]^\dagger = (i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'})^\dagger = -i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} + \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}'}}} \underbrace{[\dot{\Psi}_{\mathbf{k}}, \dot{\Psi}_{\mathbf{k}'}^\dagger]}_{= [\Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{-\mathbf{k}'}] = 0, \text{ siehe 1. Term}} \right) \\ &= \frac{1}{2} (-i(i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}) + i(-i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'})) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \end{aligned} \quad (2.221)$$

Also erfüllen $a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger$ die kanonischen Vertauschungsrelationen für *Bosonen*. Das ist nicht überraschend wegen der Analogie zum harmonischen Oszillator, die wir für die heuristische Begründung benutzt haben. Das System ist in diesem Bild analog zu einem elastischen dreidimensionalen Körper ($\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$), aber mit einer etwas anderen Dispersionsrelation $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{k^2 + m^2}$, oder mit restaurierten Naturkonstanten $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{k^2 c^2 + m^2 c^4 / \hbar^2}$. Beachte, dass sich für $m \rightarrow 0$ die lineare Dispersion $\omega_{\mathbf{k}} = kc$ von Phononen im Kontinuum ergibt.



Von der linearen Kette kennen wir bereits einen Hamiltonian, der die gefundene Dynamik beschreibt, nämlich

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^2 q_{\mathbf{k}}^\dagger q_{\mathbf{k}} \right). \quad (2.222)$$

Also ausgedrückt durch das Feld Ψ

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\dot{\Psi}_{\mathbf{k}}^\dagger \dot{\Psi}_{\mathbf{k}} + \underbrace{\omega_{\mathbf{k}}^2}_{=k^2+m^2} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}} \right). \quad (2.223)$$

In Ortsdarstellung ist dann

$$H = \int d^3r \underbrace{\mathcal{H}(\mathbf{r})}_{\text{Hamilton-Dichte}} \quad (2.224)$$

mit

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left[\dot{\Psi}^2(\mathbf{r}) + |\nabla \Psi|^2 + m^2 \Psi^2(\mathbf{r}) \right], \quad (2.225)$$

wobei wir benutzt haben, dass Ψ Hermitesch ist. Beachte, dass die Hamilton-Dichte $\mathcal{H}$ den Ausdruck

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)^2 \quad (2.226)$$

enthält. Ist dies Lorentz-invariant? Nein! Lorentz-invariant ist nur der Lorentz-Skalar

$$\partial^\mu \Psi \partial_\mu \Psi = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)^2. \quad (2.227)$$

Der Lagrangian (Lagrange-Operator)

$$L = \int d^3r \underbrace{\mathcal{L}(\mathbf{r})}_{\text{Lagrange-Dichte}} \quad (2.228)$$

ist gegeben durch die Legendre-Transformation

$$L[q_{\mathbf{k}}, \dot{q}_{\mathbf{k}}] := \sum_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}} \dot{q}_{\mathbf{k}} - H[p_{\mathbf{k}}, q_{\mathbf{k}}] \quad (2.229)$$

$$\Rightarrow \mathcal{L}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left[\dot{\Psi}^2(\mathbf{r}) - |\nabla \Psi|^2 - m^2 \Psi^2(\mathbf{r}) \right] \quad (2.230)$$

$$\Rightarrow \mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial^\mu \Psi \partial_\mu \Psi - m^2 \Psi^2). \quad (2.231)$$

Der Lagrangian ist offenbar Lorentz-invariant. Daher werden relativistische Feldtheorien bevorzugt mittels ihrer Lagrange-Dichte $\mathcal{L}$ beschrieben, nicht mittels $\mathcal{H}$. Zurück zum Hamiltonian: Wir finden

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\dot{\Psi}_{\mathbf{k}}^\dagger \dot{\Psi}_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^2 \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}} \right) \\ &\stackrel{\text{s. 28}}{=} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left[\left(a_{\mathbf{k}}^\dagger i\omega_{\mathbf{k}} e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} + a_{-\mathbf{k}} (-i\omega_{\mathbf{k}}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \right) \left(a_{\mathbf{k}} (-i\omega_{\mathbf{k}}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger i\omega_{\mathbf{k}} e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \omega_{\mathbf{k}}^2 \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} + a_{-\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \right) \left(a_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \right) \\
& = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left[\underbrace{\omega_{\mathbf{k}}^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}}^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} e^{2i\omega_{\mathbf{k}} t}}_{-\alpha} \underbrace{- \omega_{\mathbf{k}}^2 a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}} t} + \omega_{\mathbf{k}}^2 a_{-\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger}_{-\beta} \right. \\
& \quad \left. + \underbrace{\omega_{\mathbf{k}}^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^2 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}} e^{2i\omega_{\mathbf{k}} t}}_{+\alpha} \underbrace{+ \omega_{\mathbf{k}}^2 a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}} t} + \omega_{\mathbf{k}}^2 a_{-\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger}_{+\beta} \right] \\
& = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger \right) = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right), \tag{2.232}
\end{aligned}$$

also entkoppelte harmonische Oszillatoren, wie erwartet. Beachte: H ist positiv definit. Wir haben dank des Übergangs zur Vielteilchentheorie (Feldtheorie) kein Problem mehr mit negativen Energieeigenwerten.

2.6 Komplexes skalares Feld

Wir hatten im vorigen Abschnitt verlangt, dass die Einteilchenwellenfunktionen $\psi(\mathbf{r}, t)$ reell seien. Wir hatten gesehen, dass dann der Feldoperator $\Psi(\mathbf{r}, t)$ Hermitesch ist. Es gab aber keine überzeugende Begründung dafür, dass $\psi \in \mathbb{R}$ sein soll. Das ist keine natürliche Forderung in der Quantenmechanik. Wir lassen sie jetzt fallen. (Wir werden aber sehen, dass es im Rahmen der QFT eine sinnvolle Forderung ist.)

Ein komplexes Feld $\psi(\mathbf{r}, t)$ ist einfach

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 + i\phi_2), \tag{2.233}$$

wobei $\phi_{1,2}$ *reelle* Felder sind. Wir schreiben in Analogie zum reellen Feld die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \partial^\mu \Psi^* \partial_\mu \Psi - m^2 \Psi^* \Psi \tag{2.234}$$

und finden

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} & = \frac{1}{2} \left(\partial^\mu \phi_1 \partial_\mu \phi_1 + \underbrace{i \partial^\mu \phi_1 \partial_\mu \phi_2 - i \partial^\mu \phi_2 \partial_\mu \phi_1}_{=0} \right. \\
& \quad \left. + \partial^\mu \phi_2 \partial_\mu \phi_2 - m^2 \phi_1^2 - \underbrace{im^2 \phi_1 \phi_2 + im^2 \phi_2 \phi_1}_{=0} - m^2 \phi_1^2 \right) \\
& = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 (\partial^\mu \phi_j \partial_\mu \phi_j - m^2 \phi_j^2). \tag{2.235}
\end{aligned}$$

Das ist einfach die Summe von Lagrange-Dichten für zwei reelle Felder, die nicht miteinander wechselwirken. Beim Übergang zur QFT ist es naheliegend zu fordern ($\phi \rightarrow \Phi, \psi \rightarrow \Psi$)

$$[\dot{\Phi}_i(\mathbf{r}, t), \Phi_j(\mathbf{r}', t)] = -i\delta_{ij}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{2.236}$$

$$[\Phi_i(\mathbf{r}, t), \Phi_j(\mathbf{r}', t)] = [\dot{\Phi}_i(\mathbf{r}, t), \dot{\Phi}_j(\mathbf{r}', t)] = 0. \tag{2.237}$$

Daraus folgt mit $\Psi = (\Phi_1 + i\Phi_2)/\sqrt{2}$:

$$[\dot{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t), \Psi(\mathbf{r}', t)] = -i\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{2.238}$$

$$\text{und } [\dot{\Psi}(\mathbf{r}, t), \Psi(\mathbf{r}', t)] = [\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t), \Psi(\mathbf{r}', t)] = [\Psi(\mathbf{r}, t), \Psi(\mathbf{r}', t)] = 0. \tag{2.239}$$

Wir drücken $\Phi_{1,2}$ wie oben durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_{1,2}^\dagger, a_{1,2}$ aus, so dass $\Phi_{1,2}$ Hermitesche Operatoren sind:

$$\Phi_j(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{j\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + a_{j\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (j = 1, 2) \quad (2.240)$$

mit

$$\left[a_{i\mathbf{k}}, a_{j\mathbf{k}'}^\dagger \right] = \delta_{ij} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad \text{etc.} \quad (2.241)$$

Wir könnten nun Ψ durch $a_j, a_j^\dagger$ ausdrücken. Es ist aber praktischer, neue Operatoren $b_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}}$ einzuführen:

$$b_{\mathbf{k}} = \frac{a_{1\mathbf{k}} + ia_{2\mathbf{k}}}{\sqrt{2}}, \quad (2.242)$$

$$c_{\mathbf{k}} = \frac{a_{1\mathbf{k}} - ia_{2\mathbf{k}}}{\sqrt{2}}. \quad (2.243)$$

Damit findet man $\left[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^\dagger \right] = \left[c_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}'}^\dagger \right] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ usw. Weiter gilt

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(b_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right) \quad (2.244)$$

und der Hamiltonian lautet

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left(b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \right) = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left(b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + 1 \right) \quad (2.245)$$

Wie zu erwarten war, erhalten wir zwei Sätze von entkoppelten harmonischen Oszillatoren.

Man kann jetzt den Stromoperator

$$j^\mu := i \left(\Psi^\dagger \partial^\mu \Psi - \Psi \partial^\mu \Psi^\dagger \right) \quad (2.246)$$

definieren. Man findet, dass j^μ ein erhaltener Strom ist: $\partial_\mu j^\mu = 0$ (dies folgt, da $\psi \partial^\mu \psi^* - \psi^* \partial^\mu \psi$ erhalten ist, wenn ψ eine Lösung der KG-Gleichung ist)

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} j^0 + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (2.247)$$

Integration über den Ortsraum ergibt

$$\frac{d}{dt} \int d^3r j^0(\mathbf{r}) + \underbrace{\int d^3r \nabla \cdot \mathbf{j}}_{=0} = 0. \quad (2.248)$$

j^0 ist die zeitliche Komponente des Stromdichtevektors, also eine Dichte. Wir können damit eine *erhaltene Ladung* Q definieren:

$$Q := \int d^3r j^0(\mathbf{r}) = i \int d^3r \left[\Psi^\dagger(\mathbf{r}) \dot{\Psi}(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r}) \dot{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \right] = \sum_{\mathbf{k}} \left(b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} - \underset{\uparrow}{c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}} \right). \quad (2.249)$$

Wir finden, dass die von $b_{\mathbf{k}}^\dagger$ erzeugten Feldquanten (Teilchen) die Ladung $+1$ tragen, während die von $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ erzeugten Quanten die Ladung -1 haben. (j^μ ist nur bis auf einen Zahlenfaktor festgelegt, insbesondere könnten wir die Vorzeichen auch umgekehrt wählen.) Wir nennen die c -Quanten *Antiteilchen* der b -Quanten. Wir sehen, dass $\Psi^\dagger$ Teilchen (b) erzeugt und Antiteilchen (c) vernichtet.

Beachte, dass Teilchen und Antiteilchen beide *positive* Energie $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{k^2 + m^2}$ und positive Masse m haben, siehe Seite 32. Somit ist das Energiespektrum nun von unten beschränkt und ein Grundzustand existiert, nämlich der Vakuumzustand ohne Teilchen b und c .

2.7 Feynman-Propagator

Wir kennen im Prinzip die Dynamik des Feldes Ψ , die durch die Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2} \int d^3r \left(\partial^\mu \Psi^\dagger \partial_\mu \Psi - m^2 \Psi^\dagger \Psi \right) \quad (2.250)$$

festgelegt wird. Aus der Lagrange Funktion folgt als Euler-Lagrange-Gleichung die KG-Gleichung

$$\partial^\mu \partial_\mu \Psi - m^2 \Psi = 0. \quad (2.251)$$

Wir wollen aber nun die Dynamik im *Teilchenbild* beschreiben. Wir wollen dazu angeben, mit welcher Wahrscheinlichkeit (genauer Wahrscheinlichkeitsamplitude) ein Teilchen zur Zeit t_2 am Ort $\mathbf{r}_2$ (im Volumenelement d^3r_2) ist, wenn es zur Zeit t_1 am Ort $\mathbf{r}_1$ war. Diese bedingte Wahrscheinlichkeitsamplitude wird durch die *Green-Funktion* (den *Propagator*)

$$\Delta^{(+)}(\overset{4\text{-Vektoren}}{\underset{\downarrow}{x_1}, \underset{\downarrow}{x_2}}) := -i \langle 0 | \Psi(x_2) \Psi^\dagger(x_1) | 0 \rangle = -i \langle 0 | \Psi(\mathbf{r}_2, t_2) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1, t_1) | 0 \rangle \quad (2.252)$$

beschrieben. Zur Erinnerung, der Feldoperator lautet

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(b_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right). \quad (2.253)$$

Da nach Definition

$$b_{\mathbf{k}} |0\rangle = c_{\mathbf{k}} |0\rangle = 0 \quad (2.254)$$

und daher

$$\langle 0 | b_{\mathbf{k}}^\dagger = \langle 0 | c_{\mathbf{k}}^\dagger = 0, \quad (2.255)$$

gilt

$$\Delta^{(+)}(x_1, x_2) := -i \left\langle 0 \left| \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{2\sqrt{\omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}'}}} b_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2 - \omega_{\mathbf{k}} t_2)} b_{\mathbf{k}'}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_1 - \omega_{\mathbf{k}'} t_1)} \right| 0 \right\rangle. \quad (2.256)$$

Ein nicht verschwindender Beitrag existiert nur für $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$:

$$\dots = -i \left\langle 0 \left| \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) - i\omega_{\mathbf{k}}(t_2 - t_1)} b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger \right| 0 \right\rangle =: \Delta^{(+)}(x_2 - x_1) \quad (2.257)$$

Wir sehen:

1. $\Delta^{(+)}$ hängt nur von $x_2 - x_1$ ab, da das System translationsinvariant in Raum und Zeit ist und
2. $\Delta^{(+)}$ beschreibt die Propagation eines Teilchens b von x_1 nach x_2 .

Physikalisch wollen wir oft (aber nicht immer) *kausale* Prozesse beschreiben, d. h. solche, bei denen die Ursache (Erzeugung von b aus dem Vakuum) der Wirkung (Vernichtung von b) vorausgeht. Das erfordert offenbar $t_2 > t_1$. Analog definieren wir

$$\begin{aligned} \Delta^{(-)}(x_1, x_2) &:= -i \langle 0 | \Psi^\dagger(x_2) \Psi(x_1) | 0 \rangle \\ &= -i \left\langle 0 \left| \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) + i\omega_{\mathbf{k}}(t_2 - t_1)} c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger \right| 0 \right\rangle \\ &=: \Delta^{(-)}(x_2 - x_1), \end{aligned} \quad (2.258)$$

dies beschreibt die Propagation eines Antiteilchens c von x_2 nach x_1 . Dieser Prozess ist kausal, wenn $t_1 > t_2$. Der *kausale* oder *Feynman-Propagator* ist definiert als der für gegebene t_1, t_2 kausale Propagator $\Delta^{(\pm)}$:

$$\Delta_F(x_2 - x_1) := \begin{cases} -i \langle 0 | \Psi(x_2) \Psi^\dagger(x_1) | 0 \rangle & \text{für } t_2 > t_1, \\ -i \langle 0 | \Psi^\dagger(x_1) \Psi(x_2) | 0 \rangle & \text{für } t_2 < t_1 \end{cases}$$

$$\equiv -i \langle 0 | T \Psi(x_2) \Psi^\dagger(x_1) | 0 \rangle. \quad (2.259)$$

Hier ist T der *Zeitordnungsoperator*. T ist kein Operator auf dem Hilbertraum, sondern eine Vorschrift, wie die nachfolgenden Operatoren zu ordnen sind: T arrangiert diese Operatoren so, dass deren Zeitargumente von rechts nach links zunehmen,

$$TA(t_2)B(t_1) := \begin{cases} A(t_2)B(t_1) & \text{für } t_2 > t_1, \\ A(t_1)B(t_2) & \text{für } t_2 < t_1. \end{cases} \quad (2.260)$$

Für das komplexe skalare Feld ohne Wechselwirkungen, das wir bisher beschrieben haben, können wir Δ_F ausrechnen:

$$\begin{aligned} \Delta_F(x) &= -i \begin{cases} \langle 0 | \Psi(x) \Psi^\dagger(0) | 0 \rangle & \text{für } x^0 = t > 0, \\ \langle 0 | \Psi^\dagger(0) \Psi(x) | 0 \rangle & \text{für } x^0 = t < 0 \end{cases} \\ &= -i \left\langle 0 \left| \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}}t} \underbrace{b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger}_{=1} \\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}}t} \underbrace{c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger}_{=1} \end{pmatrix} \right| 0 \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.261)$$

Im Fall $t > 0$ ersetzen wir $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$,

$$\dots = -i \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}}t} \\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}}t} \end{pmatrix}. \quad (2.262)$$

Übergang zum unendlich großen System:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (2.263)$$

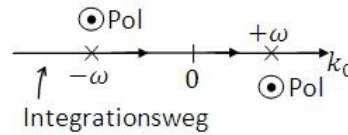
ergibt

$$\dots = -i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}}|t|}. \quad (2.264)$$

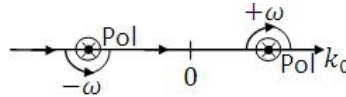
Nun sieht dies nicht Lorentz-invariant aus, da die Zeit t in anderer Form als der Ort $\mathbf{r}$ auftritt und nur über Dreivektoren $\mathbf{k}$ integriert wird. Wir benutzen folgende Identität, um ein Integral über Vierervektoren k^μ zu erhalten:

$$e^{-i\omega|t|} = \frac{i\omega}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk^0 \frac{e^{ik^0 t}}{(k^0)^2 - \omega^2 + i\eta} \quad \text{mit } \eta \rightarrow 0^+, \quad (2.265)$$

wobei $+i\eta$ angibt, auf welcher Seite wir am Pol bei $k_0^2 = \omega^2$ vorbei integrieren sollen.



dies ist dasselbe wie



$$\Rightarrow \quad \Delta_F(x) = -i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \frac{i\omega_{\mathbf{k}}}{\pi} \int dk^0 \frac{e^{ik^0 t - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\underbrace{(k^0)^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2}_{=(k^0)^2 - \mathbf{k}\cdot\mathbf{k} - m^2} + i\eta}$$

$$= \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{e^{ik^\mu x_\mu}}{k^\mu k_\mu - m^2 + i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+}. \quad (2.266)$$

Dies ist der gesuchte Propagator. Er ist explizit Lorentz-invariant. Um zu sehen, dass wir Δ_F zu Recht als Green-Funktion bezeichnet haben, berechnen wir

$$\begin{aligned} (\partial^\mu \partial_\mu + m^2) \Delta_F(x) &= \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2 \right) \Delta_F(x) \\ &= \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \underbrace{\left(-(k^0)^2 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} + m^2 \right)}_{= -(k^\mu k_\mu - m^2)} \frac{e^{ik^\mu x_\mu}}{k^\mu k_\mu - m^2 + i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} \\ &= - \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} e^{ik^\mu x_\mu} = - \frac{1}{(2\pi)^4} (2\pi)^4 \delta(x^0) \delta(x^1) \delta(x^2) \delta(x^3) \\ &\quad \text{4-Vektor} \\ &= -\delta(\mathbf{r}) \delta(t) = -\delta(\overset{\downarrow}{x}). \end{aligned} \quad (2.267)$$

Δ_F ist also tatsächlich die Green-Funktion der KG-Gleichung, also die Lösung der Gleichung für die Inhomogenität $-\delta(x)$ (das Vorzeichen ist konventionsabhängig). Wir können das vierdimensionale Integral in $\Delta_F(x)$ explizit ausführen. Wir geben nur das Ergebnis an:

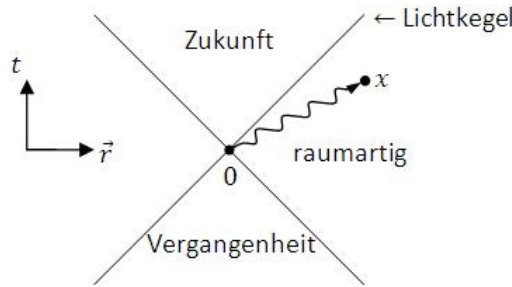
$$\Delta_F(x) = \frac{m}{8\pi\sqrt{x^2}} H_1^{(1)}(m\sqrt{x^2}) \quad \text{für } x^2 \equiv t^2 - r^2 > 0 \text{ (zeitartig)}, \quad (2.268)$$

$$\Delta_F(x) = -\frac{im}{4\pi\sqrt{-x^2}} K_1(m\sqrt{-x^2}) \quad \text{für } x^2 < 0 \text{ (raumartig)}. \quad (2.269)$$

K_1 und $H_1^{(1)}$ sind Bessel-Funktionen. Zusätzlich enthält Δ_F noch eine δ -Distributions-Singularität bei $x^2 = 0$ (auf dem Lichtkegel):

$$\Delta_F(x) \cong -\frac{1}{4\pi} \delta(x^2) \quad \text{für } x^2 \rightarrow 0 \quad (2.270)$$

Wieso ist $\Delta_F(x) \neq 0$ für raumartige x ? Ist hier nicht die Kausalität verletzt? Schließlich müsste sich eine Wirkung von 0 schneller als mit der Lichtgeschwindigkeit ausbreiten, um den Punkt x zu erreichen.



Antwort: Dies drückt aus, dass ein Teilchen nicht beliebig scharf in der Raumzeit lokalisiert werden kann. Die Heisenbergsche Unschärferelation lautet

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{1}{2} \quad (\text{weil } \hbar = 1), \quad (2.271)$$

wobei für ΔE eine typische Skala m ist und Δt im relativistischen Fall durch eine Lorentz-invariante Größe, $-\Delta x^2 = \Delta r^2 - \Delta t^2$, ersetzt wird,

$$\Rightarrow \quad m\sqrt{-\Delta x^2} \geq \frac{1}{2}. \quad (2.272)$$

2.8 ϕ^4 -Theorie

Wir wollen zum Abschluss des Abschnitts zu bosonischen Feldern kurz eine der einfachsten Quantenfeldtheorien erwähnen, die Wechselwirkungen enthalten. Es ist die ϕ^4 -Theorie, die durch die Lagrange-Dichte (für reelles bzw. Hermitesches Feld)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial^\mu \Psi \partial_\mu \Psi - \frac{1}{2} m^2 \Psi^2 - \underbrace{\frac{1}{4} g \Psi^4}_{\text{neu}} \quad (2.273)$$

definiert wird. Diese ergibt als Bewegungsgleichung

$$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2) \Psi + g \Psi^3 = 0, \quad (2.274)$$

die nichtlinear ist. Diese Nichtlinearität stammt offenbar vom Term vierter Ordnung im Feld, daher die Bezeichnung „ ϕ^4 -Theorie“. Terme höherer als zweiter Ordnung beschreiben Wechselwirkungen, während Terme zweiter Ordnung einfach die ungestörte Propagation bestimmen, wie wir oben gesehen haben. Die Wechselwirkung bzw. die Nichtlinearität macht diese Theorie sehr viel schwieriger aber damit auch interessanter als die freie bosonische Feldtheorie.

In den Kapiteln zur Vielteilchentheorie werden Wechselwirkungen eine zentrale Rolle spielen. Wir verschieben die Diskussion von Methoden für wechselwirkende Felder bis dahin.

2.9 Dirac-Feld

2.9.1 Erinnerung an die Dirac-Gleichung

Wir hatten gesehen, dass die KG-Gleichung keine konsistente Einteilchentheorie beschreibt. Der Grund ist, dass sie von 2. Ordnung in der Zeit ist, und daher beliebige (Orts-) Funktionen $\psi(\mathbf{r}, t)$ und $\dot{\psi}(\mathbf{r}, t)$ zu festen t erlaubt (vgl. Anfangsbedingungen für Dgl. 2. Ordnung: man kann ψ und $\dot{\psi}$ vorgeben). Daher kann $j^0(\mathbf{r}, t)$ beliebig reell sein, insbesondere auch negativ.

Um dieses Problem zu lösen, sind wir oben zur Vielteilchentheorie bzw. QFT übergegangen. Dirac versuchte dagegen, eine relativistische Einteilchen-Quantenmechanik zu retten, indem er zu einer Gleichung 1. Ordnung in der Zeit überging. Aufgrund der Lorentz-Invarianz muss sie dann auch 1. Ordnung in den räumlichen Koordinaten sein. Also schrieb Dirac

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi \quad \text{mit } H = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Impulsoperator } -i\nabla}}{\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}} + \beta m \quad (2.275)$$

Dies ist die *Dirac-Gleichung*. Hier sind $\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3$ und β Hermitesche Operatoren, die nicht auf den Ort $\mathbf{r}$ wirken (damit die Gleichung von 1. Ordnung in ∇ ist) und nicht von $\mathbf{r}$ abhängen (Translationsinvarianz). Sie wirken daher nur auf *innere Freiheitsgrade*. Es folgt

$$\begin{aligned} H^2 &= \sum_{jk} \alpha^j p_j \alpha^k p_k + \sum_j \alpha^j p_j \beta m + \sum_k \beta m \alpha^k p_k + \beta^2 m^2 \\ &= \sum_j (\alpha^j)^2 p_j^2 + \sum_{\substack{jk \\ j \neq k}} \alpha^j \alpha^k \underbrace{p_j p_k}_{\text{vertauschen}} + \sum_j (\alpha^j \beta + \beta \alpha^j) p_j m + \beta^2 m^2 \\ &= \sum_j (\alpha^j)^2 p_j^2 + \sum_{\substack{jk \\ j < k}} (\alpha^j \alpha^k + \alpha^k \alpha^j) p_j p_k + \sum_j (\alpha^j \beta + \beta \alpha^j) p_j m + \beta^2 m^2. \end{aligned} \quad (2.276)$$

Wir fordern zusätzlich, dass $H^2 = p^2 + m^2$ gilt. Dies stellt sicher, dass der klassische Grenzfall korrekt ist. Das bedeutet übrigens, dass ψ zugleich auch die KG-Gleichung erfüllen soll. Die Forderung der Energie-Impuls-Beziehung impliziert

$$\Rightarrow (\alpha^j)^2 = 1, \quad (2.277)$$

$$\alpha^j \alpha^k + \alpha^k \alpha^j = 0 \quad \text{für } j \neq k, \quad (2.278)$$

$$\alpha^j \beta + \beta \alpha^j = 0, \quad (2.279)$$

$$\beta^2 = 1. \quad (2.280)$$

Eine einfache Umschreibung lässt uns besser erkennen, dass die Dirac-Gleichung Lorentz-invariant ist. Wir multiplizieren

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} - H \psi = 0 \quad (2.281)$$

von links mit β :

$$i \beta \frac{\partial \psi}{\partial t} + i \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \psi - \underbrace{\beta^2}_{=1} m \psi = 0, \quad (2.282)$$

definieren vier Operatoren

$$\gamma^0 := \beta, \quad (2.283)$$

$$\gamma^j := \beta \alpha^j \quad (j = 1, 2, 3) \quad (2.284)$$

und bilden daraus einen Vierervektor (-Operator) γ^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$). Dann lautet die Dirac-Gleichung

$$i \gamma^\mu \partial_\mu \psi - m \psi = 0. \quad (2.285)$$

Schreibweise: für jeden Vierervektor v_μ sei $\not{v} := \gamma^\mu v_\mu$ („Feynman dagger“). Dann lautet die Dirac-Gleichung

$$i \not{\partial} \psi - m \psi = 0. \quad (2.286)$$

Die Bedingungen an β , α^j implizieren

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2 g^{\mu\nu}, \quad (2.287)$$

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, \quad (2.288)$$

$$(\gamma^j)^\dagger = -\gamma^j \quad (j = 1, 2, 3) \quad (2.289)$$

$$\left(\Rightarrow \gamma^0 (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 = \gamma^\mu \right). \quad (2.290)$$

Wir suchen eine Darstellung der γ^μ , d. h. wir wollen sie als Matrizen mit diesen Eigenschaften schreiben. Dafür gibt es unendlich viele Möglichkeiten. Es zeigt sich (vgl. z. B. Messiah, Quantenmechanik, Bd. 2), dass man die γ^μ nicht durch kleinere als 4×4 Matrizen darstellen kann. Die Standard-Darstellung beinhaltet mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma^1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma^0 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.291)$$

folgende 4×4 Matrizen:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma^0 & 0 \\ 0 & -\sigma^0 \end{pmatrix}, \quad (2.292)$$

$$\gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ -\sigma^j & 0 \end{pmatrix} \quad (j = 1, 2, 3). \quad (2.293)$$

In dieser vierdimensionalen Darstellung muss $\psi(\mathbf{r}, t)$ ein vierkomponentiger Vektor sein, da die γ^μ auf ψ wirken. Also

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (2.294)$$

(„Dirac-Spinor“). Bemerkung: ψ ist *kein* relativistischer Vierervektor. Der vierdimensionale Spinor-Raum der ψ hat nichts mit der 4-dimensionalen Raumzeit zu tun.

Der Hermitesch adjungierte (oder konjugierte) Vektor ist

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*). \quad (2.295)$$

Man führt noch den *Pauli-adjungierten* Vektor

$$\bar{\psi} := \psi^\dagger \gamma^0 = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*) \quad (2.296)$$

ein. (In der relativistischen Quantenmechanik und QFT nennt man letzteren einfach den „adjungierten“ Vektor.) Man kann zeigen, dass

$$j^\mu := \bar{\psi} \gamma^\mu \psi = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi \quad (2.297)$$

eine erhaltene Stromdichte ist:

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \quad (2.298)$$

Ihre 0-Komponente, die Teilchenzahldichte, lautet

$$j^0 = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \psi = \psi^\dagger \psi = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_3^* \psi_3 + \psi_4^* \psi_4 \geq 0 \quad (2.299)$$

und ist offenbar positiv semidefinit. In dieser Hinsicht führt die Dirac-Gleichung, anders als die KG-Gleichung nicht zu einem Problem.

Wir lösen nun die Dirac-Gleichung

$$i\gamma^\mu \partial_\mu \psi - m\psi = 0, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (2.300)$$

mittels des Ansatzes ebener Wellen,

$$\psi = u(k) e^{-ik_\nu x^\nu} \equiv u(k) e^{-ik^\nu x_\nu}, \quad (2.301)$$

wobei

$$u(k) = \begin{pmatrix} u_1(k) \\ u_2(k) \\ u_3(k) \\ u_4(k) \end{pmatrix} \quad (2.302)$$

ein vierkomponentiger Dirac-Spinor ist. Es folgt

$$i\gamma^\mu (-ik_\mu) u(k) e^{-ik_\nu x^\nu} - m u(k) e^{-ik_\nu x^\nu} = 0, \quad (2.303)$$

$$\gamma^\mu k_\mu u(k) - m u(k) = 0. \quad (2.304)$$

Wir multiplizieren von links mit $k_\nu \gamma^\nu + m$:

$$k_\nu \gamma^\nu \gamma^\mu k_\mu u(k) + \underbrace{m \gamma^\mu k_\mu u(k) - k_\nu \gamma^\nu m u(k)}_{=0} - m^2 u(k) = 0 \quad (2.305)$$

$$\Rightarrow k^\mu k_\mu u(k) - m^2 u(k) = 0. \quad (2.306)$$

Um eine Lösung zu erhalten, muss also

$$k^\mu k_\mu \equiv (k^0)^2 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = m^2 \quad (2.307)$$

sein. Dies folgt schon aus der Beobachtung, dass ψ auch die KG-Gleichung erfüllt. Es ist der übliche relativistische Energie-Ausdruck. Also ist

$$k^0 = \pm \sqrt{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} + m^2} \quad (2.308)$$

bis auf das Vorzeichen festgelegt und $u(k) = u(\mathbf{k})$ hängt nur vom Dreivektor $\mathbf{k}$ ab. Sei wie oben

$$\omega_{\mathbf{k}} := \sqrt{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} + m^2} > 0. \quad (2.309)$$

Die Matrix in der Dirac-Gleichung (2.304) lautet

$$\gamma^\mu k_\mu - m \equiv \beta - m = \begin{pmatrix} k^0 - m & 0 & -k^3 & -k^1 + ik^2 \\ 0 & k^0 - m & -k^1 - ik^2 & k^3 \\ k^3 & k^1 - ik^2 & -k^0 - m & 0 \\ k^1 + ik^2 & -k^3 & 0 & -k^0 - m \end{pmatrix}. \quad (2.310)$$

Daraus erhalten wir die Lösungen

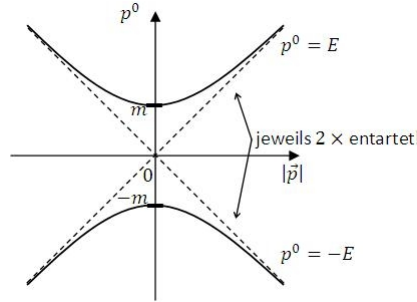
$$u^+(\mathbf{k}, 1) := \underbrace{\sqrt{\frac{m + \omega_{\mathbf{k}}}{2m}}}_{\substack{\uparrow \\ \text{konventioneller Normierungsfaktor}}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{k^3}{m + \omega_{\mathbf{k}}} \\ \frac{k^1 + ik^2}{m + \omega_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad \text{mit } k^0 = \omega_{\mathbf{k}}, \quad (2.311)$$

$$u^+(\mathbf{k}, 2) := \sqrt{\frac{m + \omega_{\mathbf{k}}}{2m}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{k^1 - ik^2}{m + \omega_{\mathbf{k}}} \\ \frac{-k^3}{m + \omega_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad \text{mit } k^0 = \omega_{\mathbf{k}}, \quad (2.312)$$

$$u^-(\mathbf{k}, 1) := \sqrt{\frac{m + \omega_{\mathbf{k}}}{2m}} \begin{pmatrix} \frac{-k^3}{m + \omega_{\mathbf{k}}} \\ \frac{-k^1 - ik^2}{m + \omega_{\mathbf{k}}} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit } k^0 = -\omega_{\mathbf{k}}, \quad (2.313)$$

$$u^-(\mathbf{k}, 2) := \sqrt{\frac{m + \omega_{\mathbf{k}}}{2m}} \begin{pmatrix} \frac{-k^1 + ik^2}{m + \omega_{\mathbf{k}}} \\ \frac{k^3}{m + \omega_{\mathbf{k}}} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit } k^0 = -\omega_{\mathbf{k}}, \quad (2.314)$$

wie man durch einsetzen in Gl. (2.304) prüft. Die Dispersionsrelation sieht nun so aus:



Wir sehen, dass die Dirac-Gleichung wie die KG-Gleichung Lösungen mit negativen Energien von beliebig großem Betrag hat. (Das Spektrum ist unbeschränkt von unten.) Diese Eigenschaft macht eine Einteilchen-Dirac-Theorie inkonsistent und erfordert wieder den Übergang zur QFT. Diracs ursprüngliches Programm zur Konstruktion einer relativistischen Einteilchen-Quantenmechanik ist also gescheitert. Allerdings können wir wie zuvor die Lösungen der Dirac-Gleichung zur Konstruktion von Vielteilchenzuständen benutzen.

2.9.2 Dirac-Feldtheorie

Wie gesehen erfordert Diracs Idee Zustandsvektoren mit (mindestens) vier Komponenten. Dies entspricht inneren Freiheitsgraden der beschriebenen Teilchen, die vier verschiedene Werte annehmen können. Ohne Beweis geben wir an, dass es sich hier um einen Spin-1/2-Freiheitsgrad und um den Teilchen/Antiteilchen-Freiheitsgrad handelt. Die möglichen Zustände sind also

$$\begin{aligned} &|\text{Teilchen}, \uparrow\rangle, \quad |\text{Teilchen}, \downarrow\rangle, \\ &|\text{Antiteilchen}, \uparrow\rangle, \quad |\text{Antiteilchen}, \downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Ebenfalls ohne Beweis sei mitgeteilt, dass halbzahlige Spins fermionische Symmetrie der Wellenfunktion erfordern und umgekehrt (Spin-Statistik-Theorem).

Beim Übergang zur QFT wollen wir also das Feld $\psi(x)$ durch einen Feldoperator $\Psi(x)$ mit fermionischen Antivertauschungsrelationen ersetzen. (Bemerkung: Genauer müssten wir jetzt wieder eine Basis von Vielteilchenzuständen aus den Eigenzuständen der Einteilchen-Dirac-Gleichung konstruieren usw.)

Die Dirac-Gleichung folgt als Euler-Lagrange-Gleichung aus der („klassischen“) Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\partial\!\!\!/ - m)\psi, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (2.315)$$

Die kanonisch konjugierte Größe π_a zu ψ_a finden wir wie in der Mechanik:

$$\pi_a = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_a} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \psi_a)} = i\bar{\psi}_b \gamma_{ba}^0 = i\psi_a^\dagger \quad (2.316)$$

↗
Erinnerung: $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$
 $\Rightarrow \bar{\psi} \gamma^0 = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 = \psi^\dagger$.

Würden wir Bosonen beschreiben wollen, so wäre es naheliegend, beim Übergang zur QFT kanonische Vertauschungsrelationen für die Koordinaten ψ_a und Impulse $i\psi_a^*$ zu fordern. Für Fermionen setzen wir stattdessen die Antikommutatoren an. Man kann zeigen, dass die Zweite Quantisierung auf genau diese Relationen führt. Also sollen nun Ψ_a und $\Psi_a^\dagger$ fermionische Antivertauschungsrelationen erfüllen:

$$\{\Psi_a(\mathbf{r}, t), \Psi_b^\dagger(\mathbf{r}', t)\} = \delta_{ab} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.317)$$

$$\{\Psi_a(\mathbf{r}, t), \Psi_b(\mathbf{r}', t)\} = 0 \quad \text{usw.} \quad (2.318)$$

Wir können Ψ wie zuvor nach Einteilchenzuständen (Lösungen der Dirac-Gleichung) entwickeln. Dazu ist es nützlich zu setzen

$$u(\mathbf{k}, s) := u^+(\mathbf{k}, s), \quad (2.319)$$

$$v(\mathbf{k}, s) := u^-(\mathbf{k}, s) \quad (2.320)$$

(physikalisch drückt das aus, dass die Abwesenheit eines Teilchens mit Impuls $\mathbf{k}$ einem Antiteilchen mit Impuls $-\mathbf{k}$ entspricht). Wir schreiben

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s=1}^2 \sqrt{\frac{m}{E_{\mathbf{k}}}} \left[a_{\mathbf{k}s} u(\mathbf{k}, s) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - E_{\mathbf{k}} t)} + b_{\mathbf{k}s}^\dagger v(\mathbf{k}, s) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - E_{\mathbf{k}} t)} \right]. \quad (2.321)$$

Man kann zeigen, dass dann fermionische Antivertauschungsrelationen für a, b folgen:

$$\{a_{\mathbf{k}s}, a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger\} = \{b_{\mathbf{k}s}, b_{\mathbf{k}'s'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ss'}, \quad (2.322)$$

$$\{a, a\} = \{a^\dagger, a^\dagger\} = \{b, b\} = \{b^\dagger, b^\dagger\} = \{a, b\} = \{a, b^\dagger\} = 0 \quad (2.323)$$

für beliebige Indizes. In Ψ vernichtet a ein Teilchen und $b^\dagger$ erzeugt ein Antiteilchen. Bis auf den fermionischen Charakter ist alles analog zum komplexen (bosonischen) Feld im vorigen Abschnitt. Insbesondere erhalten wir für den Hamiltonian (Gesamtenergie)

$$H = \sum_{\mathbf{k}s} E_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} + b_{\mathbf{k}s}^\dagger b_{\mathbf{k}s} \underbrace{-1}_{\text{irrelevante Konstante}} \right). \quad (2.324)$$

Dies ist jetzt beschränkt von unten. Die Ladung wird wieder über die 0-Komponente der Stromdichte definiert:

$$Q = \int d^3r j^0 = \int d^3r \bar{\Psi} \gamma^0 \Psi = \int d^3r \Psi^\dagger \Psi = \sum_{\mathbf{k}s} \left(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} - b_{\mathbf{k}s}^\dagger b_{\mathbf{k}s} \underbrace{+1}_{\text{irrelevant}} \right). \quad (2.325)$$

Wie bei Bosonen haben Teilchen und Antiteilchen beide positive Energie aber entgegengesetzte Ladung.

2.9.3 Feynman-Propagator für das Dirac-Feld

Die Definition des Feynman-Propagators erfolgt im Prinzip wie für das komplexe Feld, bis auf folgende Unterschiede:

- Ψ ist jetzt ein vierkomponentiger Vektor, der Propagator wird daher eine 4×4 Matrix.
- Werden zwei fermionische Faktoren vertauscht, so ändert sich das Vorzeichen.
- $\Psi^\dagger$ wird durch das Pauli-adjungierte Feld $\bar{\Psi}$ ersetzt.

Also:

$$S_F(x) := -i \left\langle 0 \left| \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Zeitordnungsoperator}}}{T} \Psi(x) \bar{\Psi}(0) \right| 0 \right\rangle, \quad (2.326)$$

wobei

$$T\Psi(x)\bar{\Psi}(0) = \begin{cases} \Psi(x)\bar{\Psi}(0) & \text{für } x^0 > 0, \\ -\bar{\Psi}(0)\Psi(x) & \text{für } x^0 < 0 \end{cases} \quad (2.327)$$

und $\Psi(x)\bar{\Psi}(0)$ ist das äußere (Tensor-) Produkt der beiden Vektoren:

$$[S_F(x)]_{ab} = -i \left\langle 0 \left| T\Psi_a(x)\bar{\Psi}_b(0) \right| 0 \right\rangle. \quad (2.328)$$

Wie im bosonischen Fall tragen für $x^0 > 0$ nur die (a -) Teilchen und für $x^0 < 0$ nur die (b -) Antiteilchen bei. Aus der expliziten Darstellung von Ψ erhalten wir analog

$$S_F(x) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{-ik^\mu x_\mu} \underbrace{\frac{1}{\gamma^\mu k_\mu - m + i\eta}}_{\not{k}} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+}. \quad (2.329)$$

Beachte, dass $\not{k}$ eine 4×4 -Matrix ist, der Bruch ist also als Matrix-Inversion zu verstehen.

Wir erkennen einen Zusammenhang zwischen der Bewegungsgleichung (Klein-Gordon bzw. Dirac) im Fourier-Raum und dem Fourier-transformierten Propagator:

	KG	Dirac
Gleichung:	$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2) \psi(x) = 0$ $\Rightarrow (-k^\mu k_\mu + m^2) \psi(x) = 0$	$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(x) = 0$ $\Rightarrow (\gamma^\mu k_\mu - m) \psi(k) = 0$
Propagator:	$\frac{1}{k^\mu k_\mu - m^2 + i\eta}$	$\frac{1}{\gamma^\mu k_\mu - m + i\eta}$

2.10 Elektromagnetismus

Nach dem skalaren Feld (Spin 0) und dem Dirac-Feld (Spin 1/2) kommen wir nun zum elektromagnetischen Feld mit Spin 1. Hier kommen einige neue Ideen ins Spiel, denn das elektromagnetische Feld ist nicht einfach ein bosonisches Feld, nur mit Spin 1 statt 0, sondern ist zusätzlich ein *Eichfeld*. Wir erinnern uns zunächst an die klassische Elektrodynamik und formulieren deren Grundgleichungen dann in relativistischer Form.

Das elektrische und das magnetische Feld sind, in Gegenwart von Ladungen und Strömen, durch die Maxwell-Gleichungen

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \varrho, \quad (2.330)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.331)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.332)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = 4\pi \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.333)$$

bestimmt. Wir verwenden hier *Gaußsche Einheiten* und setzen weiterhin $c = 1$. (In späteren Abschnitten werden wir zu SI-Einheiten übergehen, aber hier sind Gaußsche Einheiten zunächst praktischer.) Wir können zwei der vier Gleichungen lösen, indem wir *Eichfelder* $\phi, \mathbf{A}$ einführen:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2.334)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}. \quad (2.335)$$

Die Maxwell-Gleichungen werden zu

$$\nabla^2\phi + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = -4\pi\rho, \quad (2.336)$$

$$0 = 0, \quad (2.337)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{A} = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2.338)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} = 4\pi\mathbf{j} - \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial\phi}{\partial t} \right). \quad (2.339)$$

Wir erkennen, dass zwei der Gleichungen trivial werden. Die Maxwell-Gleichungen ändern sich nicht unter der simultanen *Eichtransformation*

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad (2.340)$$

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t} \quad (2.341)$$

mit einer beliebigen Funktion $\chi(\mathbf{r}, t)$. D. h. die physikalischen Eigenschaften sind invariant unter dieser Eichtransformation. Die gesuchte Theorie muss diese Invarianz enthalten.

Interpretation: $(\phi, \mathbf{A})$ enthalten mehr Information, als zur eindeutigen Beschreibung des elektromagnetischen Feldes tatsächlich nötig ist. Das Feld hat gar nicht vier unabhängige Komponenten A^0 ($:= \phi$), A^1, A^2, A^3 , oder gar sechs $(E^1, E^2, E^3, B^1, B^2, B^3)$. Es ist wünschenswert, eine Theorie so zu formieren, dass sie in jeder Eichung gilt (d. h., so dass sie invariant unter Eichtransformationen ist). Andererseits kann man die Eichinvarianz auch ausnutzen: Wir erhalten garantiert dieselben Ergebnisse für beobachtbare Größen unabhängig von der Eichung. Wir können also χ so wählen, dass die Rechnung möglichst einfach wird. Zwei Eichungen sind hier wichtig:

(a) Lorenz-Eichung: Diese wird durch die Forderung

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial\phi}{\partial t} = 0 \quad (2.342)$$

festgelegt (dies ist *eine* Gleichung, sie legt *eine* Größe, χ , fest). „Lorenz“ schreibt sich wirklich ohne „t“, es ist eine andere Person: Ludvig Lorenz, nicht Hendrik Anton Lorentz. Die Lorenz-Eichung respektiert die Lorentz-Invarianz, da wir sie auch in der explizit kovarianten Form

$$\partial^\mu A_\mu = 0 \quad (2.343)$$

schreiben können. Sie führt zu symmetrischen Gleichungen

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A} \equiv \square \mathbf{A} = 4\pi\mathbf{j}, \quad (2.344)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \phi \equiv \square \phi = 4\pi\rho, \quad (2.345)$$

verschleiert aber wichtige Eigenschaften, wie wir sehen werden.

(b) Coulomb-Eichung: Diese wird durch

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (2.346)$$

festgelegt. Dann wird

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) \mathbf{A} \equiv \square \mathbf{A} = \underbrace{4\pi \mathbf{j} - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \phi}_{=: 4\pi \mathbf{j}_T}, \quad (2.347)$$

$$\nabla^2 \phi = -4\pi \varrho \quad (\text{instantan!}), \quad (2.348)$$

wobei $\mathbf{j}_T$ *transversale Stromdichte* genannt wird, da gilt

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_T = \nabla \cdot \mathbf{j} - \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 \phi = \nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \varrho}{\partial t} = 0. \quad (2.349)$$

Im Fourier-Raum lautet die entsprechende Beziehung $\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}_T = 0$, also gilt $\mathbf{j}_T \perp \mathbf{k}$.

2.10.1 Vierervektor-Notation

In der relativistischen kovarianten Formulierung führen wir ein Vierervektorfeld

$$A^\mu = (\phi, \mathbf{A}) \quad (2.350)$$

ein. Die allgemeine Eichtransformation lautet dann

$$A^\mu \rightarrow A^\mu - \partial^\mu \chi. \quad (2.351)$$

Die Lorenz-Eichung

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \quad (2.352)$$

führt zu

$$\square A^\mu = 4\pi j^\mu \quad (2.353)$$

wobei

$$j^\mu = (\varrho, \mathbf{j}). \quad (2.354)$$

Dies ist alles explizit Lorentz-invariant.

Die Coulomb-Eichung und die resultierenden Gleichungen sind nicht explizit Lorentz-invariant, aber die beschriebene Physik ist es natürlich, da sie ja nicht von der speziellen Eichung abhängt. (Hier passiert folgendes: die Gleichungen ändern ihre Form unter Lorentz-Transformationen, aber man kann immer eine Eichtransformation finden, die sie wieder in die ursprüngliche Form bringt.) Die $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ Felder sind jetzt Komponenten des antisymmetrischen Tensors

$$F^{\mu\nu} := \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \quad (2.355)$$

Dies ist der sogenannte Feld-Tensor mit den Komponenten

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -B^3 & B^2 \\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix}_{\mu\nu}. \quad (2.356)$$

Man kann die beiden inhomogenen Maxwell-Gleichungen dann schreiben als

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi j^\nu. \quad (2.357)$$

Die beiden homogenen Maxwell-Gleichungen folgen ja bereits aus der Darstellung durch das Eichfeld A^μ .

Die Maxwell-Gleichungen lassen sich als Euler-Lagrange-Gleichungen zu einer Lagrange-Dichte $\mathcal{L}$ auffassen, die lautet

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - 4\pi j^\mu A_\mu \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) - 4\pi \varrho \phi + 4\pi \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}, \quad (2.358)$$

verstanden als Funktion des Eichfeldes A^μ bzw. ϕ , $\mathbf{A}$ und von dessen Ableitungen. Wir zeigen dies anhand der inhomogenen Gleichungen:

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= -\frac{1}{4} (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) - 4\pi j^\mu A_\mu \\ &= -\frac{1}{2} (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) \partial_\mu A_\nu - 4\pi j^\mu A_\mu\end{aligned}\quad (2.359)$$

und daher

$$0 = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu A_\nu)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\nu} = -\partial_\mu (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) + 4\pi j^\nu = -\partial_\mu F^{\mu\nu} + 4\pi j^\nu \quad (2.360)$$

$$\Rightarrow \partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi j^\nu. \quad (2.361)$$

Dies war zu zeigen.

Die zu A_ν (unterer, d. h. kovarianter Index!) kanonisch konjugierte Größe ist

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 A_\nu)} = -F^{0\nu}. \quad (2.362)$$

Insbesondere:

- (a) Zu $A_0 = \phi$ konjugiert ist $-F^{00} = 0$. Also ist $A_0 = \phi$ gar keine dynamische Variable – der zugehörige Impuls ist exakt Null. Das versteht man am besten in der Coulomb-Eichung. In dieser gilt nämlich

$$\nabla^2 A_0 \equiv \nabla^2 \phi = -4\pi \varrho. \quad (2.363)$$

A_0 ist also durch die äußere Ladungsträgerdichte (und Randbedingungen) eindeutig bestimmt und hat keine eigene Dynamik.

Es ist nicht etwa so, dass die Coulomb-Eichung *dazu führt*, dass eine Komponente von A_ν keine Dynamik hat. Das ist unabhängig von der Eichung der Fall. Wir könnten es auch ohne eine bestimmte Wahl der Eichung zeigen, nur wäre das etwas schwieriger. Die Coulomb-Eichung wurde nur benutzt, um dieses Ergebnis einfacher herleiten zu können.

- (b) Zu A_k , $k = 1, 2, 3$ (also $-\mathbf{A}$, Vorzeichen beachten!) konjugiert ist

$$-F^{0k} = E^k \quad (2.364)$$

(also $+\mathbf{E}$). Zu $\mathbf{A}$ ist also $-\mathbf{E}$ konjugiert.

Da eine Komponente von A_ν keine eigene Dynamik hat, scheint es, als hätten wir noch *drei* dynamische Freiheitsgrade. Das ist aber nicht der Fall: Da die Physik invariant ist unter den Eichtransformationen

$$A^\mu \rightarrow A^\mu - \partial^\mu \chi, \quad (2.365)$$

kann man *eine* Größe pro Punkt beliebig wählen. Es bleiben noch *zwei* dynamische Freiheitsgrade. Wir hatten gesehen, dass wir z. B. $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ fordern können (Coulomb-Eichung). Dann ist $\mathbf{A}$ *rein transversal* (wie man durch Fouriertransformation sieht: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A} = 0 \Rightarrow \mathbf{A}$ ist senkrecht zur Ausbreitungsrichtung).

Bemerkung: Wir haben die Coulomb-Eichung verwendet, um zu zeigen, dass das elektromagnetische Feld nur zwei unabhängige, dynamische Komponenten hat. Da das eine Aussage über beobachtbare Physik ist, gilt sie aber unabhängig von der Eichung. Die Coulomb-Eichung war nur besonders günstig für die Herleitung.

2.10.2 Quantentheorie des Elektromagnetismus

Wir wollen nun das elektromagnetische Feld quantisieren. Wir betrachten zunächst das freie Feld ($\varrho = 0$, $\mathbf{j} = 0$). Wir hatten

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) \quad (2.366)$$

und das zu $\mathbf{A}$ kanonisch konjugierte Feld ist $-\mathbf{E}$. Wir verwenden die Coulomb-Eichung. Wir hatten gesehen, dass dann gilt

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (2.367)$$

(freies Feld). Mit der vernünftigen Forderung $\phi \rightarrow 0$ im unendlichen folgt

$$A^0 = \phi = 0. \quad (2.368)$$

Dann lautet die Hamiltonsche Dichte (Energiedichte)

$$\mathcal{H} = (-\mathbf{E}) \cdot \underbrace{\partial_0 \mathbf{E}}_{=\dot{\mathbf{A}}=-\mathbf{E}} - \mathcal{L} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} - \frac{1}{2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) = \frac{1}{2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}), \quad (2.369)$$

wie wir aus der Elektrodynamik-Vorlesung schon wissen. Wir müssen $\mathcal{H}$ durch das dynamische Feld („Koordinaten“) $\mathbf{A}$, mit $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, und das dazu konjugierte Feld („Impulse“) $-\mathbf{E}$ ausdrücken:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (E^2 + (\nabla \times \mathbf{A})^2) \quad (2.370)$$

also

$$H = \frac{1}{2} \int d^3r (E^2 + (\nabla \times \mathbf{A})^2). \quad (2.371)$$

Da $-\mathbf{E}$ zu $\mathbf{A}$ konjugiert ist, würden wir in Analogie zu den bisher betrachteten Feldern gern schreiben

$$[-E_m(\mathbf{r}, t), A_n(\mathbf{r}', t)] \stackrel{?}{=} -i\delta_{mn}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.372)$$

$m, n = 1, 2, 3$, also

$$[E_m(\mathbf{r}, t), A_n(\mathbf{r}', t)] \stackrel{?}{=} i\delta_{mn}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.373)$$

um zur QFT überzugehen. Das ist aber nicht konsistent: Fourier-Transformation ergibt

$$\begin{aligned} [E_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, A_n(\mathbf{k}', t)] &= \int d^3r d^3r' e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} [E_m(\mathbf{r}, t), A_n(\mathbf{r}', t)] \\ &\stackrel{?}{=} i\delta_{mn} \int d^3r d^3r' e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= i\delta_{mn} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (2.374)$$

wobei wir angenommen haben, dass das Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ Hermitesch ist. Es folgt

$$\begin{aligned} [\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, t)^\dagger, A_n(\mathbf{k}', t)] &\stackrel{?}{=} \sum_m k_m i\delta_{mn} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &= ik_n (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (2.375)$$

Andererseits folgt aus $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ für das freie Feld, dass das elektrische Feld transversal ist: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0$. Widerspruch! Analog finden wir

$$[E_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, \mathbf{k}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}', t)] = ik'_m (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.376)$$

im Widerspruch zu $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ in der Coulomb-Eichung. Also: der naive Kommutator enthält nichttriviale Beiträge für die *longitudinalen* Anteile von $\mathbf{E}$ und $\mathbf{A}$ die (aus verschiedenen Gründen) gar keine dynamischen Freiheitsgrade darstellen. Mit anderen Worten: $[E_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, A_n(\mathbf{k}', t)]$ muss transversal in $\mathbf{k}$ und $\mathbf{k}'$ sein,

$$\sum_m k_m [E_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, A_n(\mathbf{k}', t)] = \sum_n k'_n [E_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, A_n(\mathbf{k}', t)] = 0, \quad (2.377)$$

aber $i\delta_{mn}(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ ist es nicht. Lösung: Wir verwenden nur den transversalen Anteil der rechten Seite:

$$[E_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, A_n(\mathbf{k}', t)] = i \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (2.378)$$

Jetzt ist

$$\sum_m k_m i \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = i \left(k_n - \frac{|\mathbf{k}|^2 k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 0, \quad (2.379)$$

also ist die rechte Seite transversal. Im Ortsraum erhalten wir

$$[E_m(\mathbf{r}, t), A_n(\mathbf{r}', t)] = i \overset{\text{transversal}}{\delta_{mn}^T}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.380)$$

mit

$$\delta_{mn}^T(\mathbf{r}) := \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right). \quad (2.381)$$

Es gibt nun zwei orthogonale lineare Polarisationen von $\mathbf{A}$, da $\mathbf{A}$ transversal ist. Diese werden durch zwei Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{e}}_{1\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{e}}_{2\mathbf{k}}$ ausgedrückt. Die entsprechenden (klassischen) Lösungen der Maxwell-Gleichung sind proportional zu $\hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)}$, $s = 1, 2$. Wir vereinbaren

$$\hat{\mathbf{e}}_{1\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{e}}_{2\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}, \quad (2.382)$$

d. h., $\hat{\mathbf{e}}_{1\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{e}}_{2\mathbf{k}}, \mathbf{k}$ bilden ein *Rechtssystem*.

Wir schreiben den Feldoperator $\mathbf{A}$ (hier benutzen wir dasselbe Symbol für klassisches und Quantenfeld!) als Superposition von klassischen („Einteilchen“-) Lösungen, d. h. von ebenen Wellen:

$$A_j(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \sum_{s=1}^2 (\hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}})_j \left[a_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + a_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right] \quad (2.383)$$

mit $j = 1, 2, 3$ und

$$\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}| \quad (\text{da } c \equiv 1). \quad (2.384)$$

Diese spezielle Form des Feldes ausgedrückt durch $a_{\mathbf{k}s}$ und $a_{\mathbf{k}s}^\dagger$ schreiben wir dabei in Analogie zum reellen Feld direkt hin, vgl. Gl. (2.214). Wir könnten sie auch wie für das reelle Feld herleiten. $\mathbf{A}$ ist ein *reelles* Vektorfeld in der klassischen Elektrodynamik, es wird in der QFT zu einem *Hermiteischen* Feldoperator.

Es folgt direkt

$$E_j(\mathbf{r}, t) = -\dot{A}_j(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \sum_{s=1}^2 (\hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}})_j \left[a_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - a_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right]. \quad (2.385)$$

Die Gleichungen können wir für $a_{\mathbf{k}s}$ und $a_{\mathbf{k}s}^\dagger$ lösen. Die Vertauschungsrelationen für $\mathbf{E}, \mathbf{A}$ führen auf

$$[a_{\mathbf{k}s}, a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ss'}, \quad (2.386)$$

$$[a_{\mathbf{k}s}, a_{\mathbf{k}'s'}] = 0 \quad \text{usw.} \quad (2.387)$$

$a_{\mathbf{k}s}^\dagger$ ist also ein bosonischer Erzeugungsoperator, der ein Quant des elektromagnetischen Feldes erzeugt. Dieses Quant nennen wir *Photon*. Wir finden also, dass Photonen *Bosonen* sind. Wir fassen zusammen, wie wir darauf gekommen sind:

1. Die Lagrange-Formulierung der klassischen Elektrodynamik ergab, dass (der transversale Anteil von) $\mathbf{A}$ die dynamische Variable und $-\mathbf{E}$ der dazu konjugierte Impuls sind.
2. Standard-Quantisierung von konjugierten Variablen und Darstellung des Feldes durch ebene Wellen (also klassische Lösungen) ergab bosonische Vertauschungsrelationen für die Photonen-Erzeuger bzw. -Vernichter.

Wir können $\mathbf{A}$, $\mathbf{E}$ auch in

$$H = \frac{1}{2} \int d^3r (E^2 + (\nabla \times \mathbf{A})^2) \quad (2.388)$$

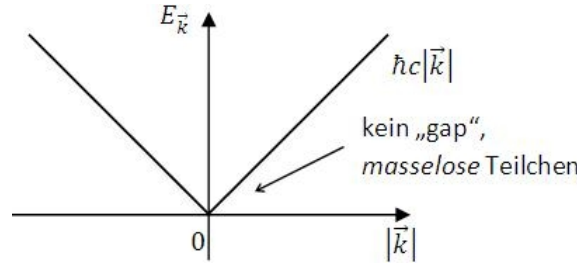
einsetzen und erhalten den Hamilton-Operator

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s=1}^2 \underbrace{|\mathbf{k}|}_{=\omega_{\mathbf{k}}} \left(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.389)$$

was noch expliziter zeigt, dass Photonen mit Wellenvektor $\mathbf{k}$ die Energie $\omega_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|$ haben. Oder mit $\hbar$, c wiederhergestellt:

$$E_{\mathbf{k}} = \hbar \omega_{\mathbf{k}} = \hbar c |\mathbf{k}|. \quad (2.390)$$

Die Dispersion sieht also wie folgt aus:



Wir finden außerdem, dass das Photon sein eigenes Antiteilchen ist, analog zum reellen (Hermiteschen) skalaren Feld. Damit ist das Photon insbesondere elektrisch neutral.

2.10.3 Transversaler Propagator

Wir schreiben schließlich noch den Propagator des elektromagnetischen Feldes in der Coulomb-Eichung auf. Wie zuvor ist das Ergebnis nicht Lorentz-invariant, man kann aber zeigen, dass der nicht Lorentz-invariante Anteil nicht zu beobachtbaren Effekten (z. B. in Streuexperimenten) führt, siehe Huangs Buch.

Der Propagator wird wie üblich definiert durch

$$D_T^{ij}(x) \quad \underset{\substack{\uparrow \\ \text{transversal: } \nabla \cdot \mathbf{A} = 0}}{:=} \quad -i \langle 0 | \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Zeitordnung}}}{T} A_i(x) A_j(0) | 0 \rangle \quad (2.391)$$

Wir verwenden die Darstellung von $\mathbf{A}$ durch die Operatoren $a, a^\dagger$, gehen aber zum unendlich großen System über:

$$\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (2.392)$$

Dann

$$D_T^{ij}(x) = -i \int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6} \frac{1}{2\sqrt{\omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}'}}} \sum_{s,s'=1}^2 \begin{cases} \langle 0 | a_{\mathbf{k}s}^i a_{\mathbf{k}'s'}^{j\dagger} e^{-ik^\mu x_\mu} | 0 \rangle & \text{für } x^0 > 0 \\ \langle 0 | a_{\mathbf{k}'s'}^j a_{\mathbf{k}s}^{i\dagger} e^{ik^\mu x_\mu} | 0 \rangle & \text{für } x^0 < 0 \end{cases} \quad (2.393)$$

↑
Term mit $a|0\rangle$ verschwindet jeweils, da a das Vakuum vernichtet

wobei $a_{\mathbf{k}s}^i := (\hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}})_i a_{\mathbf{k}s}$. Nun ist

$$\langle 0 | a_{\mathbf{k}s}^i a_{\mathbf{k}'s'}^{j\dagger} e^{-ik^\mu x_\mu} | 0 \rangle = (2\pi)^3 \delta_{ss'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (\hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}})_i (\hat{\mathbf{e}}_{s'\mathbf{k}'})_j \quad (2.394)$$

also unter der Summe $\sum_{ss'}$:

$$D_T^{ij}(x) = -i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}}|t|} \left(\delta_{ij} - \frac{k^i k^j}{|\mathbf{k}|^2} \right) \quad (2.395)$$

Mit der Darstellung

$$e^{-i\omega_{\mathbf{k}}|t|} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dk^0 2\omega \frac{e^{-ik^0 t}}{\omega^2 - (k^0)^2 - i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow k^0} \quad (2.396)$$

erhalten wir schließlich

$$D_T^{ij}(x) = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{e^{ik^\mu x_\mu}}{k^\mu k_\mu + i\eta} \left(\delta_{ij} - \frac{k^i k^j}{|\mathbf{k}|^2} \right) \quad (2.397)$$

Die ganze Herleitung ist sehr ähnlich zum Fall des skalaren Feldes.

2.10.4 Impuls und Spin

Als Anwendung wollen wir den Impuls und Eigendrehimpuls (Spin) eines Photons bestimmen. Die *Impulsdichte* des elektromagnetischen Feldes ist bekanntlich durch den *Poynting-Vektor* $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ gegeben. Naiv würden wir den Impuls nun schreiben

$$\mathbf{p} = \int d^3 r \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{A}). \quad (2.398)$$

Warum ist das nicht gut? $\mathbf{p}$ ist nicht Hermitesch, da $\mathbf{E}$ und $\mathbf{A}$ nicht kommutieren. Also nehmen wir die symmetrisierte, Hermitesche Form

$$\mathbf{p} = \frac{1}{2} \int d^3 r \left[\mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{A}) - (\nabla \times \mathbf{A}) \times \mathbf{E} \right], \quad (2.399)$$

die ebenfalls den korrekten klassischen Grenzfall ergibt. Wir setzen die explizite Darstellung von $\mathbf{A}$ und $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}$ ein:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \frac{i}{2} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}'}}} \sum_{ss'} \int d^3 r \left[\hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - a_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} \right) \times (i\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{e}}_{s'\mathbf{k}'}) \left(a_{\mathbf{k}'s'} e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}'}t)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}'}t)} \right) - (i\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{e}}_{s'\mathbf{k}'}) \left(a_{\mathbf{k}'s'} e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}'}t)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}'}t)} \right) \times \hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} - a_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} \right) \right] \\ &= -\frac{1}{2} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}'}}} \sum_{ss'} \int d^3 r \hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}} \times (\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{e}}_{s'\mathbf{k}'} \left[\left(a_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{k}'s'} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s} \right) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}'}t)} \right. \\ &\quad \left. - \left(a_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger + a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \right) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}'}t)} \right. \\ &\quad \left. - \left(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} + a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s}^\dagger \right) e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}'}t)} \right. \\ &\quad \left. + \left(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger + a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{\mathbf{k}s}^\dagger \right) e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}'}t)} \right] \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \left[-\hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}} \times (\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{e}}_{s'} \underbrace{-\mathbf{k}}_{\substack{\uparrow \\ \mathbf{k}'=-\mathbf{k} \text{ hier}}}) a_{\mathbf{k}s} a_{-\mathbf{k},s'} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}}t} \right. \\ &\quad \left. - \hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}} \times (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{s'} \underbrace{\mathbf{k}}_{\substack{\uparrow \\ \mathbf{k}'=+\mathbf{k} \text{ hier}}}) \left(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \delta_{ss'} \right) \right. \\ &\quad \left. - \hat{\mathbf{e}}_{s\mathbf{k}} \times (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{s'\mathbf{k}}) \left(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} + \frac{1}{2} \delta_{ss'} \right) \right] \end{aligned}$$

$$- \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}\mathbf{k}} \times (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}', -\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}\mathbf{s}}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \mathbf{s}'} e^{2i\omega_{\mathbf{k}} t} \Big] \quad (2.400)$$

Im 1. und 4. Term: Diese Terme sind ungerade in $\mathbf{k}$, daher verschwindet die Summe. (Beweis: 1. Term lautet

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} \left[(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}', -\mathbf{k}}) \mathbf{k} - \underbrace{(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k})}_{=0} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}', -\mathbf{k}} \right] a_{\mathbf{k}\mathbf{s}} a_{-\mathbf{k}, \mathbf{s}'} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}} t} \\ & \text{setze } \mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}, \mathbf{s} \leftrightarrow \mathbf{s}' : \\ & = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} -(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}, -\mathbf{k}}) \mathbf{k} a_{\mathbf{k}\mathbf{s}} a_{-\mathbf{k}, \mathbf{s}'} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}} t} \end{aligned} \quad (2.401)$$

Die Summe ist gleich ihrem Negativen, also ist sie gleich Null.)

Es bleibt:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{s}'} \left[\underbrace{(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}'\mathbf{k}})}_{=\delta_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}} \mathbf{k} - \underbrace{(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k})}_{=0} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{s}'\mathbf{k}} \right] (a_{\mathbf{k}\mathbf{s}'}^\dagger a_{\mathbf{k}\mathbf{s}} + a_{\mathbf{k}\mathbf{s}}^\dagger a_{\mathbf{k}\mathbf{s}'} + \delta_{\mathbf{s}\mathbf{s}'}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{s}} \mathbf{k} \left(a_{\mathbf{k}\mathbf{s}}^\dagger a_{\mathbf{k}\mathbf{s}} + \frac{1}{2} \right) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{s}} \mathbf{k} a_{\mathbf{k}\mathbf{s}}^\dagger a_{\mathbf{k}\mathbf{s}}. \end{aligned} \quad (2.402)$$

Der konstante Term verschwindet, da sich Beiträge zu $\mathbf{k}$ und $-\mathbf{k}$ gegenseitig wegheben. Ein von $a_{\mathbf{k}\mathbf{s}}^\dagger$ erzeugtes Photon hat also wie erwartet den Impuls $\mathbf{k}$ (mit wiederhergestellten Einheiten: $\hbar\mathbf{k}$).

Nun zum interessanteren Fall des Eigendrehimpulses. Aus dem Poynting-Vektor erhalten wir die Drehimpulsdichte $\mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B})$. Also für den Drehimpuls des Feldes, symmetrisiert:

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2} \int d^3r [\mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{A})) - \mathbf{r} \times ((\nabla \times \mathbf{A}) \times \mathbf{E})], \quad (2.403)$$

und in Komponenten:

$$\begin{aligned} J_i &= \frac{1}{2} \int d^3r \sum_{jklmnp} \left(\varepsilon_{ijk} r_j \varepsilon_{klm} E_l \varepsilon_{mnp} \frac{\partial}{\partial r_n} A_p - \varepsilon_{ijk} r_j \varepsilon_{\dots} \right) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3r \sum_{jklmnp} \varepsilon_{ijk} \underbrace{\varepsilon_{klm} \varepsilon_{mnp}}_{\substack{\uparrow \\ \text{beachte } \varepsilon_{klm} \varepsilon_{mnp} = \delta_{kn} \delta_{lp} - \delta_{kp} \delta_{ln}}} r_j \left(E_l \frac{\partial}{\partial r_n} A_p + \frac{\partial A_p}{\partial r_n} E_l \right) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3r \sum_{jklm} \varepsilon_{ijk} r_j \left(E_l \frac{\partial}{\partial r_k} A_l - E_l \frac{\partial}{\partial r_l} A_k + \frac{\partial A_l}{\partial r_n} E_l - \frac{\partial A_k}{\partial r_l} E_l \right) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3r \sum_{jklm} \varepsilon_{ijk} \left[r_j \left(E_l \frac{\partial A_l}{\partial r_k} + \frac{\partial A_l}{\partial r_k} E_l \right) - \frac{\partial}{\partial r_l} \underbrace{(r_j E_l A_k + r_j A_k E_l)}_{=0} \right. \\ & \quad \left. + \delta_{jl} (E_l A_k + A_k E_l) + r_j \left(\underbrace{\frac{\partial E_l}{\partial r_l} A_k + A_k \frac{\partial E_l}{\partial r_l}}_{=0, \text{ da } \nabla \cdot \mathbf{E}=0} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.404)$$

Der 1. Term enthält $\mathbf{r}$ linear, hängt also von der Wahl des Koordinatenursprungs ab. Dieses Verhalten kennen wir aus der Mechanik für den *Bahndrehimpuls*. Es ist also vernünftig, diesen Term als Bahndrehimpuls $\mathbf{L}$ des Feldes zu identifizieren. Der 3. Term hängt dagegen nicht explizit von $\mathbf{r}$ ab. Dies ist der *Eigendrehimpuls* $\mathbf{S}$ des Feldes:

$$S_i = \frac{1}{2} \int d^3r \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} (E_j A_k + A_k E_j) \quad (2.405)$$

$$\Rightarrow \mathbf{S} = \frac{1}{2} \int d^3r (\mathbf{E} \times \mathbf{A} - \mathbf{A} \times \mathbf{E}). \quad (2.406)$$

Wir können wieder $\mathbf{A}$, $\mathbf{E}$ einsetzen und erhalten nach einiger Rechnung

$$\mathbf{S} = i \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \left(a_{\mathbf{k}2}^\dagger a_{\mathbf{k}1} - a_{\mathbf{k}1}^\dagger a_{\mathbf{k}2} \right). \quad (2.407)$$

Dies ist nicht diagonal im Polarisationsindex s , d. h. $a_{\mathbf{k}s}^\dagger$ erzeugt keinen Eigenzustand zu $\mathbf{S}$. Wir können dies leicht reparieren: Wir führen Linearkombinationen

$$a_{\mathbf{k}\pm} := \frac{\overset{\text{Konvention}}{\downarrow} a_{\mathbf{k}1} \mp i a_{\mathbf{k}2}}{\sqrt{2}} \quad (2.408)$$

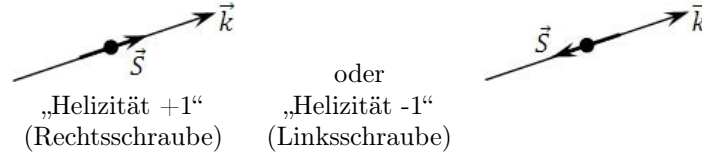
ein. Dies lässt den Hamiltonian diagonal:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}| \left(a_{\mathbf{k}+}^\dagger a_{\mathbf{k}+} + a_{\mathbf{k}-}^\dagger a_{\mathbf{k}-} + 1 \right) \quad (2.409)$$

und diagonalisiert den Eigendrehimpuls:

$$\mathbf{S} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \left(a_{\mathbf{k}+}^\dagger a_{\mathbf{k}+} - a_{\mathbf{k}-}^\dagger a_{\mathbf{k}-} \right). \quad (2.410)$$

Den Eigendrehimpuls nennen wir *Spin*. Der Spin des Photons hat also den Betrag 1 (mit Einheiten: $\hbar$). Es existieren jedoch nur *zwei* Einstellmöglichkeiten des Spins: parallel oder antiparallel zu $\mathbf{k}$, also zum Impuls.



Aus der elementaren Quantenmechanik hätten wir für den Spin 1 noch eine dritte Einstellmöglichkeit erwartet, nämlich mit

$$\mathbf{S} \cdot \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} = 0. \quad (2.411)$$

Diese tritt hier nicht auf, weil das elektromagnetische Feld wie gesehen nur *zwei* unabhängige, dynamische Komponenten hat, nicht drei. (Das lässt sich darauf zurückführen, dass das elektromagnetische Feld *masselos* ist. Führt man einen Masseterm $m^2 A^\mu A_\mu / 2$ in $\mathcal{L}$ ein, so erhält man drei unabhängige Komponenten und auch drei Erzeuger $a_{\mathbf{k}1}^\dagger, a_{\mathbf{k}0}^\dagger, a_{\mathbf{k},-1}^\dagger$.)

2.11 Quantenelektrodynamik (QED)

Zum Abschluss der Einführung in die QFT wollen wir die QFT des Elektromagnetismus zumindest formulieren. Aus Zeitgründen können wir nicht viel damit rechnen. Die QED ist eine sehr erfolgreiche Theorie, die hochpräzise quantitative Ergebnisse liefert, z. B. für das magnetische Moment (oder äquivalent den g -Faktor) des Elektrons. Der Vergleich mit ebenfalls hochpräzisen Experimenten liefert hervorragende Bestätigungen der Gültigkeit der QED.

Wieso ist die QED so erfolgreich? Zum einen ist sie offenbar *korrekt* innerhalb ihres Gültigkeitsbereichs, d. h. bei Vernachlässigbarkeit anderer Kräfte. Zum anderen zeigt die Beobachtung, dass die elektromagnetische Wechselwirkung relativ schwach ist: die Kopplungsstärke, gegeben durch e^2 , in natürlichen Einheiten ist relativ klein gegen eins:

$$\frac{e^2}{4\pi \underbrace{\hbar c}_{=1}} \equiv \alpha_{\uparrow} \approx \frac{1}{137} \quad \text{Feinstrukturkonstante} \quad (2.412)$$

in unseren Einheiten

Dies erlaubt Störungsrechnung in α . Wäre α groß, könnte man das nicht machen und quantitative Ergebnisse wären viel schwieriger zu erhalten. Das ist ein Problem der Quantenchromodynamik (QCD), der Theorie der starken Wechselwirkung, in der die entsprechende Kopplungskonstante von der Größenordnung eins ist.

Wir betrachten nun Fermionen (Elektronen) im elektromagnetischen Feld, die Diskussion für ein geladenes skalares Feld (z. B. π^+ -Meson) ist ähnlich.

Wir kennen bereits die Lagrange-Dichten für das Dirac-Feld und das elektromagnetische Feld:

$$\mathcal{L}_{\text{Dirac}} = \bar{\Psi} (i\not{\partial} - m) \Psi, \quad (2.413)$$

$$\mathcal{L}_{\text{em}} = -\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \quad (2.414)$$

Die Gleichung

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{Dirac}} + \mathcal{L}_{\text{em}} \quad (2.415)$$

würde *ungeladene* Fermionen im elektromagnetischen Feld beschreiben (Neutrinos) – die beiden Felder sind gar nicht gekoppelt.

Für geladene Fermionen können wir nun auf verschiedenen Wegen vorgehen. Hier werden wir die Form der Kopplung physikalisch motivieren und die Konsequenzen für die Eichtheorie folgern. Wir wissen:

$$j^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi \quad (\text{mit Komponenten } \varrho, \mathbf{j}) \quad (2.416)$$

beschreibt die (Teilchen-) Stromdichte der durch Ψ beschriebenen Fermionen und es gilt

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (\text{Kontinuitätsgleichung}), \quad (2.417)$$

d. h. j^μ ist ein erhaltener Strom.

Wir wissen auch, wie die Ladungen und Ströme in der klassischen Elektrodynamik an das elektromagnetische Feld koppeln. Um diesen klassischen Grenzfall zu gewährleisten (Korrespondenzprinzip), definieren wir zunächst j^μ geringfügig um:

$$j^\mu := q \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi \quad (\text{Ladungsstromdichte}) \quad (2.418)$$

mit der Ladung q eines Feldquants. Für Elektronen

$$q = -e < 0. \quad (2.419)$$

(In der QFT-Literatur wird oft e als Ladung des Elektrons, also negativ, definiert, so auch von Huang und Itzykson/Zuber. In der Vielteilchen-Literatur und anderswo bezeichnet e die positive Elementarladung. So auch hier.) Natürlich gilt weiterhin $\partial_\mu j^\mu = 0$. In der klassischen Elektrodynamik lautet dann der Kopplungsterm

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -4\pi j^\mu A_\mu, \quad (2.420)$$

vgl. Gleichung (2.358). Wir nehmen an, dass dieser auch in der QED gilt.

Dann ist

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \mathcal{L}_{\text{Dirac}} + \mathcal{L}_{\text{em}} + \mathcal{L}_{\text{int}} \\ &= \bar{\Psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \Psi - \frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - 4\pi j^\mu A_\mu \\ &= \bar{\Psi} \left(\underbrace{i\gamma^\mu \partial_\mu - 4\pi\gamma^\mu q A_\mu}_{\text{}} - m \right) \Psi - \frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \end{aligned} \quad (2.421)$$

Man fasst die Terme mit ∂_μ und A_μ zusammen durch Definition der *kovarianten Ableitung*

$$D_\mu := \partial_\mu + 4\pi i q A_\mu, \quad (2.422)$$

was ergibt

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi} (i\gamma^\mu D_\mu - m) \Psi - \frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}$$

$$= \bar{\Psi} (i \not{D} - m) \Psi - \frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \quad (2.423)$$

Dies ist nun die Lagrange-Dichte der QED. Sie ist offenbar explizit Lorentz-invariant.

Es ist vielleicht bemerkenswert, dass aus diesem harmlos aussehenden Ausdruck Ergebnisse wie die präzise Berechnung des g -Faktors des Elektrons ($g \approx 2,00231930$) folgen. Wie gesagt verwendet die Rechnung Störungstheorie in $q^2 = e^2 (\sim \alpha)$ als kleinem Parameter.

Wir untersuchen noch die Eichsymmetrie der Theorie: Für das freie elektromagnetische Feld hatten wir die Invarianz unter

$$A^\mu \rightarrow A^\mu - \partial^\mu \chi \quad (2.424)$$

für beliebiges $\chi(x) \equiv \chi(\mathbf{r}, t)$ gefunden. $F^{\mu\nu}$ ist eichinvariant, da es nur $\mathbf{E}$ und $\mathbf{B}$ enthält, aber naiv finden wir

$$\begin{aligned} \bar{\Psi} (i \not{D} - m) \Psi &= \bar{\Psi} (i \gamma^\mu \partial_\mu - 4\pi \gamma^\mu q A_\mu - m) \Psi \\ &\rightarrow \bar{\Psi} (i \gamma^\mu \partial_\mu - 4\pi \gamma^\mu q A_\mu + 4\pi \gamma^\mu q \partial_\mu \chi - m) \Psi \\ &= \bar{\Psi} (i \not{D} - m) \Psi + 4\pi \bar{\Psi} q \not{\partial} \chi \Psi. \end{aligned} \quad (2.425)$$

Das ist nicht eichinvariant. Um dies zu reparieren fordern wir, dass sich Ψ simultan gemäß

$$\Psi \rightarrow e^{4\pi i q \chi} \Psi \quad (2.426)$$

transformiert. Dann folgt nämlich

$$\begin{aligned} &\bar{\Psi} (i \gamma^\mu \partial_\mu - 4\pi \gamma^\mu q A_\mu - m) \Psi \\ &\rightarrow \bar{\Psi} \underbrace{e^{-4\pi i q \chi} e^{4\pi i q \chi}}_{=1} \left(i \gamma^\mu \partial_\mu - \underbrace{4\pi q \gamma^\mu (\partial_\mu \chi) + 4\pi \gamma^\mu q (\partial_\mu \chi)}_{=0} - 4\pi \gamma^\mu q A_\mu - m \right) \Psi \\ &= \bar{\Psi} (i \gamma^\mu \partial_\mu - 4\pi \gamma^\mu q A_\mu - m) \Psi. \end{aligned} \quad (2.427)$$

Damit ist $\mathcal{L}$ insgesamt eichinvariant. Man kann sich natürlich fragen, warum wir auf die Eichinvarianz der Theorie so viel Wert legen. Die Erfahrung zeigt aber, dass die meisten (oder alle) fundamentalen Wechselwirkungen durch Eichfeldtheorien, d. h. Quantenfeldtheorien mit Eichinvarianz, beschrieben werden.

Kapitel 3

Vielteilchentheorie bei der Temperatur Null

Im vorigen Abschnitt haben wir einige Quantenfeldtheorien eingeführt und ihre Eigenschaften diskutiert. Man kann noch viele andere definieren. Eine Aufgabe der Hochenergie- und Elementarteilchenphysik ist es herauszufinden, welche QFT die beobachteten Teilchen am besten beschreibt. Wie in der Einführung erwähnt, ist der Ausgangspunkt in der Physik der kondensierten Materie ein anderer: Wir *wissen*, was die zu Grunde liegende Theorie ist, nämlich die QED mit einigen, ziemlich trivialen Erweiterungen für mehrere Sorten von geladenen Teilchen (Elektronen und Kernen). Das Augenmerk verschiebt sich auf Effekte aufgrund der (praktisch unendlich) großen Zahl von Teilchen.

Dennoch kommen andere Quantenfeldtheorien in der Vielteilchentheorie schon bald durch die Hintertür wieder herein: Wir sind meist an Effekten bei niedrigen Energien/Temperaturen interessiert, die oft durch *effektive Hamiltonians* (oder Lagrangians) beschrieben werden, die z. B. ein reelles Feld (Phononen) oder masselose relativistische Fermionen (Elektronen in Graphen, d. h. Graphit-Einzelschichten) darstellen.

3.1 Wechselwirkungsfreie Elektronen

Wir betrachten als erstes nicht wechselwirkende Elektronen in einem starren Kristallgitter. Dieser Abschnitt wiederholt teilweise Konzepte aus der Einführung in die Festkörperphysik und aus der Quantentheorie 2 und ist auch nützlich, um die Nomenklatur einzuführen, die wir im Folgenden verwenden werden. Das System nicht wechselwirkende Elektronen im starren Gitter ist nicht Lorentz-invariant: das Gitter zeichnet ein Inertialsystem aus. Außerdem ist die Geschwindigkeit der Elektronen i. A. klein gegen c . Eine relativistische Formulierung ist daher weder angemessen noch notwendig. Relativistische Quantenfeldtheorien waren einfacher im Lagrange-Formalismus zu formulieren. Hier ist dies nicht von Belang und man verwendet meist den Hamiltonian.

Für nicht wechselwirkende Elektronen treten im Hamiltonian in zweiter Quantisierung wie gesehen nur *bilineare Terme* auf (vgl. Abschnitt 2.4). Also ist

$$H = T + V_1 = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

den Index lassen wir fallen

und im $\mathbf{k}$ -Raum, nach Glg. (2.185) und (2.186),

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{2m} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \quad (3.2)$$

mit

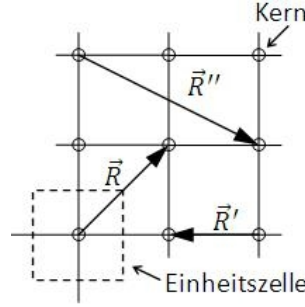
$$V_{\mathbf{q}} = \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}). \quad (3.3)$$

$\mathcal{V}$ ist das Volumen des Systems; wir betrachten den Kristall in einem sehr großen, aber endlichen Volumen $\mathcal{V}$ mit periodischen Randbedingungen und führen (im Prinzip) am Ende der Rechnung den Grenzübergang $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ aus. Damit laufen Integrale $\int d^3r$ über das Volumen $\mathcal{V}$.

In diesem Abschnitt ignorieren wir den Elektronen-Spin, der einfach zu einer Verdoppelung der Einteilchenzustände führt. Wir betrachten aber nicht irgendein Potential $V(\mathbf{r})$, sondern ein starres Kristallgitter. Das bedeutet, dass die Funktion $V(\mathbf{r})$ periodisch ist:

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}) \quad \forall \mathbf{r} \quad (3.4)$$

für jeden *Gittervektor* $\mathbf{R}$. Einige Gittervektoren sind in dieser Skizze (hier in zwei Dimensionen) dargestellt:



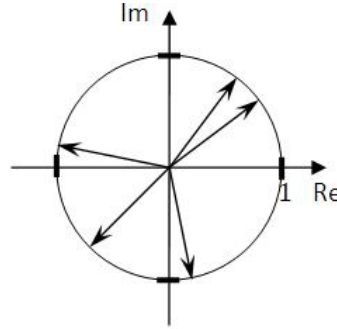
Daher gilt:

$$V_{\mathbf{q}} = \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R} \in \text{Gitter}} \int_{\text{Zelle}} d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \underbrace{V(\mathbf{R} + \mathbf{r})}_{= V(\mathbf{r})}. \quad (3.5)$$

Das Integral $\int d^3r$ läuft über das große, aber endliche Volumen $\mathcal{V}$. Daher hat auch die Gittersumme $\sum_{\mathbf{R}}$ endlich viele Terme, deren Anzahl wir mit N bezeichnen. An dieser Stelle ist es nützlich, zunächst folgende Summe zu betrachten:

$$\sum_{\mathbf{R} \in \text{Gitter}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = ? \quad (3.6)$$

Für fast alle $\mathbf{q}$ nehmen die $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}$ gleichverteilte Werte auf dem Einheitskreis ($|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}| = 1$) an. In der Summe heben sie sich weg:



Das passiert nur dann nicht, wenn

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \forall \mathbf{R}, \quad (3.7)$$

denn dann gilt für alle $\mathbf{R}$:

$$e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = e^{-i2\pi n} = (e^{-2\pi i})^n = 1. \quad (3.8)$$

Also ist in diesem Fall

$$\sum_{\mathbf{R} \in \text{Gitter}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R} \in \text{Gitter}} 1 = N, \quad (3.9)$$

die Zahl der Gitterpunkte ($N \rightarrow \infty$ am Ende der Rechnung). Man definiert das *reziproke Gitter* als Menge aller $\mathbf{Q}$ mit

$$e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} = 1 \quad \forall \mathbf{R} \quad (3.10)$$

oder äquivalent: $\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}/2\pi \in \mathbb{Z} \forall \mathbf{R}$. Also erhalten wir

$$\sum_{\mathbf{R} \in \text{Gitter}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} = \begin{cases} 0 & \text{für } \mathbf{q} \notin \text{rez. Gitter,} \\ N & \text{für } \mathbf{q} \in \text{rez. Gitter.} \end{cases} \quad (3.11)$$

Somit folgt:

$$V_{\mathbf{q}} = \int_{\text{Zelle}} d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \times \begin{cases} 0 & \text{für } \mathbf{q} \notin \text{rez. Gitter} \\ N & \text{für } \mathbf{q} \in \text{rez. Gitter} \end{cases} \quad (3.12)$$

ist nur dann von Null verschieden, wenn $\mathbf{q}$ zum reziproken Gitter gehört, und ist dann i. W. die Fourier-Transformierte über eine Einheitszelle. Daher gilt auch

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{Q} \in \text{rez. Gitter}} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} V_{\mathbf{Q}}. \quad (3.13)$$

Da die Fourier-Transformation in den $\mathbf{k}$ -Raum unitär ist, ändert sich dabei die Zahl der Freiheitsgrade bzw. die Dimension des Hilbert-Raums nicht. Daher muss auch die Summe $\sum_{\mathbf{Q}}$ über das reziproke Gitter N Terme enthalten.

Um den Faktor N loszuwerden, definieren wir die Fourier-Transformierte von $V(\mathbf{r})$ ab jetzt geringfügig anders:

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{Q}} &:= \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{R} \in \text{Gitter}} \int_{\text{Zelle}} d^3r e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \\ &\quad \text{wobei } \sum_{\mathbf{R} \in \text{Gitter}} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}} = N \\ &= \frac{1}{v_{\text{Zelle}}} \int_{\text{Zelle}} d^3r e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.14)$$

$\uparrow$
 Volumen der Einheitszelle

Die Rücktransformation ist dann

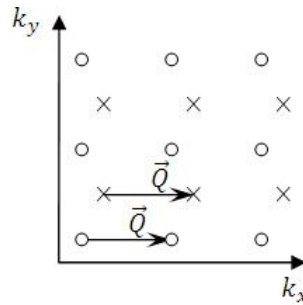
$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{Q} \in \text{rez. Gitter}} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} V_{\mathbf{Q}}. \quad (3.15)$$

Damit vermeiden wir ein explizites Auftreten der extensiven Größen N und $\mathcal{V}$.

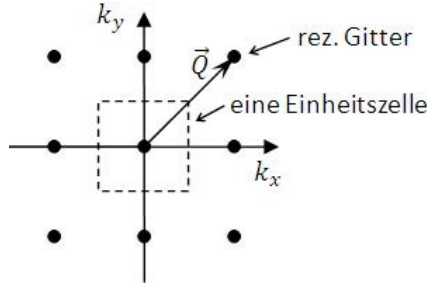
Somit ist

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{2m} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{Q} \in \text{rez. Gitter}} V_{\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}. \quad (3.16)$$

Wir sehen, dass der zweite Term Elektronen koppelt, deren Wellenvektoren (oder Impulse, da $\hbar = 1$) sich um reziproke Gittervektoren $\mathbf{Q}$ unterscheiden:



Hier sind alle Punkte „o“ miteinander gekoppelt und alle „x“ sind ebenfalls miteinander gekoppelt, aber nicht die „o“ mit den „x“.



Die 1. Brillouin-Zone (1. BZ) ist definiert als die Menge aller $\mathbf{k}$, die näher an $\mathbf{Q} = 0$ als an irgendeinem anderen reziproken Gittervektor $\mathbf{Q}$ liegen. Die 1. Brillouin-Zone ist eine spezielle primitive Einheitszelle des reziproken Gitters. Jedes $\mathbf{k}$ lässt sich schreiben als Summe eines reziproken Gittervektors $\mathbf{Q}$ und eines $\mathbf{q} \in 1. \text{ BZ}$:

$$\mathbf{k} = \mathbf{Q} + \mathbf{q}. \quad (3.17)$$

Das tun wir jetzt für die Operatoren $c, c^\dagger$ und schreiben

$$H = \sum_{\substack{\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ} \\ \mathbf{Q} \in \text{rez. Gitter}}} \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{Q})^2}{2m} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \sum_{\mathbf{k} \mathbf{Q} \mathbf{Q}'} V_{\mathbf{Q}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{Q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}. \quad (3.18)$$

Da H keine Wechselwirkungen enthält, reicht es hin, Einteilchenzustände zu betrachten. Vielteilchenzustände ergeben sich dann einfach durch Besetzung der entsprechenden Zahl von Einteilchenzuständen unter Beachtung des Pauli-Prinzips. Wir betrachten Einteilchenzustände der Form

$$|n\mathbf{k}\rangle = \sum_{\mathbf{Q} \in \text{rez. Gitter}} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger |0\rangle, \quad \mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}. \quad (3.19)$$

Dies ist eine Superposition der von H in Glg. (3.16) und (3.18) gekoppelten Einteilchenzustände. Es folgt

$$\begin{aligned} H|n\mathbf{k}\rangle &= \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{Q} \mathbf{Q}''} \frac{(\mathbf{k}' + \mathbf{Q})^2}{2m} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}}^\dagger \underbrace{c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}}}_{\swarrow} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}''} \underbrace{c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}''}^\dagger}_{\nearrow} |0\rangle \\ &\quad \text{erfordert } \mathbf{k}' + \mathbf{Q} = \mathbf{k} + \mathbf{Q}'' \\ &+ \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{Q} \mathbf{Q}' \mathbf{Q}''} V_{\mathbf{Q}'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}+\mathbf{Q}'}^\dagger \underbrace{c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}+\mathbf{Q}'}^\dagger}_{\swarrow} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}''} \underbrace{c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}''}^\dagger}_{\nearrow} |0\rangle \\ &\quad \text{beachte } c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}''}^\dagger = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{Q}\mathbf{Q}''} - \underbrace{c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}''}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}}}_{\text{vernichtet } |0\rangle} \\ &= \sum_{\mathbf{Q}} \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{Q})^2}{2m} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} |0\rangle + \sum_{\mathbf{Q} \mathbf{Q}'} V_{\mathbf{Q}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{Q}'}^\dagger u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} |0\rangle \\ &\quad \text{mit } \mathbf{Q} + \mathbf{Q}' \rightarrow \mathbf{Q} \Rightarrow \mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{Q} - \mathbf{Q}' \\ &= \sum_{\mathbf{Q}} \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{Q})^2}{2m} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger |0\rangle + \sum_{\mathbf{Q} \mathbf{Q}'} V_{\mathbf{Q}'} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Wir wollen die Koeffizienten $u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}}$ so wählen, dass $|n\mathbf{k}\rangle$ ein Eigenzustand von H ist:

$$\dots \stackrel{!}{=} E_{n\mathbf{k}} |n\mathbf{k}\rangle = \sum_{\mathbf{Q}} E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger |0\rangle. \quad (3.21)$$

Dies erfordert, wegen der linearen Unabhängigkeit der Zustandsvektoren $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger |0\rangle$ für verschiedene $\mathbf{k}$,

$$\begin{aligned} \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{Q})^2}{2m} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} + \underbrace{\sum_{\mathbf{Q}'} V_{\mathbf{Q}'} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'}}_{= \sum_{\mathbf{Q}'} V_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}'}} &= E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'} \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\Rightarrow \sum_{\mathbf{Q}'} \left[\delta_{\mathbf{Q}\mathbf{Q}'} \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{Q})^2}{2m} + V_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'} \right] u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}'} = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}}. \quad (3.23)$$

Wir erhalten eine Eigenwertgleichung für die Matrix $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ mit den Komponenten

$$\mathcal{H}_{\mathbf{Q}\mathbf{Q}'}(\mathbf{k}) = \delta_{\mathbf{Q}\mathbf{Q}'} \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{Q})^2}{2m} + V_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'} \quad (3.24)$$

für die Eigenwerte $E_{n\mathbf{k}}$, $n = 1, 2, \dots$, $\mathbf{k}$ aus der 1. Brillouin-Zone, und die Eigenvektoren $u_{n\mathbf{k}}$ mit Komponenten $u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}}$, $\mathbf{Q}$ aus dem reziproken Gitter. $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ ist Hermitesch, da $V(\mathbf{r})$ reell ist. Daher können wir das Problem im Prinzip lösen. $|n\mathbf{k}\rangle$ mit den derart bestimmten $u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}}$ ist ein Eigenzustand von H . In Ortsdarstellung lautet dieser

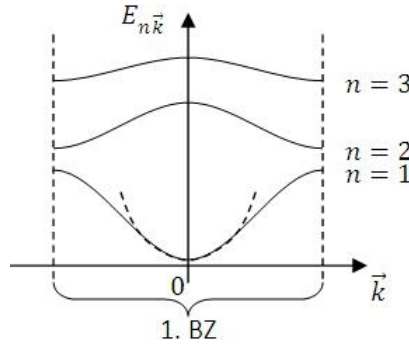
$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | n\mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{Q}} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} \langle \mathbf{r} | c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{Q}} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{r}} = \underbrace{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}_{\text{ebene Welle}} \underbrace{\sum_{\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}}}_{=: u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})}. \quad (3.25)$$

$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ist gitterperiodisch, denn

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} \underbrace{e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}}}_{=1} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.26)$$

Dies ist der Inhalt des *Bloch'schen Theorems*: In einem periodischen Potential sind die Einteilchenwellenfunktionen Produkte aus einer ebenen Welle und einer gitterperiodischen Funktion.

Beachte auch, dass das Energiespektrum $E_{n\mathbf{k}}$ nun durch eine *diskrete* Quantenzahl n (den „Bandindex“) und ein $\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}$ aufgezählt wird. Da die Matrix $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ eine stetige Funktion von $\mathbf{k}$ ist, erwarten wir, dass auch $E_{n\mathbf{k}}$ für festes n stetig in $\mathbf{k}$ ist. Also bildet ein typisches Spektrum eine *Bandstruktur*, wie in der Skizze für eine Dimension gezeigt:



Nahe bei $\mathbf{k} = 0$, und allgemeiner an allen Sattelpunkten in der Bandstruktur, können wir entwickeln:

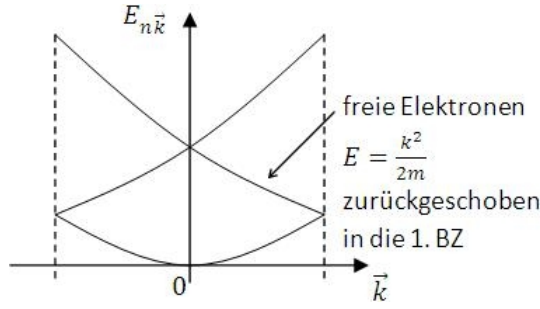
$$E_{n\mathbf{k}} \cong E_{n0} + \frac{1}{2} \sum_{ij} k_i (m_n^{*, -1})_{ij} k_j, \quad (3.27)$$

wobei $m_n^{*, -1}$ der *inverse effektive Massentensor* ist. $m_n^{*, -1}$ ist in drei Dimensionen eine reelle und symmetrische 3×3 -Matrix. Falls diese Matrix proportional zur Einheitsmatrix ist, ergibt sich die einfachere Form

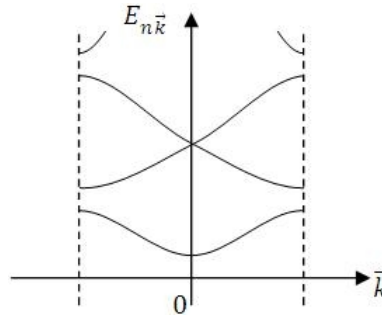
$$E_{n\mathbf{k}} \cong E_{n0} + \frac{k^2}{2m_n^*}, \quad (3.28)$$

wobei m_n^* die *effektive Masse* ist.

Wir können zusätzliche Einsicht aus dem Grenzfall $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ gewinnen. Wie sieht $E_{n\mathbf{k}}$ dann aus? V ist auch hier periodisch, sogar mit jeder Periode, also auch mit der uns interessierenden.



Man kann zeigen, dass sich für ein schwaches Potential V zuerst dort Energielücken öffnen, wo sich zwei Bänder berühren:



Man kann dies als *Streuung* der Elektronen am periodischen Gitter verstehen.

Wir definieren noch

$$c_{n\mathbf{k}}^\dagger := \sum_{\mathbf{Q} \in \text{rez. Gitter}} u_{n\mathbf{k}\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger. \quad (3.29)$$

Dann ist einfach

$$|n\mathbf{k}\rangle = c_{n\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle, \quad (3.30)$$

$c_{n\mathbf{k}}^\dagger$ erzeugt also einen Einteilchen-Eigenzustand. Man kann zeigen, dass die Operatoren $c_{n\mathbf{k}}^\dagger$, $c_{n\mathbf{k}}$ ebenfalls Fermionen beschreiben. Der Hamilton-Operator ausgedrückt durch die neuen Operatoren ist nun einfach

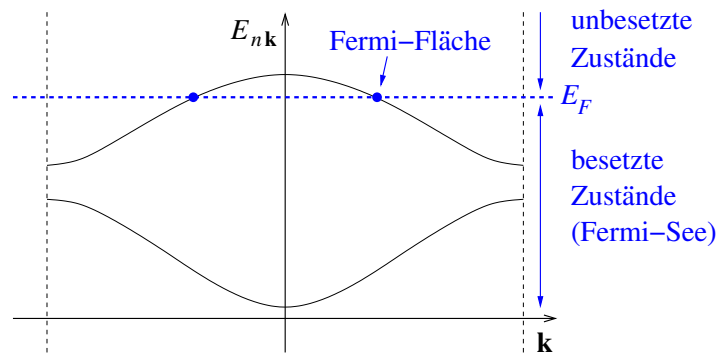
$$H = \sum_{n\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^\dagger c_{n\mathbf{k}}. \quad (3.31)$$

Wir haben den Hamilton-Operator damit vollständig diagonalisiert.

Für wechselwirkungsfreie Elektronen erhalten wir Vielteilchenzustände wie erwähnt einfach durch Besetzung vieler Einteilchenzustände. Der Formalismus der Zweiten Quantisierung sorgt automatisch für die korrekte Antisymmetrie unter Vertauschung (Pauli-Prinzip). Vielteilchenzustände lassen sich also schreiben als

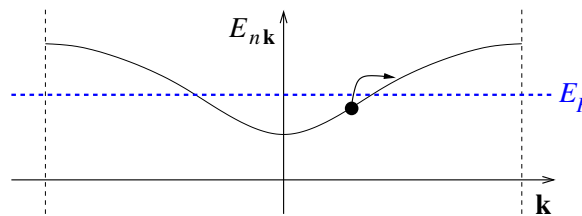
$$|n_1\mathbf{k}_1, n_2\mathbf{k}_2, \dots\rangle = c_{n_1\mathbf{k}_1}^\dagger c_{n_2\mathbf{k}_2}^\dagger \cdots |0\rangle. \quad (3.32)$$

Diese Vielteilchenzustände sind ebenfalls Eigenzustände von H , wie man leicht überprüft. Die zugehörige Eigenenergie ist $E_{n_1\mathbf{k}_1} + E_{n_2\mathbf{k}_2} + \dots$. Der *Grundzustand* ist der Vielteilchenzustand mit der niedrigsten Energie bei der vorgegebenen Teilchenzahl. Wegen des Pauli-Prinzips kann jeder Einteilchenzustand (unter Berücksichtigung des Spins) nur einfach besetzt sein. Wir füllen also die Einteilchenzustände mit aufsteigender Energie auf, bis wir alle Elektronen untergebracht haben. Die höchste dabei erreichte Einteilchenenergie heißt *Fermi-Energie* E_F :

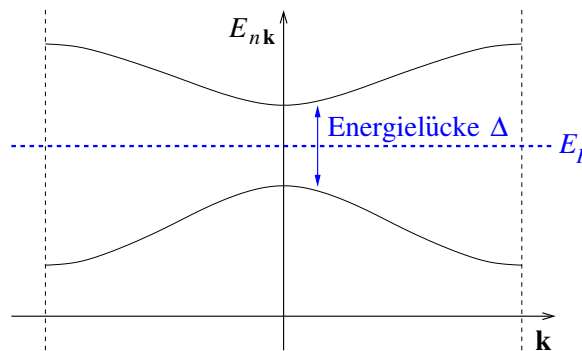


Die Menge aller $\mathbf{k}$ mit $E_{n\mathbf{k}} = E_F$ nennt man *Fermi-Fläche* (eine Fläche im dreidimensionalen $\mathbf{k}$ -Raum). Es gibt mehrere wichtige Fälle:

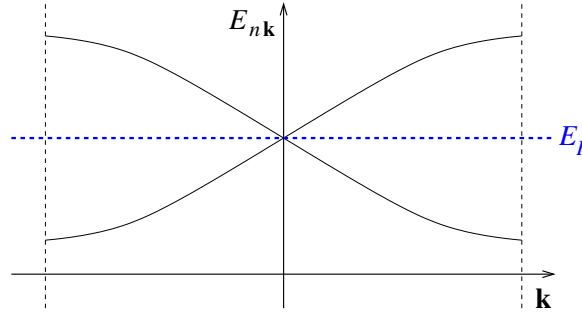
(a) Die Fermi-Energie liegt in einem Band: Elektrische Anregungen mit niedrigen Energien sind möglich, insbesondere Transport (Strom) – es handelt sich um ein *Metall*.



(b) E_F liegt in einer *Energielücke* der Breite Δ zwischen zwei Bändern: Elektrische Anregungen benötigen die Mindestenergie Δ , daher keine Leitfähigkeit bei $T = 0$ – es handelt sich um einen (Band-) *Isolator* (für großes Δ) oder *Halbleiter* (für kleinere Δ). Ein Isolator oder Halbleiter hat also keine Fermi-Fläche. Anregungen werden thermisch erzeugt für $k_B T \gtrsim \Delta$, dann erhalten wir intrinsische Leitung im Halbleiter. Für $k_B T \ll \Delta$ ist die Leitfähigkeit exponentiell unterdrückt.



(c) Bei der Fermi-Energie E_F berühren sich zwei Bänder, so dass zwar keine Energielücke vorhanden ist, die Zustandsdichte bei E_F aber verschwindet. Die Leitfähigkeit bei $T = 0$ ist deshalb Null, aber bei niedrigen Temperaturen $T > 0$ ist sie durch ein Potenzgesetz von T gegeben und nicht exponentiell unterdrückt, wie in einem Isolator oder Halbleiter. Die Bänder können sich am Bandberührungspunkt linear oder quadratisch verhalten, auch unterschiedlich in verschiedenen Richtungen im Impulsraum. Ein zweidimensionales Beispiel ist Graphen.



Die Abbildung $\mathcal{H} : \mathbf{k} \mapsto \mathcal{H}(\mathbf{k})$ aus der 1. BZ (oder dem periodischen $\mathbf{k}$ -Raum) in einen Raum von Bloch-Hamiltonians mit gewissen Eigenschaften kann interessante *topologische* Eigenschaften haben. Charakterisiert man z.B. Hamiltonians nach drei globalen Symmetrien (Zeitumkehrsymmetrie, Ladungskonjugations- bzw. Teilchen-Loch-Symmetrie und deren Produkt, genannt chirale Symmetrie), so findet man zehn Klassen. Abhängig von der Klasse und der Raumdimension erlaubt die Abbildung $\mathcal{H}$ (a) die Existenz einer topologischen Invarianten, die beliebige ganzzahlige Werte annehmen kann, die Existenz einer topologischen Invarianten, die nur zwei diskrete Werte („trivial“ und „nichttrivial“) annehmen kann, oder (c) keine topologische Invariante. Wegen der zehn Klassen nennt man diese topologische Klassifizierung „tenfold way“. Hat das durch den Hamiltonian $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ beschriebene Modell eine Energielücke an der Fermi-Energie, ist also ein Isolator oder – siehe unten – ein Supraleiter im Rahmen der BCS-Theorie, und besitzt eine von Null verschiedene topologische Invariante, so spricht man von einem topologischen Isolator bzw. Supraleiter. Diese zeichnen sich durch nichttriviale elektronische Zustände auf, die an der Oberfläche lokalisiert sind und deren Energie die Fermi-Energie schneidet. Dies ist ein aktuelles Forschungsgebiet, das in eigenen Vorlesungen behandelt wird.

3.1.1 Tight-Binding-Modelle

Nach dem Blochschen Theorem lässt sich jede Eigenfunktion von wechselwirkungsfreien Elektronen auf einem Gitter schreiben als

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (3.33)$$

wobei $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gitterperiodisch ist. Nun ist $\mathbf{k}$ beschränkt auf die 1. BZ und die Fourier-Transformierte von $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ bzgl. des Parameters $\mathbf{k}$ ist daher diskret, wie wir jetzt zeigen. Wir können auch $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ periodisch im $\mathbf{k}$ -Raum fortsetzen, dann ist $\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{Q}}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ für alle reziproken Gittervektoren $\mathbf{Q}$. Daher ist die Fourier-Transformierte (beachte die Nicht-Standard-Konvention über das Vorzeichen im Exponenten, das sich später als nützlich erweist)

$$\phi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.34)$$

nur für $\mathbf{R}$ aus dem reziproken Gitter des reziproken Gitters von Null verschieden, also für $\mathbf{R}$ aus dem ursprünglichen Gitter. Die Umkehrtransformation lautet

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \phi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (3.35)$$

Diese Darstellung von $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ muss das Blochsche Theorem erfüllen:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{r})} \phi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (3.36)$$

mit

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}') \quad \forall \mathbf{R}' \in \text{Gitter} \quad (3.37)$$

$$\Rightarrow \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{r})} \phi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}'-\mathbf{r})} \phi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r} + \mathbf{R}')$$

$$\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R} + \mathbf{R}' \quad \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r})} \phi_n(\mathbf{R} + \mathbf{R}', \mathbf{r} + \mathbf{R}'). \quad (3.38)$$

Wegen der linearen Unabhängigkeit der ebenen Wellen muss dafür $\phi_n(\mathbf{R} + \mathbf{R}', \mathbf{r} + \mathbf{R}') = \phi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ für jeden Gittervektor $\mathbf{R}'$ gelten. Mit der Wahl $\mathbf{R}' = -\mathbf{R}$ finden wir, dass ϕ_n nur von $\mathbf{r} - \mathbf{R}$ abhängen darf. Wir schreiben daher

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (3.39)$$

$$\phi_n(\mathbf{r}) \equiv \phi_n(0, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.40)$$

Die Funktionen $\phi_n(\mathbf{r})$ heißen *Wannier-Funktionen*. Sie sind typischerweise stark lokalisiert im Ortsraum und nähern sich den atomaren Orbitalen an, wenn diese sich schwach überlappen. Anders als diese sind sie jedoch für unterschiedliche n und $\mathbf{R}$ orthogonal,

$$\int d^3r \phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \phi_{n'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \sim \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}, \quad (3.41)$$

und bilden ein vollständiges System. Wir beweisen diese Aussagen hier nicht.

Es ist nützlich, den Hamiltonian H in der Basis der Wannier-Zustände $c_{ni}^\dagger |0\rangle$ mit

$$c_{ni}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{n\mathbf{k}}^\dagger \quad (3.42)$$

darzustellen. Es ist

$$\langle \mathbf{r} | c_{ni}^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \langle \mathbf{r} | c_{n\mathbf{k}}^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (3.43)$$

also erzeugt $c_{ni}^\dagger$ wirklich einen Wannier-Zustand. Mit der Umkehrtransformation

$$c_{n\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{ni}^\dagger, \quad (3.44)$$

wobei die Summe über alle Gitterpunkte läuft, wird der Hamiltonian

$$\begin{aligned} H &= \sum_{n\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^\dagger c_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \sum_{ij} E_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} c_{ni}^\dagger c_{nj} \\ &= \sum_n \sum_{ij} h_{n,ij} c_{ni}^\dagger c_{nj} \end{aligned} \quad (3.45)$$

mit

$$h_{n,ij} := \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} E_{n\mathbf{k}}. \quad (3.46)$$

In dieser Darstellung besteht H aus lokalen Termen ($i = j$) und Hüpferten ($i \neq j$) auf dem zugrundeliegenden Gitter. Diese Art von Modell nennt man *Tight-Binding-Modell*. Es ist instruktiv, die Tight-Binding- (Gitter-) Darstellung (3.45) mit der kontinuierlichen Form in Gl. (3.1) zu vergleichen. Es ist wichtig zu realisieren, dass beiden Hamilton-Operatoren *exakt gleich* sind. Bei der Herleitung von Gl. (3.45) ist insbesondere keine näherungsweise Diskretisierung von $\Psi(\mathbf{r})$ eingegangen, sondern es wurde nur die Periodizität von $V(\mathbf{r})$ verwendet.

Der Begriff Tight-Binding-Modell entstammt der Theorie für Festkörper mit stark an die Kerne gebundenen Elektronen, ist aber in der heutigen Verwendung nicht auf diesen Grenzfall beschränkt. Wenn man von atomaren Orbitalen ausgeht, erhält man i. A. auch Hüpfsterme zwischen verschiedenen Orbitalen an verschiedenen Gitterplätzen, was auf die allgemeinere Form

$$H = \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} h_{i\alpha,j\beta} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} \quad (3.47)$$

führt, wobei α, β atomare Orbitale abzählen. Führt man für feste i, j eine Diagonalisierung der Matrix h_{ij} mit den Komponenten $h_{i\alpha,j\beta}$ aus, so erhält man wieder die Form von Gl. (3.45). Oft stellt man Modelle dieser Art an den Anfang der Diskussion.

3.1.2 Thermodynamischer Limes für Summen im reziproken Raum

Oft treten Summen über die 1. BZ der Form $\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})$ auf. Da wir immer ein großes, aber endliches System mit N Gitterplätzen annehmen, hat die Summe genau N Terme. (Die Anzahl der Atome ergibt sich aus N multipliziert mit der Mächtigkeit der Basis des Gitters.) Da die Größe der 1. BZ von N unabhängig ist, liegen die $\mathbf{k}$ -Punkte für große N immer dichter. Die Summe sollte also im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ in ein Integral über die 1. BZ übergehen. Für praktische Rechnungen, ist die Integraldarstellung i. A. nützlicher als die Summe, da es für Integrale mehr Lösungsmethoden und auch umfangreichere Tafeln gibt als für endliche Summen.

Es stellt sich die Frage, welches Integrationsmaß beim Übergang zu einem Integral auftritt, d. h. wir suchen die Konstante c in

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \xrightarrow{N \gg 1} c \int d^3k f(\mathbf{k}). \quad (3.48)$$

Da c nicht von $f(\mathbf{k})$ abhängen darf, können wir die Konstante für den einfachsten Fall $f \equiv 1$ bestimmen. Es ist

$$\sum_{\mathbf{k}} 1 = N \quad (3.49)$$

und andererseits

$$\int d^3k 1 = \text{Volumen der 1. BZ.} \quad (3.50)$$

Sind $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ die primitiven Gittervektoren, die also das Kristallgitter im Ortsraum aufspannen, so überzeugt man sich leicht, dass

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (3.51)$$

und $\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ zyklisch primitive Gittervektoren des reziproken Gitters sind. Damit ist das Volumen einer Einheitszelle des reziproken Gitters, insbesondere der 1. BZ, gegeben durch

$$|\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)| = \left| \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \right| = \frac{(2\pi)^3}{\mathcal{V}/N}, \quad (3.52)$$

wobei $\mathcal{V}/N$ das Volumen einer Einheitszelle des Gitters im Ortsraum ist. Damit folgt

$$N \stackrel{!}{=} c \int d^3k 1 = c \frac{(2\pi)^3}{\mathcal{V}/N} = c N \frac{(2\pi)^3}{\mathcal{V}} \quad (3.53)$$

$$\Rightarrow c = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}. \quad (3.54)$$

Die Transformationsregel lautet also

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \xrightarrow{N \gg 1} \mathcal{V} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(\mathbf{k}). \quad (3.55)$$

Die Verallgemeinerung auf andere Dimensionszahlen ist offensichtlich. Hier wird auch klar, warum wir in der Festkörperphysik eine asymmetrische Definition der Fourier-Transformation bevorzugen.

3.2 Elektron-Elektron-Wechselwirkung

In realen Kristallen wechselwirken die Elektronen aufgrund ihrer Coulomb-Abstoßung stark miteinander. Die Physik der elektromagnetischen Wechselwirkung von Elektronen wird durch die in 2.11 besprochene QED beschrieben, aber diese Theorie ist hier unnötig kompliziert, denn

- Elektronen im Kristall sind i. A. nicht relativistisch ($v \ll c$) und
- für die Behandlung der Coulomb-Abstoßung reicht i. A. die klassische Elektrostatik aus.

In diesem Abschnitt ist es erforderlich, den Elektronenspin explizit zu berücksichtigen. Das Zweiteilchen-Coulomb-Potential ist (vgl. S. 25)

$$V_C = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \Psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1). \quad (3.56)$$

Ab jetzt verwenden wir SI-Einheiten. Die Integrale laufen über das Volumen des Kristalls. Wir werden in diesem Abschnitt im Interesse einer einfachen Notation das *Jellium-Modell* verwenden, in dem das periodische Potential aufgrund der Kerne durch seinen konstanten Mittelwert ersetzt wird (die Masse m in der elektronischen kinetischen Energie ist als effektive Masse aufzufassen). Wir werden sehen, dass diese Konstante notwendig ist, um eine Divergenz in der Coulomb-Energie wegzuheben. Anhand dieses einfachen Modells können wir die wesentliche Physik diskutieren, ohne unnötige Komplikationen einzuführen. Es ist aber konzeptionell nicht schwierig, ein periodisches Potential zu behandeln. Dann müssen Bloch-Zustände betrachtet werden und Wellenvektoren sind auf die 1. Brillouin-Zone beschränkt und nur bis auf reziproke Gittervektoren erhalten.

Es ist oft praktisch, die Coulomb-Wechselwirkung im Fourier-Raum zu schreiben. Im Jellium-Modell ist das besonders einfach. Mit

$$\Psi_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.57)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} V_C &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \\ &\quad \times e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}'_2 \cdot \mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}'_1 \cdot \mathbf{r}_1} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d^3 r_1 d^3 \Delta \mathbf{r} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\Delta \mathbf{r}} \\ &\quad \times e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}_1} e^{-i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2) \cdot \Delta \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Die Integrale laufen weiterhin über das große, aber endliche Volumen des Kristalls. Daher ist

$$\int d^3 r_1 e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{r}_1} = \mathcal{V} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2}, \quad (3.59)$$

wir finden also Impulserhaltung, und

$$\int d^3 \Delta \mathbf{r} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\Delta \mathbf{r}} e^{-i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2) \cdot \Delta \mathbf{r}} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2|^2} =: V_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2} \quad (= V_{\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_2}). \quad (3.60)$$

Diese Fourier-Transformation werden wir gleich besprechen. Mit $\mathbf{q} := \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_2$ folgt

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_2 - \mathbf{q}, \quad (3.61)$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{q}, \quad (3.62)$$

$$\begin{aligned} V_C &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}'_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1} \\ &\quad (\text{wir lassen den Strich jetzt weg}) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Wir bestimmen nun die Fourier-Transformierten des Coulomb-Potentials. Gesucht ist

$$V_{\mathbf{q}} = \int d^3 r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{r}. \quad (3.64)$$

Da dieses Integral bei großen r nicht konvergiert, regularisieren wir es durch Übergang zum *Yukawa-Potential*

$$V_{\mathbf{q}}^Y = \int d^3r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-\kappa r}}{r} \quad (3.65)$$

und lassen am Ende der Rechnung $\kappa \rightarrow 0$ gehen. Das Yukawa-Potential beschreibt eine abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung. Es gilt

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{q}}^Y &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int dr d\theta d\varphi r^2 \sin\theta \frac{e^{-iqr \cos\theta} e^{-\kappa r}}{r} \\ &= \frac{e^2}{2\epsilon_0} \int_0^\infty dr r e^{-\kappa r} \underbrace{\int_{-1}^1 du e^{-iqr u}}_{= \frac{e^{-iqr} - e^{iqr}}{-iqr} = 2 \frac{\sin qr}{qr}} \\ &= \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q} \underbrace{\int_0^\infty dr e^{-\kappa r} \sin qr}_{= \frac{q}{q^2 + \kappa^2}} \\ &= \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2 + \kappa^2}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Im Limes $\kappa \rightarrow 0$ erhalten wir

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2}. \quad (3.67)$$

Diese $1/q^2$ -Form schließt man übrigens sofort aus der Poisson-Gleichung für eine Punktladung:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{e}{\epsilon_0} \delta(\mathbf{r}). \quad (3.68)$$

Mittels Fourier-Transformation folgt

$$-q^2 \phi_{\mathbf{q}} = -\frac{e}{\epsilon_0} \quad (3.69)$$

$$\Rightarrow \phi_{\mathbf{q}} = \frac{e}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2} \quad (3.70)$$

$$\Rightarrow V_{\mathbf{q}} = e \phi_{\mathbf{q}} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2}. \quad (3.71)$$

Die Abhängigkeit $1/q^2$ ist unabhängig von der Dimension des Raumes und kann somit als fundamentaler als das Coulomb- $1/r$ -Gesetz angesehen werden, das speziell für drei Dimensionen gilt.

Die Terme mit $\mathbf{q} = 0$ sind nicht wohldefiniert ($1/0$). Was bedeutet das? Wenn wir die Fourier-Transformation für $\mathbf{q} = 0$ sorgfältig ausführen, erhalten wir

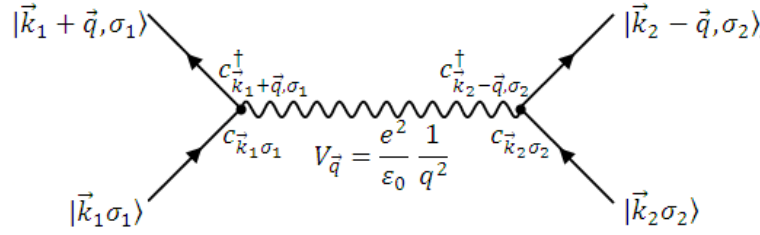
$$\begin{aligned} V_{\mathbf{q}=0} &= \int d^3r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \int d^3r V_C(\mathbf{r}) \\ &= \underbrace{\mathcal{V}}_{\text{Volumen}} \underbrace{\overline{V_C}}_{\text{Mittelwert des Potentials}}. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Im Kristall müssen wir aber das gesamte Potential aufgrund der Kerne und der (übrigen) Elektronen berücksichtigen. Da der Kristall insgesamt neutral ist, ist

$$\overline{V_{\text{ges}}} = \overline{V_{\text{el}}} + \overline{V_{\text{Kerne}}} = 0. \quad (3.73)$$

Der $V_{\mathbf{q}=0}$ Term wird also vom Kernpotential exakt weggehoben. Wir schließen im Folgenden $\mathbf{q} = 0$ aus den Summen aus.

Den durch V_C in Gl. (3.63) beschriebenen Prozess können wir diagrammatisch darstellen, wobei dies zunächst nur zur Veranschaulichung dienen soll:



Die Interpretation ist klar: zwei Elektronen mit Impulsen $\mathbf{k}_1$ und $\mathbf{k}_2$ streuen in Zustände mit Impulsen $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$, $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}$, unter Beibehaltung des Spins, mit einer Wahrscheinlichkeitsamplitude proportional zu e^2/q^2 .

3.2.1 Störungstheorie für die Coulomb-Wechselwirkung

Die Coulomb-Wechselwirkung macht die Physik deutlich schwieriger, denn wir können die Vielteilchenzustände nicht mehr aus Einteilchenzuständen konstruieren, weil die Eigenschaften der Elektronen von den Zuständen aller anderen Elektronen abhängen. Daher wollen wir den Wechselwirkungsterm in H näherungsweise behandeln. Wir betrachten hier quantenmechanische *Störungstheorie* in V_C , weil diese Methode ziemlich systematisch durchgeführt werden kann. Wir verwenden weiterhin das Jellium-Modell.

Für die Störungstheorie müssen wir einen *kleinen Parameter* identifizieren. Die Kopplungsstärke der Coulomb-Wechselwirkung ist e^2/ϵ_0 . Aber es macht keinen Sinn zu behaupten, e^2/ϵ_0 sei klein. Wir müssen sagen, im Vergleich zu welcher Größe e^2/ϵ klein ist. Oder besser, wir brauchen eine dimensionslose Größe. Dann bedeutet „klein“ einfach „klein gegen eins“. Sinnvoll ist, als dimensionslose Größe das Verhältnis der Beiträge von Coulomb-Wechselwirkung und kinetischer Energie zur Grundzustandsenergie zu betrachten. Wir schätzen daher die beiden Energiebeiträge ab:

(a) Kinetische Energie: Hier können wir die bekannte Lösung für wechselwirkungsfreie Elektronen verwenden; alle Einteilchenzustände bis E_F werden aufgefüllt. Wir bezeichnen Erwartungswerte im Grundzustand mit $\langle \dots \rangle_0$. Es ist

$$\begin{aligned}
 \langle T \rangle_0 &= \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma \\ |\mathbf{k}| \leq k_F}} \frac{k^2}{2m} \stackrel{\text{vgl. 3.1.2}}{=} \underbrace{\sum_{\sigma}}_{=2} \mathcal{V} \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{2m} \\
 &\Leftrightarrow \frac{k_F^2}{2m} \leq E_F \\
 &= 2\mathcal{V} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m} \int_0^{k_F} dk \underbrace{\int d\Omega}_{\text{voller Raumwinkel}} k^2 k^2 \\
 &= 2\mathcal{V} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m} 4\pi \frac{k_F^5}{5} = \frac{\mathcal{V}}{5\pi^2} \frac{1}{2m} k_F^5.
 \end{aligned} \tag{3.74}$$

Wir wollen die kinetische Energie *pro Elektron* ausrechnen, dazu brauchen wir die Elektronenzahl

$$\langle N_e \rangle_0 = \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma \\ |\mathbf{k}| \leq k_F}} 1 = \sum_{\sigma} \mathcal{V} \underbrace{\int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}}_{\text{Kugelvolumen}} 1 = 2\mathcal{V} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{\mathcal{V}}{3\pi^2} k_F^3 \tag{3.75}$$

$$\Rightarrow \left\langle \frac{T}{N_e} \right\rangle_0 = \frac{3}{5} \frac{k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} E_F. \tag{3.76}$$

Es ist auch nützlich, dies durch die Elektronenkonzentration statt durch E_F auszudrücken: Die Konzentration ist

$$n := \frac{\langle N_e \rangle_0}{\mathcal{V}} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \tag{3.77}$$

$$\Rightarrow k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n} \tag{3.78}$$

$$\text{und } E_F = \frac{1}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \tag{3.79}$$

$$\Rightarrow \left\langle \frac{T}{N_e} \right\rangle_0 = \frac{3}{5} \frac{1}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3} \sim n^{2/3}. \quad (3.80)$$

(b) Coulomb-Energie: Bei einer Konzentration von n ist der typische Abstand zweier benachbarter Elektronen (betrachte die Dimensionen)

$$d = n^{-1/3}, \quad (3.81)$$

also ist die typische Coulomb-Energie pro Elektron

$$\left\langle \frac{V_C}{N_e} \right\rangle_0 \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d} \sim n^{1/3} \quad (3.82)$$

(eine sorgfältigere Rechnung folgt später).

Zusammenfassend finden wir also

$$\frac{\langle V_C \rangle_0}{\langle T \rangle_0} \sim \frac{n^{1/3}}{n^{2/3}} = n^{-1/3} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \quad (3.83)$$

Wir erhalten ein überraschendes Ergebnis:

- Für *hohe* Dichten wird die Coulomb-Wechselwirkung irrelevant, die kinetische Energie dominiert. Die Elektronen verhalten sich wie ein freies Elektronengas.
- Für *niedrige* Dichten wird die Wechselwirkung dominant. Die Elektronen haben das Bestreben, ihre gegenseitigen Abstände zu maximieren. Dies kann zur Bildung eines Elektronenkristalls (Wigner-Kristalls) führen. Dieses Phänomen wurde in zwei Dimensionen für Elektronen auf einer Helium-Oberfläche beobachtet.

Wieso ist das so? $\langle V_C \rangle_0$ wächst mit der Dichte an, wie erwartet, aber $\langle T \rangle_0$ wächst wegen des Pauli-Prinzips *schneller* an. Dieses zwingt Elektronen für höhere Konzentrationen in Einteilchenzustände mit immer höherer Energie.

Aus der Elektronendichte erhalten wir eine nützliche dimensionslose Größe unter Verwendung des *Bohr-Radius* (typischer Elektron-Proton-Abstand im H-Atom) $a_B = 0,053 \text{ nm}$:

$$r_s := \frac{\text{Radius einer Kugel, die im Mittel ein Elektron enthält}}{a_B} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{k_F a_B}. \quad (3.84)$$

Damit ist

$$\left\langle \frac{T}{N_e} \right\rangle_0 = \frac{3}{10} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} \frac{1}{r_s^2} = 2,211 \text{ Ry} \frac{1}{r_s^2} \quad (3.85)$$

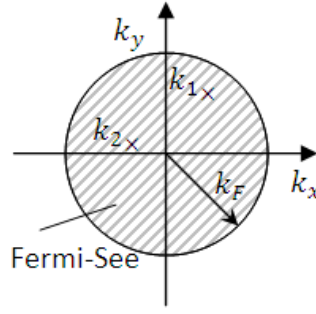
mit dem *Rydberg* definiert durch $1 \text{ Ry} = 13,6 \text{ eV}$ (Bindungsenergie des H-Atoms).

V_C wird schwach im Vergleich zu T für hohe Dichten, also für kleine r_s . Daher ist r_s unser kleiner Parameter. Die führende (niedrigste) Ordnung in der Störungstheorie in r_s ist offenbar die Ordnung -2 , denn bereits ohne Coulomb-Wechselwirkung erhalten wir

$$\frac{E^{(0)}}{N_e} = \left\langle \frac{T}{N_e} \right\rangle_0 = 2,211 \text{ Ry} \frac{1}{r_s^2}. \quad (3.86)$$

Die nächst höhere Ordnung ist die erste Ordnung in V_C und erwartungsgemäß die Ordnung -1 in r_s . Störungstheorie erster Ordnung in V_C ergibt:

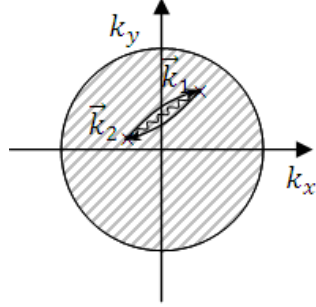
$$\begin{aligned} \frac{E^{(1)}}{N_e} &= \frac{1}{N_e} \langle V_C \rangle_0 \\ &= \frac{1}{2N_e \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}, \mathbf{q} \neq 0} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2} \underbrace{\langle \text{GZ} | c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger}_{\text{Grundzustand (Fermi-See)}} \underbrace{c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} | \text{GZ} \rangle}_{\substack{\uparrow \\ \text{nur nicht Null, wenn} \\ |\mathbf{k}_1|, |\mathbf{k}_2| \leq k_F}}. \end{aligned} \quad (3.87)$$



Die Anwendung von $c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}$ muss wieder auf *denselben* Grundzustand $|\text{GZ}\rangle$ führen, d. h. die Operatoren $c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}^\dagger$ müssen zwei Elektronen in *denselben* Einteilchenzuständen erzeugen, in denen sie von $c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}$ vernichtet wurden. Dafür gibt es nur zwei Möglichkeiten:

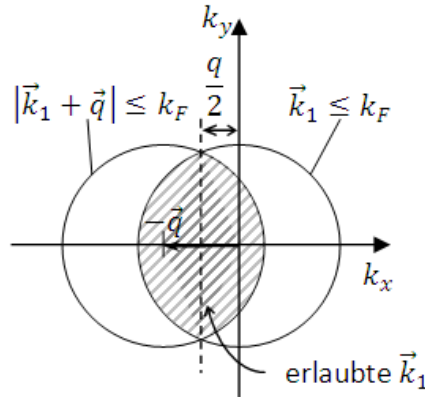
(a) $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} = \mathbf{k}_1$ und $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} = \mathbf{k}_2$, also $\mathbf{q} = 0$. Aber die $\mathbf{q} = 0$ Terme haben wir oben schon ausgeschlossen, da sie vom Kernpotential weggehoben werden.

(b) $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} = \mathbf{k}_2$ und (äquivalent dazu) $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} = \mathbf{k}_1$, sowie $\sigma_1 = \sigma_2$. Die Elektronen tauschen gewissermaßen ihre Plätze, daher nennt man dies *Austausch-Wechselwirkung*.



Also ist

$$\begin{aligned}
 \frac{E^{(1)}}{N_e} &= \frac{1}{2N_e\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1} \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2} \langle \text{GZ} | c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} | \text{GZ} \rangle \\
 &\quad \text{da } \mathbf{q} \neq 0 \text{ folgt } c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1} = -c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \\
 &= -\frac{1}{2N_e\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1} \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2} \langle \text{GZ} | n_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger n_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger | \text{GZ} \rangle \\
 &\quad \text{(Teilchenzahloperatoren)} \\
 &= -\frac{1}{2N_e\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{q}} \underbrace{\sum_{\sigma_1}}_{=2} \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2} \underbrace{\theta(k_F - |\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k}_1|)}_{\mathbf{k}_1 \text{ und } \mathbf{k}_1+\mathbf{q}=\mathbf{k}_2 \text{ müssen im Fermi-See liegen}}
 \end{aligned} \tag{3.88}$$



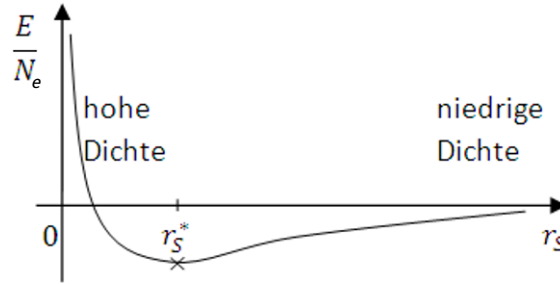
$$\dots = -\frac{1}{2N_e \mathcal{V}} 2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} \mathcal{V}^2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} \int \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3} \theta(k_F - |\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k}_1|). \quad (3.89)$$

Das Integral über $\mathbf{k}_1$ hängt nicht von der Richtung von $\mathbf{q}$ ab. Also folgt

$$\begin{aligned} \dots &= -\frac{1}{2N_e \mathcal{V}} 2 \frac{e^2}{\varepsilon_0} \mathcal{V}^2 \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{2k_F} dq \frac{q^2}{q^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \underbrace{\int d^3 k \theta(k_F - |\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k}_1|)}_{\text{Volumen des doppelten Kugelabschnitts (Skizze)}} \\ &= -\frac{1}{N_e} \frac{e^2}{\varepsilon_0} \mathcal{V} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{2k_F} dq \frac{1}{(2\pi)^3} 2 \frac{\pi}{3} \left(k_F - \frac{q}{2}\right)^2 \left(2k_F + \frac{q}{2}\right) \\ &= -\frac{\mathcal{V}}{N_e} \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{4\pi}{(2\pi)^6} \frac{2\pi}{3} \frac{3k_F^4}{2} \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{n} \frac{k_F^4}{4\pi^3} = -\underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2a_B}}_{= 1 \text{ Ry}} \underbrace{k_F a_B}_{\sim \frac{1}{r_s}} \underbrace{\frac{k_F^3}{2\pi^3 n}}_{\text{Zahl}} = -0,916 \text{ Ry} \frac{1}{r_s}. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Also lauten die führenden Terme in r_s in der Störungsentwicklung

$$\frac{E}{N_e} \cong \frac{E^{(0)}}{N_e} + \frac{E^{(1)}}{N_e} = 2,211 \text{ Ry} \frac{1}{r_s^2} - 0,916 \text{ Ry} \frac{1}{r_s}. \quad (3.91)$$



Wir finden, dass die Korrektur erster Ordnung in V_C *negativ* ist. Der Grund hierfür ist, dass die positive, d. h. abstoßende, direkte Coulomb-Wechselwirkung wie gesehen vom Kernpotential weggehoben wird. Es bleibt nur die Austauschwechselwirkung, die aufgrund der Antikommutation der Fermionoperatoren negativ ist. Sie beschreibt, dass die Coulomb-Abstoßung zwischen Elektronen abgesenkt ist, da sie sich wegen des Pauli-Prinzips nicht so nahe kommen wie klassische Teilchen es tun würden.

Da der Term erster Ordnung in V_C negativ ist, finden wir eine optimale Dichte des Elektronengases (d. h. ein optimales r_s), die die Energie minimiert. Es ist $r_s^* = 4,83$ und

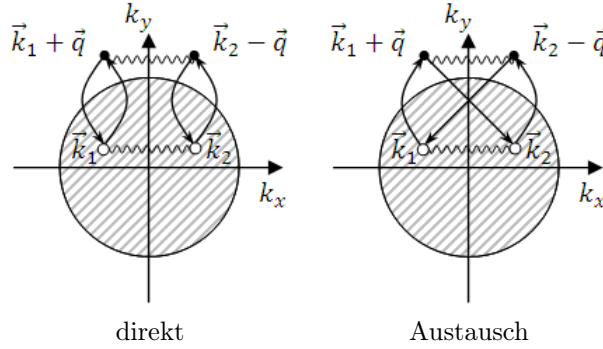
$$\frac{E(r_s^*)}{N_e} = -0,095 \text{ Ry} = -1,29 \text{ eV}. \quad (3.92)$$

Es sei daran erinnert, dass wir vom Kernpotential *nur* den Mittelwert berücksichtigt haben, nämlich um den $\mathbf{q} = 0$ Anteil von V_C zu kompensieren (Jellium-Modell). Die gitterperiodische Struktur des Kernpotentials wurde vernachlässigt. Trotzdem ist das Ergebnis überraschend gut für einfache Metalle. Z. B. findet man für Natrium experimentell $r_s = 3,96$ und $E/N_e = -1,13 \text{ eV}$.

Offenbar sind typische Werte von r_s nicht klein, was die Frage aufwirft, ob die Störungsentwicklung in r_s gerechtfertigt ist. Das hängt aber nicht nur vom absoluten Wert des Entwicklungsparameters ab, sondern auch vom Konvergenzradius der Reihe, die von den Koeffizienten abhängt. Abgesehen vom potentiellen Problem der Konvergenz liegt es nahe zu versuchen, das Ergebnis durch Betrachtung der 2. Ordnung weiter zu verbessern. Der Term 2. Ordnung in V_C ist

$$\frac{E^{(2)}}{N_e} = \frac{1}{N_e} \sum_{\substack{|\Psi\rangle \neq |\text{GZ}\rangle \\ \uparrow \\ \text{Summe über alle Vielteilchenzustände} \neq |\text{GZ}\rangle}} \frac{\langle \text{GZ} | V_C | \Psi \rangle \langle \Psi | V_C | \text{GZ} \rangle}{E^{(0)} - E_\Psi}. \quad (3.93)$$

Es gibt wieder direkte und Austausch-Beiträge:



Wir betrachten den direkten Term, der sich hier nicht weghebt (es gibt keinen weiteren kompensierenden Term vom Kernpotential; dieses haben wir im Jellium-Modell bereits vollständig berücksichtigt, als wir $V_{\mathbf{q}=0}$ weggelassen haben). Die möglichen Zwischenzustände sind

$$|\Psi\rangle = c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} |\text{GZ}\rangle \quad (3.94)$$

mit

$$k_1, k_2 \leq k_F \text{ (besetzt im Grundzustand) und } |\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|, |\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}| > k_F \text{ (unbesetzt im Grundzustand)}. \quad (3.95)$$

Daher ist

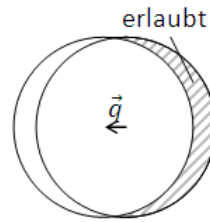
$$\frac{E_{\text{dir}}^{(2)}}{N_e} = \frac{1}{N_e \mathcal{V}^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q} \\ \text{mit Nebenbedingungen (3.95)}}} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{(\frac{1}{2} V_{\mathbf{q}})^2}{E^{(0)} - E_{\Psi}}. \quad (3.96)$$

Wir betrachten kleine $\mathbf{q} \neq 0$: In diesem Grenzfall ist

$$(a) V_{\mathbf{q}}^2 \sim \frac{1}{q^4}, \quad (3.97)$$

$$(b) E^{(0)} - E_{\Psi} = \frac{1}{2m} (k_1^2 + k_2^2 - |\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|^2 - |\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}|^2) \cong \frac{1}{2m} (-2\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{q} + 2\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{q}) \sim q, \quad (3.98)$$

$$(c) \sum_{\mathbf{k}_1} \underbrace{\theta(k_F - k_1)}_{\text{im Fermi-See}} \underbrace{\theta(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| - k_F)}_{\text{nicht im Fermi-See}} \sim q, \quad (3.99)$$



$$(d) \text{ analog gilt } \sum_{\mathbf{k}_2} \theta(k_F - k_2) \theta(|\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}|) \sim q. \quad (3.100)$$

Also ist

$$\frac{E_{\text{dir}}^{(2)}}{N_e} \sim \overbrace{\int_0^{q_{\text{max}}} dq q^2}^{\text{Kugelkoordinaten}} \underbrace{\frac{1}{q^4} \frac{1}{q}}_{\substack{\uparrow \quad \uparrow \\ (a) \quad (b)}} \underbrace{q \quad q}_{\substack{\uparrow \quad \uparrow \\ (c) \quad (d)}} = \int_0^{q_{\text{max}}} dq \frac{1}{q} = \ln q \Big|_0^{q_{\text{max}}} = \infty. \quad (3.101)$$

Der Term 2. Ordnung divergiert bei kleinen $\mathbf{q}$ (*Infrarotdivergenz*). Man kann zeigen, dass die Austauschwechselwirkung das Problem nicht beseitigt – der Austauschterm 2. Ordnung divergiert nicht für kleine q . [Das Integral (3.101) divergiert auch für $q_{\text{max}} \rightarrow \infty$. Dies ist aber irrelevant, da wir bei der Herleitung kleine $\mathbf{q}$ angenommen hatten.]

Das Ergebnis zeigt, dass die naive Störungsentwicklung in V_C versagt. Es ist nicht einfach so, dass die Störungsreihe nicht konvergiert, sondern die Terme ab der Ordnung $\mathcal{O}(V_C^2)$ divergieren schon separat. Es ist fragwürdig, die konvergenten Terme bis zur Ordnung $\mathcal{O}(V_C)$ zu verwenden, wenn man weiß, dass der nächste Term divergiert. Es ist physikalische Einsicht erforderlich, um die störungstheoretische Beschreibung der Coulomb-Wechselwirkung zu retten. Wir werden in Abschnitt 4.8 sehen, dass wir Beiträge *aller* Ordnungen der Störungstheorie aufsummieren müssen, um diese Infrarotdivergenz zu beseitigen.

3.3 Gitterschwingungen und Phononen

Wir hatten bereits in den Abschnitten 2.1 und 2.2 die lineare Kette betrachtet. Mit dem inzwischen eingeführten Formalismus der 2. Quantisierung lässt sie sich eleganter lösen. Wir hatten den Hamiltonian

$$H = \sum_n \left(\frac{1}{2m} P_n^\dagger P_n + \frac{1}{2} m \omega_n^2 Q_n^\dagger Q_n \right) \quad (3.102)$$

mit

$$\omega_n = 2 \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin \frac{\pi n}{N} \right| \quad (3.103)$$

erhalten. Hier sind P_n und Q_n die Impulse und Koordinaten (Auslenkungen) der Eigenmoden der Kette. In der Quantentheorie werden diese Größen durch Operatoren ausgedrückt. Wie in 2.2 diskutiert, erweist es sich als nützlich, nicht Hermitesche Operatoren zu verwenden; wir haben $P_n^\dagger = P_{-n}$ und $Q_n^\dagger = Q_{-n}$. Wir führen nun Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein:

$$b_n := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Q_n}{l_n} + i l_n P_n \right) \quad (3.104)$$

mit

$$l_n := \frac{1}{\sqrt{m \omega_n}}. \quad (3.105)$$

Daraus folgt

$$b_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Q_n^\dagger}{l_n} - i l_n P_n^\dagger \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Q_{-n}}{l_n} - i l_n P_{-n} \right). \quad (3.106)$$

Man sieht durch Einsetzen, dass gilt

$$H = \sum_n \omega_n \left(b_n^\dagger b_n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.107)$$

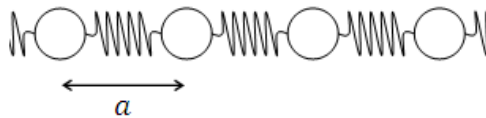
und findet $[b_n, b_{n'}^\dagger] = \delta_{nn'}$, also beschreiben die b -Operatoren Bosonen: *Phononen sind Bosonen*. Üblicherweise benutzt man die Wellenzahlen

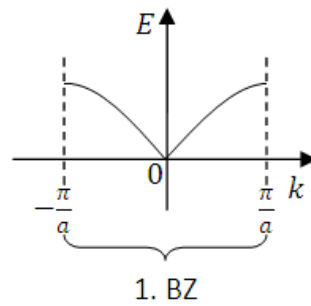
$$k = \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N} \quad \text{mit } n \in \mathbb{Z} \quad (3.108)$$

$\uparrow$
 Gitterkonstante

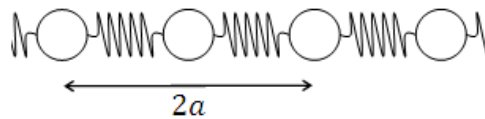
zur Abzählung der Moden:

$$\sum_k \omega_k \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right), \quad \omega_k = 2 \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|. \quad (3.109)$$

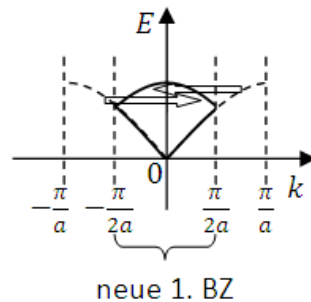




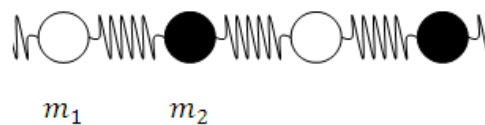
Die Kette hat natürlich auch die Periode $2a$ (und auch $3a$ usw.):



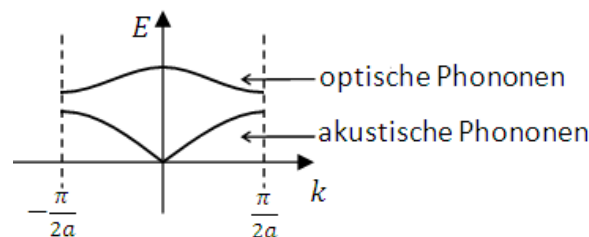
Was passiert, wenn wir diese zu Grunde legen? Die 1. Brillouin-Zone *halbiert* sich, wenn wir die Einheitszelle der Kette verdoppeln:



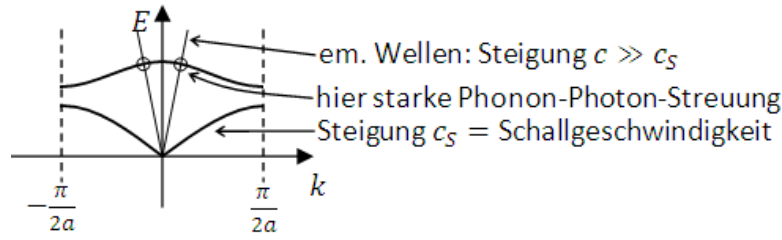
Dadurch ist nichts gewonnen. Wenn aber die Kette zwei unterschiedliche Massen m_1, m_2 abwechselnd enthält, müssen wir die $2a$ -Einheitszelle benutzen.



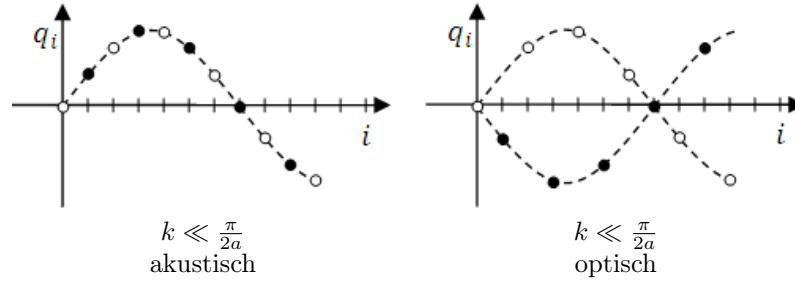
Man findet, dass sich die Phononenbänder am Rand der 1. BZ abstoßen – dasselbe Phänomen hatten wir für die elektronische Bandstruktur gefunden.



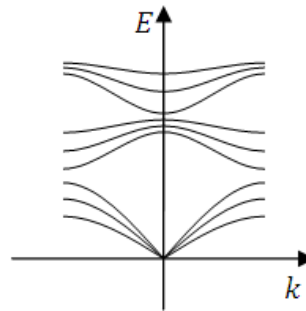
Somit kann man zwischen *optischen Phononen* (so bezeichnet, da sie stark an Licht koppeln) und *akustischen Phononen* (da sie für kleine $\mathbf{k}$ Schall beschreiben) unterscheiden. Die Dispersion von Licht ist auf der k - und Energie-Skala der Phononen sehr steil. Starke Kopplung zwischen Photonen und Phononen besteht, wo sich die Dispersionen schneiden. Dies ist für die optischen Phononen bei kleinen $\mathbf{k}$ der Fall.



Wir geben noch an, wie die Auslenkung für kleine $\mathbf{k}$ aussehen:



In der Verallgemeinerung auf drei Dimensionen findet man für N_{Basis} Atome in der Einheitszelle *drei* akustische Bänder und $3(N_{\text{Basis}} - 1)$ optische Bänder. In bestimmten Richtungen im ($\mathbf{k}$ -) Raum können einige Bänder entartet sein. Beispiel für $N_{\text{Basis}} = 3$:



3.4 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Klassisch lautet die potentielle Energie der Elektronen im durch die Ionenrümpfe, also durch die Kerne mit stark gebundenen Elektronen in inneren Schalen, gebildeten Kristallgitter

$$V_{\text{E-I}} = \int d^3r (-e) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Elektronenkonzentration}}}{n_{\text{el}}(\mathbf{r})} \sum_{j=1}^N \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ort von Ion } j}}{V_I(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)}. \quad (3.110)$$

V_I ist hier das elektrische Potential eines Ionenrumpfes. Der Einfachheit halber betrachten wir ein Kristallgitter mit einatomiger Basis, in dem also insbesondere alle Ionenrümpfe äquivalent sind.

Nun schwingen die Ionen um ihre Gleichgewichtslagen:

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{R}_j + \mathbf{u}_j. \quad (3.111)$$

Die $\mathbf{R}_j$ bilden ein periodisches Gitter und die Auslenkungen $\mathbf{u}_j$ sind klein gegenüber der Gitterkonstanten, $|\mathbf{u}_j| \ll a$. Wir können daher entwickeln:

$$\begin{aligned} V_I(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) &= V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j - \mathbf{u}_j) \\ &\stackrel{\text{Taylor-Reihe bis zur 1. Ordnung}}{\cong} V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) - \nabla V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \cdot \mathbf{u}_j \end{aligned} \quad (3.112)$$

$$\Rightarrow V_{E-I} \cong \int d^3r (-e) n_{el}(\mathbf{r}) \sum_j V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) - \int d^3r (-e) n_{el}(\mathbf{r}) \sum_j \nabla V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \cdot \mathbf{u}_j. \quad (3.113)$$

Der erste Term beschreibt ein periodisches Potential und führt zur elektronischen Bandstruktur (Bloch-Theorie, s. o.). Der zweite Term beschreibt die Wechselwirkung zwischen den Elektronen und den Gitterschwingungen,

$$V_{E-Ph} = \int d^3r n_{el}(\mathbf{r}) \sum_j e \mathbf{u}_j \cdot \nabla V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (3.114)$$

Wir wollen eine quantentheoretische Beschreibung finden. Dazu müssen wir n_{el} durch elektronische und $\mathbf{u}_j$ durch phononische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken. Wir beschränken uns hier auf ein elektronisches Band. In der Vielteilchentheorie ist

$$n_{el}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (3.115)$$

mit

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.116)$$

Also gilt

$$n_{el}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.117)$$

Für die Phononen erinnern wir uns an die lineare Kette, für die nach Glg. (3.104) und (3.106) gilt

$$b_n := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{u_k}{l_k} + i l_k p_k \right) \quad \text{mit } l_k = \frac{1}{\sqrt{m\omega_k}}, \quad (3.118)$$

$$b_n^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{u_k^{\dagger}}{l_k} - i l_k p_k^{\dagger} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{u_{-k}}{l_k} - i l_k p_{-k} \right) \quad (3.119)$$

$$\Rightarrow u_k = \frac{l_k}{\sqrt{2}} (b_k + b_{-k}^{\dagger}). \quad (3.120)$$

In drei Dimensionen haben wir drei akustische Moden $\lambda = 1, 2, 3$ mit Polarisationen beschrieben durch Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda}$ (vergleiche das elektromagnetische Feld):

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \frac{l_{\mathbf{k}\lambda}}{\sqrt{2}} (b_{\mathbf{k}\lambda} + b_{-\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}) \quad \text{mit } l_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{m\omega_{\mathbf{k}\lambda}}}. \quad (3.121)$$

Also ist

$$\mathbf{u}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}} \sum_{\lambda=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in 1. \text{ BZ}} \sum_{\lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} \frac{l_{\mathbf{k}\lambda}}{\sqrt{2}} (b_{\mathbf{k}\lambda} + b_{-\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}). \quad (3.122)$$

Das ionische Potential $V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ ist aus Sicht der Elektronen ein äußeres Potential und bedarf keiner Quantisierung. Wir drücken es durch seine Fourier-Transformierte aus,

$$V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)} V_{\mathbf{p}} \quad (3.123)$$

$$\Rightarrow \nabla V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} i\mathbf{p} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)} V_{\mathbf{p}}. \quad (3.124)$$

V_I ist nicht gitterperiodisch – es ist ja das Potential *eines* Ionenrumpfes – nur die Summe über alle $\mathbf{R}_j$ ist es. V_I hat daher beliebige Fourier-Komponenten, d. h., $\mathbf{p}$ ist nicht auf reziproke Gittervektoren beschränkt. Es ist nützlich, $\mathbf{p} = \mathbf{G} + \mathbf{q}$ zu schreiben, wobei $\mathbf{G}$ ein reziproker Gittervektor und $\mathbf{q} \in 1. \text{ BZ}$ ist. Wir erhalten

$$\nabla V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{G} \in \text{ rez. Gitter}} \sum_{\mathbf{q} \in 1. \text{ BZ}} i(\mathbf{G} + \mathbf{q}) e^{i(\mathbf{G} + \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)} V_{\mathbf{G} + \mathbf{q}}. \quad (3.125)$$

Einsetzen dieses Ergebnisses und von Gl. (3.122) ergibt

$$\begin{aligned}
\sum_j \mathbf{u}_j \cdot \nabla V_I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{G}\mathbf{q}} ie \frac{1}{\sqrt{2m\omega_{\mathbf{k}\lambda}}} (\mathbf{G} + \mathbf{q}) \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} V_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} \\
&\quad \times \underbrace{\sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{R}_j} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} (b_{\mathbf{k}\lambda} + b_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger)}_{= N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{G}+\mathbf{q}}} \\
&= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{G}\mathbf{q}\lambda} \underbrace{ie \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2m\omega_{\mathbf{q}\lambda}}} (\mathbf{G} + \mathbf{q}) \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\lambda} V_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}}_{=: g_{\mathbf{q}\mathbf{G}\lambda}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} (b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{-\mathbf{q}\lambda}^\dagger) \\
&= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{G}\mathbf{q}\lambda} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} g_{\mathbf{q}\mathbf{G}\lambda} (b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{-\mathbf{q}\lambda}^\dagger), \tag{3.126}
\end{aligned}$$

wobei $g_{\mathbf{q}\mathbf{G}\lambda}$ die sogenannte *Kopplungsstärke* ist. Da $\omega_{\mathbf{q}\lambda}$ und $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\lambda}$ periodische Funktionen von $\mathbf{q}$ sind (wir ignorieren die Möglichkeit, dass wir uns bei Verschiebung von $\mathbf{q}$ um einen reziproken Gittervektor in einer anderen Mode λ wiederfinden), hängt $g_{\mathbf{q}\mathbf{G}\lambda}$ nur von der Summe $\mathbf{G} + \mathbf{q}$ ab.

Insgesamt erhalten wir schließlich

$$V_{\text{E-Ph}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \sum_{\mathbf{G}} g_{\mathbf{q}\mathbf{G}\lambda} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} (b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{-\mathbf{q}\lambda}^\dagger). \tag{3.127}$$

Beachte, dass $g_{\mathbf{q}\mathbf{G}\lambda}$ mit der Systemgröße N wie $\sqrt{N}$ skaliert („halb-extensiv“). Zusammen mit dem Vorfaktor $1/V$ haben wir einen Faktor proportional zu $1/\sqrt{V} \sim 1/\sqrt{N}$. Dies ist wichtig, wenn wir später bei konkreten Ergebnissen überprüfen wollen, ob sie korrekt mit der Systemgröße skalieren.

Aber in Gl. (3.127) sind die elektronischen Operatoren, wie die phononischen, periodische Funktionen von $\mathbf{q}$, d. h. die Verschiebung um $\mathbf{G}$ in $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G}\sigma}^\dagger$ ist irrelevant. Wir können also auch schreiben

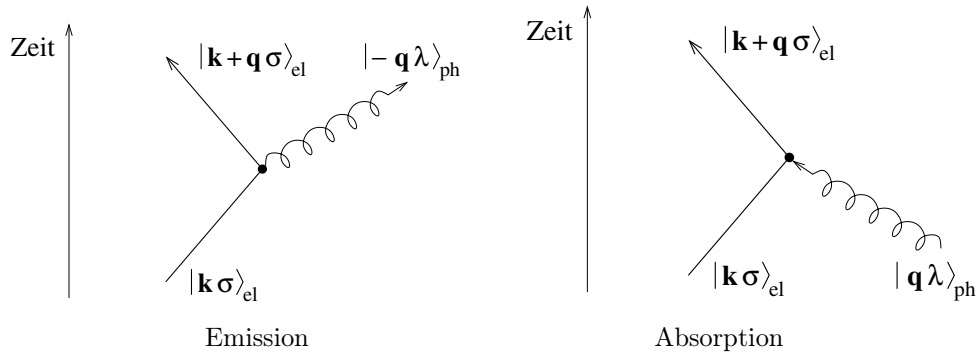
$$V_{\text{E-Ph}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}\lambda} g_{\mathbf{q}\lambda} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} (b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{-\mathbf{q}\lambda}^\dagger). \tag{3.128}$$

mit

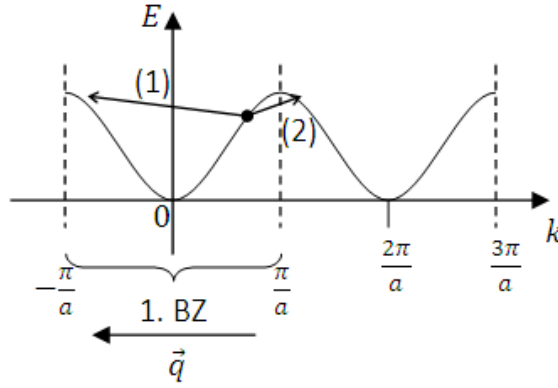
$$g_{\mathbf{q}\lambda} = \sum_{\mathbf{G}} g_{\mathbf{q}\mathbf{G}\lambda} = \sum_{\mathbf{G}} ie \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2m\omega_{\mathbf{q}\lambda}}} (\mathbf{G} + \mathbf{q}) \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\lambda} V_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}. \tag{3.129}$$

Diese neue Kopplungsstärke $g_{\mathbf{q}\lambda}$ ist explizit periodisch im reziproken Raum.

Die Interpretation von $V_{\text{E-Ph}}$ ist klar: Ein Elektron aus dem Zustand $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ kann durch Emission ($b^\dagger$) oder Absorption (b) eines Phonons in den Zustand $|\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma\rangle$ gestreut werden.



Die Summe über $\mathbf{G}$ in $g_{\mathbf{q}\lambda}$ können wir so deuten, dass der Impuls bei diesen Prozessen nur bis auf einen reziproken Gittervektor $\mathbf{G}$ erhalten ist. Prozesse mit $\mathbf{G} \neq 0$ nennt man *Umklappprozesse*. Sie drücken im Wesentlichen aus, dass der reziproke Raum für Elektronen- und Phononenzustände periodisch ist:



Streuprozesse der Art (1) und (2) haben *dieselben* Ausgangs- und Endzustände. Wir müssen über alle möglichen reziproken Gittervektoren $\mathbf{G}$ summieren.

Wir vernachlässigen nun Umklappprozesse. Dies ist eine vernünftige Näherung, wenn wir nur Elektronen mit kleinen $\mathbf{k}$ und Phononen mit kleinen $\mathbf{q}$ betrachten und vereinfacht die Notation. Wir nehmen außerdem an, dass das Medium isotrop (in allen Richtungen gleich) ist – das ist für Kristalle nie exakt erfüllt, da sie immer gewisse Raumrichtungen auszeichnen, nämlich z.B. die durch die Gittervektoren $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ gegebenen. Für ein isotropes Medium sind alle drei akustischen Zweige entartet und wir können $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}1}, \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}2}, \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}3}$ beliebig wählen, solange sie orthogonal sind. Physikalisch sinnvoll ist die Wahl

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}1} = \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \equiv \hat{\mathbf{q}} \quad (\text{longitudinal}), \quad (3.130)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}2}, \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}3} \perp \mathbf{q} \quad (\text{transversal}). \quad (3.131)$$

Wegen des Faktors $\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\lambda}$ in

$$g_{\mathbf{q}\lambda} = ie \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2m\omega_{\mathbf{q}}}} \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{q}\lambda} V_{\mathbf{q}} \quad (3.132)$$

koppeln nur die longitudinalen Moden an die Elektronen. Wir können dann den Index $\lambda = 1$ weglassen und schreiben

$$V_{\text{E-Ph}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}} g_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger). \quad (3.133)$$

Der einfachste Hamiltonian für das Elektron-Phonon-System lautet damit

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{k^2}{2m} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left(b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}} g_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger). \quad (3.134)$$

Hier werden die Elektronen im Jellium-Modell und, damit konsistent, die Phononen im Modell eines isotropen Mediums beschrieben. Für das Jellium-Modell gibt es keine 1. Brillouin-Zone und damit auch keinen Umklapp.

Ist V_I das Yukawa-Potential, das das Coulomb-Potential als Grenzfall enthält, also

$$V_I(\mathbf{r}) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad (3.135)$$

so ist

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{Ze}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2 + \kappa^2} \quad (3.136)$$

und die Kopplung hat die einfache Form

$$g_{\mathbf{q}} = i \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2m\omega_{\mathbf{q}}}} \frac{Ze^2}{\epsilon_0} \frac{q}{q^2 + \kappa^2} \cong i \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2mc_s q}} \frac{Ze^2}{\epsilon_0} \frac{q}{q^2 + \kappa^2} = i \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2mc_s}} \frac{Ze^2}{\epsilon_0} \frac{\sqrt{q}}{q^2 + \kappa^2}, \quad (3.137)$$

wobei c_s die Schallgeschwindigkeit ist. Wir finden, dass die Kopplung $g_{\mathbf{q}}$ für $\mathbf{q} \rightarrow 0$ schwach wird. Dies ist ein Spezialfall von *Adlers Theorem*, wonach die Kopplung der Elektronen an Goldstone-Moden (akustische Phononen sind Goldstone-Moden der durch das Kristallgitter gebrochenen Translationssymmetrie) für Wellenvektoren $\mathbf{q} \rightarrow 0$ verschwinden muss.

Wir werden sehen, dass die Elektron-Phonon-Kopplung, am einfachsten beschrieben durch Gleichung (3.134), wesentlich ist für die endliche Leitfähigkeit von normalen Metallen (Elektronen streuen an Phononen) und, zunächst überraschend, für den dem Anschein nach entgegengesetzten Effekt, die ideale (unendliche) Leitfähigkeit von Supraleitern.

3.5 Zeitabhängige Störungstheorie

Die Aufgabenstellung der zeitabhängigen Störungstheorie besteht darin, die zeitliche Entwicklung eines Systems unter dem Einfluss einer zeitabhängigen Störung zu bestimmen. Der Hamilton-Operator hat die Form (wir verzichten hier auf den Zirkumflex bei Operatoren)

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (3.138)$$

wobei H_0 einfach und zeitunabhängig sein soll und $V(t)$ die zeitabhängige Störung ist. Für diesen Fall ist eine Formulierung nützlich, die sich auf die nichttriviale Zeitentwicklung aufgrund von $V(t)$ konzentriert. Eine solche Formulierung wird durch das Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild) realisiert.

3.5.1 Bildwechsel in der Quantentheorie

Es soll kurz an die Beziehungen zwischen Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungs-Bild erinnert werden. Die einzigen beobachtbaren Größen in der Quantentheorie sind Matricelemente von (Hermiteschen) Operatoren, $\langle \varphi | A | \psi \rangle$. Diese sind invariant unter unitären Transformationen

$$|\varphi\rangle \rightarrow U |\varphi\rangle, \quad (3.139)$$

$$|\psi\rangle \rightarrow U |\psi\rangle, \quad (3.140)$$

$$A \rightarrow U A U^\dagger \quad (3.141)$$

(U unitär), da unter dieser Transformation

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle \rightarrow \langle \varphi | \underbrace{U^\dagger U}_1 A \underbrace{U^\dagger U}_1 | \psi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle \quad (3.142)$$

gilt. Dies kann man ausnutzen, um eine dem jeweiligen Problem angemessene Darstellung zu konstruieren.

Im *Schrödinger-Bild* haben Operatoren höchstens eine explizite Zeitabhängigkeit (z. B. zeitabhängiges äußeres Potential). Zustände erfüllen die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \quad (3.143)$$

Wir betrachten zunächst einen zeitunabhängigen Hamiltonian H . Das ist nicht konzeptionell notwendig, macht die Diskussion aber klarer. Dann ist die formale Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (3.144)$$

Im *Heisenberg-Bild* verwenden wir eine unitäre Transformation, um die Zustände zeitunabhängig zu machen. Die gesamte Dynamik ist dann in den Operatoren enthalten. Dazu wählen wir, für zeitunabhängiges H , $U = e^{iHt/\hbar}$. Das dreht gerade die Zeitentwicklung der Zustände im Schrödinger-Bild zurück:

$$\underbrace{|\psi(t)\rangle_H}_{\text{Heisenberg}} := e^{iHt/\hbar} \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger (ohne Index)}} = e^{iHt/\hbar} e^{-iHt/\hbar} \underbrace{|\psi(0)\rangle}_{\text{Schrödinger}} = |\psi(0)\rangle \quad (3.145)$$

(zeitunabhängig). Andererseits werden Operatoren zu

$$A_H(t) := e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}. \quad (3.146)$$

Hier ist A ein Operator im Schrödinger-Bild, der explizit zeitabhängig sein kann. Zum einen folgt

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle_H = 0 \quad (3.147)$$

und zum anderen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H &= \frac{d}{dt} e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} \\ &= \frac{iH}{\hbar} e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar} \frac{\partial A}{\partial t} e^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} \left(-\frac{iH}{\hbar} \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} (H \underbrace{e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}}_{A_H} - \underbrace{e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} H}_{A_H}) + e^{iHt/\hbar} \frac{\partial A}{\partial t} e^{-iHt/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar} [H, A_H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H. \end{aligned} \quad (3.148)$$

Das ist die bekannte *Heisenberg-Gleichung*. Sie ist äquivalent zur Schrödinger-Gleichung.

Im *Wechselwirkungsbild* oder *Dirac-Bild* (es hat nichts mit der relativistischen Dirac-Quantenmechanik zu tun) führen wir eine unitäre Transformation durch, die nur *einen Teil* des Hamiltonians enthält. Es sei

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (3.149)$$

wobei dieser Formalismus wie erwähnt nützlich ist, wenn H_0 zeitunabhängig und einfach ist. $V(t)$ kann explizit von der Zeit abhängen. Wir verwenden $U = e^{iH_0 t/\hbar}$:

$$|\psi(t)\rangle_D \underset{\text{Dirac}}{\uparrow} := e^{iH_0 t/\hbar} \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger}} \quad (3.150)$$

und

$$A_D(t) := e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (3.151)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_D &= i\hbar \frac{d}{dt} e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle \\ &= -H_0 e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle + e^{iH_0 t/\hbar} H |\psi(t)\rangle \\ &= -H_0 e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle + e^{iH_0 t/\hbar} H \overbrace{e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar}}^{=1} |\psi(t)\rangle \\ &\quad \uparrow \\ &\quad H_0 = e^{iH_0 t/\hbar} H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} = H_{0,D} \\ &= V_D(t) |\psi(t)\rangle_D. \end{aligned} \quad (3.152)$$

Wir erhalten eine Gleichung von der Form der Schrödinger-Gleichung für $|\psi(t)\rangle_D$, die nur die *Störung* (den komplizierten Anteil) V_D enthält. Die einfache Zeitentwicklung aufgrund von H_0 steckt einzig in den Operatoren. Die Lösung ist von der Form

$$|\psi(t)\rangle_D = U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D \quad (3.153)$$

mit einem unitären Operator $U_D(t, t_0)$, der natürlich auch nur von V_D abhängen kann. Offensichtlich ist $U_D(t_0, t_0) = \mathbb{1}$.

Wir betrachten zunächst eine zeitunabhängige Störung V . Dann ist auch H zeitunabhängig und es gilt

$$|\psi(t)\rangle_D = e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (3.154)$$

Beachte, dass H_0 und H i. A. nicht kommutieren, daher gilt *nicht*

$$e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} \stackrel{?}{=} e^{i(H_0 - H)t/\hbar} = e^{-iVt/\hbar}. \quad (3.155)$$

Man erkennt leicht, dass diese Gleichung für nicht kommutierende Operatoren nicht stimmt:

$$\begin{aligned} e^A e^B &\cong \left(\mathbb{1} + A + \frac{1}{2} A^2 \right) \left(\mathbb{1} + B + \frac{1}{2} B^2 \right) \\ &\cong \mathbb{1} + A + B + \underline{AB} + \frac{1}{2} A^2 + \frac{1}{2} B^2, \end{aligned} \quad (3.156)$$

während

$$\begin{aligned} e^{A+B} &\cong \mathbb{1} + A + B + \frac{1}{2} (A+B)^2 \\ &\cong \mathbb{1} + A + B + \frac{1}{2} AB + \frac{1}{2} BA + \frac{1}{2} A^2 + \frac{1}{2} B^2. \end{aligned} \quad (3.157)$$

Es folgt auch

$$|\psi(t_0)\rangle_D = e^{iH_0 t_0/\hbar} e^{-iH t_0/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (3.158)$$

$$\Rightarrow |\psi(0)\rangle = e^{iH t_0/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\psi(t_0)\rangle_D, \quad (3.159)$$

also

$$|\psi(t)\rangle_D = e^{iH_0 t/\hbar} \underbrace{e^{-iH t/\hbar} e^{iH t_0/\hbar}}_{\text{Zeitordnungsoperator}} e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\psi(t_0)\rangle_D, \quad (3.160)$$

so dass gilt

$$U_D(t, t_0) = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar}. \quad (3.161)$$

Man sieht, dass dieser Operator unitär ist.

Für eine allgemeine, zeitabhängige Störung $V(t)$ setzen wir

$$|\psi(t)\rangle_D = U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D \quad (3.162)$$

in die Schrödinger-Gleichung ein:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D = V_D(t) U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D \quad \forall |\psi(t_0)\rangle_D \quad (3.163)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} U_D(t, t_0) = V_D(t) U_D(t, t_0) \quad (3.164)$$

mit der Anfangsbedingung $U_D(t_0, t_0) = \mathbb{1}$. Dies ist eine Differentialgleichung für eine operatorwertige Funktion. Integration liefert

$$U_D(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) U_D(t_1, t_0). \quad (3.165)$$

Nun haben wir eine Integralgleichung erhalten. Was haben wir dadurch gewonnen? Wir können die Gleichung iterieren, indem wir $U_D(t, t_0)$ immer wieder rechts einsetzen:

$$U_D(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_D(t_2) + \dots \quad (3.166)$$

Das können wir kompakter schreiben. Der Term n -ter Ordnung enthält

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_D(t_1) \cdots V_D(t_n) &= \underbrace{\int_{t_0}^t dt_1 dt_2 \cdots dt_n}_{\text{nur } t_0 \leq t_n \leq t_{n-1} \leq \dots \leq t_2 \leq t_1 \leq t} \overbrace{V_D(t_1) V_D(t_2) \cdots V_D(t_n)}^{\text{anwachsende Argumente}} \\ &=: \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 dt_2 \cdots dt_n \underbrace{T}_{\substack{\uparrow \\ \text{Zeitordnungsoperator}}} V_D(t_1) \cdots V_D(t_n). \end{aligned} \quad (3.167)$$

Anzahl der Permutationen

Der *Zeitordnungsoperator* ist definiert durch

$$T A(t_1) B(t_2) = \begin{cases} A(t_1) B(t_2) & \text{für } t_2 < t_1, \\ B(t_2) A(t_1) & \text{für } t_2 > t_1. \end{cases} \quad (3.168)$$

Es kommt natürlich nicht darauf an, wie wir die Zeitvariablen numerieren, nur dass sie der Größe nach sortiert sind. Es folgt

$$\begin{aligned} U_D(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \cdots dt_n T V_D(t_1) \cdots V_D(t_n) \\ &=: T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_D(t') \right). \end{aligned} \quad (3.169)$$

Dies definiert die *zeitgeordnete Exponentialfunktion*. Sie ist gegeben durch die Taylor-Reihe, wobei der Zeitordnungsoperator auf jeden Term unter dem Integral anzuwenden ist.

Die Reihenentwicklung für $U_D(t, t_0)$ in Potenzen der Störung V_D lässt sich mit Hilfe von Diagrammen veranschaulichen:

$$U_I(t, t_0) = \begin{array}{c} \uparrow t \\ | \\ + \\ | \\ \uparrow \\ t_0 \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ | \\ \bullet \\ | \\ \uparrow \\ t_0 \end{array} V_I(t_1) + \begin{array}{c} \uparrow \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \uparrow \\ t_0 \end{array} V_I(t_2) + \dots$$

Ist V_D klein, so kann man die Reihe abbrechen. Es wird oft erst nachträglich klar, ob man ein V_D als klein ansehen kann. Z. B. lautet die Näherung erster Ordnung

$$U_D(t, t_0) \cong \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1). \quad (3.170)$$

3.5.2 Fermis Goldene Regel

Fermis Goldene Regel ergibt sich in der zeitabhängigen Störungstheorie als Näherung für die *Übergangsrate* von einem Zustand $|i\rangle$ in einen Zustand $|f\rangle$. Wir definieren die Rate wie folgt: Das System startet zur Zeit t_0 im Zustand

$$|\psi(t_0)\rangle = |i\rangle \quad (3.171)$$

(im Schrödinger-Bild). Der Hamiltonian sei

$$H = H_0 + V \quad (3.172)$$

mit zeitunabhängigem H_0 . Wir nehmen nun an, dass V langsam eingeschaltet wird. Dazu schreiben wir die Zeitabhängigkeit explizit hin,

$$H(t) = H_0 + V e^{\eta t/\hbar}, \quad (3.173)$$

wobei $\eta > 0$ klein und V zeitunabhängig ist. Dann ist

$$|\psi(t_0)\rangle_D = e^{iH_0 t_0/\hbar} |\psi(t_0)\rangle = e^{iH_0 t_0/\hbar} |i\rangle. \quad (3.174)$$

Außerdem ist

$$|\psi(t)\rangle_D = U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D \quad (3.175)$$

$$\Rightarrow \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger}} = e^{-iH_0 t/\hbar} U_D(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} |i\rangle. \quad (3.176)$$

Die *Wahrscheinlichkeitsamplitude* dafür, das System zur Zeit t im Zustand $|f\rangle$ zu finden, ist

$$\langle f | \psi(t) \rangle = \langle f | e^{-iH_0 t/\hbar} U_D(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} |i\rangle. \quad (3.177)$$

Wir betrachten Übergänge zwischen Eigenzuständen $|i\rangle$, $|f\rangle$ von H_0 mit Energien E_i , E_f und nehmen $|i\rangle \neq |f\rangle$ an. In erster Ordnung in V_D gilt

$$\begin{aligned}
\dots &\cong \langle f| e^{-iH_0 t/\hbar} \left(\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) \right) e^{iH_0 t_0/\hbar} |i\rangle \\
&= \langle f| e^{-iE_f t/\hbar} \left(\underbrace{\mathbb{1}}_{\text{da } \langle f|i\rangle=0} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) \right) e^{iE_i t_0/\hbar} |i\rangle \\
&= \langle f| e^{-iE_f t/\hbar} \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{iH_0 t_1/\hbar} \underbrace{V(t_1)}_{V e^{iE_i t_1/\hbar}} e^{-iH_0 t_1/\hbar} e^{iE_i t_0/\hbar} |i\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar} \langle f|V|i\rangle e^{-iE_f t/\hbar} \underbrace{\int_{t_0}^t dt_1 e^{i(E_f - E_i)t_1/\hbar} e^{\eta t_1/\hbar} e^{iE_i t_0/\hbar}}_{\text{}}. \tag{3.178}
\end{aligned}$$

Das hier auftretende Integral ist

$$\underbrace{\dots}_{\text{}} = \hbar \frac{e^{i(E_f - E_i)t_1/\hbar} e^{\eta t_1/\hbar}}{i(E_f - E_i) + \eta} \Big|_{t_0}^t = \hbar \frac{e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} e^{\eta t/\hbar} - e^{i(E_f - E_i)t_0/\hbar} e^{\eta t_0/\hbar}}{i(E_f - E_i) + \eta}. \tag{3.179}$$

Wir schicken nun t_0 nach $-\infty$, d. h. das System wurde vor beliebig langer Zeit präpariert. Es folgt

$$\langle f|\psi(t)\rangle = -\langle f|V|i\rangle e^{-iE_f t/\hbar} \frac{e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} e^{\eta t/\hbar}}{E_f - E_i - i\eta} e^{iE_i t_0/\hbar} = -\langle f|V|i\rangle \frac{e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar} e^{\eta t/\hbar}}{E_f - E_i - i\eta}. \tag{3.180}$$

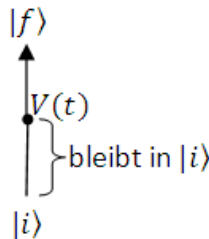
Die *Wahrscheinlichkeit*, das System zur Zeit t im Zustand $|f\rangle$ zu finden, wenn es zur Zeit $t_0 \rightarrow -\infty$ im Zustand $|i\rangle$ präpariert wurde, ist dann $|\langle f|\psi(t)\rangle|^2$. Die *Übergangsrate* Γ_{fi} von $|i\rangle$ nach $|f\rangle$ ist die Änderungsrate dieser Wahrscheinlichkeit mit der Zeit,

$$\begin{aligned}
\Gamma_{fi} &:= \frac{d}{dt} |\langle f|\psi(t)\rangle|^2 \\
&= |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{d}{dt} \frac{e^{2\eta t/\hbar}}{(E_f - E_i)^2 + \eta^2} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} \\
&= |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{1}{\hbar} \frac{2\eta e^{2\eta t/\hbar}}{(E_f - E_i)^2 + \eta^2} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+}. \tag{3.181}
\end{aligned}$$

Der letzte Faktor ist eine Darstellung der δ -Distribution. Wir erhalten *Fermis Goldene Regel*

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle f|V|i\rangle|^2. \tag{3.182}$$

Bemerkung: Oft wollen wir eigentlich die Rate für Übergänge nach $|f\rangle$ ausrechnen, mit der Bedingung, dass das System zur Zeit t (oder genauer $t - \delta t$, $\delta t \rightarrow 0^+$) im Zustand $|i\rangle$ ist. Was wir aber anscheinend ausgerechnet haben, ist die Rate unter der Bedingung, dass das System zur Zeit $-\infty$ im Zustand $|i\rangle$ war. Ist das nicht etwas anderes? Im Allgemeinen schon, aber in erster Ordnung in V kommen wir damit durch, weil vor der Zeit t keine anderen Übergänge stattfinden können – wir brauchen den *einen* Faktor von V schon zur Zeit t :



3.5.3 Verallgemeinerung auf die T -Matrix

Es ist im Prinzip klar, wie wir zu höheren Ordnungen in V übergehen können: Wir setzen die vollständige Reihenentwicklung für $U_D(t, t_0)$ ein,

$$\langle f | \psi(t) \rangle = \langle f | e^{-iE_f t/\hbar} \left[\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_D(t_1) V_D(t_2) + \dots \right] e^{iE_i t_0/\hbar} |i\rangle. \quad (3.183)$$

Der Term n -ter Ordnung enthält, mit $t_0 \rightarrow -\infty$,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n e^{iH_0 t_1/\hbar} \overset{\text{vertauschen nicht}}{\downarrow} V e^{\eta t_1/\hbar} \\ & \times e^{-iH_0 t_1/\hbar} e^{iH_0 t_2/\hbar} V e^{\eta t_2/\hbar} e^{-iH_0 t_2/\hbar} \dots e^{iH_0 t_n/\hbar} V e^{\eta t_n/\hbar} e^{-iH_0 t_n/\hbar} \uparrow_{E_i} \\ & = \frac{1}{(i\hbar)^{n-1}} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-2}} dt_{n-1} e^{iH_0 t_1/\hbar} V e^{\eta t_1/\hbar} \\ & \times e^{-iH_0 t_1/\hbar} \dots e^{iH_0 t_{n-1}/\hbar} V e^{\eta t_{n-1}/\hbar} \\ & \times \cancel{e^{-iH_0 t_{n-1}/\hbar}} \frac{e^{i(H_0 - E_i)t_{n-1}/\hbar + \eta t_{n-1}/\hbar}}{E_i - H_0 + i\eta} V. \end{aligned} \quad (3.184)$$

Der Bruch steht hier wieder für eine Operatorinversion. Für t_{n-1} haben wir im Prinzip das gleiche Integral zu lösen, außer dass die obere Grenze t_{n-2} ist und dass η durch 2η ersetzt wird. Es geht weiter mit Iteration bis wir schließlich erhalten

$$\dots = \frac{e^{-i(H_0 - E_i)t/\hbar} e^{n\eta t/\hbar}}{E_i - H_0 + in\eta} V \frac{1}{E_i - H_0 + i(n-1)\eta} V \dots \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} V. \quad (3.185)$$

Nun können wir den Grenzübergang $\eta \rightarrow 0^+$ im ersten und in den folgenden Faktoren unabhängig voneinander ausführen, da die Grenzwerte jeweils für sich allein existieren. Der erste Faktor führt, wie wir sehen werden, zu einer δ -Distribution. In den übrigen Faktoren zeigt der kleine Imaginärteil im Nenner nur an, auf welcher Seite der reellen Achse die Pole liegen. Wir schreiben, mit $\epsilon = n\eta$,

$$\begin{aligned} \langle f | \psi(t) \rangle &= \langle f | \cancel{e^{-iE_f t/\hbar}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{i(H_0 - E_i)t/\hbar} e^{\epsilon t/\hbar}}{E_i - H_0 + i\epsilon} \Big|_{\epsilon \rightarrow 0^+} V \frac{1}{E_i - H_0 + i0^+} V \dots \frac{1}{E_i - H_0 + i0^+} V e^{iE_i t_0/\hbar} |i\rangle \\ &= \frac{e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar} e^{\epsilon t/\hbar}}{E_i - E_f + i\epsilon} \Big|_{\epsilon \rightarrow 0^+} \langle f | \sum_{n=1}^{\infty} V \frac{1}{E_i - H_0 + i0^+} V \dots \frac{1}{E_i - H_0 + i0^+} V |i\rangle. \end{aligned} \quad (3.186)$$

Hier finden wir die oben definierte T -Matrix wieder:

$$T(E_i) := V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i0^+} V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i0^+} V \frac{1}{E_i - H_0 + i0^+} V + \dots \quad (3.187)$$

Die Übergangsrate ist schließlich

$$\begin{aligned} \Gamma_{fi} &= \frac{d}{dt} |\langle f | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar} \frac{2\eta e^{2\eta t/\hbar}}{(E_i - E_f)^2 + \eta^2} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} |\langle f | T(E_i) |i\rangle|^2 \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle f | T(E_i) |i\rangle|^2. \end{aligned} \quad (3.188)$$

Offenbar erhalten wir die Goldene Regel richtig als führende Ordnung in V :

$$T(E_i) \cong V \quad \Rightarrow \quad \Gamma_{fi} \cong \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle f | V |i\rangle|^2. \quad (3.189)$$

Bemerkungen:

- $T(E_i)$ scheint merkwürdig asymmetrisch definiert zu sein, da E_i explizit auftritt, nicht aber E_f . Die beiden sind aber wegen der δ -Distribution gleich. Es ist ungünstig, aber üblich, die Abhängigkeit von T von E_i nicht explizit als $T(E_i)$ anzugeben.
- Im T -Matrix-Formalismus beschreibt Γ_{fi} *nicht* die Übergangsrate von $|i\rangle$ zur Zeit $t - \delta t$ nach $|f\rangle$ zur Zeit t , sondern die Änderungsrate der Wahrscheinlichkeit von $|f\rangle$ zur Zeit t , unter der Bedingung, dass das System zur Zeit $-\infty$ im Zustand $|i\rangle$ war. Bei der Interpretation ist also Vorsicht angebracht.

3.6 Green-Funktionen bei $T = 0$

Die bisher betrachtete zeitabhängige Störungstheorie (T -Matrix, Fermis Goldene Regel) gilt ganz allgemein, sowohl für Einteilchen- als auch für Vielteilchensysteme. Aber können wir die T -Matrix für ein Vielteilchensystem wirklich ausrechnen? Nehmen wir an, wir wollen ermitteln, wie sich die Elektronen in einem Silizium-Kristall bei Bestrahlung mit Licht verhalten. Dann wäre H_0 der Hamiltonian der Elektronen ohne Licht und V die Dipolkopplung an das elektromagnetische Lichtfeld. Die T -Matrix enthält den inversen Operator $(E_i - H_0 + i0^+)^{-1}$. Diesen können wir nicht ausrechnen, ohne H_0 zu diagonalisieren. Das können wir aber wegen der Elektron-Elektron-Wechselwirkung nicht. Aus demselben Grund können wir auch den Zeitentwicklungsoperator $U_0(t, t_0) = e^{-iH_0(t-t_0)}$ für ein wechselwirkendes Vielteilchensystem nicht ausrechnen.

Wir führen daher eine neue Betrachtungsweise ein, die – auch für ein Vielteilchensystem – von einem *einzelnen* Elektron ausgeht. Diese Betrachtungsweise verwendet *Green-Funktionen*. Diese haben eine einfache Interpretation: Sie geben die *bedingte Wahrscheinlichkeitsamplitude* an, ein Teilchen zur Zeit t am Ort $\mathbf{r}$ zu finden, wenn es zur Zeit t_0 am Ort $\mathbf{r}_0$ war. Dies wurde bereits in Kapitel 2 erwähnt. Green-Funktionen sind identisch mit den dort eingeführten *Propagatoren* (in der QFT spricht man von Propagatoren, in der Vielteilchentheorie verwendet man beide Begriffe, aber häufiger den der Green-Funktionen).

3.6.1 Green-Funktionen für die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung

Um ein Gefühl für Green-Funktionen zu bekommen, führen wir sie zunächst für Einteilchen-Probleme ein. Wir betrachten den zeitunabhängigen Hamiltonian $H = H_0 + V$. Zustände erfüllen die Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \underbrace{(H_0 + V)}_H \psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.190)$$

was wir i. A. nicht lösen können. Aber zumindest formal können wir die Lösung durch eine Green-Funktion ausdrücken, wie wir sehen werden. Zunächst schreiben wir die Schrödinger-Gleichung um:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.191)$$

Dann definieren wir die Green-Funktion durch

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (3.192)$$

mit der Nebenbedingung, dass $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ als Funktion von $\mathbf{r}$ für feste $t, \mathbf{r}', t'$ quadratintegrabel sein soll. Die Anfangsbedingung für $t = t'$ lassen wir zunächst offen (wir werden $G \equiv 0$ für $t < t'$ bzw. für $t > t'$ verwenden). Gleichung (3.192) ist eine partielle Differentialgleichung für G als Funktion der *ersten* Argumente $\mathbf{r}, t$ als unabhängige Variable. Die zweiten Argumente $\mathbf{r}', t'$ sind Parameter der Gleichung. Man kann aber zeigen, dass, wenn $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ eine Lösung von Gl. (3.192) ist, auch $G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t)$ eine Lösung ist. Beide sind also Green-Funktionen.

Wir können G explizit durch den Zeitentwicklungsoperator ausdrücken: Eine Lösung ist

$$G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') := -i \theta(t - t') \langle \mathbf{r} | e^{-iH(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (3.193)$$

Diese Funktion ist für $t > t'$ bis auf einen Zahlenfaktor der Zeitentwicklungsoperator in Ortsdarstellung. Für $t < t'$ ist sie identisch Null.

Beweis: Wenn wir H in der Basis von Eigenzuständen $|\nu\rangle$ bzw. Eigenfunktionen $\phi_\nu(\mathbf{r}, t)$ zu Eigenenergien ε_ν ausdrücken (Spektraldarstellung), lässt sich diese Green-Funktion schreiben als

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= -i \theta(t - t') \sum_\nu \langle \mathbf{r} | \nu \rangle e^{-i\varepsilon_\nu(t-t')} \langle \nu | \mathbf{r}' \rangle \\ &= -i \theta(t - t') \sum_\nu \phi_\nu(\mathbf{r}, 0) e^{-i\varepsilon_\nu(t-t')} \phi_\nu^*(\mathbf{r}', 0) \\ &= -i \theta(t - t') \sum_\nu \phi_\nu(\mathbf{r}, t) \phi_\nu^*(\mathbf{r}', t'). \end{aligned} \quad (3.194)$$

Damit wird

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}) \right) G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \delta(t - t') \sum_\nu \phi_\nu(\mathbf{r}, t) \phi_\nu^*(\mathbf{r}', t') \\ &\quad - i \theta(t - t') \sum_\nu i \frac{\partial}{\partial t} \phi_\nu(\mathbf{r}, t) \phi_\nu^*(\mathbf{r}', t') \\ &\quad + i \theta(t - t') \sum_\nu H(\mathbf{r}) \phi_\nu(\mathbf{r}, t) \phi_\nu^*(\mathbf{r}', t') \\ &= \delta(t - t') \sum_\nu \phi_\nu(\mathbf{r}, t) \phi_\nu^*(\mathbf{r}', t), \end{aligned} \quad (3.195)$$

wobei wir die Schrödinger-Gleichung ausgenutzt haben. Im übrig bleibenden Term durften wir t' in $\phi_\nu^*(\mathbf{r}', t')$ wegen der δ -Distribution durch t ersetzen. Die Eigenfunktionen $\phi_\nu(\mathbf{r}, t)$ bei derselben Zeit erfüllen aber eine Vollständigkeitsrelation und es folgt

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}) \right) G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.196)$$

Analog zeigt man, dass auch

$$G^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') := +i \theta(t' - t) \langle \mathbf{r} | e^{-iH(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle \quad (3.197)$$

eine Lösung ist. Beachte:

- $G^R \neq 0$ gilt nur für $t \geq t'$, dies ist die *retardierte* Green-Funktion (sie beschreibt die Dynamik eines Teilchens in der Zukunft),
- $G^A \neq 0$ gilt nur für $t \leq t'$, dies ist die *avancierte* Green-Funktion (sie beschreibt die Dynamik eines Teilchens in der Vergangenheit).

Nun können wir die Lösung der Schrödinger-Gleichung mit Hilfe der Green-Funktionen ausdrücken. Für $t > t'$ ist

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iH(t-t')} |\psi(t')\rangle \\ \Rightarrow \psi(\mathbf{r}, t) &\equiv \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \mathbf{r} | e^{-iH(t-t')} |\psi(t')\rangle \\ &\quad \text{eins einschieben} \\ &= \int d^3r' \langle \mathbf{r} | e^{-iH(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \psi(t') \rangle \\ &= \int d^3r' \langle \mathbf{r} | e^{-iH(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle \psi(\mathbf{r}', t') \\ &= i \int d^3r' G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \psi(\mathbf{r}', t') \end{aligned} \quad (3.198) \quad (3.199)$$

und für $t < t'$ finden wir entsprechend

$$\psi(\mathbf{r}, t) = -i \int d^3r' G^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \psi(\mathbf{r}', t'). \quad (3.200)$$

Wir erhalten also Formeln, mit denen wir für beliebige Anfangszustände die Lösung der Schrödinger-Gleichung für alle Zeiten t bestimmen können, sofern wir nur die Green-Funktionen kennen. Diese Situation ist typisch für die Lösung von partiellen Differentialgleichungen mit Hilfe von Green-Funktionen. Wir müssen für eine gegebene Bewegungsgleichung nur *einmal* die Green-Funktion bestimmen, danach können wir im Prinzip beliebige Anfangswertprobleme durch Einsetzen lösen.

Für den ungestörten Hamiltonian H_0 definieren wir Green-Funktionen G_0 ganz analog. Wenn H_0 hinreichend einfach ist, können wir hoffen, G_0 explizit zu bestimmen. Es wäre dann wünschenswert, die Green-Funktion G des vollen Problems mit G_0 in Zusammenhang zu bringen. Das werden wir als nächstes tun. Es gilt

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) \psi_0(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{und} \quad (3.201)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) \psi(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.202)$$

Wir betrachten den Fall, dass ψ und ψ_0 derselben Anfangsbedingung $\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r}, t_0)$ zu einem festen Zeitpunkt t_0 gehorchen. Wir zeigen zunächst, dass für $t > t_0$ gilt

$$\psi(\mathbf{r}, t) = i \int d^3 r' G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) \psi(\mathbf{r}', t_0) + \int d^3 r' \int dt' G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}', t'). \quad (3.203)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) \psi(\mathbf{r}, t) &= i \underbrace{\int d^3 r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t_0) \psi(\mathbf{r}', t_0)}_{= 0 \text{ für } t > t_0} \\ &\quad + \int d^3 r' \int dt' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}', t') \\ &= V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.204)$$

Der Ansatz (3.203) erfüllt also die (Schrödinger-) Gleichung (3.202) oben.

Nun sollen ψ und ψ_0 zur Zeit t_0 übereinstimmen. Dann gilt für $t > t_0$,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) + \int d^3 r' \int dt' G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}', t'). \quad (3.205)$$

Beweis: Gleichung (3.199) angewandt auf $|\psi_0\rangle$ ergibt

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = i \int d^3 r' G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) \psi_0(\mathbf{r}', t_0) \equiv i \int d^3 r' G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) \psi(\mathbf{r}', t_0). \quad (3.206)$$

Einsetzen in Gl. (3.203) ergibt die Behauptung.

Andererseits gilt, ebenfalls für $t > t_0$,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) + \int d^3 r' \int dt' \underbrace{G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')}_{\text{nicht } G_0^R!} V(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}', t'). \quad (3.207)$$

Beweis: Wir wenden $(i \partial/\partial t - H)$ auf die Behauptung an,

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H\right) \psi(\mathbf{r}, t) &= \underbrace{\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) \psi_0(\mathbf{r}, t)}_{= 0} - V(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \int d^3 r' \int dt' \underbrace{\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H\right) G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}', t')}_{= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')} \\ &= -V(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}, t) = 0. \end{aligned} \quad (3.208)$$

Damit ist der Beweis vollständig.

Wir können Gl. (3.205) iterieren und erhalten

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}, t) &= \psi_0(\mathbf{r}, t) + \int d^3 r_1 \int dt_1 G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) V(\mathbf{r}_1) \psi_0(\mathbf{r}_1, t_1) \\ &\quad + \int d^3 r_1 \int dt_1 \int d^3 r_2 \int dt_2 G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) V(\mathbf{r}_1) G_0^R(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) V(\mathbf{r}_2) \psi_0(\mathbf{r}_2, t_2) \\ &\quad + \dots\end{aligned}\quad (3.209)$$

Vergleich mit Gl. (3.207) ergibt

$$G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') + \int d^3 r_1 \int dt_1 G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) V(\mathbf{r}_1) G_0^R(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}', t') + \dots, \quad (3.210)$$

vgl. die Herleitung der T -Matrix. Eine abgekürzte Schreibweise für dieses Ergebnis ist:

$$G^R = G_0^R + G_0^R V G_0^R + G_0^R V G_0^R V G_0^R + \dots \quad (3.211)$$

Hier betrachten wir G^R und V als Matrizen mit Indizes $(\mathbf{r}, t)$ und $(\mathbf{r}', t')$. Mit dieser Notation können wir auch schreiben

$$G^R = G_0^R + G_0^R V \underbrace{(G_0^R + G_0^R V G_0^R + \dots)}_{= G^R} \quad (3.212)$$

$$\Rightarrow G^R = G_0^R + G_0^R V G^R. \quad (3.213)$$

Das ist die berühmte *Dyson-Gleichung*. Ausführlicher lautet sie

$$G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') + \int d^3 r_1 \int dt_1 G_0^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) V(\mathbf{r}_1) G^R(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}', t'). \quad (3.214)$$

Diagrammatisch können wir die Dyson-Gleichung wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned}\overrightarrow{\mathbf{r}', t'} \xrightarrow{G^R} \mathbf{r}, t &= \overrightarrow{\mathbf{r}', t'} \xrightarrow{G_0^R} \mathbf{r}, t + \overrightarrow{\mathbf{r}', t'} \xrightarrow{V} \bullet \xrightarrow{G^R} \mathbf{r}, t + \dots \\ &= \overrightarrow{\mathbf{r}', t'} \xrightarrow{G_0^R} \mathbf{r}, t + \overrightarrow{\mathbf{r}', t'} \xrightarrow{G_0^R} \mathbf{r}_1, t_1 \xrightarrow{V} \bullet \xrightarrow{G^R} \mathbf{r}, t + \dots\end{aligned}$$

Analoge Beziehungen gelten für G^A vs. G_0^A .

3.6.2 Einteilchen-Green-Funktionen für Vielteilchensysteme

Wir definieren zunächst die (retardierte) Green-Funktion für ein Vielteilchensystem und zeigen dann, dass diese Definition mit der zuvor betrachteten Green-Funktion für das Einteilchensystem kompatibel ist. Die beiden Definitionen sollten im Wesentlichen übereinstimmen, wenn die Teilchen nicht wechselwirken.

Die Green-Funktion für das Vielteilchensystem lautet, unter Berücksichtigung des Spins,

$$G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') := -i\theta(t - t') \langle [\Psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t')]_{\pm} \rangle, \quad (3.215)$$

wobei gilt

$$[A, B]_{\pm} := \begin{cases} \{A, B\} \equiv AB + BA & \text{für Fermionen,} \\ [A, B] \equiv AB - BA & \text{für Bosonen.} \end{cases} \quad (3.216)$$

In diesem Kapitel betrachten wir Eigenschaften des Grundzustandes des Systems. Dann ist der Mittelwert in der Definition von G^R als Erwartungswert im Vielteilchengrundzustand $|\text{GZ}\rangle$ zu verstehen:

$$G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') := -i\theta(t - t') \langle \text{GZ} | [\Psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t')]_{\pm} | \text{GZ} \rangle. \quad (3.217)$$

Die Definition ist aber weitaus allgemeiner. In Kapitel 4 werden wir Systeme im thermischen Gleichgewicht bei Temperaturen $T > 0$ betrachten, dann ist der Mittelwert als thermischer Mittelwert zu interpretieren. Systeme außerhalb des Gleichgewichts spielen hier nur am Rande, in Kapitel 6, eine Rolle. In solchen Fällen betrachten wir den allgemeinen statistischen Mittelwert $\langle A \rangle = \text{Tr } \rho A$ mit dem Dichteoperator ρ .

Sowohl die Felsoperatoren Ψ , $\Psi^\dagger$ als auch der Grundzustand $|GZ\rangle$ sind hier im *Heisenberg-Bild* zu verstehen (in diesem Kapitel kennzeichnen wir Objekte im Heisenberg-Bild nicht durch einen besonderen Index „ H “). Im Heisenberg-Bild ist der Zustand $|GZ\rangle$ zeitunabhängig. Für Elektronen ohne Wechselwirkung beschreibt $|GZ\rangle$ z. B. den Fermi-See. Außer für wechselwirkungsfreie Systeme kennen wir $|GZ\rangle$ i. A. nicht exakt. Wir werden sehen, dass das für praktische Rechnungen auch nicht erforderlich ist.

Es sei darauf hingewiesen, dass die hier definierten Green-Funktionen für das Vielteilchensystem nicht im Sinne der Theorie partieller Differentialgleichungen Green-Funktionen für die Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung sind. Dies ist anders als im vorigen Abschnitt 3.6.1; die dort definierten Funktionen sind in der Tat Green-Funktionen für die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung, da sie nämlich über Glg. (3.199) und (3.200) deren Lösung ergeben. Die analogen Green-Funktionen für die Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung lassen sich definieren, sie müssen für den Fall von N Teilchen die Gleichung

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H^{(N)}\right) G^{(N)}(r_1, \dots, r_{3N}, t; r'_1, \dots, r'_{3N}, t') = \delta(r_1 - r'_1) \cdots \delta(r_{3N} - r'_{3N}) \delta(t - t') \quad (3.218)$$

erfüllen, wobei $H^{(N)}$ hier der N -Teilchen-Hamiltonian ist. Diese Green-Funktionen $G^{(N)}$ sind i. W. die Resolvente von $H^{(N)}$ in Ortsdarstellung. Für ein wechselwirkendes System sind sie i. A. nicht bekannt und auch nicht nützlich für Näherungsmethoden.

Ganz allgemein können wir Ψ nach Einteilchenzuständen entwickeln,

$$\Psi_\sigma(\mathbf{r}, t) = \sum_\nu \varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) \underbrace{a_{\nu\sigma}(t)}_{\text{Vernichtungsoperator von } |\nu\sigma\rangle} \quad (3.219)$$

$$\Rightarrow G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') = -i\theta(t - t') \langle GZ | \sum_{\nu\nu'} \varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu'\sigma'}^*(\mathbf{r}') [a_{\nu\sigma}(t), a_{\nu'\sigma'}^\dagger(t')]_\pm | GZ \rangle. \quad (3.220)$$

Die Zeitentwicklung von $a_{\nu\sigma}(t)$ im Heisenberg-Bild wird, für einen zeitunabhängigen Hamiltonian, beschrieben durch

$$a_{\nu\sigma}(t) = e^{iHt} a_{\nu\sigma} e^{-iHt}. \quad (3.221)$$

Speziell für *wechselwirkungsfreie* Teilchen ist der Hamiltonian H bilinear in Bose- oder Fermi-Operatoren und diagonalisierbar. Wir können dann schreiben

$$H = \sum_{\nu\sigma} \varepsilon_{\nu\sigma} a_{\nu\sigma}^\dagger a_{\nu\sigma}. \quad (3.222)$$

Hier erzeugen $a_{\nu\sigma}^\dagger$ also nicht mehr Teilchen in irgendwelchen Einteilchenzuständen, sondern in den Eigenzuständen von H . Dann ist

$$\begin{aligned} a_{\nu\sigma}(t) &= \exp\left(i \sum_{\nu'\sigma'} \varepsilon_{\nu'\sigma'} a_{\nu'\sigma'}^\dagger a_{\nu'\sigma'}\right) a_{\nu\sigma} \exp\left(-i \sum_{\nu''\sigma''} \varepsilon_{\nu''\sigma''} a_{\nu''\sigma''}^\dagger a_{\nu''\sigma''}\right) \\ &= e^{i\varepsilon_{\nu\sigma} a_{\nu\sigma}^\dagger a_{\nu\sigma} t} a_{\nu\sigma} e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma} a_{\nu\sigma}^\dagger a_{\nu\sigma} t} \\ &\quad \uparrow \\ &\quad \sum_n |n\rangle \langle n| \text{ einschieben} \\ &= \sum_n |n-1\rangle \underbrace{e^{i(n-1)\varepsilon_{\nu\sigma} t} \sqrt{n} e^{-in\varepsilon_{\nu\sigma} t}}_{= \sqrt{n} e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma} t}} \langle n|. \end{aligned} \quad (3.223)$$

Hier ist n die Besetzungszahl des Einteilchenzustands $|\nu\sigma\rangle$, wobei $n = 0, 1$ für Fermionen und $n = 0, 1, 2, \dots$ für Bosonen gilt. $|n\rangle$ sind also *Vielteilchenzustände* im Fock-Raum.

Für wechselwirkungsfreie Teilchen gilt nun

$$G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') = -i\theta(t - t') \langle GZ | \sum_{\nu\nu'} \varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu'\sigma'}^*(\mathbf{r}') \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} [a_{\nu\sigma}(t), a_{\nu'\sigma'}^\dagger(t')]_\pm | GZ \rangle$$

$$= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\nu}\langle\text{GZ}|\varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}')[a_{\nu\sigma}(t),a_{\nu\sigma}^\dagger(t')]\pm|\text{GZ}\rangle, \quad (3.224)$$

da Teilchen in *demselben* Einteilchenzustand erzeugt wie vernichtet werden müssen, um wieder zum Grundzustand zurück zu kommen. Es folgt

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't') &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\nu}\sum_{nn'}\varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}')\langle\text{GZ}|[|n-1\rangle\sqrt{n}e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}t}\langle n|, \\ &\quad |n'\rangle\sqrt{n'}e^{+i\varepsilon_{\nu\sigma}t'}\langle n'-1|]\pm|\text{GZ}\rangle \\ &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\nu}\sum_{nn'}\varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}') \\ &\quad \times \langle\text{GZ}|(|n-1\rangle\sqrt{n}e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}t}\underbrace{\langle n|n'\rangle}_{=\delta_{nn'}}\sqrt{n'}e^{+i\varepsilon_{\nu\sigma}t'}\langle n'-1| \\ &\quad \pm |n'\rangle\sqrt{n'}e^{+i\varepsilon_{\nu\sigma}t'}\underbrace{\langle n'-1|n-1\rangle}_{=\delta_{nn'}}\sqrt{n}e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}t}\langle n|)|\text{GZ}\rangle \\ &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\nu}\sum_n\varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}')\langle\text{GZ}|(ne^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}(t-t')}|n-1\rangle\langle n-1| \\ &\quad \pm ne^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}(t-t')}|n\rangle\langle n|)|\text{GZ}\rangle. \end{aligned} \quad (3.225)$$

Für Bosonen (Zeichen „-“) verschieben wir im ersten Term in der Klammer $n-1 \rightarrow n$ und erhalten

$$\begin{aligned} \dots &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\nu}\sum_n\varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}')e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}(t-t')}\langle\text{GZ}|(\mathcal{N}+1-\mathcal{N})|n\rangle\langle n|\text{GZ}\rangle \\ &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\nu}\varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}')e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}(t-t')} \\ &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\langle\mathbf{r}|\sum_{\nu}e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}(t-t')}|\nu\sigma\rangle\langle\nu\sigma|\mathbf{r}'\rangle, \end{aligned} \quad (3.226)$$

wobei wir im letzten Schritt die Green-Funktion durch Einteilchenzustände ausgedrückt haben.

Für Fermionen (Zeichen „+“) hat die Summe über n in Gl. (3.225) nur zwei Terme:

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't') &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\nu}\varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}')e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}(t-t')}\langle\text{GZ}|(0+0+\underbrace{|0\rangle\langle 0|+|1\rangle\langle 1|}_{=1})|\text{GZ}\rangle \\ &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\nu}\varphi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})\varphi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}')e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}(t-t')} \\ &= -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\langle\mathbf{r}|\sum_{\nu}e^{-i\varepsilon_{\nu\sigma}(t-t')}|\nu\sigma\rangle\langle\nu\sigma|\mathbf{r}'\rangle \end{aligned} \quad (3.227)$$

mit demselben Ergebnis wie für Bosonen.

Das letzte Matricelement in Gl. (3.226) bzw. Gl. (3.227) enthält eine Darstellung des Einteilchen-Zeitentwicklungsoperators $e^{-i\tilde{H}_{\sigma}(t-t')}$ für Spin- σ -Teilchen in seiner Eigenbasis aus Eigenzuständen $|\nu\sigma\rangle$ zu Eigenwerten $\varepsilon_{\nu\sigma}$. Wir können also schreiben

$$G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't') = -i\theta(t-t')\delta_{\sigma\sigma'}\langle\mathbf{r}|e^{-i\tilde{H}_{\sigma}(t-t')}|\mathbf{r}'\rangle. \quad (3.228)$$

Dieses Ergebnis ist identisch mit der Green-Funktion für die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung, abgesehen vom hier zusätzlich eingeführten Spin. Wir haben also eine konsistente Verallgemeinerung der Green-Funktion für Vielteilchensysteme konstruiert.

Wir definieren noch einige weitere Green-Funktionen, die später nützlich sein werden:

$$G^R(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't') := -i\theta(t-t')\langle\text{GZ}|[\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t), \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}', t')]\pm|\text{GZ}\rangle, \quad (3.229)$$

$$G^A(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't') := +i\theta(t'-t)\langle\text{GZ}|[\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t), \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}', t')]\pm|\text{GZ}\rangle, \quad (3.230)$$

$$G^{>}(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma't') := -i\langle\text{GZ}|\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t)\Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}', t')|\text{GZ}\rangle, \quad (3.231)$$

$$G^<(\mathbf{r}\sigma t, \mathbf{r}'\sigma' t') := -i(\mp 1) \langle \text{GZ} | \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}', t') \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) | \text{GZ} \rangle. \quad (3.232)$$

In $G^<$ gilt, wie für G^R und G^A , das obere Vorzeichen für Fermionen und das untere für Bosonen.

$G^>$ bezeichnet man als „größere Green-Funktion“ (*greater Green function*). Sie beschreibt Propagation eines zusätzlichen Teilchens gegenüber dem Grundzustand (Fermi-See) von $\mathbf{r}', t'$ nach $\mathbf{r}, t$, wobei keine Annahme über die Reihenfolge von t und t' gemacht wird. Diese Interpretation ist plausibel, da $G^>$ i. W. der Überlapp des Vielteilchenzustands $\Psi_{\sigma'}^{\dagger} | \text{GZ} \rangle$ zur Zeit t' und des Vielteilchenzustands $\Psi_{\sigma}^{\dagger} | \text{GZ} \rangle = (\langle \text{GZ} | \Psi_{\sigma} \rangle)^{\dagger}$ zur Zeit t .

$G^<$ bezeichnet man als „kleinere Green-Funktion“ (*lesser Green function*). Sie beschreibt, zumindest für Fermionen, die Propagation eines *Lochs* von $\mathbf{r}, t$ nach $\mathbf{r}', t'$ (denn Ψ erzeugt ein Loch im Fermi-See). Wir finden

$$G^R = \theta(t - t') (G^> - G^<), \quad (3.233)$$

$$G^A = \theta(t' - t) (G^< - G^>). \quad (3.234)$$

Für translationsinvariante Systeme hängen die Green-Funktionen nur von $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ab, wie man an ihrer Definitionsgleichung sieht, und wir können zu den Fourier-Transformierten übergehen:

$$G^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \sigma t, \sigma' t') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} G^R(\mathbf{k}, \sigma t, \sigma' t') \quad (3.235)$$

mit

$$G^R(\mathbf{k}, \sigma t, \sigma' t') = -i \theta(t - t') \langle \text{GZ} | [a_{\mathbf{k}\sigma}(t), a_{\mathbf{k}\sigma'}^{\dagger}(t')]_{\pm} | \text{GZ} \rangle. \quad (3.236)$$

Der Zusammenhang zwischen $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t)$ und $a_{\mathbf{k}\sigma}(t)$ lautet dabei bekanntlich

$$\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} a_{\mathbf{k}\sigma}(t). \quad (3.237)$$

Entsprechende Gleichungen gelten für G^A , $G^>$, $G^<$.

Da der Ausgangspunkt der Störungstheorie meist freie Elektronen sind, ist es nützlich, die diversen Green-Funktionen G_0 für freie Elektronen aufzuschreiben. Für den Hamiltonian $H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}$ finden wir (siehe auch oben)

$$G_0^R(\mathbf{k}, \sigma t, \sigma' t') = \delta_{\sigma\sigma'} G_0^R(\mathbf{k}\sigma, t - t'), \quad (3.238)$$

da H_0 diagonal im Spin ist, mit

$$\begin{aligned} G_0^R(\mathbf{k}\sigma, t - t') &= -i \theta(t - t') \langle \text{GZ} | \{c_{\mathbf{k}\sigma}(t), c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(t')\} | \text{GZ} \rangle \\ &= -i \theta(t - t') \langle \text{GZ} | (e^{iHt} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{-iHt} e^{iHt'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-iHt'} + e^{iHt'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-iHt'} e^{iHt} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{-iHt}) | \text{GZ} \rangle. \end{aligned} \quad (3.239)$$

Hier beachten wir, dass $|\text{GZ}\rangle$ ein Eigenzustand zu H ist und dass sich die Zustände rechts und links der Operatoren c , $c^{\dagger}$ nur um jeweils ein einziges Teilchen unterscheiden. Die Grundzustandsenergie hebt sich jeweils heraus, es bleiben nur die Energien der durch c , $c^{\dagger}$ vernichteten bzw. erzeugten Elektronen übrig:

$$\begin{aligned} G_0^R(\mathbf{k}\sigma, t - t') &= -i \theta(t - t') [\theta(\xi_{\mathbf{k}\sigma}) e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma} t} e^{i\xi_{\mathbf{k}\sigma} t'} + \theta(-\xi_{\mathbf{k}\sigma}) e^{i\xi_{\mathbf{k}\sigma} t'} e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma} t}] \\ &= -i \theta(t - t') e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma}(t - t')}. \end{aligned} \quad (3.240)$$

Die Stufenfunktionen $\theta(\xi_{\mathbf{k}\sigma})$ bzw. $\theta(-\xi_{\mathbf{k}\sigma})$ drücken aus, dass die jeweiligen Beiträge nur vorhanden sind, wenn der Zustand $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ außerhalb bzw. innerhalb des Fermi-Sees liegt. Analog erhalten wir

$$G_0^A(\mathbf{k}\sigma, t - t') = i \theta(t - t') e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma}(t - t')}, \quad (3.241)$$

$$\begin{aligned} G_0^>(\mathbf{k}\sigma, t - t') &= -i \underbrace{\langle c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \rangle}_{= 1 - n_F(\xi_{\mathbf{k}\sigma})} e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma}(t - t')}, \end{aligned} \quad (3.242)$$

$$\begin{aligned} G_0^<(\mathbf{k}\sigma, t - t') &= i \underbrace{\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle}_{= n_F(\xi_{\mathbf{k}\sigma})} e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma}(t - t')}, \end{aligned} \quad (3.243)$$

wobei die Fermi-Funktion n_F für den Grundzustand, d. h. für die Temperatur $T = 0$, einfach

$$n_F(\xi) = \theta(-\xi) = \begin{cases} 1 & \text{für } \xi \leq 0, \\ 0 & \text{für } \xi > 0 \end{cases} \quad (3.244)$$

lautet. Die Ergebnisse gelten aber auch für thermische Mittelwerte $\langle \dots \rangle$ bei endlichen Temperaturen. Wir zeigen dies hier nicht.

Beachte, dass $G_0^>$ und $G_0^<$ harmonische Zeitabhängigkeiten aufweisen. Daher sind ihre zeitlichen Fourier-Transformierten δ -Distributionen, z. B.

$$G_0^>(\mathbf{k}\sigma, \omega) = -2\pi i [1 - n_F(\xi_{\mathbf{k}\sigma})] \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma}). \quad (3.245)$$

G_0^R und G_0^A sind aufgrund der Sprungfunktion θ nicht einfach harmonisch. Wir berechnen die Fourier-Transformierte von G_0^R :

$$\begin{aligned} G_0^R(\mathbf{k}\sigma, \omega) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} \theta(t-t') e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma}(t-t')} \\ &= -i \int_{t'}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma}(t-t')} = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma} t}. \end{aligned} \quad (3.246)$$

Dieses Integral konvergiert nicht, da der Integrand für $t \rightarrow \infty$ mit konstanter Amplitude (eins) oszilliert. Für reale Systeme hat es aber ohnehin keinen Sinn, unendliche Zeiten zu betrachten. Wir können daher eine Änderung vornehmen, die nur sehr große Zeiten betrifft, und die das Konvergenzproblem behebt. Eine solche ist prinzipiell unbeobachtbar und daher eine erlaubte Modifikation des Modells. Wir führen dazu einen konvergenzerzeugenden Faktor ein:

$$G_0^R(\mathbf{k}\sigma, \omega) = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-i\xi_{\mathbf{k}\sigma} t} e^{-\eta t} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma} + i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} \equiv \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma} + i0^+}, \quad (3.247)$$

vgl. die Herleitung der T -Matrix. Analog findet man

$$G_0^A(\mathbf{k}\sigma, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma} - i0^+}. \quad (3.248)$$

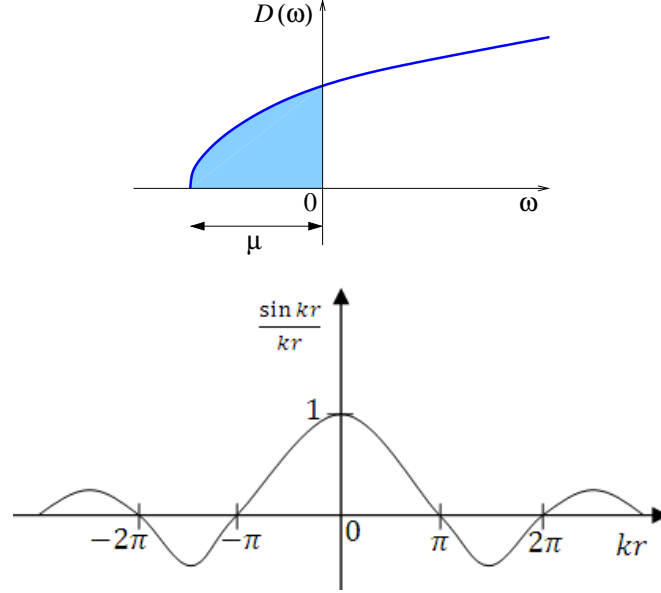
Es ist oft auch nützlich, die Green-Funktionen im *Realraum* zu kennen. Sie sind ja bedingte Wahrscheinlichkeitsamplituden für die Propagation eines (hier wechselwirkungsfreien) Elektrons. Es ist

$$\begin{aligned} G_0^>(\mathbf{r}\sigma, \omega) &= -2\pi i \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [1 - n_F(\xi_{\mathbf{k}\sigma})] \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma}) \\ &= -2\pi i [1 - n_F(\omega)] \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma}). \end{aligned} \quad (3.249)$$

Für freie Elektronen mit parabolischer Dispersion $\xi_{\mathbf{k}\sigma} = k^2/2m - \mu$ folgt

$$\begin{aligned} G_0^>(\mathbf{r}\sigma, \omega) &= -2\pi i [1 - n_F(\omega)] \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\pi} d\theta k^2 \sin \theta e^{ikr \cos \theta} \delta\left(\omega - \frac{k^2}{2m} + \mu\right) \\ &= -2\pi i [1 - n_F(\omega)] \frac{m}{2\pi^2} \int_0^{\infty} dk \int_0^{\pi} d\theta k^2 \sin \theta e^{ikr \cos \theta} \\ &\quad \times \delta\left[\underbrace{\left(k + \sqrt{2m(\omega + \mu)}\right)}_{\neq 0} \left(k - \sqrt{2m(\omega + \mu)}\right)\right] \\ &= -2\pi i [1 - n_F(\omega)] \frac{m}{2\pi^2} \frac{1}{2\sqrt{2m(\omega + \mu)}} \int_0^{\pi} d\theta 2m(\omega + \mu) \sin \theta e^{ikr \cos \theta} \Big|_{\frac{k^2}{2m} - \mu = \omega} \\ &= -2\pi i [1 - n_F(\omega)] \frac{m^{3/2} \sqrt{\omega + \mu}}{2\sqrt{2}\pi^2} \overset{\substack{\text{keine Vektoren} \\ \swarrow}}{\frac{2 \sin kr}{kr}} \Big|_{\frac{k^2}{2m} - \mu = \omega} \end{aligned}$$

$$= -2\pi i \underbrace{\frac{m^{3/2}\sqrt{\omega+\mu}}{\sqrt{2\pi^2}}}_{\text{Zustandsdichte } D(\omega)} \underbrace{[1 - n_F(\omega)]}_{\text{im Grundzustand unbesetzt?}} \left. \frac{\sin kr}{kr} \right|_{\frac{k^2}{2m} - \mu = \omega}. \quad (3.250)$$



Was ist die physikalische Bedeutung dieser Funktion? $G^>$ beschreibt, wie oben erwähnt, die Propagation eines zusätzlichen Elektrons. Die Zustandsdichte gibt einfach an, wie viele Einteilchenzustände es bei der interessierenden Energie ω überhaupt gibt. Der Fermi-Faktor $1 - n_F$ prüft, ob bei der Energie ω ein zusätzliches Elektron erzeugt werden kann. Die „sinc“-Funktion im letzten Faktor ergibt sich aus der Interferenz vieler ebener Wellen mit unterschiedlichen $\mathbf{k}$, aber derselben Energie ω . Wir sehen das resultierende Interferenzmuster.

Wir haben G in der Impuls- und der Ortsdarstellung betrachtet. Natürlich können wir die in der Definition auftretenden Operatoren Ψ bzw. a in jeder beliebigen Einteilchen-Basis schreiben. Wir schreiben z. B.

$$G^>(\nu t, \nu' t') := -i \langle \text{GZ} | \underset{\substack{\uparrow \\ \text{geeignete Quantenzahlen, z. B. } \mathbf{k}\sigma}}{c_\nu(t)} c_{\nu'}^\dagger(t') | \text{GZ} \rangle. \quad (3.251)$$

3.6.3 Die Spektralfunktion

Wir haben vier (*komplexe*) Green-Funktionen definiert, die alle dieselbe Idee der Propagation eines Teilchens ausdrücken. Außerdem zeigt der Spezialfall freier Elektronen, dass die verschiedenen Green-Funktionen ähnliche funktionale Formen haben. Wir werden nun sehen, dass sich alle vier Funktionen durch eine einzige *reelle* Funktion, nämlich die sogenannte *Spektralfunktion*, ausdrücken lassen. Das gilt ganz allgemein, auch für wechselwirkende Systeme. Zunächst definieren wir die Spektralfunktion:

$$A(\nu, \omega) := -2 \text{Im } G^R(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{geeignete Einteilchen-Quantenzahlen, z. B. } \mathbf{k}\sigma}}{\nu}, \omega) \quad (3.252)$$

mit (wie bekannt)

$$G^R(\nu; t - t') = -i \theta(t - t') \langle \text{GZ} | [a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(t')]_\pm | \text{GZ} \rangle, \quad (3.253)$$

$$G^R(\nu, \omega) = -i \int_{t'}^\infty dt e^{i\omega(t-t')} \langle \text{GZ} | [a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(t')]_\pm | \text{GZ} \rangle. \quad (3.254)$$

Also ist die Spektralfunktion, bis auf einen konventionellen Zahlenfaktor, der Imaginärteil der retardierten Green-Funktion. Die – vielleicht überraschende – Behauptung ist, dass sie die gesamte Information von G^R , G^A , $G^>$, $G^<$ enthält, bis auf die auftretende Fermi/Bose-Besetzungsfunktion.

Wir finden ganz allgemein folgende Normierung der Spektralfunktion:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(\nu, \omega) &= \cancel{2} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (\cancel{i}) \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \text{GZ} | [a_{\nu}(t), a_{\nu}^{\dagger}(0)]_{\pm} | \text{GZ} \rangle \quad (t' = 0) \\ &= 2 \operatorname{Re} \int_0^{\infty} dt \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t}}_{=\delta(t)} \langle \text{GZ} | [a_{\nu}(t), a_{\nu}^{\dagger}(0)]_{\pm} | \text{GZ} \rangle \end{aligned}$$

Wir müssen jetzt annehmen, dass die δ -Distribution halb gezählt wird, da ihre Singularität am Rand des Integrationsintervalls liegt.

$$= \operatorname{Re} \langle \text{GZ} | \underbrace{[a_{\nu}(t), a_{\nu}^{\dagger}(0)]_{\pm}}_{=1} | \text{GZ} \rangle = 1. \quad (3.255)$$

Außerdem finden wir für *freie* Elektronen:

$$A_0(\mathbf{k}\sigma, \omega) = -2 \operatorname{Im} G_0^R(\mathbf{k}\sigma, \omega) = -2 \operatorname{Im} \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma} + i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+}. \quad (3.256)$$

Nun benutzen wir die wichtige Dirac-Formel

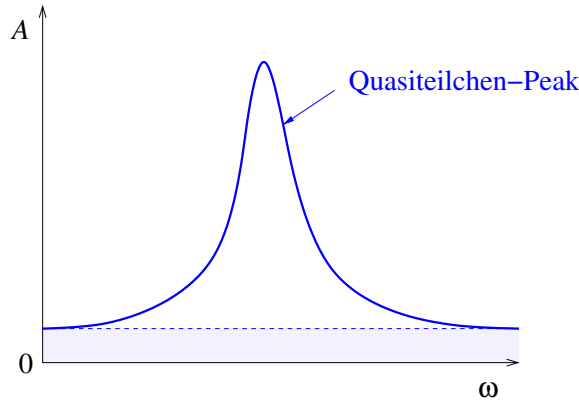
$$\frac{1}{E + i\eta} = \underbrace{\mathcal{P} \frac{1}{E}}_{\text{Hauptwert}} - i\pi \delta(E) \quad \text{für } \eta \rightarrow 0^+. \quad (3.257)$$

Wir erhalten daher

$$A_0(\mathbf{k}\sigma, \omega) = 2\pi \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma}). \quad (3.258)$$

Dies erfüllt natürlich die Normierung, die ja ganz allgemein gilt.

Wir interpretieren die Spektralfunktion $A(\nu, \omega)$ als die *Verteilungsfunktion* von möglichen Energien ω für Teilchen mit den Quantenzahlen ν . Für wechselwirkungsfreie Elektronen legt $\nu = (\mathbf{k}\sigma)$ die Energie bereits fest, daher ist die Verteilung eine δ -Distribution. Wie wir später sehen werden, ist A für wechselwirkende Systeme im Vergleich zu $A_0 \sim \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}\sigma})$ verbreitert. Oft kann man aber ein klares Maximum identifizieren, dieses nennt man dann „*Quasiteilchen-Peak*“:



Man bezeichnet die durch eine Spektralfunktion dieser Form beschriebenen Objekte, deren Energie im Bereich des Quasiteilchen-Peaks liegt, als *Quasiteilchen*. Die Breite des Maximums gibt an, wie unscharf die Energie der Quasiteilchen ist. Unter Ausnutzung der Energie-Zeit-Unschärferelation kann man die Breite in der Energie als inverse Lebensdauer interpretieren. Das Integral $\int (d\omega/2\pi) A(\mathbf{k}, \omega)$ ist immer 1, wie wir gesehen haben. Das Gewicht unter dem Quasiteilchen-Peak, das man durch Subtraktion des breiten Untergrundes und Integration erhält, nennt man das *Quasiteilchen-Gewicht*,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [A(\mathbf{k}, \omega) - A_{\text{Untergrund}}(\mathbf{k}, \omega)] \leq 1. \quad (3.259)$$

Es gibt an, in welchem Maß das Quasiteilchenbild in der konkreten Situation anwendbar ist.

Die Summe $\sum_{\nu} A(\nu, \omega) =: D(\omega)$ ist die *Zustandsdichte* bei der Energie ω , da die Beiträge aller Zustände bei der Energie ω aufsummiert werden. $D(\omega)$ ist durch Tunnelexperimente zugänglich.

Wir müssen noch zeigen, dass die Spektralfunktion tatsächlich ausreicht, um die Green-Funktionen zu rekonstruieren. Wir tun dies hier für Fermionen und erhalten nebenbei einige wichtige Beziehungen zwischen A und den Green-Funktionen. Um Methoden aus der Funktionentheorie anwenden zu können, erlauben wir in $G^R(\nu, \omega)$ komplexe Frequenzen ω .

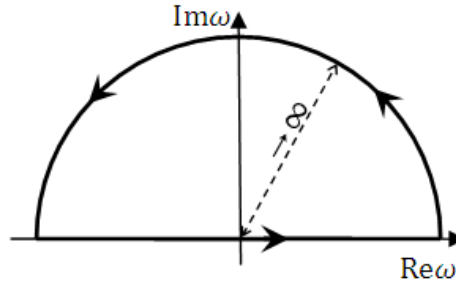
1. Zunächst zeigen wir, dass $G^R(\nu, \omega)$ keine Singularitäten für $\text{Im } \omega \geq 0$ hat: Die retardierte Green-Funktion $G^R(\nu, t - t')$ ist nur für $t \geq t'$ von Null verschieden. Dann ist

$$G^R(\nu, \omega) = \int_{t'}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} G^R(\nu, t - t') = \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} G^R(\nu, t) \quad (3.260)$$

und

$$G^R(\nu, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G^R(\nu, \omega). \quad (3.261)$$

Wir wollen dieses Integral mittels des Residuensatzes auswerten. Für $t < 0$ wird $e^{-i\omega t}$ für $\omega \rightarrow +i\infty$ klein. Wir können das ω -Integral daher in der oberen Halbebene schließen; der Beitrag vom Halbkreis verschwindet für große Radien:

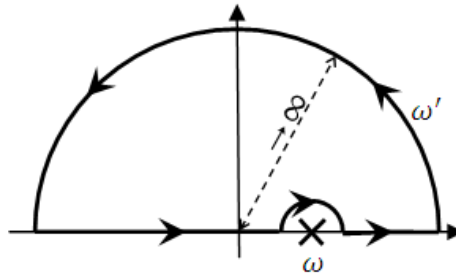


Wenn irgendwelche Singularitäten in der oberen ω -Halbebene lägen, würde das Integral nach dem Residuensatz nicht für alle $t < 0$ verschwinden. Es muss für die *retardierte* Green-Funktion aber gleich Null sein. Also gibt es keine Singularitäten für $\text{Im } \omega > 0$. (Für $t > 0$ müssen wir in der unteren Halbebene schließen. Die retardierte Green-Funktion verschwindet für $t > 0$ nicht, also müssen in der unteren Halbebene Singularitäten liegen.)

2. Aufgrund der Abwesenheit von Singularitäten innerhalb der Kontur gilt

$$\int d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} = 0 \quad \text{mit } \omega \in \mathbb{R} \quad (3.262)$$

für die folgende Kontur:

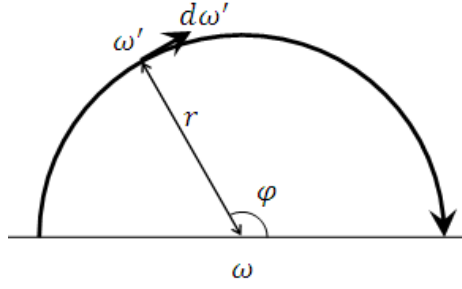


Der Beitrag des Halbkreises im Unendlichen verschwindet, da G^R schnell genug abfällt (was noch zu zeigen wäre). Wir zerlegen den Rest der Kontur:

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \mathcal{P} \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega}}_{\text{Hauptwert}} + \int_{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} = 0. \quad (3.263)$$

$$\equiv \underbrace{f_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega}}_{\text{(Schreibweise)}}$$

Die halbkreisförmige Kontur in der Nähe des Pols bei $\omega' = \omega$ sieht so aus:



Hier können wir schreiben:

$$\frac{d\omega'}{\omega' - \omega} = (-i) \frac{|d\omega'|}{r} = (-i) d\varphi. \quad (3.264)$$

Das Hauptwertintegral im ersten Term ist definiert durch

$$\oint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\int_{-\infty}^{\omega - \varepsilon} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} + \int_{\omega + \varepsilon}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} \right). \quad (3.265)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \oint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} - i \int_0^\pi d\varphi G^R(\nu, \underbrace{\omega + r e^{i\varphi}}_{\rightarrow 0}) \\ &= \oint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} - i\pi G^R(\nu, \omega) \end{aligned} \quad (3.266)$$

$$\Rightarrow G^R(\nu, \omega) = \frac{1}{i\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega}. \quad (3.267)$$

Dies ist die *Kramers-Kronig-Relation*. Sie ist eine Identität für die Fourier-Transformierten von *beliebigen* retardierten Funktionen $f^R(t)$, d. h. Funktionen mit $f^R(t) = 0$ für $t < 0$, sofern die relevanten Integrale existieren.

Wir haben in dieser Herleitung die Dirac-Formel nicht explizit benutzt. Damit geht es etwas schneller: Wir deformieren die Kontur so, dass der horizontale Anteil um η oberhalb der reellen Achse liegt. Da der Beitrag des Halbkreises im Unendlichen verschwindet, erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega' + i\eta)}{\omega' + i\eta - \omega} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \left[\mathcal{P} \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} - i\pi \delta(\omega' - \omega) G^R(\nu, \omega') \right] \\ &= \oint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} - i\pi G^R(\nu, \omega) \end{aligned} \quad (3.268)$$

und Gl. (3.267) folgt wieder.

Real- und Imaginärteil der Kramers-Kronig-Relation lauten

$$\operatorname{Re} G^R(\nu, \omega) = \frac{1}{\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega}, \quad (3.269)$$

$$\operatorname{Im} G^R(\nu, \omega) = -\frac{1}{\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Re} G^R(\nu, \omega')}{\omega' - \omega}. \quad (3.270)$$

Kausalität erzwingt also, dass $\operatorname{Re} G^R$ oder $\operatorname{Im} G^R$ bereits allein die gesamte Information enthalten.

3. Insbesondere erhalten wir mit $\operatorname{Im} G^R = -A/2$:

$$\operatorname{Re} G^R(\nu, \omega) = -\frac{1}{2\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{A(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} \quad (3.271)$$

und

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A(\nu, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} &= \int \frac{d\omega'}{2\pi} A(\nu, \omega') \left[\mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega'} - i\pi \delta(\omega - \omega') \right] \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A(\nu, \omega')}{\omega' - \omega} - \frac{i}{2} A(\nu, \omega) \\
&= \text{Re } G^R(\nu, \omega) + i \text{Im } G^R(\nu, \omega) = G^R(\nu, \omega).
\end{aligned} \tag{3.272}$$

Also ist

$$G^R(\nu, \omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A(\nu, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+}. \tag{3.273}$$

Dies ist eine *Spektraldarstellung* der retardierten Green-Funktion, auch Källén-Lehmann-Darstellung genannt. Offensichtlich gewinnt man die freie Green-Funktion wieder, wenn man für die Spektralfunktion eine δ -Distribution einsetzt. Analog erhält man

$$G^A(\nu, \omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A(\nu, \omega')}{\omega - \omega' - i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+}. \tag{3.274}$$

Beachte, dass ganz allgemein folgt

$$G^A(\nu, \omega) = [G^R(\nu, \omega)]^*. \tag{3.275}$$

Man findet außerdem

$$i G^>(\nu, \omega) = A(\nu, \omega) [1 - n_F(\omega)], \tag{3.276}$$

$$-i G^<(\nu, \omega) = A(\nu, \omega) n_F(\omega). \tag{3.277}$$

3.7 Bewegungsgleichungen für die Green-Funktion

Wir wollen nun sehen, wie wir die Green-Funktion tatsächlich ausrechnen können. Dies wird für wechselwirkende Systeme im Allgemeinen nicht ohne Näherungen möglich sein.

Wir betrachten einen zeitunabhängigen Hamiltonian $H = H_0 + V_{\text{int}}$, wobei V_{int} die Wechselwirkungen beschreibt. Wir unterdrücken hier den Spin-Index. Zunächst wollen wir eine Bewegungsgleichung für G^R herleiten. Die Definition der Green-Funktion ist

$$G^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = -i \theta(t - t') \langle \text{GZ} | [\Psi(\mathbf{r}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t')]_{\pm} | \text{GZ} \rangle. \tag{3.278}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} G^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') &= \delta(t - t') \langle \text{GZ} | [\Psi(\mathbf{r}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t')]_{\pm} | \text{GZ} \rangle \\
&\quad - i \theta(t - t') \langle \text{GZ} | \left[i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \right]_{\pm} | \text{GZ} \rangle \\
&= \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i \theta(t - t') \langle \text{GZ} | \left[i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \right]_{\pm} | \text{GZ} \rangle.
\end{aligned} \tag{3.279}$$

Wir benötigen $i \partial \Psi / \partial t$. Diese Ableitung ergibt sich aus der Heisenberg-Gleichung, da Ψ ein Operator im Heisenberg-Bild ist:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -[H, \Psi(\mathbf{r}, t)] \underset{\text{(kein } \pm, \text{ immer der Kommutator)}}{=} -[H_0, \Psi(\mathbf{r}, t)] - [V_{\text{int}}, \Psi(\mathbf{r}, t)]. \tag{3.280}$$

Um weiterzurechnen, müssen wir eine konkrete Form für H_0 annehmen. Wir setzen hier H_0 einfach als kinetische Energie T der Teilchen. Das bedeutet, dass kein periodisches Potential existiert (Jellium-Modell), alternativ können wir auch das periodische Potential in V_{int} einbeziehen. Wir können nun den ersten Term mit Hilfe von Gl. (2.180) schreiben als

$$-[H_0, \Psi(\mathbf{r}, t)] = \frac{1}{2m} \int d^3r' [\Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) (\nabla')^2 \Psi(\mathbf{r}', t), \Psi(\mathbf{r}, t)]$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2m} \int d^3 r' [\Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) (\nabla')^2 \Psi(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) (\nabla')^2 \Psi(\mathbf{r}', t)] \\
&= \frac{1}{2m} \int d^3 r' [\mp \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t)] (\nabla')^2 \Psi(\mathbf{r}', t) \\
&= -\frac{1}{2m} \int d^3 r' [\Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \pm \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}, t)] (\nabla')^2 \Psi(\mathbf{r}', t) \\
&= -\frac{1}{2m} \int d^3 r' [\Psi(\mathbf{r}, t), \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t)]_\pm (\nabla')^2 \Psi(\mathbf{r}', t) \\
&= -\frac{1}{2m} \int d^3 r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\nabla')^2 \Psi(\mathbf{r}', t) = -\frac{1}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t). \tag{3.281}
\end{aligned}$$

Das obere Vorzeichen gilt jeweils für Fermionen, das untere für Bosonen. Es ist zu beachten, dass wir für Fermionen auf den Antikommutator kommen, obwohl wir von einem Kommutator gestartet sind. Das entscheidende Vorzeichen erscheint im ersten Term in der dritten Zeile. Es folgt

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \nabla^2 \right) G^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \delta(t-t')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - i\theta(t-t') \langle \text{GZ} | [-V_{\text{int}}, \Psi(\mathbf{r}, t)], \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t')]_\pm | \text{GZ} \rangle. \tag{3.282}$$

Dies ist die gesuchte Bewegungsgleichung für G^R . Beachte, dass im letzten Term die äußere Klammer ein Kommutator (für Bosonen) oder Antikommutator (für Fermionen) ist, während die innere Klammer für beide Fälle einen Kommutator darstellt. Das liegt daran, dass die äußere Klammer aus der Definition der Green-Funktion stammt, die innere aber aus der Heisenberg-Gleichung. Der letzte Term enthält offenbar die Korrekturen zur Gleichung für den wechselwirkungsfreien Fall,

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \nabla^2 \right) G_0^R(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}'t') = \delta(t-t')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{3.283}$$

aufgrund der Wechselwirkungen in V_{int} .

Analog gilt in einer beliebigen Einteilchenbasis

$$G^R(\nu t, \nu' t') = -i\theta(t-t') \langle \text{GZ} | [a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(t')]_\pm | \text{GZ} \rangle. \tag{3.284}$$

Der ungestörte Hamiltonian H_0 hat die Form

$$H_0 = \sum_{\nu\nu'} h_{\nu\nu'} a_\nu^\dagger a_{\nu'}. \tag{3.285}$$

Dies liefert

$$\begin{aligned}
-[H_0, a_\nu] &= -\sum_{\nu'\nu''} h_{\nu'\nu''} [a_{\nu'}^\dagger a_{\nu''}, a_\nu] = -\sum_{\nu'\nu''} h_{\nu'\nu''} (a_{\nu'}^\dagger a_{\nu''} a_\nu - a_\nu a_{\nu'}^\dagger a_{\nu''}) \\
&= -\sum_{\nu'\nu''} h_{\nu'\nu''} (\mp a_{\nu'}^\dagger a_\nu - a_\nu a_{\nu'}^\dagger) a_{\nu''} = \sum_{\nu'\nu''} h_{\nu'\nu''} (a_\nu a_{\nu'}^\dagger \pm a_{\nu'}^\dagger a_\nu) a_{\nu''} \\
&= \sum_{\nu'\nu''} h_{\nu'\nu''} [a_\nu, a_{\nu'}^\dagger]_\pm a_{\nu''} = \sum_{\nu'\nu''} h_{\nu'\nu''} \delta_{\nu\nu'} a_{\nu''} = \sum_{\nu''} h_{\nu\nu''} a_{\nu''} \tag{3.286}
\end{aligned}$$

und daher

$$\sum_{\nu''} \left(i\delta_{\nu\nu''} \frac{\partial}{\partial t} - h_{\nu\nu''} \right) G^R(\nu''t, \nu't') = \delta(t-t')\delta_{\nu\nu'} - i\theta(t-t') \langle \text{GZ} | [-V_{\text{int}}, a_\nu(t)], a_{\nu'}^\dagger(t')]_\pm | \text{GZ} \rangle. \tag{3.287}$$

Für einen zeitunabhängigen Hamiltonian H hängt G^R nur von $t-t'$ ab. Es bietet sich an, zur Fourier-Transformierten in der Frequenz überzugehen. Die Gleichung für G^R lautet dann

$$\sum_{\nu''} (\delta_{\nu\nu''}\omega - h_{\nu\nu''}) G^R(\nu''\nu', \omega) = \delta_{\nu\nu'} - i \int_{t'}^\infty dt e^{i\omega(t-t')} \langle \text{GZ} | [-V_{\text{int}}, a_\nu(t)], a_{\nu'}^\dagger(t')]_\pm | \text{GZ} \rangle. \tag{3.288}$$

Damit das Integral für große t konvergiert, geben wir ω einen kleinen positiven Imaginärteil, $\omega \rightarrow \omega + i\eta$, und lassen η am Ende der Rechnung gegen Null gehen, $\eta \rightarrow 0^+$.

3.7.1 Wechselwirkungsfreier Fall

Für diesen Fall kennen wir das Ergebnis schon, siehe Gleichung (3.247). Wir lösen die Bewegungsgleichung, um sicherzustellen, dass sie sich korrekt verhält. Hier ist

$$H = H_0 = \sum_{\nu\nu'} h_{\nu\nu'} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}. \quad (3.289)$$

Wir betrachten $G_0^R(\omega)$ als Matrix mit den Komponenten

$$G_0^R(\omega)_{\nu\nu'} \equiv G_0^R(\nu\nu', \omega). \quad (3.290)$$

Dann ist die Bewegungsgleichung

$$\sum_{\nu''} [\delta_{\nu\nu''}(\omega + i\eta) - h_{\nu\nu''}] G_0^R(\omega)_{\nu''\nu'} = \delta_{\nu\nu'} \quad (3.291)$$

eine Matrix-Gleichung. Wir sehen, dass $G_0^R(\omega)$ die *inverse Matrix* zu $G_0^R(\omega)^{-1}$ mit den Komponenten

$$G_0^R(\omega)_{\nu\nu'}^{-1} = \delta_{\nu\nu'}(\omega + i\eta) - h_{\nu\nu'} \quad (3.292)$$

ist. Wenn wir die Matrix $\hat{h}$ mit den Komponenten $h_{\nu\nu'}$ einführen, können wir schreiben

$$G_0^R(\omega)^{-1} = \omega - \hat{h} + i\eta \quad (3.293)$$

$$\Rightarrow G_0^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \hat{h} + i\eta}. \quad (3.294)$$

Der Bruch ist hier als Matrix-Inversion zu verstehen. Ist H_0 diagonal, $H_0 = \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$, so folgt

$$G_0^R(\nu\nu', \omega) = G_0^R(\omega)_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\nu} + i\eta}, \quad (3.295)$$

wie wir schon wissen.

3.7.2 Resonantes Niveau (resonant-level model)

Wir betrachten ein nicht ganz so triviales Modell, in dem ein einzelnes Orbital an ein wechselwirkungsfreies Elektronengas gekoppelt ist. Der Hamiltonian lautet

$$H = H_0 + H_{\text{lokal}} + H_{\text{hyb}} \quad (3.296)$$

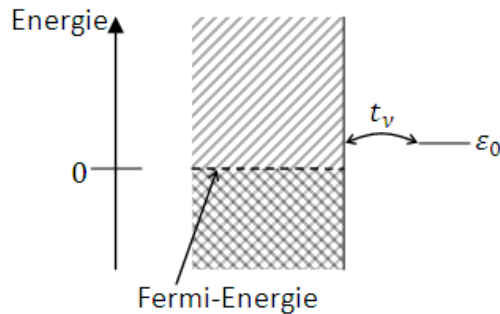
mit

$$H_0 = \sum_{\nu \neq 0} \xi_{\nu} c_{\nu}^{\dagger} c_{\nu} \quad (\text{wechselwirkungsfreies Elektronengas}), \quad (3.297)$$

$$H_{\text{lokal}} = \varepsilon_0 c_0^{\dagger} c_0 \quad (\text{lokales Orbital}), \quad (3.298)$$

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{\nu \neq 0} (t_{\nu}^* c_{\nu}^{\dagger} c_0 + t_{\nu} c_0^{\dagger} c_{\nu}) \quad (\text{Hybridisierung/Hüpfen}). \quad (3.299)$$

Die Summen über ν laufen hier über alle Einteilchenzustände des Elektronengases, aber nicht das lokale Orbital.



Wir können die retardierten Green-Funktionen

$$G^R(00, t - t') = -i\theta(t - t') \langle \text{GZ} | \{c_0(t), c_0^\dagger(t')\} | \text{GZ} \rangle, \quad (3.300)$$

$$G^R(0\nu, t - t') = -i\theta(t - t') \langle \text{GZ} | \{c_0(t), c_\nu^\dagger(t')\} | \text{GZ} \rangle \quad (\nu \neq 0), \quad (3.301)$$

$$G^R(\nu 0, t - t') = -i\theta(t - t') \langle \text{GZ} | \{c_\nu(t), c_0^\dagger(t')\} | \text{GZ} \rangle \quad (\nu \neq 0), \quad (3.302)$$

$$G^R(\nu\nu', t - t') = -i\theta(t - t') \langle \text{GZ} | \{c_\nu(t), c_{\nu'}^\dagger(t')\} | \text{GZ} \rangle \quad (\nu, \nu' \neq 0) \quad (3.303)$$

eingeführen. Uns interessiert hier $G^R(00, t - t')$. Diese Green-Funktion gibt die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür an, ein Elektron zur Zeit t im lokalisierten Orbital zu finden, wenn es zur Zeit $t' < t$ dort erzeugt wurde.

Zur Lösung beachten wir zunächst, dass es sich um ein wechselwirkungsfreies System handelt – alle Terme im Hamiltonian sind bilinear. Also haben wir $V_{\text{int}} = 0$ und wir können die Lösung aus dem vorigen Abschnitt verwenden, müssen aber über alle Einteilchenzustände $|\nu \neq 0\rangle$ und $|0\rangle$ summieren:

$$(\omega + i\eta - \varepsilon_0) G^R(00, \omega) + \sum_{\nu \neq 0} (-t_\nu) G^R(\nu 0, \omega) = \delta_{00} = 1, \quad (3.304)$$

$$(\omega + i\eta - \xi_\nu) G^R(\nu 0, \omega) + (-t_\nu^*) G^R(00, \omega) = \delta_{\nu 0} = 0 \quad (3.305)$$

(und zwei weitere Gleichungen, die wir hier nicht benötigen). Aus der zweiten Gleichung folgt

$$G^R(\nu 0, \omega) = \frac{t_\nu^*}{\omega - \xi_\nu + i\eta} G^R(00, \omega). \quad (3.306)$$

Einsetzen in Gl. (3.304) ergibt

$$(\omega - \varepsilon_0 + i\eta) G^R(00, \omega) - \sum_{\nu \neq 0} \frac{|t_\nu|^2}{\omega - \xi_\nu + i\eta} G^R(00, \omega) = 1 \quad (3.307)$$

$$\Rightarrow G^R(00, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 - \Sigma^R(00, \omega) + i\eta} \quad (3.308)$$

mit

$$\Sigma^R(00, \omega) := \sum_{\nu \neq 0} \frac{|t_\nu|^2}{\omega - \xi_\nu + i\eta}. \quad (3.309)$$

Wir finden, dass $G^R(00, \omega)$ *beinahe* die Form für $H = H_{\text{lokal}}$ hat, nämlich $1/(\omega - \varepsilon_0 + i\eta)$, aber es tritt ein zusätzlicher Term $-\Sigma^R(00, \omega)$ im Nenner auf. $\Sigma^R(00, \omega)$ nennt man die (retardierte) *Selbstenergie*. Man kann die Green-Funktion für jedes System mit Hilfe der ungestörten Green-Funktion und einer geeigneten Selbstenergie ausdrücken, denn es gilt $\Sigma^R = (G_0^R)^{-1} - (G^R)^{-1}$.

Wir erkennen, dass die Selbstenergie aufgrund der Ankopplung des lokalen Orbitals an das Elektronengas, also aufgrund von H_{hyb} , auftritt. Sie drückt hier aus, dass die Eigenzustände jetzt Superpositionen von $|0\rangle$ mit den $|\nu\rangle$ sind.

Wir können weitere Einsicht durch Betrachtung der Spektralfunktion gewinnen. Sie lautet

$$\begin{aligned} A(00, \omega) &= -2 \text{Im} G^R(00, \omega) \\ &= -2 \text{Im} \frac{\omega - \varepsilon_0 - \Sigma^R(00, \omega)^* - i\eta}{[\omega - \varepsilon_0 - \text{Re} \Sigma^R(00, \omega)]^2 + [-\text{Im} \Sigma^R(00, \omega) - \eta]^2} \\ &= -2 \frac{\text{Im} \Sigma^R(00, \omega)}{[\omega - \varepsilon_0 - \text{Re} \Sigma^R(00, \omega)]^2 + [-\text{Im} \Sigma^R(00, \omega)]^2}, \end{aligned} \quad (3.310)$$

wobei

$$\text{Re} \Sigma^R(00, \omega) = \sum_{\nu \neq 0} \mathcal{P} \frac{|t_\nu|^2}{\omega - \xi_\nu}, \quad (3.311)$$

$$\text{Im} \Sigma^R(00, \omega) = -\pi \sum_{\nu \neq 0} |t_\nu|^2 \delta(\omega - \xi_\nu). \quad (3.312)$$

Wir betrachten ein einfaches Modell mit konstanter Zustandsdichte D und konstanter Hüpfamplitude t für Energien ξ zwischen den Bandkanten $\xi_{\min}$ und $\xi_{\max}$:

$$\sum_{\nu \neq 0} \dots \rightarrow \int d\xi D \dots, \quad (3.313)$$

$$|t_\nu|^2 \rightarrow |t|^2. \quad (3.314)$$

Für $\xi_{\min} < \omega < \xi_{\max}$ finden wir dann sofort $\text{Im } \Sigma^R = -\pi D |t|^2$. Für den Realteil findet man manchmal die Argumentation, er sei Null, weil der Integrand ungerade gegenüber Spiegelung von ξ an ω ist. Das ist etwas unsauber. Die korrekte Herleitung läuft wie folgt: Es ist

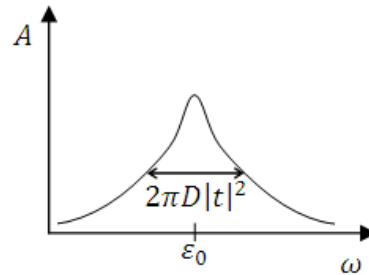
$$\begin{aligned} \text{Re } \Sigma^R(00, \omega) &= D |t|^2 \oint_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} \frac{d\xi}{\omega - \xi} = -D |t|^2 \oint_{\xi_{\min}-\omega}^{\xi_{\max}-\omega} \frac{d\xi}{\xi} \\ &= -D |t|^2 \left[-\int_{\epsilon}^{\omega-\xi_{\min}} \frac{d\xi}{\xi} + \int_{\epsilon}^{\xi_{\max}-\omega} \frac{d\xi}{\xi} \right]_{\epsilon \rightarrow 0^+} \\ &= D |t|^2 \ln \frac{\omega - \xi_{\min}}{\xi_{\max} - \omega}. \end{aligned} \quad (3.315)$$

Die letzte Gleichung gilt unabhängig davon, ob $\xi_{\max} - \omega$ oder $\omega - \xi_{\min}$ größer ist. In der Näherung eines breiten Bandes, $-\xi_{\min}, \xi_{\max} \gg |\omega|$, folgt

$$\begin{aligned} \text{Re } \Sigma^R(00, \omega) &= D |t|^2 [\ln(\omega - \xi_{\min}) - \ln(\xi_{\max} - \omega)] \\ &\cong D |t|^2 \left[\ln(-\xi_{\min}) + \frac{\omega}{-\xi_{\min}} - \ln \xi_{\max} + \frac{\omega}{\xi_{\max}} \right] \\ &= D |t|^2 \ln \left| \frac{\xi_{\min}}{\xi_{\max}} \right| + D |t|^2 \left(\frac{1}{\xi_{\max}} + \frac{1}{|\xi_{\min}|} \right) \omega. \end{aligned} \quad (3.316)$$

Der erster Term ist eine Konstante, die man (oft stillschweigend) in ε_0 absorbiert. Der zweite Term ist für ein breites Band vernachlässigbar klein. Damit erhalten wir schließlich

$$A(00, \omega) = -2 \frac{-\pi D |t|^2}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + (\pi D |t|^2)^2} = \frac{2\pi D |t|^2}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + (\pi D |t|^2)^2}. \quad (3.317)$$



(Lorentz-Kurve)

Wir finden also, dass durch die Ankopplung an das Elektronengas der lokale Zustand verbreitert wird. Die Linie wird umso breiter, je größer $D|t|^2$ ist. Seine Energie ist wegen der Hybridisierung mit Zuständen $|\nu\rangle$ nicht mehr scharf definiert. Dies können wir mit Hilfe der Energie-Zeit-Unschärferelation deuten: Die Lebensdauer des lokalen Zustandes wird endlich, da das Elektron ins Kontinuum (Elektronengas) hüpfen kann. Dies führt zu einer endlichen Breite im Energiespektrum. Dieses Argument ist aber eventuell irreführend: Die Verbreiterung hängt nicht davon ab, ob die mit ε_0 resonanten Zustände im Elektronengas besetzt sind oder nicht. Die Verbreiterung ist für ε_0 unterhalb und oberhalb der Fermi-Energie gleich. Die Besetzung der Zustände darf auch keine Rolle spielen, da wir es mit wechselwirkungsfreien Elektronen zu tun haben, die gar nichts voneinander merken. Für die Verbreiterung ist nur die Hybridisierung verantwortlich.

3.7.3 Anderson-Modell für eine magnetische Störstelle

Wir wenden nun die Methode der Bewegungsgleichungen auf das wichtige Anderson-Modell an. Im Vergleich zum resonant-level model berücksichtigen wir noch den Spin-Freiheitsgrad und erlauben eine Coulomb-Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen (Spin- $\uparrow$ und Spin- $\downarrow$) im lokalen Orbital. Das Ganze ist ein Modell für d - und f -Orbitale von Übergangsmetall- bzw. Seltenerd-Atomen in einem Metall. Die Frage, die wir hier untersuchen wollen, ist, unter welchen Bedingungen diese Störstelle ein magnetisches Moment entwickelt.

Der Hamiltonian lautet

$$H = H_c + H_d + H_U + H_{\text{hyb}} \quad (3.318)$$

mit

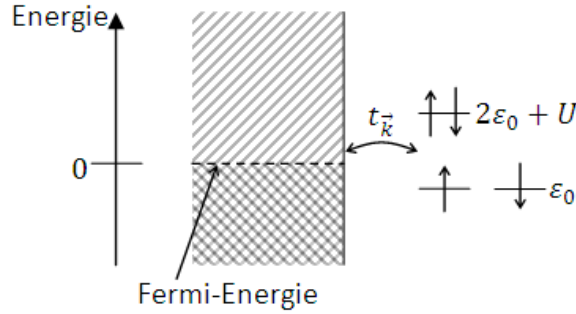
$$H_c = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{Metall}), \quad (3.319)$$

$$H_d = \sum_{\sigma} \varepsilon_d c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \quad (\text{lokales Orbital}), \quad (3.320)$$

$$H_U = U c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} \quad (\text{Coulomb-Wechselwirkung}), \quad (3.321)$$

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (t_{\mathbf{k}} c_{d\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + t_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{d\sigma}) \quad (\text{Hybridisierung}). \quad (3.322)$$

Wir berücksichtigen die Coulomb-Abstoßung nur für das lokale Orbital, da sie für in den kleinen d - oder f -Orbitalen eingesperrte Elektronen sehr viel größer ist als für Bloch-Elektronen im Leitungsband von typischen Metallen.



Das magnetische Moment in z -Richtung ist proportional zur z -Komponente des Spins der Störstelle,

$$s_d^z = \frac{c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} - c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow}}{2}. \quad (3.323)$$

Wir benötigen Erwartungswerte $\langle \text{GZ} | c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} | \text{GZ} \rangle$ für $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Diese ergeben sich aus der geringeren Green-Funktion

$$G^<(d\sigma, d\sigma', t - t') = i \langle \text{GZ} | c_{d\sigma'}^\dagger(t') c_{d\sigma}(t) | \text{GZ} \rangle \quad (3.324)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \text{GZ} | c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} | \text{GZ} \rangle &= -i G^<(d\sigma, d\sigma, t = 0) \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G^<(d\sigma, d\sigma, \omega) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(d\sigma, d\sigma, \omega) \underset{\substack{\uparrow \\ = \theta(-\omega) \text{ für } T=0}}{n_F(\omega)}. \end{aligned} \quad (3.325)$$

Die Spektralfunktion A ergibt sich natürlich aus G^R . Wir schreiben die Bewegungsgleichung für $G^R(d\sigma, d\sigma, \omega)$ auf:

$$(\omega + i\eta \underbrace{- \varepsilon_d}_{\text{von } H_d}) G^R(d\sigma, d\sigma, \omega) + \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} (-t_{\mathbf{k}}) G^R(\mathbf{k}\sigma, d\sigma, \omega)}_{\text{von } H_{\text{hyb}}}$$

$$= 1 - i \int_{t'}^{\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)(t-t')} U \langle \text{GZ} | \{ -[c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow}, c_{d\sigma}] (t), c_{d\sigma}^\dagger (t') \} | \text{GZ} \rangle. \quad (3.326)$$

Hier bedeutet $[c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow}, c_{d\sigma}] (t)$, dass alle Operatoren im Heisenberg-Bild zur Zeit t zu verstehen sind. Diese Gleichung enthält $G^R(\mathbf{k}\sigma, d\sigma, \omega)$, so dass wir hierfür ebenfalls die Bewegungsgleichung benötigen:

$$(\omega + i\eta - \xi_{\mathbf{k}}) G^R(\mathbf{k}\sigma, d\sigma, \omega) + (-t_{\mathbf{k}}^*) G^R(d\sigma, d\sigma, \omega) = 0. \quad (3.327)$$

In Gleichung (3.326) ist

$$\begin{aligned} [c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow}, c_{d\uparrow}] &= c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} [c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}, c_{d\uparrow}] \\ &= c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} (c_{d\uparrow}^\dagger \underbrace{c_{d\uparrow} c_{d\uparrow}}_{=0 \text{ (Fermionen)}} - \underbrace{c_{d\uparrow} c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow}}_{= -c_{d\uparrow} (1 - c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow})}) \\ &= -c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} c_{d\uparrow} \end{aligned} \quad (3.328)$$

und analog

$$[c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow}, c_{d\downarrow}] = -c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}. \quad (3.329)$$

Also wird Gleichung (3.327), mit Gl. (3.326) eingesetzt,

$$\begin{aligned} (\omega + i\eta - \varepsilon_d) G^R(d\sigma, d\sigma, \omega) - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|t_{\mathbf{k}}|^2}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} + i\eta} G^R(d\sigma, d\sigma, \omega) \\ = 1 - i U \int_{t'}^{\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)(t-t')} \langle \text{GZ} | \{ \underbrace{c_{d\bar{\sigma}}^\dagger(t)}_{\substack{\uparrow \\ \text{wobei } \bar{\sigma} := -\sigma}} c_{d\bar{\sigma}}(t) c_{d\sigma}(t), c_{d\sigma}^\dagger(t') \} | \text{GZ} \rangle. \end{aligned} \quad (3.330)$$

Wir erkennen, dass die rechte Seite eine *kompliziertere* Green-Funktion

$$D^R(d\sigma, t - t') := -i\theta(t - t') \langle \text{GZ} | \{ c_{d\bar{\sigma}}^\dagger(t) c_{d\bar{\sigma}}(t) c_{d\sigma}(t), c_{d\sigma}^\dagger(t') \} | \text{GZ} \rangle \quad (3.331)$$

enthält. Das ist typisch für die Methode der Bewegungsgleichungen. Wir könnten nun ähnlich wie oben die Bewegungsgleichung für D^R herleiten. Diese Gleichung enthält eine noch kompliziertere Green-Funktion! Wir erhalten eine Hierarchie von Gleichungen, die nicht geschlossen ist. Wir müssen daher geeignete Näherungen finden, um die Hierarchie abubrechen.

Unter der Bedingung, dass die Teilchenzahl $c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma}$ näherungsweise erhalten ist, können wir diesen Operator in D^R durch seinen Grundzustandserwartungswert

$$\langle \text{GZ} | c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} | \text{GZ} \rangle =: \langle n_{d\sigma} \rangle \quad (3.332)$$

ersetzen. Dann ist

$$D^R(d\sigma, t - t') \approx -i\theta(t - t') \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle \langle \text{GZ} | \{ c_{d\sigma}(t), c_{d\sigma}^\dagger(t') \} | \text{GZ} \rangle = \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle G^R(d\sigma, d\sigma, t - t'). \quad (3.333)$$

Die komplizierte Green-Funktion D^R wird also näherungsweise durch die einfachere, G^R , ausgedrückt. Damit ist das Gleichungssystem geschlossen. Die Bewegungsgleichung lautet nun

$$\left(\omega + i\eta - \varepsilon_d - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|t_{\mathbf{k}}|^2}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} + i\eta} \right) G^R(d\sigma, d\sigma, \omega) = 1 + U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle G^R(d\sigma, d\sigma, \omega), \quad (3.334)$$

mit der Lösung

$$G^R(d\sigma, d\sigma, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle - \Delta \Sigma^R(d\sigma, d\sigma, \omega) + i\eta} \quad (3.335)$$

$$\text{mit} \quad \Delta \Sigma^R(d\sigma, d\sigma, \omega) \equiv \Delta \Sigma^R(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|t_{\mathbf{k}}|^2}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} + i\eta}. \quad (3.336)$$

Die gesamte Selbstenergie ist hier

$$\Sigma^R(d\sigma, d\sigma, \omega) = U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + \Delta \Sigma^R(\omega). \quad (3.337)$$

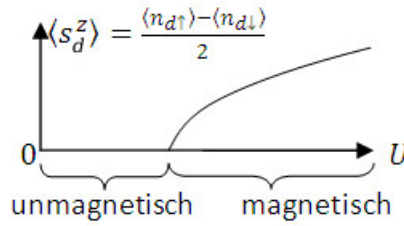
Der zweite Term ist analog zum resonanten Niveau und führt wieder zu einer Verbreiterung des Maximums in $A(d\sigma, d\sigma, \omega)$. Der neue Term $U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle$ führt zu einer zusätzlichen Verschiebung der Quasiteilchenenergie, der sogenannten *Hartree-Verschiebung*. Beachte, dass $\langle n_{d\uparrow} \rangle$ und $\langle n_{d\downarrow} \rangle$ verschieden sein können. Es ist

$$\begin{aligned} \langle n_{d\sigma} \rangle &\equiv \langle \text{GZ} | c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} | \text{GZ} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(d\sigma, d\sigma, \omega) n_F(\omega) \\ &\stackrel{T=0}{=} -2 \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle - \underbrace{\Delta \Sigma^R(\omega)}_{\text{komplex}} + i\eta}. \end{aligned} \quad (3.338)$$

Das ist eine *Selbstkonsistenz-Beziehung* (oder -Bedingung) für $\langle n_{d\uparrow} \rangle$ und $\langle n_{d\downarrow} \rangle$. Eine Lösungsmethode besteht darin, einen Wert anzunehmen, z. B. $\langle n_{d\uparrow} \rangle = 1$, und die Gleichung zu *iterieren*,

$$\langle n_{d\uparrow} \rangle \xrightarrow{(3.338)} \langle n_{d\downarrow} \rangle \xrightarrow{(3.338)} \langle n_{d\uparrow} \rangle \xrightarrow{(3.338)} \dots, \quad (3.339)$$

bis Konvergenz erreicht ist. Für ein einfaches Modell mit $D(\xi)|t_{\mathbf{k}}|^2 = \text{const}$ (vgl. S. 98) können wir das Integral in Gl. (3.338) analytisch berechnen, ansonsten ist eine numerische Rechnung erforderlich. Das typische Ergebnis ist hier dargestellt:



Die Näherung $c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} \rightarrow \langle \text{GZ} | c_{d\sigma}^\dagger c_{d\sigma} | \text{GZ} \rangle$ ist eine *Mean-Field-Näherung*, hier bei $T = 0$, die wir im folgenden Kapitel ausführlicher besprechen werden. Die Mean-Field-Näherung ist für das Anderson-Modell für eine einzelne Störstelle *nicht angemessen*. Für große U ist der wahre Grundzustand ein Spin-Singulett, das durch die Theorie des Kondo-Effekts beschrieben wird. Sie ist aber für ein System mit vielen Störstellen geeignet. Ein solches System kann eine endliche Magnetisierung aufweisen. Ein Beispiel sind verdünnte magnetische Halbleiter wie stark mit Mangan dotiertes Galliumarsenid, $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{As}$. In diesem System führt Mn^{2+} einerseits wegen seiner mit fünf Elektronen halb gefüllten d -Schalen magnetische Momente sein. Andererseits wirkt Mangan als Akzeptor, der das GaAs p -dotiert. Die magnetischen Momente wechselwirken mit dem dadurch entstehenden Löcher-Gas. Das Material ordnet bei hinreichend tiefen Temperaturen ferromagnetisch.

Kapitel 4

Vielteilchentheorie bei endlichen Temperaturen

Reale Systeme stehen meist in Kontakt mit ihrer Umwelt, d. h. sie können Energie und eventuell auch Teilchen mit der Umgebung austauschen. Ist die Umgebung näherungsweise im thermischen Gleichgewicht, können wir sie durch eine Temperatur T und ein chemisches Potential μ beschreiben. Wie in der Statistischen Physik gezeigt wird, strebt das System dann dieselbe Temperatur und gegebenenfalls dasselbe chemische Potential wie die Umgebung an. Wir beschäftigen uns in diesem Kapitel mit Vielteilchensystemen, die diesen Gleichgewichtszustand erreicht haben. Die hier diskutierten Methoden für endliche Temperaturen sind oft auch für den Grenzfall $T \rightarrow 0$ nützlich.

Nicht jede Umgebung ist im Gleichgewicht. Ein Gegenbeispiel sind zwei Zuleitungen mit zwischen ihnen angelegter Spannung. In diesem Fall können die Zuleitungen jeweils für sich im Gleichgewicht sein, ihr chemisches, oder vielmehr elektrochemisches, Potential ist aber verschieden. Vielteilchentheorie und insbesondere Green-Funktions-Methoden lassen sich auch für Systeme außerhalb des Gleichgewichts formulieren; eine wichtige Methode verwendet sogenannte Keldysh-Green-Funktionen. Damit beschäftigen wir uns in dieser Vorlesung aber nicht.

4.1 Wechselwirkungsfreie Teilchen

Zunächst erinnern wir uns an die Verteilungsfunktionen für nicht wechselwirkende Teilchen. Sei $H = \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$ der Hamiltonian des Systems. Da die Teilchen nicht wechselwirken, können wir repräsentativ den Einteilchenzustand $|\nu\rangle$ betrachten. Wir stellen uns die Frage, wieviele Teilchen der Sorte ν es gibt.

(a) Bosonen ohne Teilchenzahlerhaltung: Erzeugt $a_{\nu}^{\dagger}$ ein Boson, dessen Teilchenzahl nicht erhalten ist, so kann es beliebig oft angeregt sein. Beispiele sind Photonen und Phononen. In der Statistischen Physik findet man, dass die Wahrscheinlichkeit eines Zustands mit der Energie ε_{ν} bei der Temperatur T durch den *Boltzmann-Faktor* $e^{-\varepsilon_{\nu}/k_B T} \equiv e^{-\beta \varepsilon_{\nu}}$ gegeben ist. Die mittlere Zahl von Teilchen der Energie ε_{ν} ist also

$$\begin{aligned} \langle n_{\nu} \rangle &= \frac{0 \cdot e^{-0\beta\varepsilon_{\nu}} + 1 \cdot e^{-1\beta\varepsilon_{\nu}} + 2 \cdot e^{-2\beta\varepsilon_{\nu}} + 3 \cdot e^{-3\beta\varepsilon_{\nu}} + \dots}{\overset{\text{Normierung}}{1 \cdot e^{-0\beta\varepsilon_{\nu}} + e^{-1\beta\varepsilon_{\nu}} + e^{-2\beta\varepsilon_{\nu}} + e^{-3\beta\varepsilon_{\nu}} + \dots}} \\ &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\beta\varepsilon_{\nu}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta\varepsilon_{\nu}}} = -\frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_{\nu})} \ln \sum_n e^{-n\beta\varepsilon_{\nu}} \\ &= -\frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_{\nu})} \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta\varepsilon_{\nu}}} = \frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_{\nu})} \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon_{\nu}}) \\ &= \frac{+e^{-\beta\varepsilon_{\nu}}}{1 - e^{-\beta\varepsilon_{\nu}}} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\nu}} - 1} =: n_B(\varepsilon_{\nu}). \end{aligned} \tag{4.1}$$

Dies ist die sogenannte *Planck-Verteilung*, die oft als Spezialfall der Bose-Einstein-Verteilung betrachtet wird.

(b) Bosonen mit Teilchenzahlerhaltung: Ein Beispiel sind ^4He -Atome. Ist die Anzahl der Bosonen erhalten und können diese mit der Umgebung ausgetauscht werden, müssen wir ein chemisches Potential μ einführen. Das chemische Potential μ gibt an, um wieviel die Energie des Systems abnimmt, wenn ein Teilchen aus der Umgebung hinzugefügt wird. Wir betrachten also den großkanonischen Hamiltonian $H = \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \mu) a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$. Die Verteilungsfunktion ist dann analog zu Fall (a)

$$\langle n_{\nu} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} - 1} =: n_B(\varepsilon_{\nu} - \mu). \quad (4.2)$$

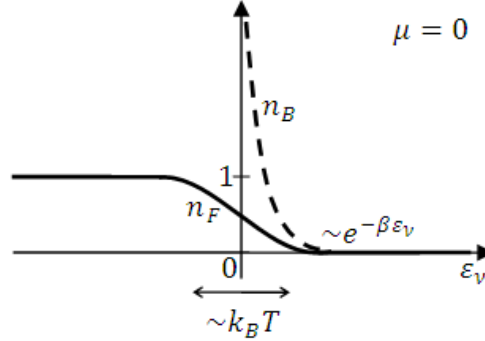
Dies ist die *Bose-Einstein-Verteilung*. Die Endlichkeit von $\langle n_{\nu} \rangle$ erfordert, dass $\mu \leq \min(\varepsilon_{\nu})$ ist. Ist die Zustandsdichte für $\varepsilon \rightarrow \min(\varepsilon_{\nu})$ von Null verschieden, kann sogar nur $\mu < \min(\varepsilon_{\nu})$ gelten. Geht die Zustandsdichte dagegen gegen Null, ist $\mu = \min(\varepsilon_{\nu})$ möglich. Dann muss man die Grundzustände, also die Zustände mit der Energie $\min(\varepsilon_{\nu})$, gesondert behandeln, sie erhalten evtl. makroskopische Besetzungszahlen. Das ist das aus der Statistischen Physik bekannte Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation. Wichtig ist hier, dass es sich um einen Effekt für wechselwirkungsfreie Teilchen handelt und nicht um einen eigentlichen Vielteilcheneffekt.

(c) Fermionen: Die Teilchenzahl von Fermionen ist in für die Vielteilchentheorie relevanten Fällen immer erhalten. Der großkanonische Hamiltonian lautet wieder $H = \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \mu) a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$. Der Zustand $|\nu\rangle$ kann nun höchstens einfach besetzt sein. Daher ist

$$\begin{aligned} \langle n_{\nu} \rangle &= \frac{0 \cdot e^{-0\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} + 1 \cdot e^{-1\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)}}{e^{-0\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} + e^{-1\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)}} = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)}} \\ &= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} + 1} =: n_F(\varepsilon_{\nu} - \mu). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Dies ist die *Fermi-Dirac-Verteilung*. Das charakteristische Phänomen für wechselwirkungsfreie Fermionen ist die Bildung eines Fermi-Sees.

Wir skizzieren noch die Verteilungsfunktionen n_B und n_F :



4.2 Mean-Field-Theorie

Nach dieser Wiederholung wenden wir uns nun wechselwirkenden Vielteilchensystemen bei $T > 0$ zu. Eine sehr wichtige Klasse von Näherungen beruht auf der Idee, die Wechselwirkungen eines Teilchens mit allen anderen (also die Mehrteilchen-Potentiale $V_2, V_3, \dots$ im Hamiltonian) durch einen effektiven bilinearen Potential-Term (V_1) zu ersetzen. Dabei werden in den Wechselwirkungstermen im Hamiltonian in noch zu besprechender Weise Operatoren durch ihre thermischen Mittelwerte ersetzt. Diese Näherungen nennt man Mean-Field-Theorien. Beispiele sind die Hartree-Fock-Näherung, die Stoner-Theorie des Ferromagnetismus und die BCS-Theorie der Supraleitung.

Wir betrachten den Hamiltonian

$$H = H_0 + V_{\text{int}} \quad (4.4)$$

mit

$$H_0 = \sum_{\nu} \xi_{\nu}^a a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + \sum_{\mu} \xi_{\mu}^b b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu}, \quad (4.5)$$

$$V_{\text{int}} = \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} a_{\nu}^{\dagger} b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} a_{\nu'} \quad (\text{Wechselwirkung}). \quad (4.6)$$

Offenbar liegen zwei Sorten von Teilchen vor. Wir können uns z. B. Elektronen und Kerne vorstellen.

Wir nehmen nun an, dass wir aufgrund physikalischer Argumente wissen, dass Fluktuationen der verallgemeinerten Teilchenzahloperatoren $a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'}$ und $b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'}$ klein sind. Damit ist gemeint, dass der Einfluss der Fluktuationen auf die uns interessierenden Größen klein im Vergleich zum Beitrag des Mittelwertes ist. Das können wir letztlich nur überprüfen, indem wir über die Mean-Field-Näherung hinausgehen.

Die Fluktuationen werden durch die Operatoren

$$d_{\nu\nu'} := a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} - \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle, \quad (4.7)$$

$$e_{\mu\mu'} := b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} - \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle \quad (4.8)$$

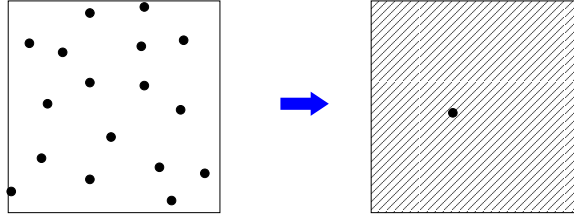
beschrieben. Dann ist der Hamiltonian

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} (\langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle + d_{\nu\nu'}) (\langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle + e_{\mu\mu'}) \\ &= H_0 + \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} (\langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle + \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle e_{\mu\mu'} + \underbrace{d_{\nu\nu'} \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle}_{\substack{\text{einsetzen: } b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} - \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle \\ \uparrow \\ a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} - \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle}} + \underbrace{d_{\nu\nu'} e_{\mu\mu'}}_{\substack{\text{vernachlässigen,} \\ \text{da klein!}}} \\ &\cong H_0 + \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} (\langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} + a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle - \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle) \\ &=: H_{\text{MF}}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Das allgemeine Schema der Mean-Field-Näherung sieht so aus: Für zwei Operatoren A, B schreiben wir

$$AB \cong \langle A \rangle B + A \langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle. \quad (4.10)$$

Wir ersetzen also einmal den ersten und einmal den zweiten Operator durch ihre thermischen Mittelwerte. Um das korrekte Ergebnis zu erhalten, wenn A und B unabhängig sind ($\langle AB \rangle = \langle A \rangle \langle B \rangle$), ziehen wir noch $\langle A \rangle \langle B \rangle$ ab.



Der Mean-Field-Hamiltonian H_{MF} ist nun bilinear in den Operatoren $a, a^{\dagger}, b, b^{\dagger}$. Daher beschreibt H_{MF} ein effektives *wechselwirkungsfreies* System, das im Prinzip eine analytische Lösung gestattet. Insbesondere haben wir den Wechselwirkungsterm V_{int} durch ein Einteilchenpotential ersetzt. Dieses hängt jedoch von den Mittelwerten $\bar{n}_{\nu\nu'}^a := \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle$ und $\bar{n}_{\mu\mu'}^b := \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle$ ab. Wie sollen wir diese wählen? Wir können diese Mittelwerte für das durch H_{MF} beschriebene effektive System ausrechnen. Die resultierenden Werte sollten mit den in H_{MF} eingesetzten übereinstimmen. Dies ist eine Selbstkonsistenz-Bedingung. Z. B. ist

$$\bar{n}_{\nu\nu'}^a = \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle = \frac{\text{Tr } a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} e^{-\beta H_{\text{MF}}}}{\text{Tr } e^{-\beta H_{\text{MF}}}}. \quad (4.11)$$

$\uparrow$
 „Trace“ = Spur über Basis
 des Hilbertraums

Wir werden in Abschnitt 4.3 die Aussagen der Quantenstatistik wiederholen, die hinter dieser Gleichung stecken. Beispiele für die praktische Berechnung werden wir im Folgenden betrachten. Zunächst machen wir jedoch noch einige Bemerkungen:

Wir erhalten diese Gleichungen für $\bar{n}_{\nu\nu'}^a, \bar{n}_{\mu\mu'}^b$ auch durch Minimierung der freien Energie

$$F_{\text{MF}} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{\text{MF}} \quad (4.12)$$

mit der Zustandssumme $Z_{\text{MF}} = \text{Tr} e^{-\beta H_{\text{MF}}}$:

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{d}{d\bar{n}_{\mu\mu'}^b} F_{\text{MF}} \\
&= \frac{1}{Z_{\text{MF}}} \text{Tr} e^{-\beta H_{\text{MF}}} \frac{d}{d\bar{n}_{\mu\mu'}^b} H_{\text{MF}} \\
&= \frac{1}{Z_{\text{MF}}} \text{Tr} e^{-\beta H_{\text{MF}}} \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} (a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} - \bar{n}_{\nu\nu'}^a) \\
&= \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} \left(\frac{1}{Z_{\text{MF}}} \text{Tr} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} e^{-\beta H_{\text{MF}}} - \bar{n}_{\nu\nu'}^a \right). \tag{4.13}
\end{aligned}$$

Da dies für alle μ, μ' gelten muss, folgt, dass der Klammerausdruck verschwindet. Analog erhalten wir eine Gleichung für $\bar{n}_{\mu\mu'}^b$. In der praktischen Rechnung können wir also einen von zwei alternativen Zugängen verwenden: Entweder wir lösen die Selbstkonsistenz-Gleichungen (ggf. numerisch) oder wir minimieren die freie Energie (ggf. numerisch).

Es existieren i. A. sehr viele Mean-Field-Parameter (Mittelwerte) $\bar{n}_{\nu\nu'}^a, \bar{n}_{\mu\mu'}^b$, die wir bestimmen müssen. In der Praxis nutzt man Symmetrien des Systems aus, um die Anzahl einzuschränken. Es ist jedoch zu beachten, dass manchmal die Symmetrie des Gleichgewichtszustandes geringer als die des Hamiltonians. Beispiele werden wir noch kennenlernen. In der Praxis betrachten wir eine kleine Zahl möglicher Mean-Field-Parameter – in der Mean-Field-Näherung findet man insofern nur, wonach man sucht!

4.2.1 Hartree-Fock-Näherung

In der obigen Einführung in die Mean-Field-Theorie haben wir mögliche nicht verschwindende Mittelwerte von $a_{\nu}^{\dagger} b_{\mu'}$ und $b_{\mu}^{\dagger} a_{\nu'}$ außer Acht gelassen. Dies ist nicht immer gerechtfertigt, wie man besonders leicht einsieht, wenn a und b tatsächlich dieselbe Teilchensorte beschreiben. Wir betrachten also den Hamiltonian

$$H = H_0 + V_{\text{int}} \tag{4.14}$$

mit

$$H_0 = \sum_{\nu} \xi_{\nu} c_{\nu}^{\dagger} c_{\nu}, \tag{4.15}$$

$$V_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} c_{\nu'}. \tag{4.16}$$

Jetzt sollten in der Mean-Field-Näherung die Mittelwerte $\langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\nu'} \rangle$ und $\langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu'} \rangle$ gleichberechtigt auftreten. Wir werden später das wichtige *Wick-Theorem* besprechen, das für nicht wechselwirkende Teilchen, wie sie die Mean-Field-Näherung liefert, aussagt, dass gilt

$$\langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} c_{\nu'} \rangle = \langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\nu'} \rangle \langle c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} \rangle \pm \underbrace{\langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu'} \rangle \langle c_{\mu}^{\dagger} c_{\nu'} \rangle}_{\text{„Austausch-Term“}} \tag{4.17}$$

(das obere/untere Vorzeichen gilt wie üblich für Bosonen/Fermionen – das Minus-Zeichen kommt von der Antikommutation von fermionischen Operatoren). Die Mean-Field-Näherung muss mit dieser Gleichung verträglich sein. Also setzen wir

$$\begin{aligned}
c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} c_{\nu'} &\cong \langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\nu'} \rangle c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} + c_{\nu}^{\dagger} c_{\nu'} \langle c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} \rangle - \langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\nu'} \rangle \langle c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} \rangle \\
&\pm \langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu'} \rangle c_{\mu}^{\dagger} c_{\nu'} \pm c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu'} \langle c_{\mu}^{\dagger} c_{\nu'} \rangle \mp \langle c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu'} \rangle \langle c_{\mu}^{\dagger} c_{\nu'} \rangle. \tag{4.18}
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir den Mean-Field-Hamiltonian

$$H_{\text{MF}} = H_0 + V_{\text{Hartree}} + V_{\text{Fock}} \tag{4.19}$$

mit, für den Fall von Fermionen,

$$V_{\text{Hartree}} = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} \bar{n}_{\nu\nu'} c_{\mu}^{\dagger} c_{\mu'} + \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} \bar{n}_{\mu\mu'} c_{\nu}^{\dagger} c_{\nu'} - \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} \bar{n}_{\nu\nu'} \bar{n}_{\mu\mu'} \tag{4.20}$$

(dies ist der Hartree-Term) und

$$V_{\text{Fock}} = -\frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} \bar{n}_{\nu\mu'} c_{\mu}^{\dagger} c_{\nu'} - \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} \bar{n}_{\mu\nu'} c_{\nu}^{\dagger} c_{\mu'} + \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'\mu\mu'} V_{\nu\mu\nu'\mu'} \bar{n}_{\nu\mu'} \bar{n}_{\mu\nu'} \quad (4.21)$$

(dies ist der Fock- oder Austausch-Term).

Wir wenden diese Näherung jetzt auf Elektronen mit Coulomb-Wechselwirkung an. Der Hamiltonian lautet

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (4.22)$$

Da dieser Hamiltonian translationsinvariant ist und auch keine Spin-Richtung auszeichnet, nehmen wir zunächst an, dass auch der Gleichgewichtszustand homogen und unmagnetisch ist. Dann gilt

$$\bar{n}_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'} \equiv \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\mathbf{k}\uparrow} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\mathbf{k}\downarrow}. \quad (4.23)$$

Mittelwerte sind hier mit dem Mean-Field-Hamiltonian auszurechnen. Wir setzen nun diese Gleichung in die Hartree- und Fock-Terme des Mean-Field-Hamiltonians ein,

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} = & H_0 + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} V(\mathbf{q}=0) \delta_{\mathbf{q}0} \bar{n}_{\mathbf{k}_1\sigma_1} c_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} V(\mathbf{q}=0) \delta_{\mathbf{q}0} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \bar{n}_{\mathbf{k}_2\sigma_2} \\ & - \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} V(\mathbf{q}=0) \delta_{\mathbf{q}0} \bar{n}_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \bar{n}_{\mathbf{k}_2\sigma_2} - \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} V(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\mathbf{k}_2} \delta_{\sigma_1\sigma_2} \bar{n}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \\ & - \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} V(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1} \bar{n}_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \\ & + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} V(\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\mathbf{k}_2} \bar{n}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1} \bar{n}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Nach Umbenennung von Summationsvariablen können wir die Terme zu einer einfachen Form zusammenfassen,

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{irrelevant}}}{\text{const}} \quad (4.25)$$

mit

$$\xi_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} = \xi_{\mathbf{k}} + \underbrace{\bar{n} V(\mathbf{q}=0)}_{\substack{\text{mittlere} \\ \text{Elektronen-} \\ \text{konzentration}}} - \underbrace{\sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma}}_{\substack{\text{Austausch-Korrektur zu } \xi_{\mathbf{k}}}}. \quad (4.26)$$

dieser Term weggehoben
durch Kernpotential

Im letzten Term ist σ beliebig, da $\bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma}$ gar nicht von σ abhängt. Wir könnten jetzt recht einfach die Gesamtenergie in der Hartree-Fock-Näherung ausrechnen. Die Rechnung ist hier nicht wiedergegeben. Im Grenzfall $T \rightarrow 0$ erhält man

$$\frac{E}{N} \cong \frac{E_{\text{HF}}}{N} = 2,211 \text{ Ry } \frac{1}{r_s^2} - 0,916 \text{ Ry } \frac{1}{r_s} \quad \text{mit } r_s := \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{k_{\text{FaB}}}. \quad (4.27)$$

Dies ist *dasselbe* Ergebnis wie in Störungstheorie 1. Ordnung, siehe Gl. (3.91). Diese Übereinstimmung ist eine spezielle Eigenschaft der Hartree-Fock-Näherung für das homogene Elektronengas und gilt nicht allgemein für Mean-Field-Theorien. Mean-Field-Näherungen sind keine Störungstheorien endlicher Ordnung. Wir werden im Gegenteil sehen, dass Mean-Field-Näherungen über Störungstheorie hinaus gehen. Hartree-Fock-Theorie ist insofern eine stärkere Begründung für Gl. (4.27) als eine nach der ersten Ordnung abgebrochene Störungsreihe.

4.2.2 Stoner-Theorie des Ferromagnetismus in Metallen

In Metallen schirmen die beweglichen Leitungselektronen die Coulomb-Wechselwirkung teilweise ab, wie wir später sehen werden. Die abgeschirmte Wechselwirkung hat näherungsweise die schon bekannte Yukawa-Form

$$\frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-r/\xi}}{r} \quad (4.28)$$

mit einer Abschirmlänge ξ . In guten Metallen ist ξ nicht viel größer als die Gitterkonstante. Wir können daher die wesentlichen Effekte mit einem Modell mit rein lokaler Wechselwirkung verstehen. Dies ist das *Hubbard-Modell*, beschrieben durch den Hamiltonian

$$H = - \underbrace{\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}}_{\text{kinetische Energie}} + \underbrace{\sum_i U c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}}_{\text{kurzreichweitige WW}}. \quad (4.29)$$

Den Wechselwirkungsterm in Impulsdarstellung erhalten wir aus

$$\begin{aligned} \sum_i U c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} &= \frac{U}{2} \sum_i \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} \right) \\ &= \frac{U}{2} \sum_{i\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i\sigma} \quad \left| \text{da } c_{i\sigma} c_{i\sigma} = 0 \right. \\ &= \frac{U}{2N^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \sum_{\sigma\sigma'} \underbrace{\sum_i e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{R}_i}}_{= N\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}} c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_3\sigma'} c_{\mathbf{k}_4\sigma} \\ &= \frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Also ist

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (4.31)$$

Wir wenden die Hartree-Fock-Näherung an, um den Wechselwirkungsterm zu entkoppeln. Die entsprechenden Mittelwerte sind $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle$. Wir schränken den Raum möglicher Lösungen ein, indem wir folgende Annahmen machen:

- Die Lösung ist homogen, d. h. sie hat die volle Translationssymmetrie des Gitters. Nicht verschwindende Mittelwerte existieren dann nur für $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ ($\mathbf{k}$ ist erhalten).
- Die Lösung hat möglicherweise *nicht* die Spin-Rotationssymmetrie von H , aber wenn eine Magnetisierung auftritt, dann in z -Richtung. Dies ist keine zusätzlich Annahme; tritt in einem homogenen System eine Magnetisierung auf, können wir einfach die z -Achse des Koordinatensystems im Spin-Raum in diese Richtung legen (das Koordinatensystem im Spin-Raum ist für das vorliegende Modell unabhängig vom Koordinatensystem im Realraum). Mögliche andere Richtungen der Magnetisierungen können wir später erhalten, indem wir den Grundzustand im Spin-Raum drehen. Endliche Mittelwerte existieren dann nur für $\sigma = \sigma'$, können aber von σ abhängen.

Also sind $\bar{n}_{\mathbf{k}\sigma} := \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$ die einzigen nicht verschwindenden Mittelwerte. Die Hartree-Fock-Näherung ist nun

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} &\cong \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle \\ &\quad - \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle - \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\ &\quad - c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Unter der Summe $\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'}$ sind nach Umbenennung einige Terme gleich und wir erhalten

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{q}0} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\
& -\frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} [\delta_{\mathbf{q}0} \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma} \delta_{\mathbf{q}0} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}} \delta_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma}] \\
& = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \\
& -\frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma} \bar{n}_{\mathbf{k}'\sigma} \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma}.
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Wir definieren die einheitenlosen Konzentrationen der $\uparrow$ und $\downarrow$ Elektronen durch

$$\bar{n}_\sigma := \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma}. \tag{4.35}$$

Damit wird einfach

$$\begin{aligned}
H_{\text{MF}} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} U(\bar{n}_\uparrow + \bar{n}_\downarrow - \bar{n}_\sigma) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{UN}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \bar{n}_\sigma \bar{n}_{\sigma'} + \frac{UN}{2} \sum_{\sigma} \bar{n}_\sigma^2 \\
&= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \underbrace{(\xi_{\mathbf{k}} + U\bar{n}_{\bar{\sigma}})}_{=: \xi_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MF}}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - UN \bar{n}_\uparrow \bar{n}_\downarrow.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Nun müssen die Konzentrationen $\bar{n}_\uparrow, \bar{n}_\downarrow$ selbstkonsistent bestimmt werden. Das ist jedoch einfach, da H_{MF} wechselwirkungsfreie Elektronen beschreibt:

$$\bar{n}_\sigma = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_F(\xi_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MF}}). \tag{4.37}$$

Um explizite Ergebnisse zu erhalten, betrachten wir im Folgenden die parabolische Dispersion $\xi_{\mathbf{k}} = k^2/2m - \mu$.

(a) Wir führen die Rechnung für $T = 0$ durch. Beim Übergang von der Summe zum Integral über den Impulsraum benötigen wir das Volumen der Einheitszelle, $\mathcal{V}/N \equiv v_{\text{uc}}$, damit die Einheiten stimmen. Es gilt

$$\begin{aligned}
\bar{n}_\sigma &= v_{\text{uc}} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \theta\left(-\frac{k^2}{2m} + \mu - U\bar{n}_{\bar{\sigma}}\right) \\
&= \frac{v_{\text{uc}}}{2\pi^2} \int_0^{k_{F\sigma}} dk k^2 \\
&\quad \text{mit } -\frac{k_{F\sigma}^2}{2m} + \mu - U\bar{n}_{\bar{\sigma}} = 0 \quad \Rightarrow \quad k_{F\sigma} = \sqrt{2m(\mu - U\bar{n}_{\bar{\sigma}})} \\
&= \frac{v_{\text{uc}}}{6\pi^2} [2m(\mu - U\bar{n}_{\bar{\sigma}})]^{3/2}.
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Es folgt

$$\left(\frac{6\pi^2}{v_{\text{uc}}}\right)^{2/3} \bar{n}_\sigma^{2/3} = 2m\mu - 2mU\bar{n}_{\bar{\sigma}} \tag{4.39}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{v_{\text{uc}}}\right)^{2/3} \bar{n}_\sigma^{2/3} = \mu - U\bar{n}_{\bar{\sigma}}. \tag{4.40}$$

Wir erhalten zwei unabhängige Gleichungen für $\sigma = \uparrow$ und $\sigma = \downarrow$. Die Differenz dieser beiden Gleichungen ergibt

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{v_{\text{uc}}}\right)^{2/3} (\bar{n}_\uparrow^{2/3} - \bar{n}_\downarrow^{2/3}) = U(\bar{n}_\uparrow - \bar{n}_\downarrow). \tag{4.41}$$

Wir definieren

$$\zeta := \frac{\bar{n}_\uparrow - \bar{n}_\downarrow}{n} \quad (4.42)$$

als Maß für die *Magnetisierung* und

$$\gamma := \frac{2m v_{\text{uc}}^{2/3} U n^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}} \quad (4.43)$$

als Maß für die Wechselwirkungsstärke U , wobei

$$n := \bar{n}_\uparrow + \bar{n}_\downarrow \quad (4.44)$$

die gesamte Elektronenkonzentration ist. Dann ist

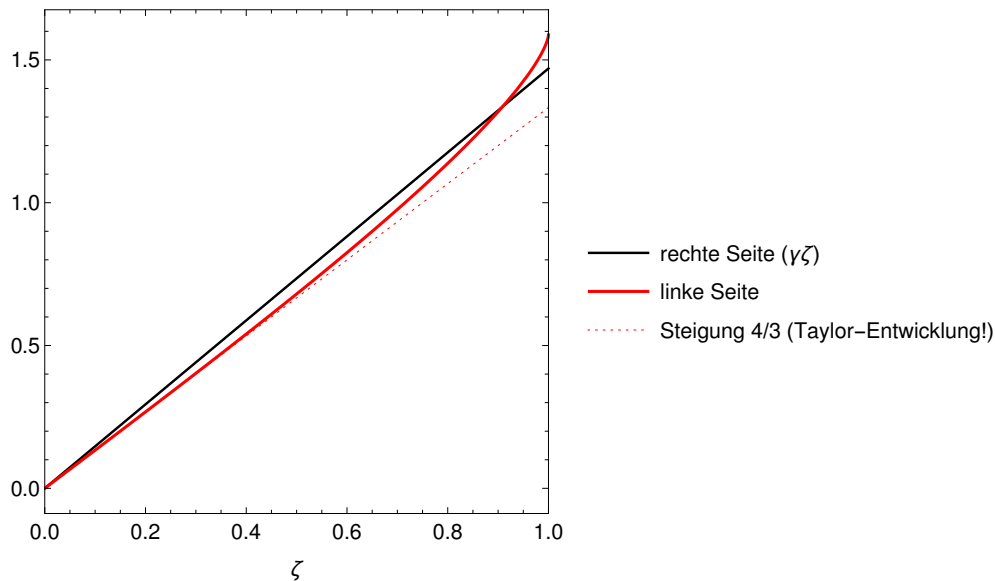
$$\bar{n}_\uparrow = n \frac{1+\zeta}{2}, \quad \bar{n}_\downarrow = n \frac{1-\zeta}{2}. \quad (4.45)$$

Es folgt

$$\frac{n^{2/3}}{2^{2/3}} [(1+\zeta)^{2/3} - (1-\zeta)^{2/3}] = \frac{2m v_{\text{uc}}^{2/3} U}{(6\pi^2)^{2/3}} n \zeta \quad (4.46)$$

$$\Rightarrow (1+\zeta)^{2/3} - (1-\zeta)^{2/3} = \gamma \zeta. \quad (4.47)$$

Die Lösungen dieser Gleichung für ζ kann man am besten anhand einer Graphik verstehen. Lösungen erhalten wir als Schnittpunkte der linken und der rechten Seite der Gleichung, aufgetragen als Funktionen von ζ :



1. $\gamma < 4/3$: Es existiert nur die Lösung $\zeta = 0 \Rightarrow \bar{n}_\uparrow = \bar{n}_\downarrow$, also verschwindende Magnetisierung.
2. $4/3 < \gamma < 2^{2/3}$: Lösungen $\zeta = 0$ (instabil) und $0 < |\zeta| < 1$ (stabil) existieren, die stabilen Lösungen zeigen teilweise Spin-Polarisation, also „schwachen Ferromagnetismus“.
3. $\gamma > 2^{2/3}$: Lösungen $\zeta = 0$ (instabil) und $|\zeta| = 1$ existieren. Man kann zeigen, dass die Mean-Field-Energie $E_{\text{MF}}(\zeta)$ Minima am *Rand* des erlaubten Intervalls, bei $\zeta = \pm 1$, hat. Wir finden vollständige Spin-Polarisation („starker Ferromagnetismus“, ferromagnetisches Halbmetall – nur Elektronen einer Spin-Richtung liegen an der Fermi-Energie vor).

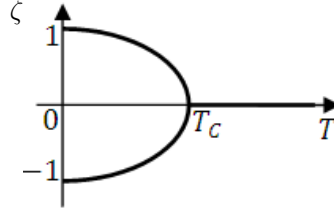
Beispiele für die drei Fälle sind:

1. Platin (ist fast ein Ferromagnet)

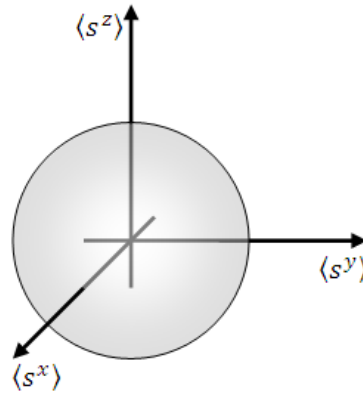
2. Eisen, Kobalt, Nickel

3. CrO_2 , EuB_6

(b) Für $T > 0$ ist $n_F(\xi) = 1/(e^{\beta\xi} + 1)$ einzusetzen. Eine numerische Lösung ergibt folgenden Verlauf von $\zeta = (\bar{n}_\uparrow - \bar{n}_\downarrow)/n$ für den Fall $\gamma > 2^{2/3}$:



Hier ist T_C die *Curie-Temperatur*. Für $T < T_C$ finden wir zwei Lösungen $\pm|\zeta|$. Die Spin-Rotationssymmetrie des Hubbard-Modells impliziert, dass für $T < T_C$ Zustände mit beliebigen Spin-Richtungen, nicht nur $\uparrow$ und $\downarrow$, gleichermaßen möglich sind. Die Gleichgewichtszustände liegen also auf einer Kugeloberfläche im Spin-Raum:



Für $T < T_C$ hat ein beliebig ausgewählter Gleichgewichtszustand also *niedrigere* Symmetrie als der Hamiltonian H , der ausgewählte Gleichgewichtszustand zeichnet nämlich eine Spin-Richtung aus. Dies ist ein Beispiel für *spontane Symmetriebrechung*. Spontane Symmetriebrechung ist ein sehr wichtiges Konzept nicht nur in der Festkörperphysik, die unten besprochene Supraleitung ist ein weiteres Beispiel, sondern auch in der Quantenfeldtheorie. Für spontane Symmetriebrechung in der Hochenergie- und Elementarteilchenphysik wurde der Physik-Nobel-Preis 2008 vergeben.

Spontan gebrochene Symmetrien kann man in der Störungstheorie unter Annahme eines ungestörten Zustandes mit *voller* Symmetrie niemals erhalten. Die Terme der Störungsentwicklung mit beliebig hoher Ordnung haben nämlich alle die volle Symmetrie. In solchen Fällen versagt die Störungstheorie also, während Mean-Field-Theorie oft eine qualitativ richtige Beschreibung des Gleichgewichtszustandes ergibt.

4.3 Lineare-Antwort-Theorie

Wir betrachten ein System beschrieben durch einen ungestörten Hamiltonian H_0 und eine äußere Störung V . Im Gegensatz zu den vorhergehenden Abschnitten stecken die inneren Wechselwirkungen des Systems nun in H_0 . Uns interessiert, wie der Mittelwert $\langle A \rangle$ einer Observablen A von V abhängt. Die Störung V lässt sich typischerweise in der Form $V = Bf$ schreiben, wobei B ein Operator im Zustandsraum des untersuchten Systems ist und f eine *klassische* Größe, z. B. ein elektrisches Feld, das klassisch behandelt werden kann. Das hat den praktischen Nutzen, dass f durch eine Zahl beschrieben werden kann. Ist die Störung f *klein*, so ist im Allgemeinen $\langle A \rangle$ linear in f ,

$$\langle A \rangle \cong \langle A \rangle(f=0) + \alpha f. \quad (4.48)$$

Beispiele sind das Ohmsche Gesetz $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$, die elektrische Polarisierung im $\mathbf{E}$ -Feld und die Magnetisierung im $\mathbf{B}$ -Feld.

Wir erhalten einen linearen Zusammenhang, indem wir $\langle A \rangle$ nach kleinen f in eine Taylor-Reihe entwickeln. Für eine allgemeine Abhängigkeit von $\langle A \rangle$ von f ist der führende nicht-triviale Term linear. Nur für spezielle Funktionen $\langle A \rangle(f)$ fällt der lineare Term weg und $\langle A \rangle$ ist von höherer Ordnung in f . Dies muss einen physikalischen Grund haben, z. B. eine Symmetrie, die ungerade Terme in der Entwicklung verbietet. Ein Beispiel ist die Magnetostraktion, d. h. die Längenänderung einer Probe in einem angelegten Magnetfeld, für paramagnetische Materialien. Da das Magnetfeld ungerade unter Zeitumkehr ist, eine Längenänderung dagegen gerade, kann die Magnetostraktion nur von geraden Potenzen des Feldes abhängen.

Unser Ziel in diesem Abschnitt ist, $\langle A \rangle$ in linearer Ordnung in f auszurechnen oder, äquivalent dazu, den Koeffizienten α in Gl. (4.48) zu bestimmen. Wir erinnern uns zunächst an einige Ergebnisse der Quantenstatistik:

- Ein Zustand eines Ensembles wird durch einen Dichte-Operator (Dichtematrix) ρ beschrieben. Treten Zustände $|\Psi\rangle$ mit Wahrscheinlichkeiten P_Ψ auf, so ist

$$\rho = \sum_{\Psi} P_{\Psi} |\Psi\rangle\langle\Psi|, \text{ wobei } \sum_{\Psi} P_{\Psi} = 1. \quad (4.49)$$

Die $|\Psi\rangle$ müssen normiert, können aber ansonsten beliebig sein. Sie sind im Allgemeinen nicht linear unabhängig oder gar orthogonal.

- Im thermischen Gleichgewicht des kanonischen Ensembles nimmt ρ eine *besondere Form* an:

$$\rho \sim \sum_n e^{-\beta E_n} |n\rangle\langle n| \equiv e^{-\beta H}. \quad (4.50)$$

$|n\rangle$ sind hier Eigenzustände von H zu Eigenenergien E_n . Die Proportionalitätskonstante ist durch die Normierungsbedingung $\text{Tr } \rho = 1$ festgelegt:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr } e^{-\beta H}}. \quad (4.51)$$

Der Nenner ist die *Zustandssumme*

$$Z := \text{Tr } e^{-\beta H} = \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (4.52)$$

- Mittelwerte sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \text{Tr } \rho A = \sum_n \langle n | \rho A | n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} A | n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \underbrace{\langle n | n' \rangle}_{\delta_{nn'}} \langle n' | e^{-\beta E_{n'}} A | n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | A | n \rangle, \end{aligned} \quad (4.53)$$

wobei wir wieder angenommen haben, dass das System im Gleichgewicht ist.

Nun betrachten wir eine Klasse von Systemen, die durch Hamiltonians der Form

$$H(t) = H_0 + V(t) \theta(t - t_0) \quad (4.54)$$

beschrieben werden. Wir schalten also eine Störung V plötzlich zur Zeit $t = t_0$ ein. Das System möge sich zur Zeit t_0 im Gleichgewicht bezüglich H_0 befinden. Wir suchen $\langle A \rangle$ für $t > t_0$. Das System hat keine

Zeit für Übergänge in andere Zustände, da die Störung plötzlich eingeschaltet wird. Die Besetzungswahrscheinlichkeit der Eigenzustände $|n\rangle$ von H_0 (nicht von H !) *bleibt* also

$$\frac{1}{Z_0} e^{-\beta E_n^0} \quad \text{mit} \quad Z_0 = \text{Tr} e^{-\beta H_0}. \quad (4.55)$$

E_n^0 sind hier die Eigenenergien von H_0 . Durch die Störung erhalten diese Zustände aber eine zusätzliche Zeitabhängigkeit. Im Schrödinger-Bild gilt

$$\rho(t) = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-\beta E_n^0} |n(t)\rangle \langle n(t)|, \quad (4.56)$$

also für eine explizit zeitunabhängige Observable A ,

$$\langle A \rangle(t) = \text{Tr} \rho(t) A = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-\beta E_n^0} \langle n(t) | A | n(t) \rangle. \quad (4.57)$$

Da V eine kleine Störung sein soll, ist das Wechselwirkungsbild günstig:

$$\begin{aligned} \underbrace{|n(t)\rangle}_{\text{Schrödinger}} &= e^{-iH_0 t} |n(t)\rangle_I = e^{-iH_0 t} U_I(t, t_0) |n(t_0)\rangle_I \\ &= e^{-iH_0 t} U_I(t, t_0) e^{iH_0 t_0} \underbrace{|n(t_0)\rangle}_{\text{Schrödinger}}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Wir hatten in Abschnitt 3.5 gesehen, dass zur ersten Ordnung in V gilt

$$U_I(t, t_0) \cong 1 - i \int_{t_0}^t dt' V_I(t'), \quad (4.59)$$

wobei

$$V_I(t') \equiv e^{iH_0 t'} V(t') e^{-iH_0 t'}. \quad (4.60)$$

Also folgt

$$|n(t)\rangle \cong e^{-iH_0(t-t_0)} |n(t_0)\rangle - i e^{-iH_0 t} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') e^{iH_0 t_0} |n(t_0)\rangle. \quad (4.61)$$

Damit wird Gl. (4.57) bis zur ersten Ordnung

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &\cong \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-\beta E_n^0} \left\{ \langle n(t_0) | e^{-iH_0(t_0-t)} A e^{-iH_0(t-t_0)} | n(t_0) \rangle \right. \\ &\quad - i \langle n(t_0) | e^{-iH_0 t_0} e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') e^{iH_0 t_0} | n(t_0) \rangle \\ &\quad \left. + i \langle n(t_0) | e^{-iH_0 t_0} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} e^{iH_0 t_0} | n(t_0) \rangle + \mathcal{O}(V^2) \right\} \\ &= \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-\beta E_n^0} \left\{ \langle n(t_0) | \cancel{e^{-iE_n^0(t_0-t)}} A \cancel{e^{-iE_n^0(t-t_0)}} | n(t_0) \rangle \right. \\ &\quad - i \langle n(t_0) | \cancel{e^{-iE_n^0 t_0}} e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \cancel{e^{iE_n^0 t_0}} | n(t_0) \rangle \\ &\quad \left. + i \langle n(t_0) | \cancel{e^{-iE_n^0 t_0}} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} \cancel{e^{iE_n^0 t_0}} | n(t_0) \rangle \right\} \\ &= \underbrace{\langle A \rangle_0}_{\text{ungestört}} - \frac{i}{Z_0} \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} e^{-\beta H_0} e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} V_I(t') \\ &\quad + \frac{i}{Z_0} \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} e^{-\beta H_0} V_I(t') e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \langle A \rangle_0 - i \int_{t_0}^t dt' \langle A_I(t) V_I(t') - V_I(t') A_I(t) \rangle_0 \\
&= \langle A \rangle_0 - i \int_{t_0}^t dt' \langle [A_I(t), V_I(t')] \rangle_0.
\end{aligned} \tag{4.62}$$

Hier bezeichnet $\langle \dots \rangle_0$ das thermische Mittel bzgl. H_0 . Wir haben die Antwort des Systems auf eine kleine Störung durch einen Mittelwert im Gleichgewicht bezüglich des *ungestörten* Systems ausgedrückt. Dies ist ein sehr nützliches Ergebnis. Wir schreiben es noch etwas um:

$$\delta \langle A \rangle(t) := \langle A \rangle(t) - \langle A \rangle_0 = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{AV}^R(t, t') \tag{4.63}$$

mit

$$C_{AV}^R(t, t') := -i \theta(t - t') \langle [A_I(t), V_I(t')] \rangle_0. \tag{4.64}$$

C^R heißt *retardierte Korrelationsfunktion*. Gleichung (4.63) mit Gl. (4.64) ist die sehr wichtige *Kubo-Formel*. Wir bemerken die Ähnlichkeit von C^R mit der retardierten Green-Funktion G^R . Diese ist tatsächlich ein Spezialfall von C^R .

Jetzt betrachten wir eine Störung von der Form

$$V(t) = B f(t) \tag{4.65}$$

mit einem zeitunabhängigen Operator B und einer reellen Funktion $f(t)$, d. h. die Zeitabhängigkeit steckt nur im Zahlenfaktor $f(t)$. Dann folgt

$$C_{AV}^R(t, t') = C_{AB}^R(t - t') f(t'). \tag{4.66}$$

Wenn wir nicht an transienten Effekten („Einschwingvorgängen“) interessiert sind, können wir $t_0 \rightarrow -\infty$ setzen. Dann ist

$$\delta \langle A \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' C_{AB}^R(t - t') f(t') \tag{4.67}$$

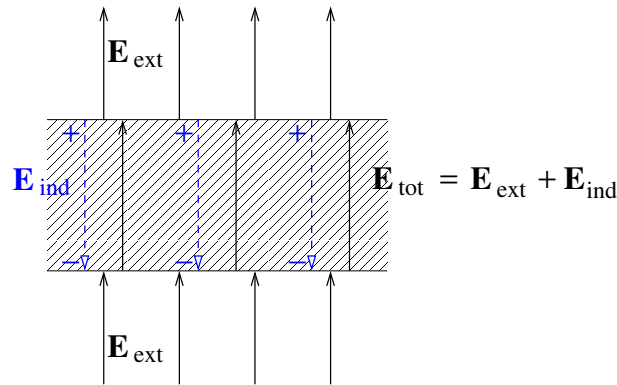
und, da die Faltung unter Fourier-Transformation in ein gewöhnliches Produkt übergeht,

$$\delta \langle A \rangle(\omega) = C_{AB}^R(\omega) f(\omega). \tag{4.68}$$

Dies ist die Kubo-Formel im Frequenz-Raum.

4.3.1 Kubo-Formel für die dielektrische Funktion

Als Anwendung betrachten wir die lineare Antwort eines (nicht ferroelektrischen) homogenen Materials auf ein angelegtes elektrisches Feld. Wir betrachten eine ausgedehnte Schicht des Materials und ein elektrisches Feld senkrecht zur Schicht, um die Situation nicht durch komplizierte Stetigkeitsbedingungen unnötig schwierig zu machen.



Im Allgemeinen ist $E_{\text{tot}} < E_{\text{ext}}$, d. h., das elektrische Feld ist im Material abgeschwächt. Außerhalb des Materials ist das Verschiebungsfeld $\mathbf{D}$ gegeben durch $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}_{\text{ext}}$. Für die skizzierte Geometrie ist $\mathbf{D}$ stetig, daher gilt $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}_{\text{ext}}$ überall. Die Dielektrizitätskonstante des Materials ist definiert durch

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}_{\text{tot}} \quad (4.69)$$

für kleines $\mathbf{E}_{\text{tot}}$. Es folgt

$$\mathbf{E}_{\text{tot}} = \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{E}_{\text{ext}} \quad (4.70)$$

und, da das elektrische Feld $\mathbf{E}$ und das skalare Potential ϕ über $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ zusammenhängen,

$$\phi_{\text{tot}} = \frac{1}{\varepsilon} \phi_{\text{ext}}. \quad (4.71)$$

Dies gilt nur für den statischen und homogenen Fall. Allgemein ist

$$\phi_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) = \int d^3 r' \int dt' \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}', t'). \quad (4.72)$$

Wir wollen ε^{-1} im Rahmen der Lineare-Antwort-Theorie berechnen. Dazu müssen wir zunächst die Störung identifizieren. Der Störoperator lautet

$$V = \int d^3 r \rho(\mathbf{r}) \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t). \quad (4.73)$$

Die zeitabhängige Störung ϕ_{ext} koppelt also an den Ladungsdichteoperator ρ .

Die gesuchte Messgröße ist ebenfalls die Ladungsdichte ρ . Ihre von der Störung hervorgerufene Änderung $\delta\rho$ bezeichnen wir in diesem Zusammenhang als *induzierte* (oder Polarisations-) *Ladungsdichte* $\rho_{\text{ind}} \equiv \delta\rho$. Für diese gilt gemäß Gl. (4.67)

$$\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = \int d^3 r' \int_{-\infty}^{\infty} dt' C_{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}^R(t-t') \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}', t') \quad (4.74)$$

↑
Summiert über alle Störungen an allen Orten $\mathbf{r}'$

mit

$$C_{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}^R(t-t') \equiv \chi_e^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = -i\theta(t-t') \langle [\rho_I(\mathbf{r}, t), \rho_I(\mathbf{r}', t')] \rangle_0. \quad (4.75)$$

Diese Funktion χ_e^R bezeichnet man auch als elektrische Suszeptibilität. Das induzierte Potential ist dann

$$\phi_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = \int d^3 r'' \underbrace{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|}}_{=: V_C(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')} \rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}'', t) \quad (4.76)$$

(in Coulomb-Eichung, vgl. Kapitel 2). Also ist

$$\phi_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) = \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) + \int d^3 r'' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' V_C(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \chi_e^R(\mathbf{r}''t, \mathbf{r}'t') \phi_{\text{ext}}(\mathbf{r}', t'). \quad (4.77)$$

Durch Vergleich mit Gl. (4.72) können wir ablesen, dass gilt

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') + \int d^3 r'' V_C(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \chi_e^R(\mathbf{r}''t, \mathbf{r}'t'). \quad (4.78)$$

Ist das System translationsinvariant, so können wir räumlich Fourier-transformieren. In der Zeit können wir dies ohnehin tun, da H_0 nicht zeitabhängig ist. Mit

$$\phi_{\text{tot,ext}}(\mathbf{q}, \omega) = \int d^3 r \int dt e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + i\omega t} \phi_{\text{tot,ext}}(\mathbf{r}, t), \quad (4.79)$$

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = \int d^3 r \int dt e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} + i\omega t} \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}t, 00) \quad (4.80)$$

folgt der einfache Zusammenhang

$$\phi_{\text{tot}}(\mathbf{q}, \omega) = \varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) \phi_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega), \quad (4.81)$$

wobei

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \underbrace{V_C(\mathbf{q})}_{\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2}} \chi_e^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (4.82)$$

die Fouriertransformierte von ε^{-1} und nicht das Inverse der Transformierten von ε ist. Diese Größen sind i. A. nicht identisch. Als nächstes wollen wir χ_e^R berechnen.

4.3.2 Bewegungsgleichungen für Lineare-Antwort-Funktionen

Wir hatten gesehen, dass die retardierten Korrelationsfunktionen Verallgemeinerungen der retardierten Green-Funktion sind. Wie bei dieser kann man Bewegungsgleichungen finden, die man wieder im Allgemeinen nur näherungsweise lösen kann. Wir betrachten hier beispielhaft die retardierte Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion

$$\chi^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = -i \theta(t - t') \langle [\rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t')] \rangle, \quad (4.83)$$

wobei wir aus Gründen der Bequemlichkeit den Subskript „I“ an ρ und „0“ am Mittelwert weggelassen haben. Aber es handelt sich immer noch um Operatoren im Wechselwirkungsbild und um einen Gleichgewichtsmittelwert, jeweils bezüglich des ungestörten Hamiltonians, den wir jetzt mit H bezeichnen. Außerdem ist

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.84)$$

nun die Teilchenzahldichte, nicht die Ladungsdichte. Den Spin-Index haben wir unterdrückt. Mit $\Psi(\mathbf{r}) = \mathcal{V}^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}}$, siehe Gl. (2.183), lautet die räumliche Fourier-Transformation von ρ ,

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{q}) \quad (4.85)$$

mit

$$\rho(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (4.86)$$

Die räumliche Fourier-Transformation von χ^R ergibt damit

$$\begin{aligned} \chi^R(\mathbf{q}, t - t') &= -i \theta(t - t') \int d^3r \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{q}'\mathbf{q}''} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}+i\mathbf{q}''\cdot\mathbf{r}'} \langle [\rho(\mathbf{q}', t), \rho(\mathbf{q}'', t')] \rangle \\ &= -i \theta(t - t') \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}''} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'+i\mathbf{q}''\cdot\mathbf{r}'} \langle [\rho(\mathbf{q}, t), \rho(\mathbf{q}'', t')] \rangle. \end{aligned} \quad (4.87)$$

Wenn das ungestörte System translationsinvariant ist, kann dieses Ergebnis nicht von $\mathbf{r}'$ abhängen. Daher muss für ein translationsinvariantes System der Erwartungswert verschwinden, wenn nicht $\mathbf{q}'' = -\mathbf{q}$ gilt. Wir erhalten

$$\chi^R(\mathbf{q}, t - t') = -i \theta(t - t') \frac{1}{\mathcal{V}} \langle [\rho(\mathbf{q}, t), \rho(-\mathbf{q}, t')] \rangle. \quad (4.88)$$

Der ungestörte, aber i. A. wechselwirkende Hamiltonian lautet

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} V_{\text{int}}(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}. \quad (4.89)$$

Die Wechselwirkung $V_{\text{int}}(\mathbf{q})$ ist zunächst beliebig, aber wir denken natürlich an das Coulomb-Potential $V_C(\mathbf{q}) = e^2/(\varepsilon_0 q^2)$. (Der Faktor e^2 ist jetzt in $V_C(\mathbf{q})$ enthalten, da ρ die Teilchenzahldichte ist. Der Beitrag für $\mathbf{q} = 0$ wird wie oben vom Kernpotential weggehoben.)

Es ist nützlich, die Bewegungsgleichung nicht direkt für $\chi^R(\mathbf{q}, t - t')$ herzuleiten, sondern für eine etwas allgemeinere Größe. Dazu schreiben wir

$$\chi^R(\mathbf{q}, t - t') = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \chi^R(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t - t') \quad (4.90)$$

mit

$$\chi^R(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t - t') := -i\theta(t - t') \langle [(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger)(t), \rho(-\mathbf{q}, t')] \rangle. \quad (4.91)$$

Für diese Größe erhalten wir durch Ableiten die Bewegungsgleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \chi^R(\mathbf{k}, \mathbf{q}, t - t') = \delta(t - t') \langle [(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger)(t), \rho(-\mathbf{q}, t')] \rangle + i\theta(t - t') \langle [[H, c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger](t), \rho(-\mathbf{q}, t')] \rangle. \quad (4.92)$$

Die Terme der Form $[c^\dagger c, c^\dagger c]$ ergeben durch Ausnutzung des Antikommutators $\{c_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ bilineare Ausdrücke der Form $c^\dagger c$. Der Wechselwirkungsterm in H führt jedoch auf einen Kommutator $[c^\dagger c^\dagger c c, c^\dagger c]$, was sich nur zu einem Ausdruck vierter Ordnung vereinfachen lässt. Wie bei den elektronischen Green-Funktionen erhalten wir auf der rechten Seite Korrelationsfunktionen höherer Ordnung. Wir benötigen Näherungen, um die Hierarchie immer komplizierterer Funktionen abubrechen. Wir verwenden eine Mean-Field-Näherung: Mit

$$V_{\text{int}} := \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} \quad (4.93)$$

ist

$$\begin{aligned} [V_{\text{int}}, c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}] &= \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} V(\mathbf{q}') (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'} \\ &\quad - c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}'} - c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}) \\ &\stackrel{\text{MF}}{\cong} \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} V(\mathbf{q}') \left(\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \rangle \right. \\ &\quad + \langle c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} + c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \rangle \\ &\quad - \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \rangle c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} - c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}+\mathbf{q}'} \rangle \\ &\quad \left. - \langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \rangle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} - c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \langle c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \rangle \right) + \frac{\text{const}}{\text{irrelevant}} \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} V(\mathbf{q}) (\langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}} \rangle) \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} V(\mathbf{q}) (\langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}} \rangle) \rho(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (4.94)$$

da $\langle c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \rangle = \langle n_{\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Wir haben eine hier unerhebliche Konstante weggelassen. Bei genauerem Hinsehen erkennt man, dass hier nur die Hartree-Terme berücksichtigt wurden. Man kann im Prinzip auch die Austausch-Terme berücksichtigen. Das ergibt eine andere Näherung.

Aus der Bewegungsgleichung (4.92) erhalten wir im Frequenz-Raum, hier ohne detaillierte Herleitung,

$$(\omega + i\eta + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \chi^R(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) \cong -(\langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}} \rangle) \left[1 + V(\mathbf{q}) \underbrace{\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} \chi^R(\mathbf{k}', \mathbf{q}, \omega)}_{= \chi^R(\mathbf{q}, \omega)} \right]. \quad (4.95)$$

Es folgt

$$\chi^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \chi^R(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) \cong \underbrace{\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle n_{\mathbf{k}} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle}{\omega + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\eta}}_{=: \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)} [1 + V(\mathbf{q}) \chi^R(\mathbf{q}, \omega)] \quad (4.96)$$

$$\Rightarrow \chi^R(\mathbf{q}, \omega) \cong \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) [1 + V(\mathbf{q}) \chi^R(\mathbf{q}, \omega)]. \quad (4.97)$$

χ_0^R ist offenbar die Lösung der Ordnung Null in der Elektron-Elektron-Wechselwirkung, d. h. das Ergebnis für *freie* Elektronen. Die letzte Gleichung kann man nach χ^R auflösen:

$$\chi^R(\mathbf{q}, \omega) \cong \frac{\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)}{1 - V(\mathbf{q}) \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)} =: \chi_{\text{RPA}}^R(\mathbf{q}, \omega). \quad (4.98)$$

Die verwendete Näherung heißt aus historischen Gründen *Random Phase Approximation* (RPA). Mit Gl. (4.82) folgt

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{RPA}}^{-1}(\mathbf{q}, \omega) &= 1 + V(\mathbf{q}) \chi_{\text{RPA}}^R(\mathbf{q}, \omega) \\ &= \frac{1 - \cancel{V(\mathbf{q}) \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)} + \cancel{V(\mathbf{q}) \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)}}{1 - V(\mathbf{q}) \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)} \\ &= \frac{1}{1 - V(\mathbf{q}) \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)}. \end{aligned} \quad (4.99)$$

Es ist üblich, dieses Resultat in der *scheinbar* offensichtlichen Form

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) &= 1 - V(\mathbf{q}) \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) \\ &= 1 - V(\mathbf{q}) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\omega + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\eta} \end{aligned} \quad (4.100)$$

zu schreiben. Das Ergebnis ist recht kompakt, hat aber eine etwas merkwürdige physikalische Interpretation: $\varepsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ ist das Inverse der Fourier-Transformierten des Inversen der dielektrischen Funktion im Ortsraum, $\varepsilon(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')$. Da Inversion nicht mit Fourier-Transformation vertauscht, ist es nicht die Fourier-Transformierte von $\varepsilon(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')$ selbst. Sowohl $\varepsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ als auch $\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$ in Gl. (4.100) wird in der Literatur als *Lindhard-Funktion* bezeichnet. Für $T \rightarrow 0$ und parabolische Dispersion $\xi_{\mathbf{k}} = k^2/2m - \mu$ kann man die Impulssumme bzw. das Integral im Impulsraum analytisch auswerten (siehe z. B. das Buch von Mahan). Wir kommen darauf zurück. Wir werden auch sehen, dass die Verwendung von Feynman-Diagrammen einen intuitiveren Zugang zur RPA erlaubt.

4.3.3 Kubo-Formel für die Leitfähigkeit

Wenn wir eine Spannung an einen Leiter anlegen, fließt ein Strom. Aus Sicht der Vielteilchentheorie ist das ein kompliziertes Problem, da wir die Elektron-Phonon-, Elektron-Störstellen- und Elektron-Elektron-Wechselwirkung berücksichtigen müssen. Außerdem ist das System natürlich nicht im Gleichgewicht. Nicht-Gleichgewichts-Prozesse sind deutlich schwieriger zu beschreiben als Gleichgewichts-Prozesse. Wir betrachten daher *kleine* angelegte Spannungen in der Hoffnung, sie als kleine Störung behandeln zu können. Dann können wir in der Beschreibung vom ungestörten System im Gleichgewicht ausgehen. Die Reaktion eines Systems auf eine kleine Störung ist der Gegenstand der Lineare-Antwort-Theorie. Diese hatte uns auf die allgemeine Kubo-Formel (4.63) geführt, die wir jetzt auf den elektronischen Transport anwenden wollen.

Für kleine elektrische Felder ist die Stromdichte i. A. linear im Feld:

$$j_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' \int dt' \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') E_\beta(\mathbf{r}', t') \quad (4.101)$$

mit dem Leitfähigkeitstensor $\sigma(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')$. Das ist das Ohmsche Gesetz. Allgemein gilt

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}, \quad (4.102)$$

aber wir können eine Eichung wählen, in der $\phi \equiv 0$ gilt. Dann gilt im Frequenz-Raum

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) \Rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{i\omega} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (4.103)$$

und wir können ebenso gut die Antwort auf $\mathbf{A}$ wie auf $\mathbf{E}$ ausrechnen.

Der Hamiltonian in Anwesenheit eines Vektorpotentials lautet (das statische Gitterpotential steckt hier in $\mathbf{A}$, V_{int} enthält Wechselwirkungsterme)

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3r \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{i} \nabla + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ladung } -e}}{e\mathbf{A}} \right)^2 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + V_{\text{int}} \\
&= H(\mathbf{A} = 0) + \frac{e}{2mi} \sum_{\sigma} \int d^3r \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \\
&\quad + \frac{e^2}{2m} \sum_{\sigma} \int d^3r \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) A^2(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \\
&= H(\mathbf{A} = 0) + \frac{e}{2mi} \int d^3r \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \sum_{\sigma} \left[\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \nabla \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) - (\nabla \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \right] \\
&\quad + \frac{e^2}{2m} \int d^3r A^2(\mathbf{r}) \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}). \tag{4.104}
\end{aligned}$$

Nun sei $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_{\text{ext}}$, wobei $\mathbf{A}_0$ das Vektorpotential ohne äußere Störung ist. Dann folgt

$$\begin{aligned}
H &= H(\mathbf{A} = \mathbf{A}_0) + \frac{e}{2mi} \int d^3r \mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \cdot \sum_{\sigma} [\Psi_{\sigma}^{\dagger} \nabla \Psi_{\sigma} - (\nabla \Psi_{\sigma}^{\dagger}) \Psi_{\sigma}] \\
&\quad + \frac{e^2}{m} \int d^3r \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{A}_{\text{ext}} \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger} \Psi_{\sigma} + \mathcal{O}(A_{\text{ext}}^2). \tag{4.105}
\end{aligned}$$

In der Theorie der linearen Antwort vernachlässigen wir den Term zweiter Ordnung in $\mathbf{A}_{\text{ext}}$.

Wir können ablesen, dass der Störoperator, der die Kopplung des Systems an $\mathbf{A}_{\text{ext}}$ beschreibt,

$$- \int d^3r \mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) \tag{4.106}$$

mit der Stromdichte

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t) &:= -\frac{e}{2mi} \sum_{\sigma} [\Psi_{\sigma}^{\dagger} \nabla \Psi_{\sigma} - (\nabla \Psi_{\sigma}^{\dagger}) \Psi_{\sigma}] - \frac{e^2}{m} \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger} \Psi_{\sigma} \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \\
&\equiv -\frac{e}{2mi} \sum_{\sigma} [\Psi_{\sigma}^{\dagger} \nabla \Psi_{\sigma} - (\nabla \Psi_{\sigma}^{\dagger}) \Psi_{\sigma}] + \frac{e}{m} \rho(\mathbf{r}) \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \tag{4.107}
\end{aligned}$$

lautet.

Die Stromdichte, die wir *messen*, sieht etwas anders aus. *Ohne* Vektorpotential ist die Stromdichte

$$\mathbf{j} = -\frac{e}{2mi} \sum_{\sigma} [\Psi_{\sigma}^{\dagger} \nabla \Psi_{\sigma} - (\nabla \Psi_{\sigma}^{\dagger}) \Psi_{\sigma}], \tag{4.108}$$

in Analogie zur Einteilchen-Quantenmechanik. Mit $\mathbf{A} \neq 0$ müssen wir den kinetischen Impuls $\mathbf{p} + e\mathbf{A} = (1/i) \nabla + e\mathbf{A}$ anstelle des kanonischen Impulses $\mathbf{p} = (1/i) \nabla$ verwenden. Dies führt auf

$$\begin{aligned}
\mathbf{j} &= -\frac{e}{2m} \sum_{\sigma} \left\{ \Psi_{\sigma}^{\dagger} \left(\frac{1}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right) \Psi_{\sigma} + \left[\left(\frac{1}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right) \Psi_{\sigma} \right]^{\dagger} \Psi_{\sigma} \right\} \\
&= -\frac{e}{2mi} \sum_{\sigma} [\Psi_{\sigma}^{\dagger} \nabla \Psi_{\sigma} - (\nabla \Psi_{\sigma}^{\dagger}) \Psi_{\sigma}] \quad (\text{paramagnetische Stromdichte}) \\
&\quad - \frac{e^2}{m} \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger} \Psi_{\sigma} \mathbf{A} \quad (\text{diamagnetische Stromdichte}) \\
&= \mathbf{j}_0 - \frac{e^2}{m} \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger} \Psi_{\sigma} \mathbf{A}_{\text{ext}} = \mathbf{j}_0 + \frac{e}{m} \rho \mathbf{A}_{\text{ext}}. \tag{4.109}
\end{aligned}$$

Die Bezeichnungen „paramagnetisch“ und „diamagnetisch“ geben an, dass diese Terme einen positiven bzw. negativen Beitrag zur magnetischen Suszeptibilität liefern.

Wir suchen die lineare Antwort in $\mathbf{j}$ aufgrund der Störung $\mathbf{A}_{\text{ext}}$. Wir behandeln die beiden Terme in Gl. (4.109) getrennt: Der *zweite* Term $(e/m) \rho \mathbf{A}_{\text{ext}}$ ist explizit von erster Ordnung in $\mathbf{A}_{\text{ext}}$. Daher müssen wir $\rho(\mathbf{r}, t)$ durch die Ladungsdichte $\rho_0(\mathbf{r})$ im Gleichgewicht ohne Störung ersetzen. Wir erhalten den Beitrag

$$\frac{e}{m} \rho_0(\mathbf{r}) \mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) \quad (4.110)$$

zur Stromdichte $\mathbf{j}$.

Der *erste* Term $\mathbf{j}_0$ ist komplizierter. Wir nehmen an, dass im Gleichgewicht ohne Störung kein Strom fließt, also $\mathbf{j}_0 = 0$ für $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0$ im Gleichgewicht. (In einem Supraleiter muss das keine gute Annahme sein.) Wir verwenden die allgemeine Kubo-Formel (4.63). Die Störung $\mathbf{A}_{\text{ext}}$ koppelt an $-\mathbf{j}_0$ und wir suchen die Antwort in $+\mathbf{j}_0$. Also tritt eine $\mathbf{j}_0$ - $\mathbf{j}_0$ -Korrelationsfunktion auf:

$$j_{0\alpha}(\mathbf{r}, t) = - \int d^3 r' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{\beta} C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r}) j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R(t-t') A_{\text{ext},\beta}(\mathbf{r}', t') \quad (4.111)$$

mit der *Strom-Strom-Korrelationsfunktion*

$$C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r}) j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R(t-t') := -i \theta(t-t') \langle [j_{0\alpha}(\mathbf{r}, t), j_{0\beta}(\mathbf{r}', t')] \rangle_0, \quad (4.112)$$

wobei der Mittelwert im Gleichgewicht des ungestörten Systems zu berechnen ist. Im Frequenzraum lautet die Beziehung entsprechend

$$j_{0\alpha}(\mathbf{r}, \omega) = - \int d^3 r' \sum_{\beta} C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r}) j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R(\omega) A_{\text{ext},\beta}(\mathbf{r}', \omega). \quad (4.113)$$

Mit Gl. (4.109) und $\mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, \omega) = (1/i\omega) \mathbf{E}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, \omega)$ folgt

$$\begin{aligned} j_{\alpha}(\mathbf{r}, \omega) &= - \int d^3 r' \sum_{\beta} C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r}) j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R(\omega) \frac{1}{i\omega} E_{\text{ext},\beta}(\mathbf{r}', \omega) + \frac{e}{m} \rho_0(\mathbf{r}) \frac{1}{i\omega} E_{\text{ext},\beta}(\mathbf{r}, \omega) \\ &\stackrel{!}{=} \int d^3 r' \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) E_{\text{ext},\beta}(\mathbf{r}', \omega). \end{aligned} \quad (4.114)$$

Wir können nun die Leitfähigkeit ablesen:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\frac{1}{i\omega} C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r}) j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R(\omega) + \frac{e\rho_0(\mathbf{r})}{i\omega m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.115)$$

Das ist die wichtige *Kubo-Formel für die Leitfähigkeit*. Wir werden sie in Abschnitt 4.6.6 anwenden, um die Leitfähigkeit in Anwesenheit von Störstellen zu berechnen.

4.4 Matsubara-Green-Funktionen

Wie schon angedeutet, lässt sich der in Abschnitt 3.6 für die Temperatur $T = 0$ vorgestellte Green-Funktions-Formalismus unmittelbar auf beliebige Temperaturen verallgemeinern. Dabei werden einfach *Grundzustandserwartungswerte* durch *thermische Mittelwerte* ersetzt. Zum Beispiel wird die retardierte Green-Funktion für $T = 0$,

$$G^R(\nu; t, t') = i \theta(t-t') \langle \text{GZ} | [a_{\nu}(t), a_{\nu'}^{\dagger}(t')]_{\pm} | \text{GZ} \rangle, \quad (4.116)$$

für beliebige Temperaturen T zu

$$G^R(\nu; t, t') = i \theta(t-t') \langle [a_{\nu}(t), a_{\nu'}^{\dagger}(t')]_{\pm} \rangle \quad (4.117)$$

verallgemeinert, wobei $\langle \dots \rangle$ nun den thermischen Gleichgewichtsmittelwert bei der Temperatur T bezeichnet. Dieser ist wie üblich durch $\langle \dots \rangle = Z^{-1} \text{Tr} e^{-\beta H} \dots$ mit der Zustandssumme $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$ gegeben.

Wir könnten also den bekannten Formalismus mit dieser Verallgemeinerung auch für den Fall $T > 0$ verwenden. Er ist aber, wie wir sehen werden, ungünstig für praktische Rechnungen. Eine Vereinfachung ergibt sich aus folgender Erkenntnis: Wir haben gesehen, dass in thermischen Mittelwerten der Operator $e^{-\beta H}$ auftritt. Andererseits wird die Zeitentwicklung durch Operatoren e^{-iHt} beschrieben. Wir sehen, dass die inverse Temperatur β formal wie eine *imaginäre Zeit* erscheint, oder genauer wie der Imaginärteil einer komplexwertigen Zeit. Das kann man ausnutzen, um thermische Mittelwerte in einem Wechselwirkungsbild in der imaginären Zeit auszurechnen. Das Wechselwirkungsbild für reelle Zeiten hat sich als vorteilhaft für Störungsentwicklungen herausgestellt. Wir sind insbesondere an Green-Funktionen oder allgemeiner an Korrelationsfunktionen interessiert.

Die allgemeine retardierte Korrelationsfunktion zweier Observablen A und B lautet, analog zur Green-Funktion in Gl. (4.117),

$$C_{AB}^R(t, t') = -i \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\mp} \rangle, \quad (4.118)$$

im Heisenberg-Bild $\begin{cases} \text{Bosonen} \\ \text{Fermionen} \end{cases}$

wobei $\langle \cdot \rangle$ nun den *thermischen* Mittelwert bei der Temperatur T darstellt. Im Abschnitt zur Lineare-Antwort-Theorie hatten wir C_{AB}^R durch Operatoren im *Wechselwirkungsbild*, nicht im Heisenberg-Bild, ausgedrückt. Das liegt daran, dass wir dort explizit in erster Ordnung in der Störung V gerechnet haben. Da V explizit auftrat, wurde die übrige Zeitentwicklung durch H_0 beschrieben, also im Wechselwirkungsbild. Die gegenwärtige Definition mit Operatoren im Heisenberg-Bild ist die allgemeinere.

Es ist

$$C_{AB}^R(t, t') = i \theta(t - t') (C_{AB}(t - t') \mp C_{BA}(t' - t)) \quad (4.119)$$

mit

$$\begin{aligned} C_{AB}(t - t') &:= -\langle A(t) B(t') \rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H} A(t) B(t') \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H} \underbrace{U_I(0, t) A_I(t) U_I(t, t') B_I(t') U_I(t', 0)}_{\text{im Wechselwirkungsbild}}. \end{aligned} \quad (4.120)$$

Jetzt müssten wir in der Störungstheorie für $H = H_0 + V$ die Operatoren $e^{-\beta H}$, $U_I(0, t)$, $U_I(t, t')$ und $U_I(t', 0)$ nach V entwickeln. Das würde auf eine vierfache Störungsreihe führen und wäre daher ziemlich unübersichtlich. Die Theorie vereinfacht sich, wenn wir die Idee mit der imaginären Zeit ausnutzen.

4.4.1 Imaginäre-Zeit-Formalismus

Formal ersetzen wir $t \rightarrow -i\tau$, $\tau \in \mathbb{R}$. Das Heisenberg-Bild in imaginärer Zeit ist definiert durch

$$A_H(\tau) = e^{H\tau} A e^{-H\tau} \quad (4.121)$$

wird weggelassen

und das Wechselwirkungsbild für $H = H_0 + V$ durch

$$A_I(\tau) = e^{H_0\tau} A e^{-H_0\tau} \quad (4.122)$$

$$\Rightarrow A(\tau) = U_I(0, \tau) A_I(\tau) U_I(\tau, 0) \quad (4.123)$$

mit, für zeitunabhängige Operatoren H und H_0 ,

$$U_I(\tau, \tau') = e^{H_0\tau} e^{-H(\tau-\tau')} e^{-H_0\tau'}. \quad (4.124)$$

Dies folgt alles aus den Beziehungen für reelle Zeiten mittels der Ersetzung $t \rightarrow -i\tau$. Außerdem ergibt sich eine Bewegungsgleichung für U_I :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} U_I(\tau, \tau') = e^{H_0\tau} \underbrace{(H_0 - H)}_{= -V} e^{-H(\tau-\tau')} e^{-H_0\tau'} = -V_I(\tau) U_I(\tau, \tau') \quad (4.125)$$

mit der Lösung, immer analog zum Formalismus für reelle Zeiten,

$$\begin{aligned} U_I(\tau, \tau') &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-1)^n \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \cdots \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_n T_{\tau} V_I(\tau_1) \cdots V_I(\tau_n) \\ &=: T_{\tau} \exp \left(- \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 V_I(\tau_1) \right), \end{aligned} \quad (4.126)$$

wobei T_{τ} der Zeitordnungsoperator in τ ist:

$$T_{\tau} A(\tau) B(\tau') := \begin{cases} A(\tau) B(\tau') & \text{für } \tau > \tau', \\ \pm B(\tau') A(\tau) & \text{für } \tau' > \tau. \end{cases} \quad (4.127)$$

Der Nutzen bei der Berechnung von thermischen Mittelwerten ergibt sich nun aus der Beziehung

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} &= e^{-\beta H_0} \underbrace{e^{\beta H_0} e^{-(\beta-0)H} e^{-0H_0}}_{= e^{-\beta H_0} U_I(\beta, 0)} \\ &= e^{-\beta H_0} U_I(\beta, 0) \\ &= e^{-\beta H_0} T_{\tau} \exp \left(- \int_0^{\beta} d\tau_1 V_I(\tau_1) \right). \end{aligned} \quad (4.128)$$

Wir betrachten nun den *zeitgeordneten* Mittelwert (das Vorzeichen ist Konvention)

$$- \langle T_{\tau} A(\tau) B(\tau') \rangle = - \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H} T_{\tau} A(\tau) B(\tau'). \quad (4.129)$$

Bis auf die Zeitordnung erhalten wir diesen Ausdruck aus der eigentlich interessierenden Korrelationsfunktion $C_{AB}(t - t')$ aus Gl. (4.120) durch die Ersetzung $t \rightarrow -i\tau$, $t' \rightarrow -i\tau'$. Diese Beobachtung kann hier aber nur als qualitative Motivation dienen. Wir werden noch zeigen müssen, dass uns die Berechnung von $-\langle T_{\tau} A(\tau) B(\tau') \rangle$ wirklich bei der Bestimmung der interessierenden Korrelationsfunktion hilft.

Für $\tau > \tau'$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \dots &= - \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} \underbrace{U_I(\beta, 0) U_I(0, \tau)}_{\text{Einfügungen von } V_I \text{ bei Zeiten zwischen } \tau \text{ und } \beta} A_I(\tau) U_I(\tau, \tau') B_I(\tau') U_I(\tau', 0) \\ &= - \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} U_I(\beta, \tau) A_I(\tau) U_I(\tau, \tau') B_I(\tau') U_I(\tau', 0) \\ &= - \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} \underbrace{T_{\tau} \exp \left(- \int_{\tau}^{\beta} d\tau_1 V_I(\tau_1) \right)}_{\text{Einfügungen von } V_I \text{ bei Zeiten zwischen } \tau \text{ und } \beta} A_I(\tau) T_{\tau} \exp \left(- \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_2 V_I(\tau_2) \right) \\ &\quad \times B_I(\tau') T_{\tau} \exp \left(- \int_0^{\tau'} d\tau_3 V_I(\tau_3) \right) \\ &= - \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} T_{\tau} \left[\exp \left(- \int_0^{\beta} d\tau_1 V_I(\tau_1) \right) A_I(\tau) B_I(\tau') \right]. \end{aligned} \quad (4.130)$$

Es ist zu beachten, dass sich das Integral im letzten Ausdruck über das gesamte Intervall $[0, \beta]$ erstreckt. Der Zeitordnungsoperator T_{τ} sorgt dafür, dass die Einfügungen von V_I sowie $A_I(\tau)$ und $B_I(\tau')$ in von rechts nach links aufsteigender zeitlicher Reihenfolge sortiert werden. Der Ausdruck ist also tatsächlich identisch zum darüber stehenden.

Wir erkennen hier nun den Vorteil des Formalismus: Die Störung V_I tritt nur noch an *einer* Stelle auf. Die Störungsentwicklung ergibt sich als Taylor-Entwicklung der zeitgeordneten Exponentialfunktion. Diese können wir noch kompakter schreiben:

$$\dots = - \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} T_{\tau} [U_I(\beta, 0) A_I(\tau) B_I(\tau')]. \quad (4.131)$$

Für $\tau' > \tau$ erhalten wir entsprechend

$$\begin{aligned} -\langle T_\tau A(\tau) B(\tau') \rangle &= \mp \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} T_\tau [U_I(\beta, 0) B_I(\tau') A_I(\tau)] \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} T_\tau [U_I(\beta, 0) A_I(\tau) B_I(\tau')] \end{aligned} \quad (4.132)$$

(das Vorzeichen $\pm$ verschwindet wieder, da wir A, B zweimal vertauschen). Also gilt allgemein

$$\begin{aligned} -\langle T_\tau A(\tau) B(\tau') \rangle &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} T_\tau [U_I(\beta, 0) A_I(\tau) B_I(\tau')] \\ &= -\frac{\text{Tr} e^{-\beta H_0} T_\tau [U_I(\beta, 0) A_I(\tau) B_I(\tau')]}{\text{Tr} e^{-\beta H_0} U_I(\beta, 0)} \\ &= -\frac{\langle T_\tau [U_I(\beta, 0) A_I(\tau) B_I(\tau')] \rangle_0^{\text{bzgl. } H_0}}{\langle U_I(\beta, 0) \rangle_0}. \end{aligned} \quad (4.133)$$

Dieses Ergebnis ist vielversprechend, da wir einen Gleichgewichts-Mittelwert bezüglich des *vollen* Hamiltonians H , vgl. Gl. (4.129), durch Gleichgewichts-Mittelwerte bezüglich des *ungestörten* Hamiltonians H_0 ausgedrückt haben. Letztere können wir i. A. berechnen.

Der betrachtete Mittelwert wird als *Matsubara-Korrelationsfunktion* bezeichnet, oft auch als *Matsubara-Green-Funktion*:

$$\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') := -\langle T_\tau A(\tau) B(\tau') \rangle. \quad (4.134)$$

Wir untersuchen nun die mathematischen Eigenschaften dieser Funktion:

- (a) $\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') \equiv \mathcal{C}_{AB}(\tau - \tau')$ hängt nur von $\tau - \tau'$ ab.

Das ist nicht überraschend, weil H nicht von $t = -i\tau$ abhängt. Wir geben hier trotzdem den Beweis:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') &\stackrel{\tau \geq \tau'}{=} -\frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H} e^{\tau H} A e^{-\tau H} e^{\tau' H} B e^{-\tau' H} \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H} e^{-\tau' H} e^{\tau H} A e^{-\tau H} e^{\tau' H} B \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H} e^{H(\tau - \tau')} A e^{-H(\tau - \tau')} B \\ &= \mathcal{C}_{AB}(\tau - \tau') \end{aligned} \quad (4.135)$$

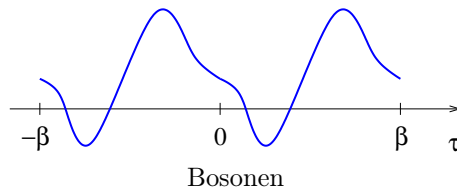
und analog für $\tau' > \tau$.

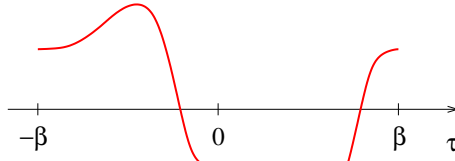
- (b) Der Ausdruck (4.135) zeigt, dass wir für große $\tau - \tau'$ im Allgemeinen divergente Ausdrücke erhalten, da das Spektrum von H nach oben unbeschränkt ist. Für positive $\tau - \tau'$ divergiert dann $e^{H(\tau - \tau')}$ und für negative $\tau - \tau'$ divergiert $e^{-H(\tau - \tau')}$. Um Konvergenz zu gewährleisten, beschränken wir $\tau - \tau'$ auf das Intervall $[-\beta, \beta]$. Dann fällt der Faktor $e^{-\beta H}$ für große Eigenenergien schnell genug ab, um die Divergenz zu verhindern.

- (c) Es gilt

$$\mathcal{C}_{AB}(\tau) = \pm \mathcal{C}_{AB}(\tau + \beta) \quad (4.136)$$

für $-\beta < \tau < 0$. Das obere (untere) Vorzeichen gilt wieder für Bosonen (Fermionen). Der Beweis ist nicht schwierig.





Fermionen

- (d) Da die Funktion $\mathcal{C}_{AB}(\tau)$ nur auf dem endlichen Intervall $[-\beta, \beta]$ definiert ist, ist ihre Fourier-Transformierte diskret. Man definiert sie durch

$$\mathcal{C}_{AB}(n) := \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau e^{i\pi n\tau/\beta} \mathcal{C}_{AB}(\tau), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (4.137)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \mathcal{C}_{AB}(n) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 d\tau e^{i\pi n\tau/\beta} \mathcal{C}_{AB}(\tau) + \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\pi n\tau/\beta} \mathcal{C}_{AB}(\tau) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\pi n\tau/\beta} e^{-i\pi n} \underbrace{\mathcal{C}_{AB}(\tau - \beta)}_{\pm \mathcal{C}_{AB}(\tau)} + \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\pi n\tau/\beta} \mathcal{C}_{AB}(\tau) \\ &= \frac{1}{2} (1 \pm e^{-i\pi n}) \int_0^{\beta} d\tau e^{i\pi n\tau/\beta} \mathcal{C}_{AB}(\tau) \\ &= \int_0^{\beta} d\tau e^{i\pi n\tau/\beta} \mathcal{C}_{AB}(\tau) \quad \text{mit } n \begin{cases} \text{gerade f\"ur Bosonen,} \\ \text{ungerade f\"ur Fermionen.} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.138)$$

Die übliche Schreibweise lautet

$$\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n\tau} \mathcal{C}_{AB}(\tau) \quad (4.139)$$

mit den *Matsubara-Frequenzen*

$$\omega_n = \begin{cases} \frac{2n\pi}{\beta} & \text{für Bosonen,} \\ \frac{(2n+1)\pi}{\beta} & \text{für Fermionen,} \end{cases} \quad (4.140)$$

wobei $n \in \mathbb{Z}$ ist. Man nennt auch $i\omega_n$ Matsubara-Frequenzen. Wir werden gleich sehen, warum wir die imaginäre Einheit i explizit in das Argument von $\mathcal{C}_{AB}$ schreiben. Die Umkehrung der Fourier-Transformation auf Matsubara-Frequenzen lautet

$$\mathcal{C}_{AB}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n\tau} \mathcal{C}_{AB}(i\omega_n) \equiv \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n\tau} \mathcal{C}_{AB}(i\omega_n), \quad (4.141)$$

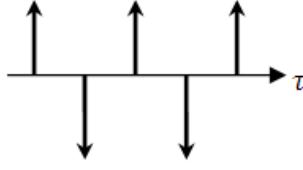
sowohl für Bosonen als auch für Fermionen.

Beachte, dass das Integral $\int_0^{\beta} d\tau \dots$ im fermionischen Fall nicht eindeutig ist, falls sich eine δ -Distribution bei $\tau = 0$ (und dann wegen Eigenschaft (c) auch bei $\tau = \beta$) befindet. Wir vereinbaren, eine δ -Distribution bei $\tau = 0$ vollständig zu berücksichtigen und bei $\tau = \beta$ gar nicht, d.h. wir verschieben die Singularitäten um ein kleines $\varepsilon > 0$. Z. B. für

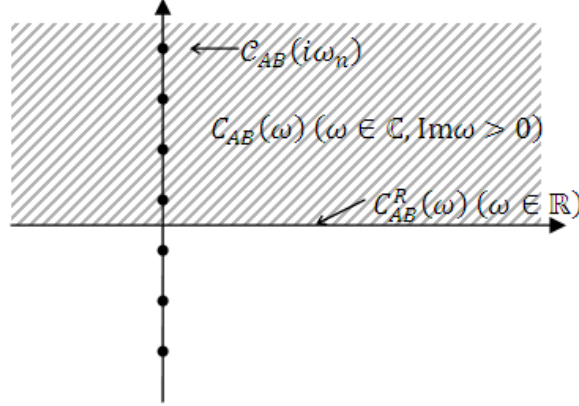
$$\mathcal{C}_{AB}(\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m \delta(\tau - m\beta) \quad (\text{fermionisch}) \quad (4.142)$$

vereinbaren wir

$$\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n\tau} \delta(\tau - 0^+) = \beta. \quad (4.143)$$



Wir können jetzt erkennen, wieso der Imaginäre-Zeit-Formalismus so nützlich ist: Die Matsubara-Funktion $\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n)$ und die retardierte Funktion $C_{AB}^R(\omega)$ sind tatsächlich *dieselbe* holomorphe Funktion eines komplexen Arguments ω in der oberen Halbebene ($\text{Im}\omega \geq 0$), nur jeweils ausgewertet für spezielle Werte von ω . Für Fermionen sind diese speziellen Werte hier skizziert:



Mit anderen Worten: Wir erhalten $\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n)$ und $C_{AB}^R(\omega)$ aus derselben Funktion durch Auswertung an den diskreten, imaginären Matsubara-Frequenzen bzw. auf der reellen Achse. Dass das möglich ist, ist plausibel, da in der Definition von $\mathcal{C}_{AB}$ gegenüber C_{AB}^R im Wesentlichen t durch $-i\tau$ ersetzt wurde. Praktisch ist das Ganze, weil wir nun aus der Matsubara-Funktion durch *analytische Fortsetzung* die retardierte Funktion erhalten können:

$$C_{AB}^R(\omega) = \mathcal{C}_{AB}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta), \quad \eta \rightarrow 0^+. \quad (4.144)$$

Beweis: Wir hatten

$$C_{AB}^R(t) = -i \theta(t) \langle [A(t), B(0)]_{\mp} \rangle \quad (4.145)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow C_{AB}^R(\omega) &= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t - \eta t} \langle [A(t), B(0)]_{\mp} \rangle \\ &= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t - \eta t} \langle e^{iHt} A e^{-iHt} B \mp B e^{iHt} A e^{-iHt} \rangle. \end{aligned} \quad (4.146)$$

Sei nun $\{|m\rangle\}$ eine Orthonormal-Eigenbasis von H mit Eigenenergien E_m . Dann ist

$$\begin{aligned} C_{AB}^R(\omega) &= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t - \eta t} \sum_{mm'} \frac{1}{Z} \left[e^{-\beta E_m} e^{iE_m t} \langle m|A|m'\rangle e^{-iE_{m'} t} \langle m'|B|m\rangle \right. \\ &\quad \left. \mp e^{-\beta E_{m'}} \langle m'|B|m\rangle e^{iE_m t} \langle m|A|m'\rangle e^{-iE_{m'} t} \right] \\ &= +i \frac{1}{Z} \sum_{mm'} \frac{\langle m|A|m'\rangle \langle m'|B|m\rangle}{i\omega + iE_m - iE_{m'} - \eta} (e^{-\beta E_m} \mp e^{-\beta E_{m'}}) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{mm'} \frac{\langle m|A|m'\rangle \langle m'|B|m\rangle}{\omega + E_m - E_{m'} + i\eta} (e^{-\beta E_m} \mp e^{-\beta E_{m'}}) \end{aligned} \quad (4.147)$$

(Spektraldarstellung von C_{AB}^R). Andererseits ist, für $\tau > 0$,

$$\mathcal{C}_{AB}(\tau) = -\frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H} e^{\tau H} A e^{-\tau H} B$$

$$= -\frac{1}{Z} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} e^{\tau E_m} \langle m|A|m'\rangle e^{-\tau E_{m'}} \langle m'|B|m\rangle \quad (4.148)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow C_{AB}(i\omega_n) &= -\frac{1}{Z} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} e^{\tau(E_m - E_{m'})} \langle m|A|m'\rangle \langle m'|B|m\rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} \overbrace{e^{i\omega_n \beta}}^{=\pm 1} \frac{e^{\beta(E_m - E_{m'})} - 1}{i\omega_n + E_m - E_{m'}} \langle m|A|m'\rangle \langle m'|B|m\rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{mm'} e^{-\beta E_m} \frac{\langle m|A|m'\rangle \langle m'|B|m\rangle}{i\omega_n + E_m - E_{m'}} (e^{-\beta E_m} \mp e^{-\beta E_{m'}}). \end{aligned} \quad (4.149)$$

Offenbar erhalten wir hieraus $C_{AB}^R(\omega)$ durch die Ersetzung $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$, wie behauptet.

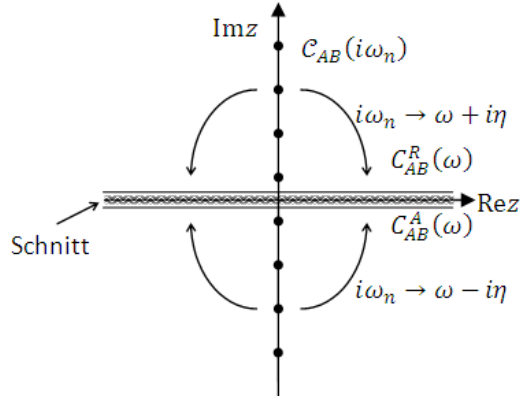
Analog erhalten wir für die avancierte Funktion

$$C_{AB}^A(\omega) = C_{AB}(i\omega_n \rightarrow \omega - i\eta). \quad (4.150)$$

C_{AB} , C_{AB}^R und C_{AB}^A sind Spezialfälle der Funktion

$$C_{AB}(z) := \frac{1}{Z} \sum_{mm'} \frac{\langle m|A|m'\rangle \langle m'|B|m\rangle}{z + E_m - E_{m'}} (e^{-\beta E_m} \mp e^{-\beta E_{m'}}) \quad (4.151)$$

mit $z \in \mathbb{C}$. Diese Funktion ist holomorph in der oberen und unteren Halbebene, hat aber Singularitäten für $z = E_{m'} - E_m \in \mathbb{R}$. Für wechselwirkende Systeme findet man typischerweise einen *Schnitt* auf der reellen Achse, weil zu $C_{AB}(z)$ viele Eigenenergien E_m beitragen, die ein kontinuierliches Spektrum bilden.



4.4.2 Einteilchen-Matsubara-Green-Funktionen

Ein wichtiger Fall ist die Einteilchen-Green-Funktion

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}\sigma\tau, \mathbf{r}'\sigma'\tau') := -\langle T_\tau \Psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', \tau') \rangle \quad (4.152)$$

bzw.

$$\mathcal{G}(\nu\tau, \nu'\tau') := -\langle T_\tau c_\nu(\tau) c_{\nu'}^\dagger(\tau') \rangle. \quad (4.153)$$

Für *wechselwirkungsfreie* Teilchen mit zeitunabhängigem Hamiltonian erhalten wir mit $H = H_0 = \sum_\nu \xi_\nu c_\nu^\dagger c_\nu$:

$$c_\nu(\tau) = e^{\tau H_0} c_\nu e^{-\tau H_0} = e^{-\xi_\nu \tau} c_\nu, \quad (4.154)$$

$$c_\nu^\dagger(\tau) = e^{\tau H_0} c_\nu^\dagger e^{-\tau H_0} = e^{\xi_\nu \tau} c_\nu^\dagger. \quad (4.155)$$

Es folgt $\mathcal{G}_0(\nu\tau, \nu'\tau') = \delta_{\nu\nu'} \mathcal{G}_0(\nu, \tau - \tau')$ mit

$$\mathcal{G}_0(\nu, \tau - \tau') \equiv -\langle T_\tau c_\nu(\tau) c_\nu^\dagger(\tau') \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= -\theta(\tau - \tau') \langle c_\nu(\tau) c_\nu^\dagger(\tau') \rangle \mp \theta(\tau' - \tau) \langle c_\nu^\dagger(\tau') c_\nu(\tau) \rangle \\
&= -e^{-\xi_\nu(\tau - \tau')} [\theta(\tau - \tau') \langle c_\nu c_\nu^\dagger \rangle \pm \theta(\tau' - \tau) \langle c_\nu^\dagger c_\nu \rangle] \\
&= -e^{-\xi_\nu(\tau - \tau')} [\theta(\tau - \tau') [1 \pm n(\xi_\nu)] \pm \theta(\tau' - \tau) n(\xi_\nu)], \tag{4.156}
\end{aligned}$$

wobei $n(\xi_\nu) = n_B(\xi_\nu)$ für Bosonen und $n(\xi_\nu) = n_F(\xi_\nu)$ für Fermionen ist. Hieraus erhalten wir

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_0(\nu, i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}_0(\nu, \tau) = -[1 \pm n(\xi_\nu)] \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} e^{-\xi_\nu \tau} \\
&= -[1 \pm n(\xi_\nu)] \frac{e^{i\omega_n \beta} e^{-\beta \xi_\nu} - 1}{i\omega_n - \xi_\nu} = \left[1 \pm \frac{1}{e^{\beta \xi_\nu} \mp 1} \right] \frac{1 \mp e^{-\beta \xi_\nu}}{i\omega_n - \xi_\nu} \\
&= \frac{e^{\beta \xi_\nu} (1 \mp e^{-\beta \xi_\nu})}{e^{\beta \xi_\nu} \mp 1} \frac{1}{i\omega_n - \xi_\nu} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_\nu} \tag{4.157}
\end{aligned}$$

sowohl für Bosonen als auch für Fermionen (beachte aber die unterschiedlichen Matsubara-Frequenzen).

Wir erhalten durch die analytische Fortsetzung $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$ die schon bekannte freie retardierte Green-Funktion

$$G_0^R(\nu, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_\nu + i\eta}. \tag{4.158}$$

4.4.3 Rechnungen mit Matsubara-Green-Funktionen

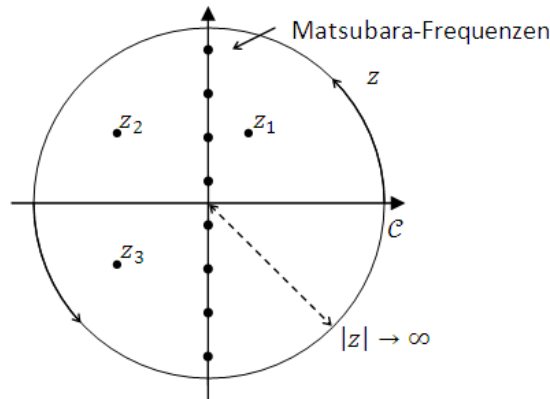
In praktischen Rechnungen treten oft Summen über Matsubara-Frequenzen auf. In diesem Abschnitt verwenden wir Methoden aus der Funktionentheorie, v. a. den Residuensatz, um solche Frequenz-Summen zu berechnen. Wir formulieren die Methode ganz allgemein für Summen der Form

$$\sum_{i\omega_n} g(i\omega_n), \tag{4.159}$$

wobei $i\omega_n$ bosonische oder fermionische Matsubara-Frequenzen sein können.

(a) Isolierte Singularitäten

Wir beginnen mit dem Fall, dass $g(z)$ isolierte Singularitäten für komplexe Argumente $z_1, z_2, \dots$ aufweist. Dies können allgemein Pole beliebiger Ordnung oder wesentliche Singularitäten sein. Wenn g z. B. ein Produkt von ungestörten Green-Funktionen $1/(z - \xi_\nu)$ ist, hat g Pole erster Ordnung an den Stellen $z = \xi_\nu$. Wir betrachten die folgende Kontur $\mathcal{C}$:



Für $|z| \rightarrow \infty$ umschließt $\mathcal{C}$ alle Singularitäten von g und alle Matsubara-Frequenzen. Nun bemerken wir, dass die Verteilungsfunktionen

$$n(z) = \frac{1}{e^{\beta z} \mp 1} = \begin{cases} n_B(z) & \text{für Bosonen,} \\ n_F(z) & \text{für Fermionen.} \end{cases} \tag{4.160}$$

Pole bei den Matsubara-Frequenzen (und nur dort) haben. Also hat $n(z)g(z)$ Singularitäten bei den $i\omega_n$ und bei $z_1, z_2, \dots$. Der Residuensatz lautet nun

$$\oint_{\mathcal{C}} dz n(z) g(z) = 2\pi i \sum_{\text{Sing. } z_j \text{ in } \mathcal{C}} \text{Res}_{z_j} [n(z) g(z)]. \quad (4.161)$$

In Worten: Das Integral über $\mathcal{C}$ ist $2\pi i$ mal der Summe der Residuen aller eingeschlossenen isolierten Singularitäten. Was ist das Residuum einer Singularität? Hat $f(z)$ eine isolierte Singularität bei z_0 , so können wir $f(z)$ um z_0 entwickeln (*Laurent-Reihe*, Verallgemeinerung der Taylor-Reihe):

$$f(z) = \dots + a_{-1}(z - z_0)^{-1} + a_0 \underbrace{(z - z_0)^0}_{=1} + a_1(z - z_0)^1 + a_2(z - z_0)^2 + \dots \quad (4.162)$$

Dann ist der Koeffizient a_{-1} das Residuum. Wenn die Singularität ein Pol erster Ordnung ist, fallen alle höheren Koeffizienten $a_{-2}, a_{-3}, \dots$ weg. In diesem Fall gilt

$$a_{-1} = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) f(z). \quad (4.163)$$

Alternativ können wir das Residuum als Integral ausrechnen:

$$\text{Res}_{z_0} f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\substack{\uparrow \\ \text{um } z_0 \text{ (und keine anderen Singularitäten)}}} dz f(z). \quad (4.164)$$



Was sind nun die Residuen der Pole von n_F und n_B ? Wir finden

$$\begin{aligned} \text{Res}_{i\omega_n} n(z) &= \lim_{z \rightarrow i\omega_n} (z - i\omega_n) \frac{1}{e^{\beta z} \mp 1} \\ &\stackrel{(\text{L'Hospital})}{=} \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{1}{\frac{\partial}{\partial z}(e^{\beta z} \mp 1)} \\ &= \lim_{z \rightarrow i\omega_n} \frac{1}{\beta e^{\beta z}} = \frac{1}{\beta e^{\beta i\omega_n z}} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\beta \exp(2\pi n i)} = \frac{1}{\beta} & \text{für Bosonen,} \\ \frac{1}{\beta \exp((2n+1)\pi i)} = -\frac{1}{\beta} & \text{für Fermionen.} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.165)$$

Wir folgern

$$\begin{aligned} \oint_{\mathcal{C}} dz n(z) g(z) &= 2\pi i \sum_{i\omega_n} [\text{Res}_{i\omega_n} n(z)] g(i\omega_n) + 2\pi i \sum_{\text{Sing. } z_j \text{ von } g} n(z_j) \text{Res}_{z_j} g(z) \\ &= \pm \frac{2\pi i}{\beta} \sum_{i\omega_n} g(i\omega_n) + 2\pi i \sum_{\text{Sing. } z_j \text{ von } g} n(z_j) \text{Res}_{z_j} g(z). \end{aligned} \quad (4.166)$$

Fällt aber $n(z)g(z)$ für $|z| \rightarrow \infty$ schneller ab als $1/|z|$, so ist

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} \oint_{\mathcal{C}} dz n(z) g(z) = 0, \quad (4.167)$$

weil die Kontur ins Unendliche geschoben wird, wo der Integrand klein ist. Es folgt dann

$$\sum_{i\omega_n} g(i\omega_n) = \mp \beta \sum_{\text{Sing. } z_j \text{ von } g} n(z_j) \text{Res}_{z_j} g(z). \quad (4.168)$$

Wir haben folgenden Trick verwendet: Wir haben $g(z)$ mit einer Funktion, nämlich $n(z)$, multipliziert, die Pole gerade dort hat, wo wir g benötigen, nämlich bei den Matsubara-Frequenzen. Dann pickt der Residuensatz gerade diese Punkte aus einem Kontur-Integral heraus, das trivial ist, nämlich Null. Es bleiben als nicht triviale Beiträge nur die übrigen Residuen, die von $g(z)$ stammen. Dies sind i. A. wenige, d. h. die Summe auf der rechten Seite enthält wenige Summanden.

Als Beispiel betrachten wir die häufig auftretende Summe

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - \xi} \frac{1}{i\omega_n - \xi'} \quad (4.169)$$

mit reellen Energien $\xi \neq \xi'$. Hier ist

$$g(z) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{z - \xi} \frac{1}{z - \xi'}. \quad (4.170)$$

Diese Funktion hat Pole erster Ordnung bei $z = \xi$ und $z = \xi'$ mit den Residuen

$$\text{Res}_\xi g(z) = \lim_{z \rightarrow \xi} (z - \xi) \frac{1}{\beta} \frac{1}{z - \xi} \frac{1}{z - \xi'} = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\xi - \xi'} \quad (4.171)$$

und analog

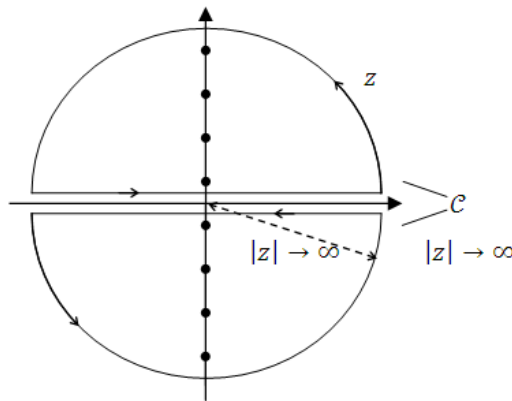
$$\text{Res}_{\xi'} g(z) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\xi' - \xi}. \quad (4.172)$$

Also folgt aus Gl. (4.168) das Ergebnis

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - \xi} \frac{1}{i\omega_n - \xi'} &= \mp \beta \left[n(\xi) \frac{1}{\beta} \frac{1}{\xi - \xi'} + n(\xi') \frac{1}{\beta} \frac{1}{\xi' - \xi} \right] \\ &= \mp \frac{n(\xi) - n(\xi')}{\xi - \xi'}. \end{aligned} \quad (4.173)$$

(b) Schnitte

Oft treten Funktionen $g(z)$ auf, die neben isolierten Singularitäten auch *Schnitte* aufweisen. Ein Beispiel ist die volle Green-Funktion $G(z)$ für ein wechselwirkendes Vielteilchensystem. $G(z)$ ist holomorph für $\text{Im } z > 0$ und für $\text{Im } z < 0$, hat aber i. A. einen Schnitt auf der (oder auf Teilen der) reellen Achse. Der Residuensatz gilt nur, wenn die Kontur keine Singularitäten oder Schnitte enthält. Daher wählen wir sie wie folgt:



Jetzt fällt $\oint_C dz n(z)g(z)$ für $|z| \rightarrow \infty$ nicht weg, sondern es bleiben die Beiträge von der reellen Achse übrig, da dort der Integrand i. A. nicht klein ist. Also erhalten wir

$$\oint_C dz n(z)g(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega + i\eta) g(\omega + i\eta) + \int_{\infty}^{-\infty} d\omega n(\omega - i\eta) g(\omega - i\eta)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) [g(\omega + i\eta) - g(\omega - i\eta)]. \quad (4.174)$$

Der zweite Schritt gilt für Fermionen immer, aber für Bosonen müssen wir aufpassen, da $n_B(z)$ einen Pol bei $z = 0$ hat. Die Gleichung ist auch für Bosonen korrekt, falls $\lim_{\eta \rightarrow 0^+} [g(i\eta) - g(-i\eta)] = 0$ gilt. Das ist in praktisch auftretenden Rechnungen i. A. der Fall und wir nehmen es jetzt an.

Nach dem Residuensatz gilt weiterhin

$$\oint_C dz n(z) g(z) = \pm \frac{2\pi i}{\beta} \sum_{i\omega_n} g(i\omega_n) + 2\pi i \sum_{\text{Sing. } z_j \text{ von } g} n(z_j) \text{Res}_{z_j} g(z). \quad (4.175)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \sum_{i\omega_n} g(i\omega_n) &= \pm \frac{\beta}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) [g(\omega + i\eta) - g(\omega - i\eta)] \\ &\mp \beta \sum_{\text{Sing. } z_j \text{ von } g} n(z_j) \text{Res}_{z_j} g(z). \end{aligned} \quad (4.176)$$

Wir erhalten also den schon bekannten Beitrag von den Singularitäten von g und einen neuen vom Schnitt auf der reellen Achse.

Beispiel: Fourier-Transformation der vollen elektronischen Green-Funktion in der imaginären Zeit,

$$\mathcal{G}(\nu, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\nu, i\omega_n). \quad (4.177)$$

In diesem Fall ist

$$g(z) = \frac{1}{\beta} e^{-z\tau} G(\nu, z). \quad (4.178)$$

Hier ist ein Problem verborgen: Unsere Herleitung hatte vorausgesetzt, dass $n(z)g(z) = n_F(z)g(z)$ für $|z| \rightarrow \infty$ hinreichend schnell abfällt. Hier enthält dieses Produkt den Faktor

$$n_F(z) e^{-z\tau} = \frac{e^{-z\tau}}{e^{\beta z} + 1}. \quad (4.179)$$

Ist nun $-\beta < \tau < 0$, so folgt

$$n_F(z) e^{-z\tau} \cong e^{-z\tau} \rightarrow 0 \quad \text{für } \text{Re } z \rightarrow -\infty, \quad (4.180)$$

$$n_F(z) e^{-z\tau} \cong e^{-(\beta+\tau)z} \rightarrow 0 \quad \text{für } \text{Re } z \rightarrow +\infty, \quad (4.181)$$

also ist der Grenzübergang $|z| \rightarrow \infty$ harmlos, solange dabei $\text{Re } z \rightarrow \pm\infty$ geht. Der Spezialfall $|z| \rightarrow \infty$ auf der imaginären Achse ist dadurch noch nicht abgedeckt. Hier oszilliert $n_F(z)g(z)$ als Funktion von z . Es bleibt zu zeigen, dass das Konturintegral dennoch konvergiert. Das führen wir hier nicht durch. Andererseits ist für $0 < \tau < \beta$

$$n_F(z) e^{-z\tau} \cong e^{-z\tau} \rightarrow \infty \quad \text{für } \text{Re } z \rightarrow -\infty, \quad (4.182)$$

$$n_F(z) e^{-z\tau} \cong e^{-(\beta+\tau)z} \rightarrow 0 \quad \text{für } \text{Re } z \rightarrow +\infty. \quad (4.183)$$

Für diesen Fall fällt also $n_F(z)g(z)$ überhaupt nicht ab, sondern wächst zumindest in bestimmten Richtungen in der komplexen z -Ebene exponentiell an (der zusätzliche Faktor $G(\nu, z)$ ist eine algebraische Funktion von z und ändert nichts an diesem Ergebnis). Wir müssen uns daher auf das Intervall $-\beta < \tau < 0$ beschränken. Für $0 < \tau < \beta$ können wir dann $\mathcal{G}(\nu, \tau)$ aber leicht mittels Gl. (4.136) erhalten.

Wir hatten gesehen, dass $G(\nu, z)$ einen Schnitt auf der reellen Achse hat. Damit hat auch $g(z)$ einen Schnitt auf der reellen Achse. $g(z)$ hat aber keine isolierten Singularitäten. Also ist nach Gl. (4.176)

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\nu, i\omega_n) = \frac{\beta}{2\pi i} \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) e^{-\omega \tau} [G(\nu, \omega + i\eta) - G(\nu, \omega - i\eta)]. \quad (4.184)$$

Die Ausdrücke in den eckigen Klammern sind gerade die retardierte und avancierte Green-Funktion. Also folgt

$$\begin{aligned}
\ldots &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) e^{-\omega\tau} [G^R(\nu, \omega) - \underbrace{G^A(\nu, \omega)}_{= G^R(\nu, \omega)^*}] \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n_F(\omega) e^{-\omega\tau} 2i \operatorname{Im} G^R(\nu, \omega) \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_F(\omega) e^{-\omega\tau} \underbrace{A(\nu, \omega)}_{\text{Spektralfunktion}}. \tag{4.185}
\end{aligned}$$

Die Spektralfunktion A ist offenbar proportional zur Differenz der Werte von $G(\nu, z)$ für komplexe Frequenzen z knapp oberhalb und knapp unterhalb der reellen Achse. A beschreibt also die Unstetigkeit von G auf der reellen Achse.

Das Ergebnis können wir ausnutzen, um die mittlere Besetzungszahl eines Einteilchenzustandes $|\nu\rangle$ auszudrücken. Es gilt

$$\mathcal{G}(\nu, \tau) = -\langle T_\tau c_\nu(\tau) c_\nu^\dagger(0) \rangle \tag{4.186}$$

$$\Rightarrow \mathcal{G}(\nu, 0^-) = + \underbrace{\langle c_\nu^\dagger(0) c_\nu(0) \rangle}_{\text{Besetzungszahl}} = \langle c_\nu^\dagger c_\nu \rangle. \tag{4.187}$$

$\uparrow$
 oder $-\eta$

Wir erhalten also

$$\langle c_\nu^\dagger c_\nu \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_F(\omega) A(\nu, \omega). \tag{4.188}$$

Die Besetzungszahlen der Einteilchenzustände $|\nu\rangle$ lassen sich *auch im wechselwirkenden System* durch die Fermi-Funktion und die Spektralfunktion ausdrücken. Eine analoge Aussage gilt für Bosonen.

4.4.4 Bewegungsgleichungen

Die Methode der Bewegungsgleichungen überträgt sich direkt auf Matsubara-Funktionen: Mit

$$A(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H} \tag{4.189}$$

ist

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \tau} A(\tau) &= e^{\tau H} H A e^{-\tau H} + e^{\tau H} A (-H) e^{-\tau H} \\
&= e^{\tau H} [H, A] e^{-\tau H} \equiv \underbrace{[H, A](\tau)}_{\text{Heisenberg-Bild}}. \tag{4.190}
\end{aligned}$$

Mit

$$\mathcal{C}_{AB}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau A(\tau) B(\tau') \rangle \tag{4.191}$$

folgt

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{C}_{AB}(\tau - \tau') &= \frac{\partial}{\partial \tau} [\theta(\tau - \tau') \langle A(\tau) B(\tau') \rangle \pm \theta(\tau' - \tau) \langle B(\tau') A(\tau) \rangle] \\
&= \delta(\tau - \tau') [\langle A(\tau) B(\tau') \rangle \mp \langle B(\tau') A(\tau) \rangle] \\
&\quad + \theta(\tau - \tau') \langle [H, A](\tau) B(\tau') \rangle \pm \theta(\tau' - \tau) \langle B(\tau') [H, A](\tau) \rangle \\
&= \delta(\tau - \tau') \langle [A, B]_\mp \rangle + \underbrace{\langle T_\tau [H, A](\tau) B(\tau') \rangle}_{\text{höhere Green-Funktion}}. \tag{4.192}
\end{aligned}$$

Insbesondere erhalten wir für die bosonischen oder fermionischen Einteilchen-Green-Funktionen

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}\tau, \mathbf{r}'\tau') = -\langle T_\tau \Psi(\mathbf{r}, \tau) \Psi^\dagger(\mathbf{r}', \tau') \rangle, \tag{4.193}$$

$$\mathcal{G}(\nu\tau, \nu'\tau') = -\langle T_\tau c_\nu(\tau) c_{\nu'}^\dagger(\tau') \rangle \quad (4.194)$$

die Bewegungsgleichungen

$$-\frac{\partial}{\partial\tau} \mathcal{G}(\mathbf{r}\tau, \mathbf{r}'\tau') = \delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \langle T_\tau [H, \Psi(\mathbf{r})](\tau) \Psi^\dagger(\mathbf{r}', \tau') \rangle, \quad (4.195)$$

$$-\frac{\partial}{\partial\tau} \mathcal{G}(\nu\tau, \nu'\tau') = \delta(\tau - \tau') \delta_{\nu\nu'} + \langle T_\tau [H, c_\nu](\tau) c_{\nu'}^\dagger(\tau') \rangle. \quad (4.196)$$

Z. B. finden wir für wechselwirkungsfreie Elektronen mit dem Hamiltonian

$$H = H_0 = \sum_{\nu\nu'} h_{\nu\nu'} c_\nu^\dagger c_{\nu'} \quad (4.197)$$

die Gleichung

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial\tau} \mathcal{G}_0(\nu\tau, \nu'\tau') &= \delta(\tau - \tau') \delta_{\nu\nu'} - \left\langle T_\tau \sum_{\nu''} h_{\nu\nu''} c_{\nu''}(\tau) c_{\nu'}^\dagger(\tau') \right\rangle \\ &= \delta(\tau - \tau') \delta_{\nu\nu'} + \sum_{\nu''} h_{\nu\nu''} \mathcal{G}_0(\nu'\tau, \nu''\tau') \end{aligned} \quad (4.198)$$

(die Vorzeichen sind korrekt – den Kommutator $[H, c_\nu]$ ausführen!) In Matrixschreibweise lautet diese

$$\left(-\frac{\partial}{\partial\tau} - h \right) \mathcal{G}_0(\tau - \tau') = \delta(\tau - \tau') \mathbb{1}. \quad (4.199)$$

In diesem Sinne ist $\mathcal{G}_0$ die inverse Matrix zu

$$\mathcal{G}_0^{-1} \equiv -\frac{\partial}{\partial\tau} - h. \quad (4.200)$$

Dies ist offenbar ein Differential-Operator. Mathematisch sauberer wird der Zusammenhang nach Fourier-Transformation nach der imaginären Zeit:

$$(i\omega_n \mathbb{1} - h) \mathcal{G}_0(i\omega_n) = \mathbb{1}. \quad (4.201)$$

4.5 Das Wick-Theorem

Wir betrachten nun ein Theorem, das für die Störungstheorie sehr wichtig ist, sie sogar oft erst praktikabel macht. Der Hamiltonian laute wieder $H = H_0 + V$, wobei H_0 wechselwirkungsfreie Bosonen oder Fermionen beschreiben soll. Oft haben wir es mit höheren, aber ungestörten, Green-Funktionen der Form

$$\mathcal{G}_0^{(n)}(\nu_1\tau_1, \dots, \nu_n\tau_n; \nu'_1\tau'_1, \dots, \nu'_n\tau'_n) := (-1)^n \langle T_\tau c_{\nu_1}(\tau_1) \cdots c_{\nu_n}(\tau_n) c_{\nu'_n}^\dagger(\tau'_n) \cdots c_{\nu'_1}^\dagger(\tau'_1) \rangle_0 \quad (4.202)$$

zu tun, worin $\langle \dots \rangle_0$ die Mittelung bezüglich H_0 bezeichnet. In der ungestörten Green-Funktion ist die Zeitentwicklung die von H_0 generierte (Wechselwirkungsbild):

$$c_\nu(\tau) = e^{\tau H_0} c_\nu e^{-\tau H_0}. \quad (4.203)$$

Ausdrücke wie $\mathcal{G}_0^{(n)}$ treten z. B. in Bewegungsgleichungen für Green-Funktionen auf. $\mathcal{G}_0^{(n)}$ ist ein komplizierter Ausdruck, da aber H_0 keine Wechselwirkungen enthält, können wir hoffen, $\mathcal{G}_0^{(n)}$ in Einteilchen-Green-Funktionen zu zerlegen. Das besorgt das folgende *Wick-Theorem*:

Für wechselwirkungsfreie, ununterscheidbare Bosonen oder Fermionen gilt

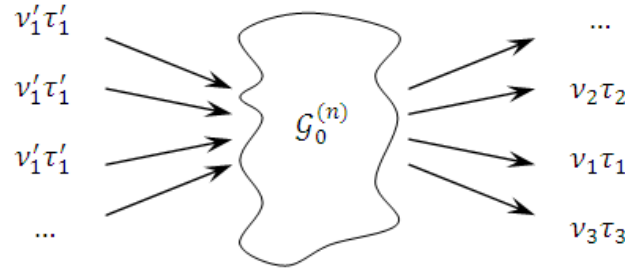
$$\mathcal{G}_0^{(n)}(\nu_1\tau_1, \dots, \nu_n\tau_n; \nu'_1\tau'_1, \dots, \nu'_n\tau'_n) = \left| \begin{array}{ccc} \mathcal{G}_0(\nu_1\tau_1, \nu'_1\tau'_1) & \cdots & \mathcal{G}_0(\nu_1\tau_1, \nu'_n\tau'_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{G}_0(\nu_n\tau_n, \nu'_1\tau'_1) & \cdots & \mathcal{G}_0(\nu_n\tau_n, \nu'_n\tau'_n) \end{array} \right|_{\pm}. \quad (4.204)$$

Die rechte Seite enthält alle möglichen *Paarungen*

$$\mathcal{G}_0(\nu_i \tau_i, \nu'_j \tau'_j) = -\langle T_\tau c_{\nu_i}(\tau_i) c_{\nu'_j}^\dagger(\tau'_j) \rangle_0 \quad (4.205)$$

mit $i, j = 1, \dots, n$. Varianten des Beweises finden sich in allen in der Literaturliste angegebenen Büchern, sind aber nicht sehr instruktiv und werden hier nicht reproduziert. Es ist wichtig zu bemerken, dass andere Korrelationsfunktionen $\mathcal{C}$, z. B. von Spin-Operatoren, meist *kein* analoges Theorem erfüllen. Dies macht Rechnungen für Spin-Systeme sehr viel schwieriger als für Bosonen oder Fermionen. Ebensovienig gilt es für die vollen Green-Funktionen wechselwirkender Systeme.

Anschaulich ist die Aussage des Wick-Theorems plausibel, wenn man sich erinnert, was die Green-Funktion $\mathcal{G}_0^{(n)}$ eigentlich bedeutet: Sie ist die bedingte Wahrscheinlichkeitsamplitude, Teilchen in Zuständen ν_i zu Zeiten τ_i zu finden, wenn Teilchen in Zuständen ν'_i zu Zeiten τ'_i erzeugt wurden. Schematisch können wir dies so darstellen:



Das Wick-Theorem sagt nun aus, dass dies für *wechselwirkungsfreie* und ununterscheidbare Teilchen gleich einer Summe über alle möglichen Paarungen von ein- und auslaufenden Teilchen, unter Beachtung der Antikommutation für Fermionen, ist:

$$\begin{array}{ccccccc} \nu'_1 \tau'_1 & \xrightarrow{\mathcal{G}_0} & \nu_1 \tau_1 & \nu'_1 \tau'_1 & \xrightarrow{\mathcal{G}_0} & \nu_1 \tau_1 & \\ \nu'_2 \tau'_2 & \xrightarrow{\mathcal{G}_0} & \nu_1 \tau_1 & \nu'_2 \tau'_2 & \xrightarrow{\mathcal{G}_0} & \nu_2 \tau_2 & \\ \nu'_3 \tau'_3 & \xrightarrow{\mathcal{G}_0} & \nu_3 \tau_3 & \nu'_3 \tau'_3 & \xrightarrow{\mathcal{G}_0} & \nu_3 \tau_3 & \\ \dots & & & \dots & & & \end{array} \pm \dots$$

Da die Teilchen nicht wechselwirken, können sie höchstens vertauscht werden. Da sie ununterscheidbar sind, kann man aus Prinzip nicht sagen, welches herauskommende Teilchen welchem hineingehenden entspricht und alle Beiträge im obigen Diagramm tragen gleichermaßen bei.

Als Beispiel berechnen wir die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion für freie Elektronen, die wir aus dem Abschnitt über Lineare-Antwort-Theorie schon kennen, mit Hilfe des Wick-Theorems. Es ist

$$\begin{aligned} \chi_0(\mathbf{q}, \tau) &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \langle T_\tau \varrho(\mathbf{q}, \tau) \varrho(-\mathbf{q}, 0) \rangle_0 \\ &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}' \sigma \sigma'} \langle T_\tau c_{\mathbf{k} \sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}' \sigma'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}(0) \rangle_0 \\ &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}' \sigma \sigma'} \langle T_\tau c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}(0) c_{\mathbf{k}' \sigma'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k} \sigma}^\dagger(\tau) \rangle_0 \\ &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}' \sigma \sigma'} \mathcal{G}_0^{(2)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma, \tau, \mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma', 0; \mathbf{k}, \sigma, \tau, \mathbf{k}', \sigma', 0) \\ &\stackrel{\text{Wick}}{=} -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}' \sigma \sigma'} [\mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma, \tau; \mathbf{k}, \sigma, \tau) \mathcal{G}_0(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma', 0; \mathbf{k}', \sigma', 0) \\ &\quad - \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma, \tau; \mathbf{k}', \sigma', 0) \mathcal{G}_0(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma', 0; \mathbf{k}, \sigma, \tau)]. \end{aligned} \quad (4.206)$$

Hierin ist

$$\sum_{\mathbf{k} \sigma} \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma, \tau; \mathbf{k}, \sigma, \tau) = \langle \varrho(\mathbf{q}) \rangle_0 = 0 \quad (4.207)$$

für $\mathbf{q} \neq 0$, da das Elektronengas homogen ist. Für $\mathbf{q} \neq 0$ bleibt also nur der zweite Beitrag übrig,

$$\begin{aligned}\chi_0(\mathbf{q}, \tau) &= +\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma, \tau; \mathbf{k}', \sigma', 0) \mathcal{G}_0(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \sigma', 0; \mathbf{k}, \sigma, \tau) \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma, \tau) \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \mathbf{k}} \delta_{\sigma'\sigma} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \sigma, -\tau) \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma, \tau) \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \sigma, -\tau).\end{aligned}\quad (4.208)$$

Die Fourier-Transformierte lautet dann

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma, i\omega_n + i\nu_n) \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \sigma, i\nu_n). \quad (4.209)$$

Wir kennen schon die ungestörte Green-Funktion

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \sigma, i\nu_n) = \frac{1}{i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}}} \quad (4.210)$$

und können schließlich den Residuensatz anwenden, um die Summe über $i\nu_n$ zu berechnen, vgl. (4.173),

$$\begin{aligned}\dots &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{1}{i\nu_n + i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{1}{i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}}} \\ &= \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Periodizität!}}}{\beta n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - i\omega_n)} \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}} + \beta n_F(\xi_{\mathbf{k}}) \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}} + i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) \\ &\quad \text{beachte } g(z) = \frac{1}{z + i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{1}{z - \xi_{\mathbf{k}}}, \text{ Pole bei } z_1 = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - i\omega_n \text{ und } z_2 = \xi_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} = \frac{2}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}.\end{aligned}\quad (4.211)$$

Nach analytischer Fortsetzung $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$ erhalten wir das schon bekannte Ergebnis, z. B. Gl. (4.96), aber auf einfacherem Weg.

4.6 Potentialstreuung

Wir betrachten ein wichtiges Problem, nämlich wechselwirkungsfreie Elektronen in einem äußeren, statischen Potential $V(\mathbf{r})$. Dieses Problem erscheint auf den ersten Blick einfach, da die Elektronen nicht wechselwirken. Also haben wir es im Prinzip mit einem Einteilchenproblem zu tun. Wir denken aber hier an ein *Unordnungspotential*, das kompliziert, insbesondere nicht periodisch, ist und das wir im Allgemeinen gar nicht genau kennen. Zur *makroskopischen* Messgrößen, z. B. dem Leitwert oder der mittleren Leitfähigkeit einer großen Probe, tragen viele Bereiche mit unterschiedlichen und unkorrelierten Unordnungspotentialen bei. Die räumliche Mittelung entspricht dann einer Mittelung über mögliche Unordnungspotentiale. Ein solches *Unordnungsmittel* werden wir im Folgenden ausführen. Dabei müssen wir aufpassen: Eine Mittelung über $V(\mathbf{r})$ in $H = H_0 + V$ würde V durch ein *konstantes* mittleres Potential ersetzen, das in H irrelevant ist. Wir würden die gesamte von der Unordnung stammende Physik ignorieren. Das ist also keine sinnvolle Methode.

Wir starten mit dem Hamiltonian

$$H = H_0 + V = \int d^3r \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) [H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})] \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (4.212)$$

H_0 sei lösbar. Z. B. kann H_0 Elektronen in einem *periodischen* Potential beschreiben. Dann können wir das ungestörte System mit Hilfe der Bloch-Theorie exakt beschreiben. Wir behandeln V störungstheoretisch.

Wir führen die Abkürzung

$$(\mathbf{r}_1 \sigma_1, \tau_1) =: 1 \quad (4.213)$$

usw. ein und schreiben

$$\int_0^\beta d\tau_1 \int d^3r_1 \sum_{\sigma_1} =: \int d1, \quad (4.214)$$

um Schreibarbeit zu sparen. Wir führen Green-Funktionen

$$\mathcal{G}(b, a) = -\langle T_\tau \Psi(b) \Psi^\dagger(a) \rangle \quad \text{bzgl. } H, \quad (4.215)$$

$$\mathcal{G}_0(b, a) = -\langle T_\tau \Psi(b) \Psi^\dagger(a) \rangle_0 \quad \text{bzgl. } H_0 \quad (4.216)$$

ein. Hier ist wieder $a \equiv (\mathbf{r}_a \sigma_a, \tau_a)$ usw. Es gilt

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H_0(b) \right) \mathcal{G}_0(b, a) = \delta(b - a) \quad (4.217)$$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) + V(b) \right) \mathcal{G}_0(b, a) = \delta(b - a) \quad (4.218)$$

und

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) \right) \mathcal{G}(b, a) = \delta(b - a). \quad (4.219)$$

Aus den letzten beiden Gleichungen folgt durch Gleichsetzen

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) \right) \mathcal{G}(b, a) &= \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) + V(b) \right) \mathcal{G}_0(b, a) \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) \right) \mathcal{G}_0(b, a) + V(b) \mathcal{G}_0(b, a) \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) \right) \mathcal{G}_0(b, a) + \int d1 \underbrace{\delta(b-1) V(1)}_{(4.219) \text{ wieder einsetzen}} \mathcal{G}_0(1, a) \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) \right) \mathcal{G}_0(b, a) + \int d1 \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) \right) \mathcal{G}(b, 1) V(1) \mathcal{G}_0(1, a) \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) \right) \mathcal{G}_0(b, a) + \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_b} - H(b) \right) \int d1 \mathcal{G}(b, 1) V(1) \mathcal{G}_0(1, a). \end{aligned} \quad (4.220)$$

Mit der Anfangsbedingung

$$\mathcal{G}(a, a) = \mathcal{G}_0(a, a) \quad (4.221)$$

folgt

$$\mathcal{G}(b, a) = \mathcal{G}_0(b, a) + \int d1 \mathcal{G}(b, 1) V(1) \mathcal{G}_0(1, a), \quad (4.222)$$

also eine *Dyson-Gleichung*. Setzen wir $\mathcal{G}$ von links wieder rechts ein und iterieren, so erhalten wir die Dyson-Reihe

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(b, a) &= \mathcal{G}_0(b, a) + \int d1 \mathcal{G}_0(b, 1) V(1) \mathcal{G}_0(1, a) \\ &\quad + \int d1 d2 \mathcal{G}_0(b, 1) V(1) \mathcal{G}_0(1, 2) V(2) \mathcal{G}_0(2, a) + \dots, \end{aligned} \quad (4.223)$$

vgl. Abschnitt 3.6.1.

4.6.1 Feynman-Diagramme

R. P. Feynman hat im Zusammenhang mit der QED eine diagrammatische Darstellung von Ausdrücken entwickelt, die in Rechnungen mit Green-Funktionen (Propagatoren) auftreten. Diese Darstellung ist einerseits eine Veranschaulichung der Ausdrücke, die nützlich für die Entwicklung von Intuition für die

physikalischen Prozesse ist. Andererseits ist sie auch eine rigorose Übersetzung der komplizierten Integrale, d. h. wir können aus einem Diagramm *eindeutig* den entsprechenden Ausdruck konstruieren.

Die Übersetzung wird durch *Feynman-Regeln* beschrieben. Im vorliegenden Fall lauten sie:

$$\mathcal{G}(b, a) = \begin{array}{c} \parallel b \\ \uparrow \\ \parallel a \end{array} \quad (4.224)$$

(der Pfeil zeigt vom Punkt der Erzeugung $[\Psi^\dagger(a)]$ zum Punkt der Vernichtung $[\Psi(b)]$ des Teilchens),

$$\mathcal{G}_0(b, a) = \begin{array}{c} b \\ \uparrow \\ a \end{array} \quad (4.225)$$

$$\int d1 \dots V(1) \dots = \times 1 \quad (4.226)$$

Damit lautet die Dyson-Gleichung (4.222)

$$\begin{array}{c} \parallel b \\ \uparrow \\ \parallel a \end{array} = \begin{array}{c} b \\ \uparrow \\ a \end{array} + \begin{array}{c} \parallel b \\ \times 1 \\ \uparrow \\ \parallel a \end{array} \quad \left(= \begin{array}{c} b \\ \uparrow \\ a \end{array} + \begin{array}{c} \parallel b \\ \uparrow \\ \times 1 \\ \parallel a \end{array} \right) \quad (4.227)$$

und die Dyson-Reihe in Gleichung (4.223)

$$\begin{array}{c} \parallel b \\ \uparrow \\ \parallel a \end{array} = \begin{array}{c} b \\ \uparrow \\ a \end{array} + \begin{array}{c} b \\ \uparrow \\ \times 1 \\ \uparrow \\ a \end{array} + \begin{array}{c} b \\ \uparrow \\ \times 1 \\ \uparrow \\ \times 2 \\ \uparrow \\ a \end{array} + \dots \quad (4.228)$$

Die anschauliche Bedeutung ist klar: Der einfache Pfeil beschreibt die ungestörte Propagation und das Kreuz die Streuung am Potential $V(\mathbf{r})$.

4.6.2 Elastische Streuung

Bis hier war V ein ganz allgemeiner Einteilchenterm. Jetzt nehmen wir an, dass H_0 und V und damit auch H zeitunabhängig sind. Dann hängen $\mathcal{G}_0$ und $\mathcal{G}$ nur von $\tau - \tau'$ ab. Die Fourier-Darstellung ist also

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{r}\tau, \mathbf{r}'\tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} \mathcal{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n), \quad (4.229)$$

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) = \int_0^\beta d(\tau - \tau') e^{i\omega_n(\tau-\tau')} \mathcal{G}_0(\mathbf{r}\tau, \mathbf{r}'\tau') \quad (4.230)$$

und analoge Gleichungen für $\mathcal{G}$. Wir unterdrücken hier die Spin-Argumente. Die Dyson-Gleichung (4.227) enthält ein Faltungsintegral über τ_1 :

$$\int d\tau_1 \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_b\tau_b, \mathbf{r}_1\tau_1) \overset{\text{kein } \tau_1}{\downarrow} V(\mathbf{r}_1) \mathcal{G}(\mathbf{r}_1\tau_1, \mathbf{r}_a\tau_a). \quad (4.231)$$

Dieses wird in der Fourier-Transformierten zu einem gewöhnlichen Produkt:

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; i\omega_n) = \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; i\omega_n) + \int d^3r_1 \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_1; i\omega_n) V(\mathbf{r}_1) \mathcal{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_a; i\omega_n). \quad (4.232)$$

Diese Gleichung ist *lokal* in der Matsubara-Frequenz $i\omega_n$. Sie ist nicht lokal im Ort. Es ist auch nützlich, die Dyson-Gleichung in der Einteilchen-Eigenbasis von H_0 auszudrücken. Sei also $\{|\nu\rangle\}$ eine Basis von Eigenzuständen des ungestörten Einteilchen-Hamiltonians. Wir definieren

$$\mathcal{G}_{\nu\nu'}(i\omega_n) := \int d^3r d^3r' \underbrace{\langle \nu | \mathbf{r} \rangle}_{u_\nu^*(\mathbf{r})} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) \underbrace{\langle \mathbf{r}' | \nu' \rangle}_{u_{\nu'}(\mathbf{r}')} \quad (4.233)$$

$$\Rightarrow \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) = \sum_{\nu\nu'} \langle \mathbf{r} | \nu \rangle \mathcal{G}_{\nu\nu'}(i\omega_n) \langle \nu' | \mathbf{r}' \rangle \quad (4.234)$$

und entsprechend

$$V_{\nu\nu'} := \int d^3r \langle \nu | \mathbf{r} \rangle V(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | \nu' \rangle. \quad (4.235)$$

$\mathcal{G}_{\nu\nu'}(i\omega_n)$ erfüllt die Gleichung

$$\sum_{\nu''} [(i\omega_n - \xi_\nu) \delta_{\nu\nu''} - V_{\nu\nu''}] \mathcal{G}_{\nu''\nu'}(i\omega_n) = \delta_{\nu\nu'} \quad (4.236)$$

und $\mathcal{G}_{\nu\nu'}^0(i\omega_n)$ erfüllt entsprechend

$$\sum_{\nu''} (i\omega_n - \xi_\nu) \delta_{\nu\nu''} \mathcal{G}_{\nu''\nu'}^0(i\omega_n) = \delta_{\nu\nu'}, \quad (4.237)$$

was sofort das bekannte Ergebnis

$$\mathcal{G}_{\nu\nu'}^0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_\nu} \delta_{\nu\nu'} \quad (4.238)$$

liefert. Die Dyson-Gleichung lautet jetzt

$$\mathcal{G}_{\nu_b\nu_a}(i\omega_n) = \delta_{\nu_b\nu_a} \mathcal{G}_{\nu_a\nu_a}^0(i\omega_n) + \sum_{\nu_1} \mathcal{G}_{\nu_b\nu_1}^0(i\omega_n) V_{\nu_1\nu_a} \mathcal{G}_{\nu_1\nu_a}(i\omega_n). \quad (4.239)$$

Sie hat die einfache Struktur einer Matrix-Gleichung, $\mathcal{G}(i\omega_n) = \mathcal{G}^0(i\omega_n) + \mathcal{G}^0(i\omega_n) V \mathcal{G}(i\omega_n)$. Wir können auch Feynman-Regeln für $\mathcal{G}_{\nu\nu'}(i\omega_n)$ formulieren:

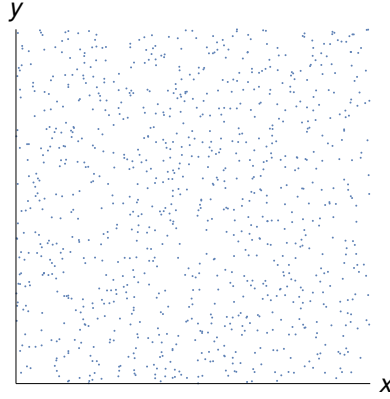
$$\mathcal{G}_{\nu_b\nu_a}(i\omega_n) = \begin{array}{c} \text{---} \nu_b \\ \text{---} \updownarrow \text{---} \\ \text{---} \nu_a \end{array} \quad (4.240)$$

$$\mathcal{G}_{\nu_b\nu_a}^0(i\omega_n) = \begin{array}{c} \text{---} \nu_b \\ \text{---} \updownarrow \text{---} \\ \text{---} \nu_a \end{array} = \frac{\delta_{\nu_b\nu_a}}{i\omega_n - \xi_{\nu_a}} \quad (4.241)$$

$$V_{\nu_b\nu_a} = \begin{array}{c} \text{---} \nu_b \\ \text{---} \times \text{---} \\ \text{---} \nu_a \end{array} \quad (4.242)$$

4.6.3 Störstellenstreuung

Ein häufiger Fall betrifft eine endliche Konzentration von identischen Störstellen in einem Leiter.



Für diesen Fall gilt

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{St}}} u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (4.243)$$

wobei N_{St} die Anzahl der Störstellen und $\mathbf{R}_j$ der Ort der Störstelle j ist. Also lautet die Dyson-Gleichung

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{G}(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; i\omega_n) & = & \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a; i\omega_n) + \sum_{j=1}^{N_{\text{St}}} \int d^3 r_1 \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_1; i\omega_n) u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j) \mathcal{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_a; i\omega_n). \end{array} \quad (4.244)$$

nicht translationsinvariant translationsinvariant

Die Iteration der Dyson-Gleichung führt auf eine Entwicklung im Potential u ,

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; i\omega_n) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{G}^{(n)}(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; i\omega_n) \quad (4.245)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(n)}(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; i\omega_n) &= \sum_{j_1=1}^{N_{\text{St}}} \dots \sum_{j_n=1}^{N_{\text{St}}} \int d^3 r_1 \dots d^3 r_n \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_n; i\omega_n) u(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_{j_n}) \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}; i\omega_n) \\ &\quad \times u(\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{R}_{j_{n-1}}) \dots \mathcal{G}_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_a; i\omega_n). \end{aligned} \quad (4.246)$$

Günstiger ist die Darstellung im $\mathbf{k}$ -Raum, wo gilt

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; i\omega_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n), \quad (4.247)$$

$$\mathcal{G}^{(n)}(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; i\omega_n) = \frac{1}{V^n} \sum_{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b} e^{i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}_b - i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a} \mathcal{G}^{(n)}(\mathbf{k}_b, \mathbf{k}_a; i\omega_n). \quad (4.248)$$

Hier kennen wir schon $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = 1/(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}})$. Es ist nun

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(n)}(\mathbf{k}_b, \mathbf{k}_a; i\omega_n) &= \sum_{j_1 \dots j_n} \frac{1}{V^{n-1}} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_{n-1}} e^{-i(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_{n-1}) \cdot \mathbf{R}_{j_n}} \dots e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_a) \cdot \mathbf{R}_{j_1}} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_b; i\omega_n) \\ &\quad \times u_{\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_{n-1}} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_{n-1}, i\omega_n) \dots \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_a, i\omega_n) \end{aligned} \quad (4.249)$$

oder mit Feynman-Diagrammen:

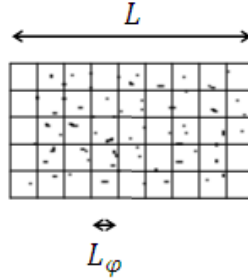
$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(n)}(\mathbf{k}_b, \mathbf{k}_a; i\omega_n) &= \sum_{j_1 \dots j_n} \frac{1}{V^{n-1}} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_{n-1}} e^{-i(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_{n-1}) \cdot \mathbf{R}_{j_n}} \dots e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_a) \cdot \mathbf{R}_{j_1}} \\ &\quad \times \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \times \vec{R}_{j_n} & \times \vec{R}_{j_2} & \times \vec{R}_{j_1} \\ \downarrow \vec{k}_b - \vec{k}_{n-1} & \downarrow & \downarrow \\ \leftarrow \vec{k}_b & \leftarrow \dots & \leftarrow \vec{k}_a \end{array} \\ \begin{array}{ccccccc} & n & & & 2 & & 1 \\ & \leftarrow & \leftarrow & \dots & \leftarrow & \leftarrow & \leftarrow \end{array} \end{array} \end{array} \quad (4.250)$$

$\mathcal{G}^{(n)}(\mathbf{k}_b, \mathbf{k}_a; i\omega_n)$ beschreibt die n -fache Streuung. Für die Störstellenstreuung können wir jetzt die Feynman-Regeln aufschreiben:

1. Für jedes Streuereignis zeichne $\begin{array}{c} \vec{R}_{j_i} \quad \vec{q}_i \quad i \\ \times \cdots \rightarrow \bullet \end{array}$, dies entspricht dem Ausdruck $u_{\mathbf{q}_i}$ und führt einen Faktor $e^{-i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{R}_{j_i}}$ in Gl. (4.250) ein.
2. Für jede Green-Funktion zeichne $\begin{array}{c} \vec{k} \\ \longrightarrow \end{array}$, dies entspricht $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$.
3. Sorge für Impulserhaltung an jedem Vertex $\bullet$.
4. Summiere mittels $(1/\mathcal{V}) \sum_{\mathbf{k}_i}$ über alle Impulse, außer den äußeren Impulsen $\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b$.
5. Summiere mittels $\sum_{j_i=1}^{N_{\text{St}}}$ über alle Störstellen, für jedes $\begin{array}{c} \vec{R}_{j_i} \\ \times \end{array}$.

Diese Regeln beschreiben die eineindeutige (bijektive) Abbildung zwischen dem Ausdruck und dem Diagramm, in diesem Fall für $\mathcal{G}^{(n)}$.

Wörtlich genommen ist das Modell sehr kompliziert, da die Streuung an allen N_{St} Störstellen interferiert. Verschiebt man *eine* Störstelle um eine Strecke der Größenordnung der elektronischen (Fermi-) Wellenlänge $\lambda_F = 2\pi/k_F$, so ändert sich im Prinzip das Interferenzmuster *überall*. Solche Effekte kann man an kleinen, relativ sauberen Proben bei sehr tiefen Temperaturen (unterhalb von 1 K) beobachten. An makroskopischen Proben, die nicht sehr sauber sind oder deren Temperatur nicht sehr niedrig ist, sind solche Interferenzeffekte nicht zu beobachten. Das liegt an der Elektron-Phonon- und der Elektron-Elektron-Wechselwirkung, die wir im Modell nicht berücksichtigt haben. Diese führen zu *inelastischer* Streuung der Elektronen. Daher sind die elektronischen (Einteilchen-) Zustände nur über eine endliche Länge L_φ kohärent, d. h. sie können nur auf kleineren Längenskalen interferieren. L_φ heißt *Phasenkohärenzlänge*. Makroskopische Messgrößen für Systeme der Ausdehnung $L \gg L_\varphi$ sind dann inkohärente (d. h. normale) Mittelwerte über viele Bereiche („Zellen“) der Größe L_φ :



Da es viele Zellen gibt und die Störstellen in jeder Zelle zufällig und unabhängig verteilt sind, entspricht diesem Mittelwert der Mittelwert über alle möglichen Verteilungen der N_{St} Störstellen.

Für die Green-Funktion sieht diese *Unordnungsmittelung* so aus:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\mathcal{V}} \langle \mathcal{G}(\mathbf{k}_b, \mathbf{k}_a; i\omega_n) \rangle_{\text{St}} &\equiv \delta_{\mathbf{k}_a \mathbf{k}_b} \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}_a, i\omega_n) \\
 &:= \delta_{\mathbf{k}_a \mathbf{k}_b} \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_1 \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_2 \cdots \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_{N_{\text{St}}} \mathcal{G}(\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_a; i\omega_n) \\
 &= \delta_{\mathbf{k}_a \mathbf{k}_b} \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_1 \cdots \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_{N_{\text{St}}} \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{G}^{(n)}(\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_a; i\omega_n). \quad (4.251)
 \end{aligned}$$

Beachte, dass das Unordnungsmittel die Impulserhaltung wieder herstellt, da das System *im Mittel* wieder translationsinvariant wird. Daher hängt die gemittelte Green-Funktion $\bar{\mathcal{G}}$ nur von *einer* Impulsvariablen

ab. Wir müssen nun $\mathcal{G}^{(n)}$ aus Gl. (4.249) über alle Störstellenpositionen $\mathbf{R}_j$ mitteln. Die $\mathbf{R}_j$ tauchen in $\mathcal{G}^{(n)}$ nur in den Exponentialfaktoren auf. Wir benötigen demnach

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_1 \cdots \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_{N_{\text{St}}} e^{-i(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_{n-1}) \cdot \mathbf{R}_{j_n}} e^{-i(\mathbf{k}_{n-1} - \mathbf{k}_{n-2}) \cdot \mathbf{R}_{j_{n-1}}} \cdots e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_a) \cdot \mathbf{R}_{j_1}}. \quad (4.252)$$

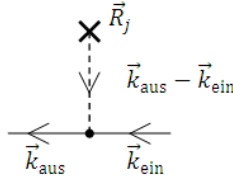
Nun kann eine bestimmte Störstelle j am Ort $\mathbf{R}_j$ im Integranden $0, 1, 2, 3, \dots, n$ -mal auftreten:

(a) Nullmal: wir erhalten einfach

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_j = 1. \quad (4.253)$$

(b) Einmal:

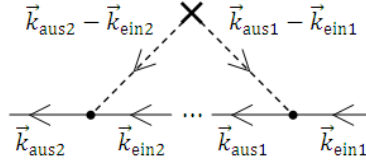
$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_j e^{-i(\mathbf{k}_{\text{aus}} - \mathbf{k}_{\text{ein}}) \cdot \mathbf{R}_j} = \delta_{\mathbf{k}_{\text{aus}} - \mathbf{k}_{\text{ein}}, 0}. \quad (4.254)$$



Die Störstelle kann keinen Impuls übernehmen, daher ist der Impuls des Elektrons erhalten.

(c) Zweimal:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_j e^{-i(\mathbf{k}_{\text{aus2}} - \mathbf{k}_{\text{ein2}}) \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i(\mathbf{k}_{\text{aus1}} - \mathbf{k}_{\text{ein1}}) \cdot \mathbf{R}_j} = \delta_{\mathbf{k}_{\text{aus2}} - \mathbf{k}_{\text{ein2}} + \mathbf{k}_{\text{aus1}} - \mathbf{k}_{\text{ein1}}, 0}. \quad (4.255)$$



(d) m -mal ($m \leq n$):

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_j e^{-i(\mathbf{k}_{\text{aus},m} - \mathbf{k}_{\text{ein},m}) \cdot \mathbf{R}_j} \cdots e^{-i(\mathbf{k}_{\text{aus1}} - \mathbf{k}_{\text{ein1}}) \cdot \mathbf{R}_j} = \delta_{\mathbf{k}_{\text{aus},m} - \mathbf{k}_{\text{ein},m} \pm \cdots \pm \mathbf{k}_{\text{aus},1} - \mathbf{k}_{\text{ein},1}, 0}. \quad (4.256)$$

Also ist in jedem Fall die *Summe* der Impulsüberträge von der Störstelle j an die Elektronen Null. Das ist vernünftig, da die Störstellen statisch sind. Jede Störstelle j führt also zu *einem* Faktor $\delta_{\sum \mathbf{q}, 0}$, der eine Impuls-Summe beseitigt. Es bleibt der Vorfaktor $1/\mathcal{V}$ dieser Impuls-Summe übrig. Außerdem kann j jede der N_{St} Störstellen bezeichnen; derselbe Beitrag erscheint also N_{St} -mal. Damit erhält jeder der genannten Prozesse, unabhängig von der Anzahl der Streuungen an derselben Störstelle, einen Faktor

$$n_{\text{St}} := \frac{N_{\text{St}}}{\mathcal{V}}. \quad (4.257)$$

Schließlich müssen wir noch über alle Möglichkeiten von mehrfachem Auftreten von Störstellen summieren. Z. B. für $\mathcal{G}^{(3)}$:

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_1 \cdots \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3 R_{N_{\text{St}}} \mathcal{G}^{(3)}(\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_a; i\omega_n)$$

$$\begin{aligned}
&= \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} \\
&+ \text{diagram 4} + \text{diagram 5}
\end{aligned}
\tag{4.258}$$

und damit

$$\begin{aligned}
&\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}_a, i\omega_n) \\
&= \underbrace{\text{diagram 1}}_{(n=0)} + \underbrace{\text{diagram 2}}_{(n=1)} + \underbrace{\text{diagram 3}}_{(n=2)} + \underbrace{\text{diagram 4}}_{(n=3)} + \dots
\end{aligned}
\tag{4.259}$$

Hier lauten die Feynman-Regeln:

$$\text{diagram 1} \quad \vec{q} = u_{\mathbf{q}}, \tag{4.260}$$

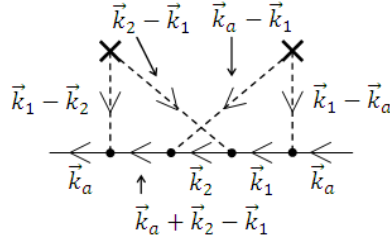
$$\text{diagram 2} = n_{\text{St}}, \tag{4.261}$$

$$\text{diagram 3} = \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) \tag{4.262}$$

und Impulserhaltung an jedem Vertex $\bullet$ und an jedem $\times$ ist impliziert. Über alle inneren Impulse wird mittels $(1/\mathcal{V}) \sum_{\mathbf{k}_j}$ summiert.

Als Beispiel übersetzen wir ein Diagramm vierter Ordnung in den entsprechenden mathematischen

Ausdruck:



$$= n_{\text{St}}^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_2} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_a, i\omega_n) u_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_a} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_1, i\omega_n) u_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_2, i\omega_n) u_{\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_1} \\ \times \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_a + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1, i\omega_n) u_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_a, i\omega_n). \quad (4.263)$$

Hier führen wir noch einen wichtigen Begriff ein: Lässt sich ein Diagramm in zwei Teile zerlegen, indem man eine innere $\mathcal{G}_0$ -Linie durchtrennt, so nennt man es *reduzibel*, andernfalls *irreduzibel*. Das obige Diagramm ist z. B. irreduzibel.

4.6.4 Selbstenergie

Die diagrammatische Darstellung gestattet eine sehr kompakte Definition der Selbstenergie:

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \equiv \text{Diagram with a shaded circle} := \underbrace{\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} + \dots}_{\text{Summe über alle irreduziblen Diagramme}} \quad (4.264)$$

Es folgt

$$\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots \quad (4.265)$$

Diese Reihe enthält *alle*, reduzierbaren und irreduzierbaren, Diagramme. Wir können wieder eine Dyson-Gleichung herleiten:

$$\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \times \left(\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \dots \right) \\ = \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) + \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (4.266)$$

mit der Lösung

$$\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n)}{1 - \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\omega_n) \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)} \\ = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}. \quad (4.267)$$

$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ ist also eine additive Korrektur zur Energie $\xi_{\mathbf{k}}$. Daher stammt die Bezeichnung „Selbstenergie“. Das praktische Problem ist jedoch, dass die Selbstenergie i. A. von $i\omega_n$ abhängt, sie führt also *nicht* einfach zu einer Änderung der Dispersionsrelation (mit $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$) der Art

$$\omega \stackrel{?}{=} \xi_{\mathbf{k}} + \Sigma(\mathbf{k}). \quad (4.268)$$

Das Problem der Berechnung von $\bar{\mathcal{G}}$ ist aber jedenfalls auf die Berechnung von Σ zurückgeführt.

Für Σ ist kein exakter analytischer Ausdruck bekannt. Wir benötigen daher eine Näherung. Die einfachste, naive Näherung besteht sicherlich darin, nur den ersten Term in Σ mitzunehmen:

$$\Sigma_{\text{naiv}}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \text{Diagram: a vertical dashed line with a dot at the bottom and an 'X' at the top} \quad (4.269)$$

Aber dann ist

$$\Sigma_{\text{naiv}}(\mathbf{k}, i\omega_n) = n_{\text{St}} u_{\mathbf{q}=0} = n_{\text{St}} \int d^3r u(\mathbf{r}) = \text{const}, \quad (4.270)$$

wobei $u(\mathbf{r})$ wie bekannt das Potential einer Störstelle ist. Dies ist nur eine konstante Verschiebung der Elektronenenergie

$$\xi_{\mathbf{k}} \rightarrow \xi_{\mathbf{k}} + n_{\text{St}} u_0 = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + n_{\text{St}} u_0, \quad (4.271)$$

die wir von nun an in das chemische Potential absorbieren. Diese Näherung beschreibt daher keine interessante Physik.

4.6.5 Bornsche Näherungen

Die einfachste nicht triviale Näherung lautet

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{B1}}(\mathbf{k}, i\omega_n) &:= \text{Diagram: a triangle with vertices at } \vec{k}, \vec{k}', \text{ and } \vec{k}-\vec{k}' \text{, each with an 'X' above it} \\ &= n_{\text{St}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}', i\omega_n) u_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \\ &= n_{\text{St}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}'}}. \end{aligned} \quad (4.272)$$

Das ist die *erste Bornsche Näherung*. Sie führt auf

$$\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \equiv \text{Diagram: a series of terms in a Dyson series, starting with a double arrow, followed by a single arrow, then a sum of terms with one, two, and three scattering events (triangles with 'X's) on a single arrow, followed by another sum of terms with two, three, and four scattering events, and so on} \quad (4.273)$$

Beachte, dass diese Näherung aufgrund der Dyson-Reihe bereits unendlich viele Terme enthält. Der physikalische Gehalt der Näherung ist folgender:

1. Elektronen streuen höchstens zweimal an derselben Störstelle und
2. sie kehren nicht zu derselben Störstelle zurück.

Wir betrachten nun die mathematischen Eigenschaften von $\Sigma_{\text{B1}}(\mathbf{k}, i\omega_n)$: Wir setzen Σ_{B1} als Funktion der Frequenz analytisch fort und finden

$$\Sigma_{\text{B1}}(\mathbf{k}, z) = \frac{n_{\text{St}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 \frac{1}{z - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{reell}}}{\xi_{\mathbf{k}'}}} \quad (4.274)$$

Σ_{B1} ist also eine Summe (ein Integral im Limes $\mathcal{V} \rightarrow \infty$) von Termen mit Polen bei $z = \xi_{\mathbf{k}'} \in \mathbb{R}$. Daher ist Σ_{B1} auf zumindest einem Teil der reellen Achse singulär. Σ_{B1} hat also einen *Schnitt* auf (einem Teil) der reellen Achse.

Für die retardierte/avancierte Green-Funktion benötigen wir die retardierte/avancierte Selbstenergie

$$\Sigma_{\text{B1}}^{R/A}(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma_{\text{B1}}(\mathbf{k}, z \rightarrow \omega \pm i\eta)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{n_{\text{St}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}'} \pm i\eta} \\
&= \frac{n_{\text{St}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 \left[P \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}'}} \mp i\pi \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}'}) \right].
\end{aligned} \tag{4.275}$$

Dann lautet die Green-Funktion

$$\bar{G}_{\text{B1}}^{R/A}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega \pm i\eta - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\text{B1}}^{R/A}(\mathbf{k}, \omega)}. \tag{4.276}$$

Wir werden gleich sehen, dass $\Sigma_{\text{B1}}^{R/A}$ einen endlichen Imaginärteil hat, so dass die infinitesimale Größe $\pm i\eta$ weggelassen werden kann.

$\bar{G}^{R/A}$ wird betragsmäßig groß, wenn $\omega \approx \xi_{\mathbf{k}}$ gilt. (Das setzt voraus, dass $\text{Re } \Sigma_{\text{B1}}^{R/A}$ hinreichend klein ist, was aber schon für die Konvergenz der Dyson-Reihe (4.273) notwendig und daher keine zusätzliche Annahme ist.) Daher können wir in $\Sigma_{\text{B1}}^{R/A}$ näherungsweise $\omega \approx \xi_{\mathbf{k}}$ setzen. Falls ω und $\xi_{\mathbf{k}}$ nämlich nicht ähnlich sind, ist $\bar{G}^{R/A}$ insgesamt klein und daher für die Physik nicht entscheidend. Also gilt

$$\Sigma_{\text{B1}}^{R/A}(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{n_{\text{St}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 \left[P \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}'}} \mp i\pi \delta(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}'}) \right]. \tag{4.277}$$

Der Realteil

$$\text{Re } \Sigma_{\text{B1}}^{R/A}(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{n_{\text{St}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 P \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}'}} \tag{4.278}$$

ist eine impulsabhängige Korrektur zur Dispersion $\xi_{\mathbf{k}}$. Falls $\xi_{\mathbf{k}}$ und das Streupotential $u(\mathbf{r})$ isotrop sind, muss dies auch für $\text{Re } \Sigma_{\text{B1}}^{R/A}$ gelten. Allgemein bricht $\text{Re } \Sigma_{\text{B1}}^{R/A}$ keine Symmetrien des Systems. Außerdem ist die Korrektur klein, solange die Störungstheorie überhaupt gültig ist. Insgesamt für der Realteil i. A. nicht zu interessanten Effekten und wir ignorieren ihn bzw. absorbieren ihn in eine „renormierte“ Dispersion $\xi_{\mathbf{k}}$.

Es bleibt der Imaginärteil der Selbstenergie,

$$\Sigma_{\text{B1}}^{R/A}(\mathbf{k}, \omega) \approx \mp i\pi \frac{n_{\text{St}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 \delta(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}'}) = \mp \frac{i}{2\tau_{\mathbf{k}}} \tag{4.279}$$

mit der *Streurate*

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} := \frac{2\pi}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} n_{\text{St}} |u_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 \delta(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}'}). \tag{4.280}$$

Damit ist die Green-Funktion

$$\bar{G}_{\text{B1}}^{R/A}(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} \pm \frac{i}{2\tau_{\mathbf{k}}}}. \tag{4.281}$$

Wir sehen, dass $\bar{G}$ ebenfalls einen Schnitt auf der reellen Achse hat. $\bar{G}$ ist aber in der oberen und unteren komplexen Halbebene jeweils holomorph.

Die Störstellenstreuung ersetzt also den infinitesimalen Imaginärteil $\pm i\eta$ in der Green-Funktion durch eine endliche Größe. Um zu sehen, was das bedeutet, betrachten wir die Fourier-Transformierte in der Zeit:

$$\begin{aligned}
\bar{G}_{\text{B1}}^R(\mathbf{k}, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_{\mathbf{k}}}} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\exp\left[-i\left(\omega - \xi_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_{\mathbf{k}}}\right)t\right]}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_{\mathbf{k}}}} \underbrace{\exp\left[i\left(-\xi_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_{\mathbf{k}}}\right)t\right]}_{\leftarrow} \\
&= \underbrace{e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t} e^{-t/(2\tau_{\mathbf{k}})}}_{\leftarrow} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-i) \int_{-\infty}^t dt' \exp\left[-i\left(\omega - \xi_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_{\mathbf{k}}}\right)t'\right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -i e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t} e^{-t/(2\tau_{\mathbf{k}})} \underbrace{\int_{-\infty}^t dt' \delta(t') e^{i\xi_{\mathbf{k}}t'} e^{t'/(2\tau_{\mathbf{k}})}}_{= \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0, \\ 1 & \text{für } t > 0 \end{cases}} \\
&= -i \theta(t) e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t} e^{-t/(2\tau_{\mathbf{k}})}.
\end{aligned} \tag{4.282}$$

Also fällt der Propagator auf der Zeitskala $2\tau_{\mathbf{k}}$ ab. Die Streuung transformiert die freien Elektronen in *Quasiteilchen* mit endlicher Lebensdauer $\tau_{\mathbf{k}}$. Diese sind die fermionischen Moden des ungeordneten Systems.

Für die Green-Funktion im Ortsraum, im statischen Limes $\omega \rightarrow 0$, findet man ein ähnliches Resultat. Um dies zu sehen, nehmen wir an, dass die Streuzeit $\tau_{\mathbf{k}} \equiv \tau_{\text{streu}}$ unabhängig von $\mathbf{k}$ und die Streurate $1/\tau_{\text{streu}}$ klein gegenüber dem chemischen Potenzial μ ist. Außerdem betrachten wir die parabolische Dispersion $\xi_{\mathbf{k}} = k^2/2m - \mu$ freier Elektronen. Dann gilt

$$\bar{G}_{B1}^R(\mathbf{r}, \omega \rightarrow 0) \cong -\frac{\pi d(E_F)}{k_F |\mathbf{r}|} e^{ik_F |\mathbf{r}|} e^{-|\mathbf{r}|/2l} \tag{4.283}$$

mit der *Steulänge* oder *mittleren freien Weglänge* $l = v_F \tau_{\text{streu}}$. Hier ist $d(E_F)$ die Zustandsdichte pro Spin-Richtung an der Fermi-Energie. Die Propagation der Elektronen wird also durch die Streuung *gedämpft*. Die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron an einem entfernten Ort zu finden, ist exponentiell unterdrückt.

Wir erwähnen noch, dass man die erste Bornsche Näherung in zwei Schritten verbessern kann:

(a) Die vollständige Bornsche Näherung

Die vollständige Bornsche Näherung ist diagrammatisch gegeben durch

$$\Sigma_{B\infty}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \underbrace{\left(\begin{array}{c} \times \\ \vdots \\ \bullet \end{array} \right)}_{\text{const}} + \underbrace{\left(\begin{array}{c} \times \\ \swarrow \quad \searrow \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right)}_{\text{1. Bornsche Näherung}} + \dots \tag{4.284}$$

Die berücksichtigten Diagramme nennt man, aus offensichtlichen Gründen, „Wigwam-Diagramme“.

(b) Die selbstkonsistente Bornsche Näherung

Diese ist gegeben durch

$$\bar{G}_{SCB} \equiv \leftarrow \leftarrow = \leftarrow + \leftarrow \text{ (mit Kreis) } \tag{4.285}$$

mit

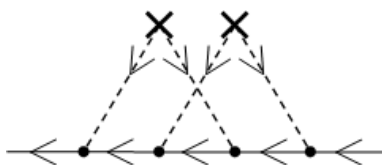
$$\Sigma_{SCB} \equiv \text{ (mit Kreis) } = \underbrace{\left(\begin{array}{c} \times \\ \vdots \\ \bullet \end{array} \right)}_{\text{const}} + \underbrace{\left(\begin{array}{c} \times \\ \swarrow \quad \searrow \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right)}_{\uparrow} + \dots \tag{4.286}$$

selbstkonsistente Green-Funktion $\bar{G}_{SCB}$

Was für Diagramme sind hier enthalten?

(4.287)

Nicht enthalten ist z. B.



Das ist eine sogenannte *Vertexkorrektur*. Also ist auch die selbstkonsistente Bornsche Näherung nicht exakt. Für weitere Diskussion siehe das Buch von Bruus und Flensberg.

4.6.6 Leitfähigkeit

In diesem Abschnitt kommen wir auf die elektrische Leitfähigkeit zurück. Wir untersuchen die endliche Leitfähigkeit aufgrund von Streuung an Störstellen im Rahmen der Lineare-Antwort-Theorie. Wir hatten gesehen, dass Störstellenstreuung in der ersten Bornschen Näherung zu einer endlichen Lebensdauer der Einteilchenzustände führt, die sich als Imaginärteil der Selbstenergie äußert:

$$\bar{G}_{B1}^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} + i/2\tau}, \quad (4.288)$$

$$\bar{G}_{B1}^A(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} - i/2\tau}, \quad (4.289)$$

wobei wir hier eine $\mathbf{k}$ -unabhängige Streurate $1/\tau$ angenommen haben.

Wir schreiben die Stromdichte als $\mathbf{j}_0 = \mathbf{v}\varrho$. Da nur Elektronen in der Nähe der Fermi-Energie nennenswert zum Transport beitragen, ist in guter Näherung $|\mathbf{v}| = v_F$ mit der Fermi-Geschwindigkeit $v_F := \partial \varepsilon_{\mathbf{k}} / \partial k|_{k=k_F}$. Für ein isotropes Medium (nach Ausführung des Unordnungsmittels!) ist die Korrelationsfunktion $C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r})j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R$ sicherlich diagonal in α, β und sogar proportional zu $\delta_{\alpha\beta}$. Mit anderen Worten, die tensorwertige Korrelationsfunktion $C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r})j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R$ ist proportional zur Einheitsmatrix:

$$\begin{aligned}
C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r})j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R(t-t') &= -i\theta(t-t')\delta_{\alpha\beta}\langle[j_{0x}(\mathbf{r},t),j_{0x}(\mathbf{r}',t')]\rangle_0 \\
&= -i\theta(t-t')\delta_{\alpha\beta}\frac{1}{3}\sum_{\gamma}\langle[j_{0\gamma}(\mathbf{r},t),j_{0\gamma}(\mathbf{r}',t')]\rangle_0.
\end{aligned}
\tag{4.290}$$

Mit der obigen Näherung wird dies

$$C_{j_{0\alpha}(\mathbf{r})j_{0\beta}(\mathbf{r}')}^R(t-t') = -i\theta(t-t')\delta_{\alpha\beta}\frac{v_F^2}{3}\langle[\varrho(\mathbf{r},t),\varrho(\mathbf{r}',t')]\rangle_0 = \delta_{\alpha\beta}\frac{v_F^2}{3}\chi^R(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') \quad (4.291)$$

mit der retardierten Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion bzw. elektrischen Suszeptibilität aus Abschnitt 4.3. Diese kennen wir schon für das wechselwirkungsfreie Elektronengas ohne Störstellen. In diesem Fall ist $\chi^R = \chi_0^R$ gegeben durch

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \nu) = -\Pi_0^R(\mathbf{q}, \nu) = -$$

da ϱ hier die *Ladungsdichte* ist

$$\begin{aligned}
&= \frac{2e^2}{\beta} \sum_{i\omega_n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}} \Big|_{i\nu_n \rightarrow \nu + i\eta} \\
&= 2e^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\nu + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\eta}.
\end{aligned} \tag{4.292}$$

Das „Schleifendiagramm“ und die Schreibweise Π_0^R sind ein Vorgriff auf Abschnitt 4.8, sie sind im Folgenden nicht erforderlich. Wir betrachten den statischen ($\nu \rightarrow 0$), homogenen ($\mathbf{q} \rightarrow 0$) Grenzfall. Dafür lautet die Suszeptibilität

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \nu) \cong 2e^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\partial n_F}{\partial \xi} = 2e^2 \int d\xi d(\mu + \xi) \frac{\partial n_F}{\partial \xi} \tag{4.293}$$

mit der Zustandsdichte pro Spin-Richtung, $d(\mu + \xi)$. (Wir kommen auf S. 157 ausführlicher darauf zurück.) Die Ableitung $\partial n_F / \partial \xi$ ist nur in der Nähe der Fermi-Energie wesentlich von Null verschieden. Ist dort $d(\mu + \xi) \approx \text{const}$, so folgt

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \nu) \cong 2e^2 d(E_F) \int d\xi \frac{\partial n_F}{\partial \xi} = -2e^2 d(E_F). \tag{4.294}$$

Für $\xi = k^2/2m - \mu$ ist

$$2d(E_F) = \frac{3n_{\text{el}}}{2E_F} = \frac{3n_{\text{el}}}{mv_F^2} \tag{4.295}$$

$$\Rightarrow \chi_0^R(\mathbf{q}, \nu) \cong -\frac{3e^2 n_{\text{el}}}{mv_F^2} \quad \text{für } \mathbf{q}, \nu \rightarrow 0. \tag{4.296}$$

Die Kubo-Formel (4.115) für die Leitfähigkeit reproduzieren wir hier nochmals:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \nu) = -\frac{1}{i\nu} C_{j_0\alpha(\mathbf{r})j_0\beta(\mathbf{r}')}^R(\nu) + \frac{e\rho_0(\mathbf{r})}{i\nu m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha\beta}. \tag{4.297}$$

Durch Fourier-Transformation wird dies zu

$$\begin{aligned}
\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \nu) &= -\frac{1}{i\nu} \delta_{\alpha\beta} \frac{v_F^2}{3} \chi^R(\mathbf{q}, \nu) - \frac{e^2 n_{\text{el}}}{i\nu m} \delta_{\alpha\beta} \\
&= +\frac{1}{i\nu} \delta_{\alpha\beta} \cancel{\frac{v_F^2}{3}} \cancel{\frac{3}{m}} \frac{e^2 n_{\text{el}}}{v_F^2} - \frac{e^2 n_{\text{el}}}{i\nu m} \delta_{\alpha\beta} = 0.
\end{aligned} \tag{4.298}$$

Für freie Elektronen ohne Unordnungspotential erhalten wir $\sigma = 0$. Das ist ein *unphysikalisches* Ergebnis, das nur anzeigt, dass die Annahme linearer Antwort hier zusammenbricht: Die Elektronen sollten im elektrischen Feld beliebig beschleunigt werden, der Strom wächst unbegrenzt auch für eine kleine Störung.

Das Ergebnis ist dennoch nützlich: Bei der Rechnung in *Anwesenheit* von Unordnungsstreuung können wir den Ausdruck *ohne* Unordnungsstreuung gleich abziehen, da er vom zweiten Term in der Kubo-Formel ohnehin weggehoben wird. Also berechnen wir $\chi^R(\mathbf{q}, \nu) - \chi_0^R(\mathbf{q}, \nu)$ anstelle von χ^R .

Die einfachste Näherung besteht nun darin, in χ^R die Green-Funktion (4.288) mit endlicher Streuzeit τ einzusetzen. Die retardierte und avancierte Green-Funktion implizieren die Matsubara-Green-Funktion

$$\bar{\mathcal{G}}_{1B}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + (i/2\tau) \text{sgn}(\omega_n)}. \tag{4.299}$$

Die Vorzeichenfunktion sorgt dafür, dass sich $\bar{G}^R$ und $\bar{G}^A$ korrekt durch analytische Fortsetzung ergeben. Wir erhalten

$$\chi(\mathbf{q}, i\nu_n) = \frac{2e^2}{\beta} \sum_{i\omega_n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + (i/2\tau) \text{sgn}(\omega_n + \nu_n)} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + (i/2\tau) \text{sgn}(\omega_n)} \tag{4.300}$$

und im homogenen Grenzfall ($\mathbf{q} \rightarrow 0$)

$$\chi(0, i\nu_n) = \frac{2e^2}{\beta} \sum_{i\omega_n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}} + (i/2\tau) \text{sgn}(\omega_n + \nu_n)} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} + (i/2\tau) \text{sgn}(\omega_n)}. \tag{4.301}$$

Die Frequenz-Summe lässt sich mit Hilfe der Methoden aus Abschnitt 4.4 berechnen. Der Summand hat keine Pole, aber Schnitte für $z = \varepsilon \in \mathbb{R}$ und $z = \varepsilon - i\nu_n$, $\varepsilon \in \mathbb{R}$. Es folgt

$$\chi(0, i\nu_n) = -\frac{2e^2}{2\pi i} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int d\varepsilon n_F(\varepsilon) \left\{ \frac{1}{\varepsilon + i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}} + (i/2\tau) \operatorname{sgn}(\nu_n)} \left(\frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} + i/2\tau} - \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} - i/2\tau} \right) + \left(\frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} + i/2\tau} - \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} - i/2\tau} \right) \frac{1}{\varepsilon - i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}} - (i/2\tau) \operatorname{sgn}(\nu_n)} \right\}. \quad (4.302)$$

Dies enthält den Faktor

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} + i/2\tau} - \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} - i/2\tau} &= G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) - G^A(\mathbf{k}, \varepsilon) \\ &= 2i \operatorname{Im} G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) = -i A(\mathbf{k}, \varepsilon), \end{aligned} \quad (4.303)$$

also die Spektralfunktion. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \chi(0, i\nu_n) &= \cancel{\frac{e^2}{\pi i}} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon n_F(\varepsilon) \cancel{(-i)} A(\mathbf{k}, \varepsilon) \left(\frac{1}{\varepsilon + i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}} + (i/2\tau) \operatorname{sgn}(\nu_n)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\varepsilon - i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}} - (i/2\tau) \operatorname{sgn}(\nu_n)} \right) \end{aligned} \quad (4.304)$$

und nach analytischer Fortsetzung

$$\begin{aligned} \chi^R(0, \nu) &= \frac{e^2}{\pi} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon n_F(\varepsilon) A(\mathbf{k}, \varepsilon) \left(\frac{1}{\varepsilon + \nu - \xi_{\mathbf{k}} + i/2\tau} + \frac{1}{\varepsilon - \nu - \xi_{\mathbf{k}} - i/2\tau} \right) \\ &= \frac{e^2}{\pi} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon n_F(\varepsilon) A(\mathbf{k}, \varepsilon) \frac{2(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}})}{(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}})^2 + (\nu + i/2\tau)^2}. \end{aligned} \quad (4.305)$$

Im statischen Grenzfall ($\nu \rightarrow 0$) wird dies zu

$$\chi^R(0, \nu) \cong \frac{2e^2}{\pi} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon n_F(\varepsilon) A(\mathbf{k}, \varepsilon) \frac{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}}}{(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}})^2 + (1/2\tau)^2} \left(1 + \frac{i/\tau}{(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}})^2 + (1/2\tau)^2} \nu \right). \quad (4.306)$$

Mit

$$A(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1/\tau}{(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}})^2 + (1/2\tau)^2} \quad (4.307)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \chi^R(0, \nu) &\cong \frac{2\tau e^2}{\pi} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon n_F(\varepsilon) A^2(\mathbf{k}, \varepsilon) (\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}}) (1 + A(\mathbf{k}, \varepsilon) i\nu) \\ &= \frac{2\tau e^2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi d(\mu + \xi) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon n_F(\varepsilon) \left(\frac{1/\tau}{(\varepsilon - \xi)^2 + (1/2\tau)^2} \right)^2 (\varepsilon - \xi) \\ &\quad \times \left(1 + \frac{i\nu/\tau}{(\varepsilon - \xi)^2 + (1/2\tau)^2} \right) \\ &\stackrel{\varepsilon \rightarrow \varepsilon + \xi}{=} \frac{2\tau e^2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi d(\mu + \xi) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon n_F(\varepsilon + \xi) \left(\frac{1/\tau}{\varepsilon^2 + (1/2\tau)^2} \right)^2 \varepsilon \\ &\quad \times \left(1 + \frac{i\nu/\tau}{\varepsilon^2 + (1/2\tau)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.308)$$

Für $k_B T \ll E_F$ gilt

$$2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi d(\mu + \xi) n_F(\xi + \varepsilon) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dE d(E) n_F(E - (\mu - \varepsilon))$$

$$= \frac{[2m(\mu - \varepsilon)]^{3/2}}{3\pi^2} \quad \text{für } \mu > \varepsilon, \text{ sonst Null.} \quad (4.309)$$

(Dies gilt, da

$$2 \int_{-\infty}^{\infty} dE d(E) n_F(E - \mu) = n_{\text{el}} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{(2m\mu)^{3/2}}{3\pi^2} \quad (4.310)$$

gilt, nur ist im vorliegenden Fall das chemische Potential μ durch $\mu - \varepsilon$ ersetzt.) Es folgt

$$\chi^R(0, \nu) \cong \frac{\tau e^2}{\pi} \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2} \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon (\mu - \varepsilon)^{3/2} \left(\frac{1/\tau}{\varepsilon^2 + (1/2\tau)^2} \right)^2 \varepsilon \left(1 + \frac{i\nu/\tau}{\varepsilon^2 + (1/2\tau)^2} \right). \quad (4.311)$$

Der Term von der Ordnung ν^0 geht für $1/\mu\tau \rightarrow 0$ gegen eine Konstante, die in $\chi^R - \chi_0^R$ wegfällt. Es bleibt der Term der Ordnung ν' . Im Limes $1/\mu\tau \rightarrow 0$ erhalten wir also

$$\begin{aligned} \chi^R(0, \nu) - \chi_0^R(0, \nu) &\cong \frac{\tau e^2}{\pi} \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2} \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon (\mu - \varepsilon)^{3/2} \varepsilon i\nu \left(\frac{1/\tau}{\varepsilon^2 + (1/2\tau)^2} \right)^3 \\ &\cong \frac{\tau e^2}{\pi} \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2} i\nu \left(-\frac{3\pi}{2} \sqrt{\mu} \right) \\ &= -\frac{1}{2\pi^2} i\nu \tau e^2 (2m)^{3/2} \sqrt{\mu} \end{aligned} \quad (4.312)$$

und mit $\sqrt{\mu} \approx \sqrt{E_F} = k_F/\sqrt{2m}$ und $d(E_F) = mk_F/2\pi^2$ folgt

$$\begin{aligned} \dots &= -\frac{1}{2\pi^2} i\nu \tau e^2 4\pi^2 d(E_F) \\ &= -2i\nu \tau e^2 d(E_F). \end{aligned} \quad (4.313)$$

Dies führt auf

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(0, \nu) &\cong +\frac{1}{i\nu} \delta_{\alpha\beta} 2i\nu \frac{v_F^2 \tau}{3} e^2 d(E_F) \\ &= \delta_{\alpha\beta} 2e^2 \frac{v_F^2 \tau}{3} d(E_F). \end{aligned} \quad (4.314)$$

Hier definiert man die *Diffusionskonstante*

$$D := \frac{v_F^2 \tau}{3} \quad (4.315)$$

und erhält die statische, homogene Leitfähigkeit

$$\sigma \cong e^2 \underbrace{2d(E_F)}_{\text{Zustandsdichte}} D. \quad (4.316)$$

Dies ist eine Schreibweise für die *Drude-Leitfähigkeit*. Dieser Ausdruck, den man in der elementaren Festkörperphysik im Wesentlichen errät, folgt also auch im Rahmen der Vielteilchentheorie. Hier haben wir folgendes getan:

- Die elektronische Green-Funktion wurde in Anwesenheit von Störstellenstreuung in der ersten Bornschen Näherung berechnet.
- Die Leitfähigkeit wurde dann in der Lineare-Antwort-Theorie mittels der Kubo-Formel berechnet.

Es ist nicht zu leugnen, dass diese Herleitung der einfachen Drude-Formel ziemlich kompliziert war. Die Vielteilchentheorie erlaubt aber, darüber hinausgehende Resultate für den Einfluss von Störstellen auf den elektronischen Transport zu erhalten, z. B. zu Fluktuationen des Leitwerts im Magnetfeld. In Kapitel 6 werden wir die Bewegung von Teilchen unter dem Einfluss von Unordnung aus einem scheinbar ganz anderen Blickwinkel betrachten.

4.7 Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Wir betrachten Elektronen mit einer Zwei-Teilchen- (z. B. Coulomb-) Wechselwirkung. Der Hamiltonian lautet

$$H = H_0 + V_2, \quad (4.317)$$

wobei $H_0 = T + V_1$ alle Einteilchenterme enthält. Wir wissen schon aus Abschnitt 2.4, dass gilt

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \Psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1). \quad (4.318)$$

Wir schreiben den Spin-Index explizit hin, nehmen aber an, dass die Wechselwirkung den Spin eines Elektrons nicht ändert. Wir verwenden wieder die Abkürzung $1 \equiv (\mathbf{r}_1, \sigma_1, \tau_1)$.

Wir suchen die Green-Funktion

$$\mathcal{G}(b, a) = -\langle T_\tau \Psi(b) \Psi^\dagger(a) \rangle. \quad (4.319)$$

$\uparrow$
 $b \equiv (\mathbf{r}_b, \sigma_b, \tau_b)$ usw.

Gemäß Abschnitt 4.4, insbesondere Gl. (4.133), ist

$$\mathcal{G}(b, a) = -\frac{\langle T_\tau U_I(\beta, 0) \Psi_I(b) \Psi_I^\dagger(a) \rangle_0}{\langle U_I(\beta, 0) \rangle_0}, \quad (4.320)$$

wobei der Subskript „0“ die Mittelung bzgl. H_0 anzeigt und U_I der Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild in imaginärer Zeit ist. Wir hatten schon gesehen, siehe Gl. (4.126), dass gilt

$$U_I(\beta, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-1)^n \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_n T_\tau V_{2I}(\tau_1) \cdots V_{2I}(\tau_n). \quad (4.321)$$

Dies ergibt

$$\mathcal{G}(b, a) = -\frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle T_\tau V_{2I}(\tau_1) \cdots V_{2I}(\tau_n) \Psi_I(b) \Psi_I^\dagger(a) \rangle_0}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle T_\tau V_{2I}(\tau_1) \cdots V_{2I}(\tau_n) \rangle_0}. \quad (4.322)$$

Hier steht

$$V_{2I}(\tau_j) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \Psi_{\sigma_1 I}^\dagger(\mathbf{r}_1, \tau_j) \Psi_{\sigma_2 I}^\dagger(\mathbf{r}_2, \tau_j) V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_2 I}(\mathbf{r}_2, \tau_j) \Psi_{\sigma_1 I}(\mathbf{r}_1, \tau_j) \quad (4.323)$$

innerhalb des zeitgeordneten Produktes $T_\tau \dots$. Da die Zeitargumente alle gleich sind, ist die Wirkung von T_τ nicht eindeutig. V_2 ist aber *definiert* mit der Reihenfolge $\Psi^\dagger \Psi^\dagger \Psi \Psi$. Damit diese unter T_τ bestehen bleibt, wählen wir die Zeiten der $\Psi^\dagger$ infinitesimal später als die der Ψ . (Im Prinzip müssen wir auch auf die Reihenfolge der $\Psi \Psi$ und $\Psi^\dagger \Psi^\dagger$ unter sich achten, da deren Vertauschung ein Minus-Zeichen ergeben würde. Es zeigt sich aber, dass hier kein Problem auftritt, wenn wir die Reihenfolge nicht „unnötig ändern“.) Wir schreiben

$$\int_0^\beta d\tau_j \cdots V_{2I}(\tau_j) \cdots = \frac{1}{2} \int dj dj' \cdots \Psi_I^\dagger(j_+) \Psi_I^\dagger(j'_+) V_{jj'}^{(2)} \Psi_I(j') \Psi_I(j) \cdots \quad (4.324)$$

mit

$$j := (\sigma_j, \mathbf{r}_j, \tau_j) \quad \text{und} \quad j_+ := (\sigma_j, \mathbf{r}_j, \tau_j + 0^+), \quad (4.325)$$

$$\int dj := \sum_{\sigma_j} \int d^3 r_j \int_0^\beta d\tau_j, \quad (4.326)$$

$$V_{jj'}^{(2)} := V_2(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_{j'}) \delta(\tau_j - \tau_{j'}) \quad (4.327)$$

(die Wechselwirkung ist instantan, d. h. lokal in der Zeit). Damit wird

$$\mathcal{G}(b, a) = - \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1/2)^n}{n!} \int d1 d1' \dots dn dn' V_{11'}^{(2)} \dots V_{nn'}^{(2)} \langle T_{\tau} \Psi_I^{\dagger}(1_+) \Psi_I^{\dagger}(1'_+) \Psi_I(1') \Psi_I(1) \dots \Psi_I^{\dagger}(n_+) \Psi_I^{\dagger}(n'_+) \Psi_I(n') \Psi_I(n) \Psi_I(b) \Psi_I^{\dagger}(a) \rangle_0}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1/2)^n}{n!} \int d1 d1' \dots dn dn' V_{11'}^{(2)} \dots V_{nn'}^{(2)} \langle T_{\tau} \Psi_I^{\dagger}(1_+) \Psi_I^{\dagger}(1'_+) \Psi_I(1') \Psi_I(1) \dots \Psi_I^{\dagger}(n_+) \Psi_I^{\dagger}(n'_+) \Psi_I(n') \Psi_I(n) \rangle_0}. \quad (4.328)$$

Zähler und Nenner enthalten höhere elektronische Green-Funktionen bzgl. des ungestörten Hamiltonians H_0 :

$$\mathcal{G}(b, a) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1/2)^n}{n!} \int d1 d1' \dots dn dn' V_{11'}^{(2)} \dots V_{nn'}^{(2)} (-1)^{2n+1} \dots}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1/2)^n}{n!} \int d1 d1' \dots dn dn' V_{11'}^{(2)} \dots V_{nn'}^{(2)} (-1)^{2n} \dots} \dots \quad (4.329)$$

$$\dots \frac{\mathcal{G}_0^{(2n+1)}(b, 1, 1', \dots, n, n'; a, 1_+, 1'_+, \dots, n_+, n'_+)}{\mathcal{G}_0^{(2n)}(1, 1', \dots, n, n'; 1_+, 1'_+, \dots, n_+, n'_+)},$$

vgl. die Definition von $\mathcal{G}_0^{(n)}$ in Abschnitt 4.5.

Hier können wir jetzt das Wick-Theorem anwenden. Es sagt aus, dass wir die Green-Funktionen $\mathcal{G}_0^{(2n+1)}$ und $\mathcal{G}_0^{(2n)}$ als antisymmetrisierte Summen über Produkte von Einteilchen-Green-Funktionen $\mathcal{G}_0$ schreiben können:

$$\mathcal{G}(b, a) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1/2)^n}{n!} \int d1 d1' \dots dn dn' V_{11'}^{(2)} \dots V_{nn'}^{(2)} \begin{vmatrix} \mathcal{G}_0(b, a) & \mathcal{G}_0(b, 1) & \dots & \mathcal{G}_0(b, n') \\ \mathcal{G}_0(1, a) & \mathcal{G}_0(1, 1_+) & \dots & \mathcal{G}_0(1, n') \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{G}_0(n', a) & \mathcal{G}_0(n', 1) & \dots & \mathcal{G}_0(n', n'_+) \end{vmatrix}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1/2)^n}{n!} \int d1 d1' \dots dn dn' V_{11'}^{(2)} \dots V_{nn'}^{(2)} \begin{vmatrix} \mathcal{G}_0(1, 1_+) & \dots & \mathcal{G}_0(1, n') \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{G}_0(n', 1) & \dots & \mathcal{G}_0(n', n'_+) \end{vmatrix}}. \quad (4.330)$$

Wie oben diskutiert, haben alle $\Psi^{\dagger}$ (außer $\Psi^{\dagger}(a)$) ein infinitesimal verschobenes Zeitargument $\tau_k + 0^+$. Das ist aber nur wichtig, wenn $\tau_j = \tau_k$ ist.

Der gefundene Ausdruck ist recht unhandlich. Zähler und Nenner können aber viel anschaulicher durch Diagramme dargestellt werden. Ohne uns zunächst um Zahlenfaktoren zu kümmern, setzen wir

$$\mathcal{G}_0(j, k) = \bullet \xleftarrow{\quad} \bullet \quad (\text{wie schon bekannt}), \quad (4.331)$$

$$V_{jj'}^{(2)} = \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \quad (4.332)$$

und summieren über alle inneren Variablen $j = (\sigma_j, \mathbf{r}_j, \tau_j)$. Dann ist der *Nenner* von $\mathcal{G}(b, a)$, also die *Zustandssumme*,

$$Z \equiv \langle U_I(\beta, 0) \rangle_0$$

$$\begin{aligned}
&= 1 + \left\{ \begin{array}{l} \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \dots \end{array} \right\} \begin{array}{l} 2 \text{ Terme} \\ \text{für } n = 1 \end{array} \\
&+ \left\{ \begin{array}{l} \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \dots \end{array} \right\} \begin{array}{l} 24 \text{ Terme} \\ \text{für } n = 2 \end{array} \\
&+ (720 \text{ Terme für } n = 3) + \dots
\end{aligned} \tag{4.333}$$

Beachte, dass Z nicht von den äußeren Variablen b, a abhängt. Dem entsprechend haben die Diagramme keine äußeren Beine. Solche Diagramme nennt man *Vakuum-Diagramme*.

Entsprechend ist der *Zähler* von $\mathcal{G}(b, a)$

$$\begin{aligned}
-\langle T_\tau U_I(\beta, 0) \Psi_I(b) \Psi_I^\dagger(a) \rangle_0 = & \left\{ \begin{array}{l} \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \end{array} \right\} \\
& + \left\{ \begin{array}{l} \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} \end{array} \right\} \\
& + (120 \text{ Terme für } n = 2) + \dots
\end{aligned} \tag{4.334}$$

Nun ist z. B.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Diagram 1} \end{array} \right\} = \frac{(-1/2)^1}{1!} \mathcal{G}_0(b, a) \int d1 d1' V_{11'}^{(2)} \mathcal{G}_0(1, 1_+) \mathcal{G}_0(1', 1'_+), \tag{4.335}$$

d. h. nicht zusammenhängende Diagramme sind das *Produkt* der einzelnen zusammenhängenden Teildia-gramme. Daher können wir die nicht mit den äußeren Vertices a, b verbundenen Teile im Zähler ausklam-mern. Das sind gerade die Vakuum-Diagramme, die auch im Nenner auftreten. Sie kürzen sich weg. (Für den Beweis siehe die Bücher von Bruus/Flensberg und Mahan.)

Weiter beachten wir, dass topologisch äquivalente Diagramme, d. h. solche, die durch Verformungen, Spiegelungen oder Drehungen ineinander überführt werden können, identische mathematische Ausdrücke ergeben, da die Benennung der inneren Vertices j, j' beliebig ist. Es zeigt sich, dass die resultierenden kombinatorischen Faktoren gerade die expliziten Faktoren $(1/2)^n/n!$ kürzen. Es bleibt ein Faktor $(-1)^n$. Wir zeichnen topologisch äquivalente Diagramme daher nur jeweils einmal und lassen den Faktor $(1/2)^n/n!$

weg. Es ergibt sich

$$\mathcal{G}(b, a) = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \bullet b \\ \uparrow \\ \bullet a \end{array} + \underbrace{\begin{array}{c} \bullet b \\ \uparrow \\ \bullet \\ \uparrow \\ \bullet a \end{array} \text{ (with a loop) }}_{\text{für } n=1} + \begin{array}{c} \bullet b \\ \uparrow \\ \bullet \\ \uparrow \\ \bullet a \end{array} \text{ (with two loops)} + \begin{array}{c} \bullet b \\ \uparrow \\ \bullet \\ \uparrow \\ \bullet a \end{array} \text{ (with three loops)} + \dots \end{array} \quad (4.336)$$

wobei die Reihe jetzt alle topologisch inäquivalenten, zusammenhängenden Diagramme mit zwei äußeren Vertizes enthält.

Wir können jetzt die Feynman-Regeln für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung hinschreiben:

1. $\mathcal{G}_0(j, k) = \begin{array}{c} \bullet \\ \leftarrow \\ j \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \leftarrow \\ k \end{array}$, wobei $\tau_k \rightarrow \tau_k + 0^+$,
2. $-V_{jj'}^{(2)} = \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ j \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ j' \end{array}$; das Vorzeichen stammt vom Faktor $(-1)^n$ in Gleichungen (4.329) und (4.330),
3. $\int dj \delta_{\sigma_j^{\text{ein}} \sigma_j^{\text{aus}}} = \begin{array}{c} \bullet \\ j \end{array}$ (kein Spin-Flip),
4. multipliziere mit $(-1)^F$, wobei F die Anzahl geschlossener Elektronen-Schleifen ist, z. B.



Dieser Faktor folgt aus der Entwicklung der Determinanten in Gl. (4.330), er ist genau die jeweilige Komponente des Levi-Civita-Tensors in der Definition der Determinante. Diese ergibt sich aus der Antisymmetrie von fermionischen Vielteilchenzuständen. Die Beweisidee findet sich im Buch von Bruus/Flensberg.

4.7.1 Selbstenergie

In Analogie zum Fall der Störstellenstreuung können wir die Selbstenergie einführen:

$$\Sigma(l, j) \equiv \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ l \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ j \end{array} := \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ l \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ j \end{array} \text{ (with a loop)} + \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ l \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ j \end{array} \text{ (with a loop)} + \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ l \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ j \end{array} \text{ (with two loops)} + \dots \quad (4.337)$$

Die Selbstenergie enthält immer nur die irreduziblen Diagramme. Damit lässt sich die volle Green-Funktion exakt als

$$\mathcal{G}(b, a) \equiv \begin{array}{c} \bullet b \\ \leftarrow \\ \bullet a \end{array} = \begin{array}{c} \bullet b \\ \leftarrow \\ \bullet a \end{array} + \begin{array}{c} \bullet b \\ \leftarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \leftarrow \\ \bullet a \end{array} + \begin{array}{c} \bullet b \\ \leftarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \leftarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \leftarrow \\ \bullet a \end{array} + \dots \quad (4.338)$$

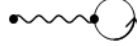
schreiben. Diese Reihe können wir wieder aufsummieren und erhalten die Dyson-Gleichung

$$\mathcal{G}(b, a) \equiv \begin{array}{c} \bullet b \\ \leftarrow \\ \bullet a \end{array} + \begin{array}{c} \bullet b \\ \leftarrow \\ \bullet l \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \leftarrow \\ \bullet j \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \leftarrow \\ \bullet a \end{array} + \dots$$

$$= \mathcal{G}_0(b, a) + \int dl dj \mathcal{G}_0(b, l) \Sigma(l, j) \mathcal{G}(j, a). \quad (4.339)$$

Ist der Hamiltonian H translationsinvariant oder zumindest gitterperiodisch, so ist es wieder nützlich, zur Fourier-Transformierten überzugehen. Wir geben die Feynman-Regeln hierfür ohne weitere Herleitung an:

1. $\mathcal{G}_\sigma^0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \overleftarrow{\vec{k}\sigma, i\omega_n}$, wobei $i\omega_n$ eine fermionische Matsubara-Frequenz ist.

In Teildigrammen der Form  und  multipliziere mit $e^{i\omega_n \eta}|_{\eta \rightarrow 0^+}$ (dieser Faktor resultiert aus der infinitesimalen Verschiebung der Zeitargumente in den $\Psi^\dagger$; in allen anderen Diagrammen darf man ihn ebenfalls einführen, er ändert dort aber nichts am mathematischen Resultat).

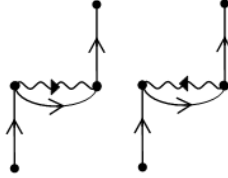
2. $-V_2(\mathbf{q}) = \overleftarrow{\vec{q}, i\nu_n}$, wobei $i\nu_n$ eine bosonische Matsubara-Frequenz ist.

3. Erhalte Impuls, Frequenz und Spin an jedem Vertex.

4. Summiere über die verbleibenden inneren Variablen mittels $\frac{1}{\beta\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \sum_{i\omega_n}$.

5. Multipliziere mit $(-1)^F$, wobei F die Anzahl geschlossener Elektronen-Schleifen ist.

Bemerkung: Die beiden Diagramme



sind nicht topologisch verschieden; der Pfeil für $V^{(2)}$ gibt nur an, in welcher Richtung $\mathbf{q}$ und $i\nu_n$ positiv gezählt werden.

Aufgrund der Erhaltung von $(\mathbf{k}, i\omega_n)$ laufen dieselben $(\mathbf{k}, i\omega_n)$ in die Selbstenergie Σ in $\mathcal{G}$ hinein wie heraus. Die Dyson-Gleichung wird daher zu einer *algebraischen* Gleichung,

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \mathcal{G}_\sigma^0(\mathbf{k}, i\omega_n) + \mathcal{G}_\sigma^0(\mathbf{k}, i\omega_n) \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n). \quad (4.340)$$

Diese hat die Lösung

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\mathcal{G}_\sigma^0(\mathbf{k}, i\omega_n)}{1 - \mathcal{G}_\sigma^0(\mathbf{k}, i\omega_n) \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}. \quad (4.341)$$

Die Lösung hat dieselbe Form wie bei der Unordnungsstreuung und ist ebenfalls exakt. Das Problem wurde auf die Berechnung von $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ zurückgeführt.

4.7.2 Die Hartree-Selbstenergie

Der einfachste Beitrag zur Selbstenergie ist der sogenannte Hartree-Term:

$$\begin{aligned} \Sigma_\sigma^H(\mathbf{k}, i\omega_n) &:= \begin{array}{c} \uparrow \vec{q}=0 \\ \bullet \text{---} \text{wavy line} \text{---} \bullet \\ \uparrow \vec{k}\sigma, i\omega_n \end{array} \\ &\quad \begin{array}{c} \uparrow \vec{k}'\sigma', i\omega'_n \end{array} \\ &\quad \begin{array}{c} F=1 \text{ (eine Schleife)} \end{array} \\ &= (-1)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\beta\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \sum_{i\omega'_n} [-V_2(0)] \mathcal{G}_{\sigma'}^0(\mathbf{k}', i\omega'_n) \underbrace{e^{i\omega'_n \eta}}_{\text{von Operator-Ordnung}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= V_2(0) \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega'_n} \frac{e^{i\omega'_n \eta}}{i\omega'_n - \xi_{\mathbf{k}'}} \\
&= V_2(0) \frac{1}{\mathcal{V}} \underbrace{\sum_{\mathbf{k}'\sigma'} n_F(\xi_{\mathbf{k}'})}_{\text{Elektronenzahl } N} = V_2(0) \frac{N}{\mathcal{V}}.
\end{aligned} \tag{4.342}$$

Die Hartree-Selbstenergie beschreibt also die Wechselwirkung mit der gemittelten Elektronenkonzentration. Denselben Term hatten wir in Abschnitt 4.2 aus der Hartree- (Mean-Field-) Näherung erhalten. Wie dort besprochen, ist er formal divergent, wird aber vom Kernpotential kompensiert. Dies geschieht, wann immer der Beitrag  auftritt, auch als Teil eines komplizierteren Diagramms.

4.7.3 Die Fock-Selbstenergie

Der Fock- oder Austausch-Term in der Selbstenergie ist

$$\Sigma_{\sigma}^F(\mathbf{k}, i\omega_n) := \begin{array}{c} \vec{k} - \vec{k}' \\ i\omega_n - i\omega'_n \\ \vec{k}\sigma, i\omega_n \quad \vec{k}'\sigma, i\omega'_n \end{array} \cdot \tag{4.343}$$

Dieser Beitrag kann analog berechnet werden:

$$\ldots = -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} V_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') n_F(\xi_{\mathbf{k}'}). \tag{4.344}$$

Er ist endlich und wird nicht kompensiert. Wir untersuchen die Fock-Selbstenergie hier nicht weiter, weil wir gleich zu einer besseren Näherung übergehen wollen.

4.8 Das wechselwirkende Elektronengas und die RPA

Wir hatten in Abschnitt 3.2 gesehen, dass die Energie des wechselwirkenden Elektronengases im Jellium-Modell in der 2. Ordnung der Störungstheorie in V_2 divergiert. Wir wollen jetzt zeigen, dass sich diese Divergenz in der vollen Vielteilchentheorie weghebt. Zugleich erhalten wir eine bessere Näherungslösung für die Green-Funktion. Dazu werden wir eine unendliche Teilmenge aller Selbstenergiadiagramme aufsummieren.

Wir sind natürlich eigentlich an der Coulomb-Wechselwirkung interessiert, betrachten aber zunächst die Yukawa-Wechselwirkung

$$V_2(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 + \alpha^2}, \tag{4.345}$$

und lassen am Ende der Herleitung $\alpha \rightarrow 0$ gehen, was die Coulomb-Wechselwirkung wieder herstellt. Dieses Vorgehen erleichtert die Rechnung. Die erwähnte Korrektur 2. Ordnung divergiert in diesem Limes wie

$$E^{(2)} \sim \int_0^{q_{\max}} dq q^2 \frac{1}{(q^2 + \alpha^2)^2} \frac{1}{q} qq \sim -\ln \alpha \rightarrow \infty. \tag{4.346}$$

Die hier betrachtete Näherung geht von der Selbstenergie aus. Die exakte Selbstenergie lautet

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \begin{array}{c} \text{Hartree term} \\ + \text{Fock term} \\ + \text{RPA bubble} \\ + \text{RPA bubble with self-energy} \\ + \text{RPA bubble with two self-energies} \\ + \dots \end{array} \tag{4.347}$$

Der Hartree-Term  ist hier bereits weggelassen, da er vom Kernpotential kompensiert wird. Aus demselben Grund haben wir alle komplizierteren Diagramme weggelassen, die diesen Beitrag irgendwo enthalten. Die zentrale Idee unserer Näherung ist folgende: Wir wollen in jeder Ordnung in V_2 die

betragsmäßig größten Terme finden und nur diese aufsummieren. Wir erwarten nach unseren Erfahrungen mit der naiven Störungstheorie, dass einige Terme für $\alpha \rightarrow 0$ divergieren. Dann sind die am stärksten divergenten Terme diejenigen, die wir suchen.

Welche Diagramme gegebener Ordnung n divergieren nun am stärksten für $\alpha \rightarrow 0$? Wir bemerken:

- Für Wechselwirkungen $V_2(\mathbf{q})$ mit unterschiedlichen Impulsen,

$$V_2(\mathbf{q}) V_2(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \cdots \sim \frac{1}{q^2 + \alpha^2} \frac{1}{|\mathbf{q} - \mathbf{p}|^2 + \alpha^2} \cdots, \quad (4.348)$$

erhalten wir für $\alpha \rightarrow 0$ nur Pole 2. Ordnung:

$$\cdots \cong \begin{cases} \frac{1}{q^2} \frac{1}{p^2} & \text{für } \mathbf{q} \rightarrow 0, \\ \frac{1}{p^2} \frac{1}{|\mathbf{q} - \mathbf{p}|^2} & \text{für } \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{p}, \end{cases} \quad (4.349)$$

außer für $\mathbf{p} = 0$, was aber höchstens auf einer Menge vom Maß Null der Fall ist.

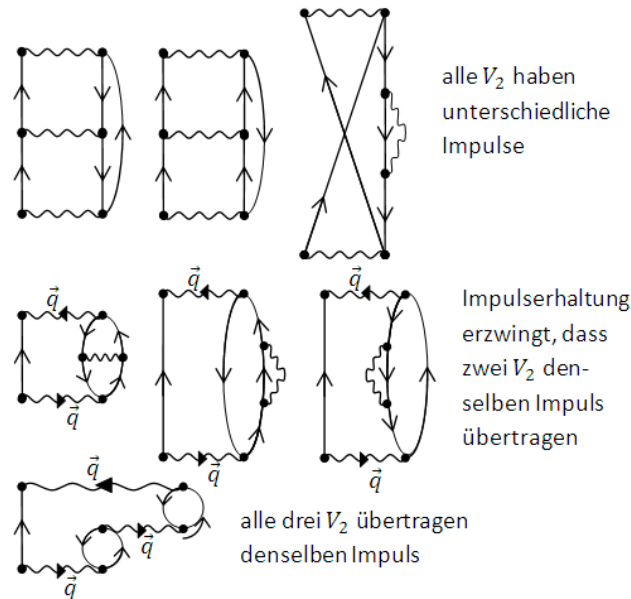
- Für zwei Faktoren $V_2(\mathbf{q})$ mit demselben Impuls erhalten wir dagegen einen Pol 4. Ordnung:

$$V_2(\mathbf{q}) V_2(\mathbf{q}) \sim \frac{1}{(q^2 + \alpha^2)^2} \rightarrow \frac{1}{q^4} \quad \text{für } \alpha \rightarrow 0. \quad (4.350)$$

- Entsprechend ergibt sich für m Faktoren

$$[V_2(\mathbf{q})]^m \sim \frac{1}{(q^2 + \alpha^2)^m} \rightarrow \frac{1}{q^{2m}} \quad \text{für } \alpha \rightarrow 0. \quad (4.351)$$

Die für kleine q am stärksten divergenten Terme der Ordnung n sind also diejenigen, bei denen die maximal mögliche Zahl von V_2 dasselbe Impulsargument $\mathbf{q}$ haben. Das ist dann der Fall, wenn *alle* V_2 dasselbe Impulsargument $\mathbf{q}$ haben. (Beachte, dass Divergenzen bei *großen* $\mathbf{q}$ in der Festkörperttheorie i. A. uninteressant sind, da wir für ein gitterperiodisches System nur über die 1. Brillouin-Zone integrieren.) Welche Terme sind das? Beispielhaft betrachten wir den Fall $n = 3$. Hier existieren 7 Diagramme:



Das letztere Diagramm ist also am stärksten divergent. Die *Random-Phase-Approximation* (RPA) für die elektronische Green-Funktion bzw. Selbstenergie besteht nun darin, *nur* die am stärksten divergenten

Diagramme in jeder Ordnung zu berücksichtigen:

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, i\omega_n) := i\omega_n - i\nu_n \left[\text{Fock-Term} + \text{Polarization Loop} + \text{Polarization Bubble} + \text{Polarization Chain} + \dots \right] \quad (4.352)$$

Wie bereits erwähnt, ist „RPA“ eine historische Bezeichnung. In unserer Herleitung ist nicht offensichtlich, welche Phase hier „zufällig“ ist.

Der wichtigste Teil aller RPA-Diagramme ist offenbar das Schleifen-Diagramm

$$\Pi_0 := \text{Polarization Loop} \quad (4.353)$$

Gemäß der Feynman-Regeln aus Abschnitt 4.7 ist dies

$$\Pi_0(\mathbf{q}, i\nu_n) = \underset{\substack{\text{Spin-Summe} \\ \downarrow \\ \uparrow \beta \mathcal{V} \\ \text{eine Schleife } (F=1)}}{-\frac{2}{\beta}} \sum_{i\omega_n} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}} \quad (4.354)$$

bzw. nach Übergang zu einem Integral über den Impulsraum,

$$\Pi_0(\mathbf{q}, i\nu_n) = -\frac{2}{\beta} \sum_{i\omega_n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}}. \quad (4.355)$$

Beachte, dass $\chi_0 = -\Pi_0$ die in Abschnitt 4.5 berechnete Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion (Suszeptibilität) ist.

Die diagrammatische Methode erlaubt uns nun, die Reihe der RPA-Diagramme aufzusummieren. Es ist

$$\Sigma^{\text{RPA}} = \text{Fock-Term} \times \left\{ \text{Polarization Loop} + \text{Polarization Bubble} + \text{Polarization Chain} + \dots \right\} = \text{renorm. Coulomb} \quad (4.356)$$

renormierte Coulomb-Wechselwirkung V_{RPA}

oder auch

$$\Sigma^{\text{RPA}} = \underbrace{\text{Fock-Term}}_{\text{Fock-Term}} + \text{Polarization Loop} \times \left\{ \text{Polarization Loop} + \text{Polarization Bubble} + \dots \right\} = \text{renorm. Coulomb} + \text{Polarization Loop} \quad (4.357)$$

Durch Vergleich der beiden Darstellungen von Σ^{RPA} erhalten wir

$$\begin{aligned} -V_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_n) &\equiv \text{renorm. Coulomb} \\ &= \text{renorm. Coulomb} + \text{Polarization Loop} \\ &+ \text{Polarization Loop} \times \text{Polarization Loop} + \dots \\ &= \text{renorm. Coulomb} + \text{Polarization Loop} \times \text{renorm. Coulomb} \end{aligned} \quad (4.358)$$

Dies hat offenbar wieder die Form einer Dyson-Gleichung. Wir können sie lösen:

$$\begin{aligned}
-V_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_n) &= \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{1 - \text{---}\text{---}\text{---}} \\
&= \frac{-V_2(\mathbf{q})}{1 - V_2(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)} = \frac{-\frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 + \alpha^2}}{1 - \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 + \alpha^2} \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)} \\
&= -\frac{\frac{e^2}{\varepsilon_0}}{q^2 + \alpha^2 - \frac{e^2}{\varepsilon_0} \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)}. \tag{4.359}
\end{aligned}$$

Für $\alpha \rightarrow 0$ ergibt sich

$$V_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_n) = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 - \frac{e^2}{\varepsilon_0} \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)}. \tag{4.360}$$

Hierin kennen wir schon die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion oder Suszeptibilität

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\nu_n + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}})}{-i\nu_n + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}}} \tag{4.361}$$

des wechselwirkungsfreien Elektronengases, siehe Gl. (4.211). Wir betrachten einige Grenzfälle: (a) Der *statische Grenzfall* ergibt sich für $i\nu_n \rightarrow \nu + i\eta \rightarrow 0 + i\eta$ als

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, 0) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}})}{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} - i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+}. \tag{4.362}$$

Im Limes großer Längenskalen oder, äquivalent dazu, kleiner $\mathbf{q}$ erhalten wir durch Taylor-Entwicklung

$$\begin{aligned}
\chi_0^R(\mathbf{q}, 0) &\cong 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\frac{\partial n_F}{\partial \xi_{\mathbf{k}}} (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}})}{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} - i\eta} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} \\
&= 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\partial n_F}{\partial \xi_{\mathbf{k}}} \\
&= \int d\xi \, 2 \, d(\mu + \xi) \frac{\partial n_F}{\partial \xi_{\mathbf{k}}}, \tag{4.363}
\end{aligned}$$

wobei $d(E)$ die Zustandsdichte pro Spin-Richtung ist. Im typischen Fall $k_B T \ll \mu \approx E_F$ wird $n_F(\xi)$ eine Stufenfunktion und $\partial n_F / \partial \xi = -\delta(\xi)$. Dann ist

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, 0) \cong \chi_0^R(0, 0) = -2d(\mu) \approx -2d(E_F). \tag{4.364}$$

Also lautet die retardierte RPA-Wechselwirkung für $\omega \rightarrow 0$ und kleine $\mathbf{q}$,

$$V_{\text{RPA}}^R(\mathbf{q}, 0) \cong \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 + \frac{e^2}{\varepsilon_0} 2d(E_F)}. \tag{4.365}$$

Sie hat die Form der Yukawa-Wechselwirkung

$$V_{\text{RPA}}^R(\mathbf{q}, 0) = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 + k_s^2} \tag{4.366}$$

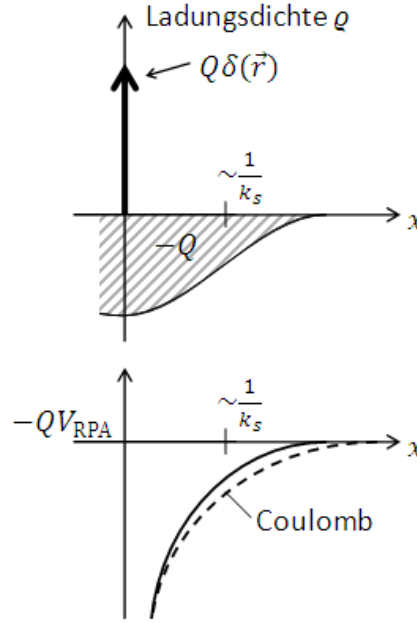
mit der *inversen Thomas-Fermi-Abschirmlänge* k_s . Es ergibt sich also, in RPA,

$$k_s = \sqrt{\frac{e^2}{\varepsilon_0} 2d(E_F)}. \tag{4.367}$$

Für eine parabolische Dispersion ist dies $k_s = \sqrt{4k_F/\pi a_B}$. Für Metalle ist typischerweise $k_s \approx 0,1 \text{ nm}^{-1}$, also $1/k_s \approx 10 \text{ nm} = 100 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ m}$. Im Ortsraum erhalten wir

$$V_{\text{RPA}}^R(\mathbf{q}, 0) \cong \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} e^{-k_s r}. \quad (4.368)$$

Dies ist die durch die Polarisation des Elektronengases *abgeschirmte* Coulomb-Wechselwirkung, in RPA. Eine Testladung erzeugt eine Raumladungswolke von Elektronen oder Löchern, die die Testladung auf einer Längenskala $1/k_s$ kompensiert.



(b) Instruktiv ist auch der Fall *hoher Frequenzen* $\nu \rightarrow \infty$: Hier ist

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \nu \rightarrow \infty) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}})}{-\nu + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} - i\eta} = 0. \quad (4.369)$$

Also erhalten wir

$$V_{\text{RPA}}^R(\mathbf{q}, \nu \rightarrow \infty) = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2}. \quad (4.370)$$

Das ist die unabgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung. Das Ergebnis können wir verstehen: $\nu \rightarrow \infty$ entspricht sehr schnellen Prozessen. Auf kurzen Zeitskalen hat das Elektronengas nicht genug Zeit, eine Ladungswolke um die Testladung auszubilden.

(c) Für beliebige $\mathbf{q}$ und ν lässt sich $\chi_0^R(\mathbf{q}, \nu)$ ebenfalls in geschlossener Form angeben, wenn $k_B T \rightarrow 0$ und parabolische Dispersion angenommen werden. Die Rechnung ist etwas langwierig, aber alle Integrale über Komponenten von $\mathbf{k}$ sind elementar. Wir geben hier nur das Ergebnis an: Es ist nützlich, die dimensionslosen Größen

$$\tilde{q} := \frac{q}{2k_F}, \quad \tilde{\nu} := \frac{\nu}{4E_F} \quad (4.371)$$

zu definieren. Dann ist

$$\text{Re } \chi_0^R(\mathbf{q}, \nu) = -2d(E_F) \left[\underset{\text{dieser Term bleibt im Fall } \nu \rightarrow 0, \mathbf{q} \rightarrow 0}{\uparrow} + \frac{f(\tilde{q}, \tilde{\nu}) + f(\tilde{q}, -\tilde{\nu})}{4\tilde{q}} \right] \quad (4.372)$$

mit

$$f(\tilde{q}, \tilde{\nu}) := \left[1 - \left(\frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}} - \tilde{q} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{\tilde{q} + \tilde{q}^2 - \tilde{\nu}}{\tilde{q} - \tilde{q}^2 + \tilde{\nu}} \right| \quad (4.373)$$

und

$$\text{Im } \chi_0^R(\mathbf{q}, \nu) = -2d(E_F) \begin{cases} \frac{\pi}{2} \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}} & \text{für } 0 \leq \tilde{\nu} < |\tilde{q} - \tilde{q}^2|, \\ \frac{\pi}{8\tilde{q}} \left[1 - \left(\frac{\tilde{\nu}}{\tilde{q}} - \tilde{q} \right)^2 \right] & \text{für } |\tilde{q} - \tilde{q}^2| \leq \tilde{\nu} < \tilde{q} + \tilde{q}^2, \\ 0 & \text{für } \tilde{\nu} \geq \tilde{q} + \tilde{q}^2. \end{cases} \quad (4.374)$$

Die Suszeptibilität und damit $V_{\text{RPA}}^R(\mathbf{q}, \nu)$ sind offenbar komplex. Der Imaginärteil beschreibt *Dissipation* – Energie wird vom Elektronengas absorbiert.

Eine Motivation für diesen Abschnitt war die Divergenz der elektronischen (Selbst-) Energie in der 2. Ordnung der Störungsentwicklung nach der Wechselwirkung V_2 . Die Divergenz rührt von kleinen $\mathbf{q}$ her. Divergenzen erscheinen auch in allen höheren Ordnungen $n > 2$; wir haben ja in der RPA die am stärksten divergenten Terme in allen Ordnungen aufsummiert. Die RPA beschreibt die Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung. Im Ergebnis tritt für $\mathbf{q} \rightarrow 0$ keine Divergenz mehr auf.

Genauer hatten wir in Gl. (4.356)

$$\begin{aligned} \Sigma_\sigma^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= -\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} V_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_n) \mathcal{G}_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, i\omega_n - i\nu_n) \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 - \frac{e^2}{\varepsilon_0} \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)} \frac{1}{i\omega_n - i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}. \end{aligned} \quad (4.375)$$

Die RPA-Selbstenergie hat also dieselbe Form wie die Fock-Selbstenergie aus Abschnitt 4.7.3, nur enthält sie jetzt die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung. Die Fock-Selbstenergie ist, wie gesehen, konvergent. Die zusätzliche Abschirmung ist harmlos, da $-(e^2/\varepsilon_0) \chi_0(\mathbf{q} \rightarrow 0, \nu \rightarrow 0)$ eine positive Konstante ist, nämlich k_s^2 . k_s^2 schneidet den Pol des Integranden ab und verbessert die vorhandene Konvergenz des Fock-Terms noch.

4.8.1 Jenseits von RPA: Eliashberg-Theorie

Es soll hier kurz eine Möglichkeit der Beschreibung wechselwirkender Elektronen angedeutet werden, die über die RPA hinaus geht. Wir schreiben nochmals die elektronische Green-Funktion und die abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung auf:

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}, \quad (4.376)$$

$$V(\mathbf{q}, i\nu_n) = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 + \frac{e^2}{\varepsilon_0} \Pi(\mathbf{q}, i\nu_n)}, \quad (4.377)$$

mit der elektronischen Selbstenergie Σ_σ und der Polarisation Π . In der RPA nehmen wir für Π nur das einfache Schleifendiagramm Π_0 und in Σ_σ tritt die RPA-Wechselwirkung, aber nur die freie elektronische Green-Funktion auf.

Die *Eliashberg-Theorie* ist durch ähnliche Diagramme wie die RPA definiert, wobei aber nun alle Linien selbstkonsistent zu berechnen sind:

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \text{Diagramm: Vertikale Linie mit einem wavy Loop (Polarisation) an der Spitze}, \quad (4.378)$$

$$\Pi(\mathbf{q}, i\nu_n) = \text{Diagramm: Kreis (Schleife) mit zwei Vertikalen Linien (Green-Funktionen) an den Enden}. \quad (4.379)$$

Dies ist nur numerisch möglich, z.B. durch Iteration. Die Näherung der Eliashberg-Theorie summiert viel mehr Diagramme auf, als die RPA. Vertex-Korrekturen werden aber weiterhin nicht berücksichtigt. Die Theorie wurde ursprünglich zur Beschreibung von Supraleitung als Verbesserung der BCS-Theorie entwickelt, wo sie auch sehr erfolgreich ist, die Idee ist aber viel allgemeiner.

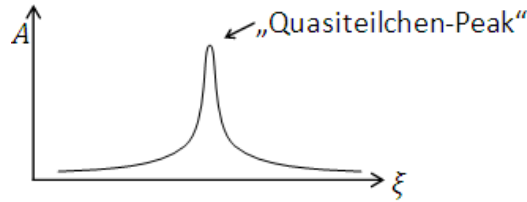
4.9 Landau-Theorie der Fermi-Flüssigkeiten

Wir können anhand der RPA die zentralen Ideen der wichtigen *Landau-Theorie* der Fermi-Flüssigkeiten verstehen. Sie sagt aus, dass die *starke* Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen in Festkörpern dazu führt, dass die Elektronen durch *schwach* wechselwirkende Quasiteilchen ersetzt werden, die weiterhin Fermionen mit Quantenzahlen $\mathbf{k}$, σ sind. Das ist überraschend, da die typische Skala der Coulomb-Wechselwirkung 1 Rydberg (einige Elektronenvolt) ist, während wir an der Physik auf Energieskalen der Größenordnung $k_B T \sim 25 \text{ meV}$ interessiert sind.

Von fundamentaler Bedeutung für die Erklärung ist die Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung durch die Polarisation des Elektronengases, die von der RPA im Wesentlichen korrekt beschrieben wird. Das stark wechselwirkende Elektronensystem schwächt durch den Mechanismus der Abschirmung die Wechselwirkung selbst ab. Ebenfalls notwendig ist das Pauli-Prinzip. Es geht nicht nur in die RPA ein (es treten ja Fermi-Funktionen auf), sondern bewirkt auch, dass nur ein kleiner Teil der Elektronen in der Nähe der Fermi-Energie überhaupt „mitspielen“.

Die Landau-Theorie erlaubt es, Methoden und Konzepte für *wechselwirkungsfreie* Elektronen auf reale Festkörper anzuwenden, z. B. die Bandstruktur. Die Landau-Theorie gilt jedoch nicht für alle Festkörper. Zum Beispiel ist CuO ein Isolator, obwohl es eine ungerade Anzahl (45) von Elektronen in der Einheitszelle hat und die Bandtheorie daher voraussagt, dass es ein Metall ist. Außerdem gilt die Landau-Theorie nur auf bestimmten Zeitskalen, wie wir gleich sehen werden.

Die Spektralfunktion aus der RPA (oder aus besseren Näherungen) sieht so aus:



Für wechselwirkungsfreie Elektronen ist sie eine δ -Distribution. Die Breite des Quasiteilchen-Peaks, also die Zerfallsrate der Quasiteilchen, ist von der Größenordnung der Streurrate $1/\tau_{\mathbf{k}}$, wobei $\tau_{\mathbf{k}}$ die schon bekannte Streuzeit ist. Es ist allgemein

$$\frac{1}{2\tau_{\mathbf{k}}} = -\text{Im} \Sigma^R(\mathbf{k}, \omega). \quad (4.380)$$

Wir hatten dies für die Störstellenstreuung explizit hergeleitet. Das Quasiteilchen-Bild ist nur sinnvoll auf Zeitskalen $t \ll \tau_{\mathbf{k}}$, da die Quasiteilchen andernfalls zerfallen.

Wir hatten gesehen, dass für große Frequenzen (kleine Zeiten) die Coulomb-Wechselwirkung nicht abgeschirmt wird. Dann müssen wir die stark wechselwirkenden Elektronen explizit betrachten, nicht schwach wechselwirkende Quasiteilchen. Die typische Frequenzskala lässt sich aus

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \nu) = 2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}})}{-\nu + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} - i\eta} \quad (4.381)$$

ablesen: Die Unterdrückung von χ_0^R für große Frequenzen setzt offenbar bei $\nu \sim |\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}}|$ ein. Wegen der Fermi-Funktionen ist die typische Energieskala $|\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}}| \sim k_B T$. Von Quasiteilchen können wir also nur für

$$t \gg \frac{1}{k_B T} \quad (4.382)$$

ausgehen.

Ob wir in der Beschreibung eines Experiments vom Quasiteilchen-Bild ausgehen können, hängt also von der typischen Zeitskala des Experiments ab. Die Landau-Theorie gilt – falls sie überhaupt zutrifft – nur auf Zeitskalen

$$\frac{1}{k_B T} \ll t \ll \tau_{\mathbf{k}}. \quad (4.383)$$

4.10 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Wir kennen den Hamiltonian für das gekoppelte Elektron-Phonon-System bereits aus Abschnitt 3.4:

$$H = \underbrace{H_e + H_{\text{ph}}}_{= H_0} + H_{\text{e-ph}} \quad (4.384)$$

mit

$$H_{\text{ph}} = \sum_{\mathbf{q}\lambda} \Omega_{\mathbf{q}\lambda} \left(b_{\mathbf{q}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right), \quad (4.385)$$

$$H_{\text{e-ph}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \underbrace{g_{\mathbf{q}\lambda}}_{\substack{\uparrow \\ \text{Kopplungsstärke}}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \underbrace{(b_{\mathbf{q}\lambda} + b_{-\mathbf{q}\lambda}^\dagger)}_{=: A_{\mathbf{q}\lambda} \sim \text{Auslenkung}}. \quad (4.386)$$

Gleichung (3.121) zeigt, dass der hier definierte Feldoperator $A_{\mathbf{q}\lambda}$ im Wesentlichen die *Auslenkung* der Kerne beschreibt. Wir gehen zum Wechselwirkungsbild in der imaginären Zeit über,

$$A_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) = e^{\tau H_0} A_{\mathbf{q}\lambda} e^{-\tau H_0} = e^{\tau H_{\text{ph}}} A_{\mathbf{q}\lambda} e^{-\tau H_{\text{ph}}}, \quad (4.387)$$

und führen die Matsubara-Green- (oder Korrelations-) Funktion für den Feldoperator A ein:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\lambda^0(\mathbf{q}, \tau) &:= -\langle T_\tau A_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) A_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 \\ &\equiv -\langle T_\tau A_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) A_{-\mathbf{q}\lambda,I}(0) \rangle_0 \\ &= -\langle T_\tau b_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 - \langle T_\tau b_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{-\mathbf{q}\lambda,I}(0) \rangle_0 \\ &\quad - \langle T_\tau b_{-\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(\tau) b_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 - \langle T_\tau b_{-\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(\tau) b_{-\mathbf{q}\lambda,I}(0) \rangle_0. \end{aligned} \quad (4.388)$$

Die *anormalen* Green-Funktionen, die bb oder $b^\dagger b^\dagger$ enthalten, verschwinden, da H_0 die Phononenzahl erhält. Es bleibt

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\lambda^0(\mathbf{q}, \tau) &= -\langle T_\tau b_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 - \langle T_\tau b_{-\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(\tau) b_{-\mathbf{q}\lambda,I}(0) \rangle_0 \\ &= -\langle T_\tau b_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 - \langle T_\tau b_{-\mathbf{q}\lambda,I}(0) b_{-\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(\tau) \rangle_0 \\ &= -\langle T_\tau b_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 - \langle T_\tau b_{-\mathbf{q}\lambda,I}(-\tau) b_{-\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 \end{aligned} \quad (4.389)$$

und, mit Gl. (4.136),

$$\mathcal{D}_\lambda^0(\mathbf{q}, \tau) = -\langle T_\tau b_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 - \langle T_\tau b_{-\mathbf{q}\lambda,I}(-\tau + \beta) b_{-\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0. \quad (4.390)$$

Für die Fourier-transformierte Matsubara-Green-Funktion

$$\mathcal{D}_\lambda^0(\mathbf{q}, i\nu_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n \tau} \mathcal{D}_\lambda^0(\mathbf{q}, \tau) \quad (4.391)$$

mit bosonischen Matsubara-Frequenzen $i\nu_n = i2\pi n/\beta$ erhalten wir, vgl. Abschnitt 4.4,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_\lambda^0(\mathbf{q}, i\nu_n) &= -\int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n \tau} \langle T_\tau b_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 - \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n \tau} \langle T_\tau b_{-\mathbf{q}\lambda,I}(-\tau + \beta) b_{-\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 \\ &= -\int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n \tau} \langle T_\tau b_{\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 - \int_0^\beta d\tau \underbrace{e^{i\nu_n(\beta-\tau)}}_{= e^{-i\nu_n \tau}} \langle T_\tau b_{-\mathbf{q}\lambda,I}(\tau) b_{-\mathbf{q}\lambda,I}^\dagger(0) \rangle_0 \\ &= \frac{1}{i\nu_n - \Omega_{\mathbf{q}\lambda}} + \frac{1}{-i\nu_n - \Omega_{-\mathbf{q}\lambda}} \\ &= \frac{1}{i\nu_n - \Omega_{\mathbf{q}\lambda}} + \frac{1}{-i\nu_n - \Omega_{\mathbf{q}\lambda}} \quad \left| \quad \text{Dispersion } \Omega_{\mathbf{q}\lambda} \text{ ist gerade} \right. \end{aligned}$$

$$= \frac{2\Omega_{\mathbf{q}\lambda}}{(i\nu_n)^2 - \Omega_{\mathbf{q}\lambda}^2}. \quad (4.392)$$

Zur Untersuchung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung schreiben wir

$$H_0 = H_e + H_{\text{ph}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}\lambda} \Omega_{\mathbf{q}\lambda} \left(b_{\mathbf{q}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.393)$$

Dieser ungestörte Hamiltonian beschreibt entkoppelte Elektronen und Phononen. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung $H_{\text{e-ph}}$ können wir perturbativ behandeln. In Analogie zum Fall der Coulomb-Wechselwirkung, die hier zunächst vernachlässigt wird, können wir die *elektronische* Green-Funktion als

$$\mathcal{G}_\sigma(\mathbf{k}, \tau) = - \frac{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_m \langle T_\tau H_{\text{e-ph}, I}(\tau_1) \cdots H_{\text{e-ph}, I}(\tau_m) c_{\mathbf{k}\sigma, I}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma, I}^\dagger(0) \rangle_0}{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_m \langle T_\tau H_{\text{e-ph}, I}(\tau_1) \cdots H_{\text{e-ph}, I}(\tau_m) \rangle_0} \quad (4.394)$$

schreiben. Wie oben wollen wir diesen Ausdruck mit Hilfe von Feynman-Diagrammen in den Griff bekommen. $\langle \dots \rangle_0$ ist ein Gleichgewichtsmittelwert über sowohl fermionische als auch bosonische Felder. Für beide gilt das Wick-Theorem separat. Insbesondere zerfällt der bosonische Mittelwert in Faktoren der Form

$$g_{\mathbf{q}_i \lambda_i} g_{\mathbf{q}_j \lambda_j} \langle T_\tau A_{\mathbf{q}_i \lambda_i, I}(\tau_i) A_{\mathbf{q}_j \lambda_j, I}(\tau_j) \rangle_0 = -\delta_{\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_j} \delta_{\lambda_i \lambda_j} |g_{\mathbf{q}_i \lambda_i}|^2 \mathcal{D}_{\lambda_i}^0(\mathbf{q}_i, \tau_i - \tau_j). \quad (4.395)$$

Für ungerades m bleibt immer ein Term erster Ordnung $g_{\mathbf{q}_i \lambda_i} \langle A_{\mathbf{q}_i \lambda_i, I}(\tau_i) \rangle_0 = 0$ übrig. Also tragen nur gerade m bei und wir schreiben $m = 2n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Nach Ausführung der bosonischen Mittelung erhalten wir Ausdrücke der Form

$$\begin{aligned} & \dots \int_0^\beta d\tau_i d\tau_j \sum_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \sum_{\mathbf{k}_2\sigma_2} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \frac{1}{2\mathcal{V}^2} |g_{\mathbf{q}\lambda}|^2 \mathcal{D}_\lambda^0(\mathbf{q}, \tau_i - \tau_j) \\ & \times c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1,I}^\dagger(\tau_j) c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2,I}^\dagger(\tau_i) c_{\mathbf{k}_2\sigma_2,I}(\tau_i) c_{\mathbf{k}_1\sigma_1,I}(\tau_j) \dots =: \dots \int_0^\beta d\tau_i P_I(\tau_i) \dots \end{aligned} \quad (4.396)$$

Die zweite Zeit-Integration (über τ_j) ist in $P_I(\tau_i)$ enthalten. P beschreibt die *effektive Wechselwirkung* zwischen den Elektronen aufgrund des Austausches von Phononen. Sie ist im Gegensatz zur Coulomb-Wechselwirkung nicht instantan: Es treten elektronische Operatoren zu zwei Zeiten auf. Wir können dennoch Feynman-Diagramme ganz analog zur Coulomb-Wechselwirkung definieren, indem wir die Coulomb-Wechselwirkung

$$\bullet \text{---}\omega\text{---}\bullet \equiv -V_C(\mathbf{q}), \quad (4.397)$$

die wir jetzt zur Unterscheidung als V_G schreiben, durch den Phononenaustausch

$$\text{wavy line with dots} \equiv -\frac{1}{\mathcal{V}} |g_{\mathbf{q}\lambda}|^2 \mathcal{D}_\lambda^0(\mathbf{q}, i\nu_n) \quad (4.398)$$

ersetzen. Der einzige wesentliche Unterschied ist, dass dieser Ausdruck im Gegensatz zu $-V_C$ von der Frequenz $i\nu_n$ abhängt.

Wir können nun die elektronische Selbstenergie aufgrund der Elektron-Phonon-Wechselwirkung hinschreiben:

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots \quad (4.399)$$

Das erste Diagramm müssen wir (überall, auch als Teildiagramm) weglassen, weil Phononen mit $\mathbf{q} = 0$ Translationen des gesamten Kristalls entsprechen, an die die Elektronen nicht koppeln. Siehe auch Abschnitt 3.4.

4.10.1 Jellium-Phononen

Wir benötigen ein konkretes, einfaches Modell für die Phononen, um weiter rechnen zu können. Wir diskutieren daher zunächst Phononen im Jellium-Modell. In diesem Modell werden die Kerne (oder Ionenrümpfe) durch eine glatte Ladungsdichte $\rho_+(\mathbf{r}, t)$ beschrieben, die im Gleichgewicht $\rho_+(\mathbf{r}, t) = \rho_+^0 = \text{const}$ ist. Wenn wir die Abschirmung durch die Elektronen zunächst vernachlässigen, ist die Rückstellkraft für Auslenkung von ϱ_+ aus dem Gleichgewicht die langreichweitige Coulomb-Kraft. Mit

$$\varrho_+(\mathbf{r}, t) = \varrho_+^0 + \delta\varrho_+(\mathbf{r}, t) \quad (4.400)$$

wird

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon_0} \delta\varrho_+, \quad (4.401)$$

da ϱ_+^0 von der elektronischen Ladungsdichte kompensiert wird. Die Kraft*dichte* ist $\mathbf{f} = \varrho_+ \mathbf{E} \cong \varrho_+^0 \mathbf{E}$ in führender Ordnung in $\delta\varrho_+$. Es folgt

$$\nabla \cdot \mathbf{f} \cong \frac{\varrho_+^0}{\varepsilon_0} \delta\varrho_+. \quad (4.402)$$

Ladungserhaltung wird durch die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho_+ + \nabla \cdot \underbrace{\varrho_+ \mathbf{v}}_{\mathbf{j}_+} = 0 \quad (4.403)$$

ausgedrückt. In führender Ordnung lautet diese

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\varrho_+ + \varrho_+^0 \nabla \cdot \mathbf{v} \cong 0 \quad (4.404)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\varrho_+ \cong -\varrho_+^0 \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} \stackrel{\text{Newton}}{=} -\varrho_+^0 \nabla \cdot \frac{\mathbf{f}}{\varrho_m} \quad (4.405)$$

mit der Massendichte ϱ_m der Ionenrümpfe. Es folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\varrho_+ &\cong -\frac{Z_{\text{eff}} e}{M} \nabla \cdot \mathbf{f} & \left| \begin{array}{l} Z_{\text{eff}} e: \text{Ionenladung} \\ M: \text{Ionenmasse} \end{array} \right. \\ &\cong -\frac{Z_{\text{eff}} e}{M} \frac{\varrho_+^0}{\varepsilon_0} \delta\varrho_+. \end{aligned} \quad (4.406)$$

Die Lösung dieser Gleichung lautet

$$\delta\varrho_+(\mathbf{r}, t) = \delta\varrho_+(\mathbf{r}) e^{-i\Omega t} \quad (4.407)$$

$$\Rightarrow \Omega^2 \cong \frac{Z_{\text{eff}} e}{M} \frac{\varrho_+^0}{\varepsilon_0} \quad (4.408)$$

$$\Rightarrow \Omega \cong \sqrt{\frac{Z_{\text{eff}} e \varrho_+^0}{\varepsilon_0 M}} = \sqrt{\frac{Z_{\text{eff}}^2 e^2 n_+^0}{\varepsilon_0 M}} \quad (4.409)$$

mit der Ionenkonzentration n_+^0 . Wir finden eine *konstante* Frequenz, also eine optische Mode mit flacher Dispersion. Das steht im Widerspruch zur Beobachtung akustischer Phononen mit linearer Dispersion bei kleinen Wellenvektoren. Wir werden noch sehen, wie diese lineare Dispersion dennoch richtig vorhergesagt wird.

Mit Methoden aus Abschnitt 3.4 erhalten wir auch die Elektron-Phonon-Kopplung

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathcal{V}} |g_{\mathbf{q}}|^2 &= \frac{1}{\mathcal{V}} \left(\frac{Z_{\text{eff}} e^2}{\varepsilon_0 q} \right)^2 \frac{N}{2M\Omega} & \left| n_+^0 = \frac{N}{\mathcal{V}} \right. \\ &= \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2} \frac{\Omega}{2} = \frac{1}{2} \underbrace{V_C(\mathbf{q})}_{\text{Coulomb-WW}} \Omega. & \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2} \end{aligned} \quad (4.410)$$

$$\begin{aligned}
& + \text{diagram with one loop} \\
& + \text{diagram with two loops} + \dots \\
& = \text{diagram with one loop} + \text{diagram with two loops}
\end{aligned} \tag{4.417}$$

zu ersetzen. Diese Dyson-Gleichung hat die Lösung

$$\text{diagram} = \frac{\text{diagram}}{1 - \text{diagram}}, \tag{4.418}$$

oder als mathematische Gleichung

$$\mathcal{V}_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_n) = \frac{\mathcal{V}_{\text{eff}}^0(\mathbf{q}, i\nu_n)}{1 - V_{\text{eff}}^0(\mathbf{q}, i\nu_n)\chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)}. \tag{4.419}$$

Wir kennen bereits

$$V_{\text{eff}}^0(\mathbf{q}, i\nu_n) = V_C(\mathbf{q}) \frac{(i\nu_n)^2}{(i\nu_n)^2 - \Omega^2}. \tag{4.420}$$

Daher ist

$$\begin{aligned}
V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_n) &= \frac{V_C(\mathbf{q}) \frac{(i\nu_n)^2}{(i\nu_n)^2 - \Omega^2}}{1 - V_C(\mathbf{q}) \frac{(i\nu_n)^2}{(i\nu_n)^2 - \Omega^2} \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)} \\
&= V_C(\mathbf{q}) \frac{(i\nu_n)^2}{(i\nu_n)^2 - \Omega^2 - (i\nu_n)^2 V_C(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)} \\
&= \frac{V_C(\mathbf{q})}{1 - V_C(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)} \frac{(i\nu_n)^2 - (i\nu_n)^2 V_C(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)}{(i\nu_n)^2 - \Omega^2 - (i\nu_n)^2 V_C(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)} \\
&\stackrel{\text{s. Abschnitt 4.8}}{\rightarrow} = V_C^{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_n) \frac{(i\nu_n)^2}{(i\nu_n)^2 - \frac{\Omega^2}{1 - V_C(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)}} \\
&=: V_C^{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\nu_n) \frac{(i\nu_n)^2}{(i\nu_n)^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2(i\nu_n)}
\end{aligned} \tag{4.421}$$

mit der *renormierten Phononenfrequenz*

$$\omega_{\mathbf{q}}(i\nu_n) = \frac{\Omega}{\sqrt{1 - V_C(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, i\nu_n)}}. \tag{4.422}$$

Im statischen Grenzfall und für kleine $\mathbf{q}$ hatten wir $\chi_0 \rightarrow -2d(E_F)$ gefunden [$2d(E_F)$ ist die Zustandsdichte an der Fermi-Energie]. Daher folgt in diesem Limes

$$1 - V_C(\mathbf{q}) \chi_0 \cong 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2} 2d(E_F) \cong \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2} 2d(E_F) \equiv \frac{k_s^2}{q^2}. \tag{4.423}$$

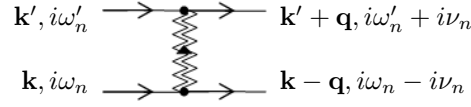
Damit wird

$$\omega_{\mathbf{q}} \cong \frac{\Omega}{k_s} q. \tag{4.424}$$

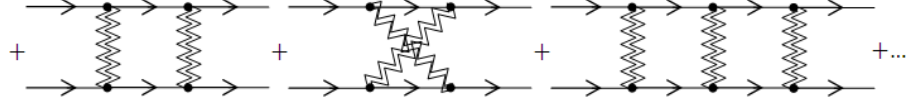
Durch die elektronische Abschirmung erhalten wir eine *akustische* Dispersion der Jellium-Phononen. Das ist natürlich ein beruhigendes Ergebnis. Es zeigt, dass die Dispersion vom Jellium-Modell qualitativ korrekt beschrieben wird, wenn man die elektronische Abschirmung berücksichtigt.

Allgemein, also nicht beschränkt auf den statischen Fall und kleine $\mathbf{q}$, findet man für den Realteil der retardierten effektiven Wechselwirkung, $\text{Re } V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$, folgende Form für gegebenes $\mathbf{q}$:

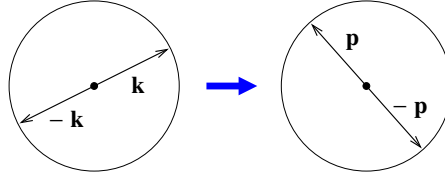
wie wir in Abschnitt 4.10 gesehen haben. Zwei Elektronen können aufgrund dieser Wechselwirkung aneinander streuen:



Sie können auch mehrfach streuen:



Eine Instabilität tritt bereits auf, wenn wir nur die *Leiterdiagramme*, nicht alle Diagramme, aufsummieren und nur die Streuung zweier Elektronen mit entgegengesetztem Impuls und Spin und entgegengesetzter Matsubara-Frequenz betrachten. Wir beschränkten uns daher auf Diagramme, die diese Situation beschreiben. Es ist naheliegend, dass die Streuung zwischen Zuständen mit entgegengesetztem Impuls dominiert: Der Gesamtimpuls ist dann natürlich Null, was den größtmöglichen Phasenraum für erlaubte Endzustände ergibt:



Wir definieren den *Streuvertex* Λ durch

$$\Lambda \equiv \text{diagram with shaded box } \Lambda + \text{diagram with two wavy lines} + \text{diagram with two wavy lines and a shaded box } \Lambda + \dots \quad (4.426)$$

Wir können diese geometrische Reihe analog zu einer Dyson-Reihe aufsummieren:

$$\Lambda = \text{diagram with two wavy lines} + \text{diagram with two wavy lines and a shaded box } \Lambda \quad (4.427)$$

oder in mathematischer Form

$$\Lambda(\mathbf{k}, i\omega_n; \mathbf{p}, i\Omega_n) = -V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(\mathbf{k} - \mathbf{p}, i\omega_n - i\Omega_n) + \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} [-V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, i\omega_n - i\nu_n)] \times \mathcal{G}_{\uparrow}^0(\mathbf{q}, i\nu_n) \mathcal{G}_{\downarrow}^0(-\mathbf{q}, -i\nu_n) \Lambda(\mathbf{k}, i\nu_n; \mathbf{p}, i\Omega_n). \quad (4.428)$$

Diese Gleichung für den Streuvertex nennt man *Bethe-Salpeter-Gleichung*. Um weiter rechnen zu können, betrachten wir eine vereinfachte Form von $V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}$, die die wesentliche Physik enthält. Wir haben gesehen, dass $V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}$ für $\omega < \omega_{\mathbf{q}}$ anziehend ist (wir vernachlässigen auch den Imaginärteil von $\omega_{\mathbf{q}}$). Die einfachste Wechselwirkung mit dieser Eigenschaft ist

$$V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) \approx \begin{cases} -V < 0 & \text{für } |\omega| < \omega_{\mathbf{q}}, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.429)$$

Die typische Energieskala für die Phononendispersion $\omega_{\mathbf{q}}$ ist die Debye-Frequenz ω_D . Also vereinfachen wir weiter zu

$$V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) \approx \begin{cases} -V & \text{für } |\omega| < \omega_D, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.430)$$

Diese genäherte Wechselwirkung ist nun auch im statischen Grenzfall $\omega \rightarrow 0$ anziehend und führt daher sehr wahrscheinlich auf falsche Voraussagen, wenn wir damit gebundene Zustände berechnen. Das tun wir aber nicht – wir betrachten nur Streuprozesse. Daher ist die Näherung in dieser Hinsicht nicht unphysikalisch. Die Wechselwirkung ist auch insofern pathologisch, als sie im Realraum eine unendliche Reichweite hat. Das ist hier harmlos, weil wir die Streuung zwischen Impulseigenzuständen betrachten, die ohnehin unendlich ausgedehnte ebene Wellen (oder Bloch-Wellen) sind.

Für die Wechselwirkung als Funktion der komplexen Frequenz z setzen wir entsprechend

$$V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(\mathbf{q}, z) \approx \begin{cases} -V & \text{für } |z| < \omega_D, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.431)$$

Da unsere Näherung für $V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}$ nun nicht mehr von den Impulsen abhängt, machen wir für den Streuvertex Λ einen analogen Ansatz: $\Lambda \approx \Lambda(i\omega_n, i\Omega_n)$. Die Bethe-Salpeter-Gleichung (4.428) wird dann zu

$$\begin{aligned} \Lambda(i\omega_n, i\Omega_n) &\approx -V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(i\omega_n - i\Omega_n) + \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} [-V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(i\omega_n - i\nu_n)] \\ &\times \mathcal{G}_{\uparrow}^0(\mathbf{q}, i\nu_n) \mathcal{G}_{\downarrow}^0(-\mathbf{q}, -i\nu_n) \Lambda(i\nu_n, i\Omega_n). \end{aligned} \quad (4.432)$$

Während $V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}$ eine Sprungfunktion der Frequenz ist, hängt die Lösung Λ wegen des zweiten Terms in komplizierterer Weise von ihren Frequenzargumenten ab. Λ ist aber jedenfalls eine fallende Funktion von $|i\omega_n - i\Omega_n|$. Ebenso ist der Summand eine fallende Funktion von $|i\nu_n|$. Um eine Abschätzung für Λ zu erhalten, folgen wir der historischen Argumentation von Cooper (1956) und ersetzen diese fallenden Funktionen durch Sprungfunktionen,

$$\Lambda(i\omega_n, i\Omega_n) \approx \begin{cases} \Lambda & \text{für } |i\omega_n - i\Omega_n| < \omega_D, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.433)$$

$$\text{und } V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(i\omega_n - i\nu_n) \Lambda(i\nu_n, i\Omega_n) \approx \begin{cases} -V\Lambda & \text{für } |i\nu_n| < \omega_D, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.434)$$

Dann wird

$$\Lambda \approx V + \frac{1}{\beta} \sum_{\substack{i\nu_n \\ |i\nu_n| < \omega_D}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} V \mathcal{G}_{\uparrow}^0(\mathbf{q}, i\nu_n) \mathcal{G}_{\downarrow}^0(-\mathbf{q}, -i\nu_n) \Lambda \quad (4.435)$$

$$\Rightarrow \Lambda \approx \frac{V}{1 - V \frac{1}{\beta} \sum_{\substack{i\nu_n \\ |i\nu_n| < \omega_D}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{G}_{\uparrow}^0(\mathbf{q}, i\nu_n) \mathcal{G}_{\downarrow}^0(-\mathbf{q}, -i\nu_n)}. \quad (4.436)$$

Wir erkennen, dass der Nenner zu Null wird, wenn

$$V \frac{1}{\beta} \sum_{\substack{i\nu_n \\ |i\nu_n| < \omega_D}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{G}_{\uparrow}^0(\mathbf{q}, i\nu_n) \mathcal{G}_{\downarrow}^0(-\mathbf{q}, -i\nu_n) = 1 \quad (4.437)$$

gilt. In diesem Fall divergiert der Streuvertex Λ offenbar, die Streuung zweier Elektronen wird dann unendlich stark. Dies zeigt an, dass die Störungsentwicklung in $V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}$ (oder V) zusammenbricht. Das heißt, der wahre Gleichgewichtszustand kann aus dem ungestörten Gleichgewichtszustand für $V = 0$, dem wechselwirkungsfreien Fermi-Gas, nicht mehr durch Störungsrechnung erhalten werden. Also ist der wahre Gleichgewichtszustand nun keine Fermi-Flüssigkeit mehr, denn diese geht gemäß der Landau-Theorie durch eine kleine Störung aus dem wechselwirkungsfreien Fermi-Gas hervor. Diese Instabilität der Landau-Fermi-Flüssigkeit nennt man die *Cooper-Instabilität*.

Der Ausdruck in Gl. (4.437) hängt von der Temperatur ab. Um zu sehen, bei welcher Temperatur die Cooper-Instabilität auftritt, betrachten wir die linke Seite von Gl. (4.437):

$$Vk_B T \sum_{\substack{i\nu_n \\ |i\nu_n| < \omega_D}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{i\nu_n - \xi_{\mathbf{q}}} \frac{1}{-i\nu_n - \xi_{\mathbf{q}}} = Vk_B T \sum_{\substack{i\nu_n \\ |i\nu_n| < \omega_D}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi d(\xi + \mu) \frac{1}{\nu_n^2 - \xi^2} \quad (4.438)$$

mit der Zustandsdichte pro Spin-Richtung, $d(E)$. Unter der Annahme, dass diese in der Nähe der Fermi-Energie näherungsweise konstant ist, ergibt sich

$$\begin{aligned} \dots &\approx V k_B T d(E_F) \sum_{\substack{i\nu_n \\ |i\nu_n| < \omega_D}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{\nu_n^2 - \xi^2}}_{= \pi/|\nu_n|} = V k_B T d(E_F) 2\pi \sum_{n=0}^{\beta\omega_D/2\pi} \frac{1}{(2n+1)\pi\beta} \\ &= V d(E_F) \sum_{n=0}^{\beta\omega_D/2\pi} \frac{1}{n+1/2} \cong V d(E_F) \left[C + \ln \left(4 \frac{\beta\omega_D}{2\pi} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.439)$$

für $\beta\omega_D \gg 1$, also $k_B T \ll \omega_D$, was für relevante Temperaturen im Allgemeinen gilt. ($C \approx 0,577216$ ist die Euler-Konstante.) Wir finden eine Temperaturabhängigkeit der Form $-\ln(k_B T/\omega_D)$, also nimmt dieser Ausdruck mit wachsender Temperatur ab.

Senken wir die Temperatur von hohen Werten (aber noch $k_B T \ll \omega_D$) kommend, so wächst der Ausdruck in Gl. (4.437) an und wird schließlich eins. Die entsprechende Temperatur nennt man *kritische Temperatur* oder *Sprungtemperatur* T_c . Bei $T \rightarrow T_c^+$ divergiert Λ also. Für $\beta_c \equiv 1/k_B T_c$ erhalten wir

$$\ln \frac{2e^C \beta_c \omega_D}{\pi} \approx \frac{1}{V d(E_F)} \quad (4.440)$$

$$\Rightarrow \beta_c \approx \frac{\pi}{2e^C \omega_D} \exp \left(\frac{1}{V d(E_F)} \right) \quad (4.441)$$

$$\Rightarrow k_B T_c \approx \underbrace{\frac{2e^C}{\pi}}_{\text{Zahl} \sim 1} \omega_D \exp \left(-\frac{1}{V d(E_F)} \right). \quad (4.442)$$

Wir diskutieren dieses Ergebnis noch etwas. Die hier auftretende Debye-Energie ω_D entspricht typischerweise einer Temperatur $T_D = \omega_D/k_B$ von einigen hundert Kelvin, der Debye-Temperatur. Der Exponentialfaktor ist aber von der Größenordnung $\sim 1/100$, so dass T_c typischerweise einige Kelvin beträgt.

Es ist zu beachten, dass $k_B T_c$ keine holomorphe Funktion von V bei $V = 0$ ist. Daher kann $k_B T_c$, d. h. die typische Energieskala der Cooper-Instabilität, nicht in Störungstheorie endlicher Ordnung in V erhalten werden. Wir finden $T_c > 0$ für beliebig schwache anziehende Wechselwirkung V . Diese Folgerung muss mit Vorsicht betrachtet werden, da andere Instabilitäten (z. B. Stoner-Ferromagnetismus) der Cooper-Instabilität zuvorkommen können.

4.11.2 Der BCS-Grundzustand

Wir hatten gesehen, dass die Streuung zwischen Elektronen in Zuständen $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$ und $|\mathbf{k}, \downarrow\rangle$ für $T \rightarrow T_c^+$ divergiert. Hier wird der Fermi-See instabil. Dieses Ergebnis des vorigen Abschnitts sagt uns aber noch nicht, was für ein Zustand an seine Stelle tritt. Für diesen neuen Zustand haben Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS) einen Ansatz formuliert. Dieser geht davon aus, dass Elektronen in den Einteilchenzuständen $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$, $|\mathbf{k}, \downarrow\rangle$ (Cooper-) *Paare* bilden, und dass der Vielteilchen-Zustand aus solchen Paaren zusammengesetzt ist. Er wird oft *BCS-Grundzustand* genannt und wir werden im folgenden Abschnitt sehen, dass er tatsächlich der Grundzustand eines (Mean-Field-) Hamiltonians ist. Dabei ist zu beachten, dass dieser Hamiltonian und damit auch der BCS-Zustand von der Temperatur abhängt; den Grundzustand im engeren Sinne erhalten wir im Limes $T \rightarrow 0$. Der Ansatz von BCS lautet

$$|\psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (4.443)$$

↑
Vakuum

In diesem Zustand sind die Besetzungszahlen für die Einteilchenzustände $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$ und $|\mathbf{k}, \downarrow\rangle$ offenbar maximal korreliert: Es sind entweder beide oder keiner von beiden besetzt. Der BCS-Grundzustand $|\psi_{\text{BCS}}\rangle$ ist offenbar eine Superposition von Zuständen mit unterschiedlich vielen Paaren. Er hat damit eine merkwürdige Eigenschaft: Er ist eine Superposition von Zuständen mit unterschiedlicher Elektronenzahl; die Elektronenzahl in $|\psi_{\text{BCS}}\rangle$ ist nicht scharf. Daher können Ausdrücke mit ungleicher Anzahl von Erzeugern und Vernichtern einen endlichen Erwartungswert haben. Insbesondere ist im Allgemeinen $\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \neq 0$.

Die $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ sind noch unbekannte komplexe Koeffizienten. Diese können durch Minimierung der Energie

$$\langle H \rangle_{\text{BCS}} = \langle \psi_{\text{BCS}} | H | \psi_{\text{BCS}} \rangle \quad (4.444)$$

unter der Nebenbedingung $\langle \psi_{\text{BCS}} | \psi_{\text{BCS}} \rangle = 1$ bestimmt werden. (Bei Temperaturen $T > 0$ muss die freie Energie minimiert werden.) $|\psi_{\text{BCS}}\rangle$ ist also ein Variationsansatz. Dies ist z. B. in Schrieffer's Buch (siehe Bibliographie) dargestellt. Wir folgen hier jedoch einem anderen Weg, der dieselben Ergebnisse liefert und auch den BCS-Ansatz rechtfertigt.

4.11.3 BCS-Theorie

Die BCS-Theorie beruht auf einer Mean-Field-Entkopplung (siehe Abschnitt 4.2) im Hamiltonian

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}. \quad (4.445)$$

Hier ist $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ die anziehende Wechselwirkung aufgrund der Elektron-Elektron- und Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

Wir definieren nun

$$\Delta_{\mathbf{k}} := - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle. \quad (4.446)$$

Im thermischen Mittelwert $\langle \dots \rangle$ stehen zwei Vernichtungsoperatoren. Der Mittelwert kann nur dann von Null verschieden sein, wenn wir nach Vernichtung zweier Teilchen mit einer nicht verschwindenden Wahrscheinlichkeit in demselben Zustand landen. Das kann nur für Zustände ohne feste Teilchenzahl zutreffen. $\Delta_{\mathbf{k}}$ hat die Dimension einer Energie. Wir werden später sehen, welche physikalische Bedeutung diese Größe hat. Damit entkoppeln wir nun den Hamiltonian H und erhalten den Mean-Field-Hamiltonian

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - \underbrace{\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle}_{\text{irrelevante Konstante}}. \quad (4.447)$$

H_{BCS} ist von zweiter Ordnung in $c, c^\dagger$, enthält aber, anders als in Abschnitt 4.2, Terme der Form cc und $c^\dagger c^\dagger$. Daher kommutiert H_{BCS} nicht mit der Teilchenzahl, diese ist also nicht erhalten. Daher erwarten wir, dass die Eigenzustände Superpositionen von Zuständen unterschiedlicher Teilchenzahl sind, konsistent mit der eben gefundenen Bedingung für $\Delta_{\mathbf{k}} \neq 0$. (Der BCS-Ansatz für den Grundzustand hatte bereits diese Eigenschaft.) Das ist etwas merkwürdig, weil Superpositionen von Zuständen unterschiedlicher Teilchenzahl nie beobachtet werden. Man kann die Zustände aber auf feste Teilchenzahl einschränken, auf Kosten einer komplizierteren Herleitung. Wir tun dies hier nicht.

Wir wollen als nächstes H_{BCS} diagonalisieren. Da Zustände unterschiedlicher Teilchenzahl mischen, führen wir neue Operatoren ein, die Linearkombinationen von Elektronenerzeugern und -vernichtern sind:

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.448)$$

Dies nennt man *Bogoliubov-* (oder Bogoliubov-Valatin-) *Transformation*. Man kann leicht zeigen, dass $\gamma, \gamma^\dagger$ die fermionischen Antivertauschungsrelationen erfüllen, wenn man $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ fordert. Die neuen γ -Quasiteilchen sind also Fermionen.

Unter Ausnutzung von $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ lautet die Rücktransformation

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.449)$$

Einsetzen in H_{BCS} ergibt

$$\begin{aligned} H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} \Big\{ & \xi_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}) (u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \\ & + \xi_{\mathbf{k}} (v_{-\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\uparrow} + u_{-\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (v_{-\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + u_{-\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}) \Big\} \end{aligned}$$

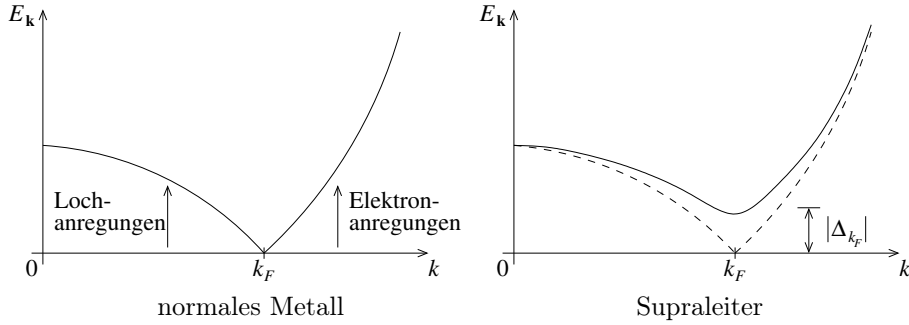
$$\begin{aligned}
& -\Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}) (v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \\
& -\Delta_{\mathbf{k}}^* (v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}) (u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \Big\} + \text{const} \\
& = \sum_{\mathbf{k}} \Big\{ (\xi_{\mathbf{k}} |u_{\mathbf{k}}|^2 - \xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^*) \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\
& + (-\xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 + \xi_{\mathbf{k}} |u_{\mathbf{k}}|^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^*) \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow} \\
& + (-\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^*)^2) \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \\
& + (-\xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^*)^2) \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \Big\} + \text{const}. \tag{4.450}
\end{aligned}$$

Die Koeffizienten $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ sind nun so zu wählen, dass die anomalen Terme der Form $\gamma\gamma$ und $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$ verschwinden, der Hamiltonian also diagonal wird. Man zeigt, dass dies der Fall ist, wenn gilt

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad \wedge \quad |v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad \wedge \quad \underbrace{\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}}_{\in \mathbb{R}} < 0 \tag{4.451}$$

mit $E_{\mathbf{k}} := \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$, denn dann ist

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}) + \text{const}. \tag{4.452}$$



Die Betrachtung der rechts skizzierten Dispersion der Quasiteilchen zeigt, dass die fermionischen Anregungen eines Supraleiters eine *Energielücke* der Größe $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ haben, wobei $\mathbf{k}$ auf der Fermi-Fläche des nicht wechselwirkenden Systems liegt ($\xi_{\mathbf{k}} = 0$). Für parabolische Dispersion und auf der Fermi-Fläche konstantes $\Delta_{\mathbf{k}}$ können wir die Energielücke als $|\Delta_{k_F}|$ schreiben.

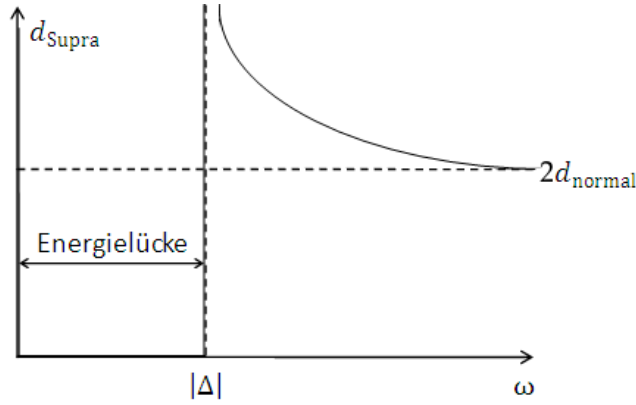
Aus der Dispersionsrelation $E_{\mathbf{k}}$ der Quasiteilchen erhalten wir unmittelbar die Zustandsdichte pro Spin-Richtung, hier in Einheiten inverser Energie,

$$d_{\text{supra}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}) = v_{\text{EZ}} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta\left(\omega - \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}\right). \tag{4.453}$$

Ist die Zustandsdichte d_{normal} im normalleitenden Zustand näherungsweise konstant und ist $\Delta_{\mathbf{k}}$ unabhängig von $\mathbf{k}$, so enthält man mit etwas Rechnung

$$\frac{d_{\text{supra}}(\omega)}{d_{\text{normal}}(0)} = \frac{2\omega}{\sqrt{\omega^2 - |\Delta|^2}} \theta(\omega - |\Delta|). \tag{4.454}$$

Der Faktor 2 stammt daher, dass wir die Loch-Anregungen auch mit positiver Energie zählen.



Das Vorhandensein einer Energielücke kann man mit Tunnelexperimenten überprüfen. Wann man den Supraleiter mit einem normalen Metall in Kontakt bringt, können im Bereich der Energielücke keine Elektronen hinein oder heraus tunneln, weil es im Supraleiter keine Zustände gibt. Außerdem hat die Lücke im Anregungsspektrum dramatische Auswirkungen auf thermodynamische Messgrößen wie z. B. die spezifische Wärme. Der elektronische Beitrag zur spezifischen Wärme ist für $k_B T_c \ll |\Delta|$ exponentiell unterdrückt, da alle elektronischen Anregungen eine Mindestenergie von $|\Delta|$ haben.

Eine Bestimmungsgleichung für $\Delta_{\mathbf{k}}$ erhalten wir aus der Definition von $\Delta_{\mathbf{k}}$ durch Einsetzen der Bogoliubov-Transformation:

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathbf{k}} &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle (v_{\mathbf{k}'} \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger + u_{\mathbf{k}'} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}) (u_{\mathbf{k}'} \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} - v_{\mathbf{k}'} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger) \rangle \\ &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left\{ v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} \underbrace{\langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle}_{= n_F(E_{\mathbf{k}'})} - v_{\mathbf{k}'}^2 \underbrace{\langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle}_{= 0} + u_{\mathbf{k}'}^2 \underbrace{\langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle}_{= 0} - u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \underbrace{\langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle}_{= 1 - n_F(E_{\mathbf{k}'})} \right\} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} [2n_F(E_{\mathbf{k}'}) - 1].\end{aligned}\quad (4.455)$$

Die hier verwendeten Beziehungen für die Mittelwerte, insbesondere das Verschwinden von $\langle \gamma\gamma \rangle$ und $\langle \gamma^\dagger \gamma^\dagger \rangle$, gelten, weil H_{BCS} bilinear in $\gamma^\dagger$ und γ ist und daher normale, wechselwirkungsfreie Fermionen beschreibt.

Wir nehmen jetzt o. B. d. A. $\Delta_{\mathbf{k}} \geq 0$ als reell an. Ein beliebiger Phasenfaktor $e^{i\varphi}$ kann nachträglich wieder eingeführt werden, denn mit $\Delta_{\mathbf{k}}$ ist auch $\Delta_{\mathbf{k}} e^{i\varphi}$ eine Lösung. Dann gilt wegen $\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} < 0$:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} [2n_F(E_{\mathbf{k}'}) - 1] \quad \text{mit} \quad E_{\mathbf{k}'} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2}.\quad (4.456)$$

Dies ist die Mean-Field-Gleichung, oder *BCS-Gap-Gleichung*, zur Bestimmung der Energielücke $\Delta_{\mathbf{k}}$.

Um die BCS-Gap-Gleichung lösen zu können, nähern wir nun wieder die Wechselwirkung. Wir hatten gesehen, dass $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ nur für Energien kleiner als ω_D anziehend ist, daher ist sie nur für Elektronen in einer Umgebung mit der Breite ω_D um die Fermi-Energie effektiv. Wir schreiben daher näherungsweise

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{für } |\xi_{\mathbf{k}}| < \omega_D \wedge |\xi_{\mathbf{k}'}| < \omega_D \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}\quad (4.457)$$

Man kann die Theorie auch für die volle RPA-Wechselwirkung $V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}$ (oder eine noch bessere Näherung) durchführen, nur erhält man dann keine einfachen Ergebnisse. Wir können nun schreiben

$$\Delta_{\mathbf{k}} = V \sum_{\substack{\mathbf{k}' \\ |\xi_{\mathbf{k}'}| \leq \omega_D}} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle.\quad (4.458)$$

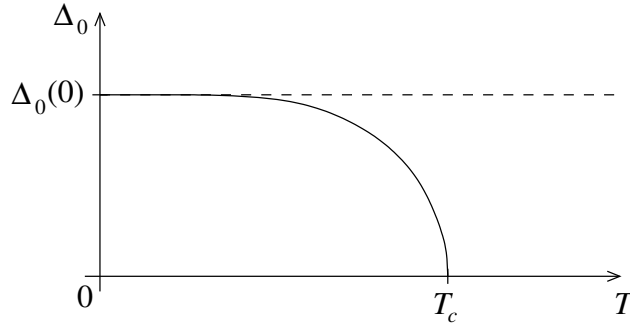
Mit der speziellen BCS-Wechselwirkung wird Δ offenbar unabhängig von $\mathbf{k}$. Damit erhalten wir

$$\Delta = V \sum_{\substack{\mathbf{k}' \\ |\xi_{\mathbf{k}'}| \leq \omega_D}} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}'}} [1 - 2n_F(E_{\mathbf{k}'})].\quad (4.459)$$

Eine Lösung ist offenbar $\Delta = 0$. Sie beschreibt ein normales Metall, keinen Supraleiter. Ist dagegen $\Delta \neq 0$, so können wir Δ herauskürzen. Wir gehen zu einem Integral über die Energie ξ (der Elektronen im Normalleiter) über. Das führt wie üblich zum Auftreten der Zustandsdichte. Da ξ die Energie im Normalzustand ist, handelt es sich um die Zustandsdichte des Normalleiters, $d \equiv d_{\text{normal}}$. Unter der Annahme konstanter Zustandsdichte $d(E_F + \xi)$ für $-\omega_D \leq \xi \leq \omega_D$ ergibt sich

$$1 = Vd(E_F) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh \frac{\beta}{2} \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}. \quad (4.460)$$

Wir haben hier die Identität $1 - 2n_F(E) = \tanh(\beta E/2)$ verwendet. Diese Form der BCS-Gap-Gleichung kann man numerisch lösen. Der resultierende Verlauf von Δ als Funktion von T ist hier gezeigt:



Für $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) ist eine analytische Lösung möglich: Es ergibt sich die Gleichung

$$1 = \frac{Vd(E_F)}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} = Vd(E_F) \operatorname{Arsinh} \frac{\omega_D}{\Delta} \quad (4.461)$$

$$\Rightarrow \Delta(T=0) = \frac{\omega_D}{\sinh \frac{1}{Vd(E_F)}}. \quad (4.462)$$

Im Grenzfall schwacher Kopplung, d. h. für $Vd(E_F) \ll 1$, erhält man

$$\Delta(T=0) \cong 2\omega_D \exp\left(-\frac{1}{Vd(E_F)}\right). \quad (4.463)$$

Für $T \rightarrow T_c^-$ erhalten wir ebenfalls eine analytische Lösung: Wegen $T < T_c$ ist $\Delta > 0$ und wir können Δ aus der BCS-Gleichung (4.459) herauskürzen. Gleichung (4.460) gilt also. Für $T \rightarrow T_c^-$ wird aber Δ klein und wir können Δ in den Wurzeln vernachlässigen. Mit $\beta_c = 1/k_B T_c$ führt dies zu

$$\begin{aligned} 1 &= Vd(E_F) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh \frac{\beta_c |\xi|}{2}}{2|\xi|} = Vd(E_F) \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh \frac{\beta_c \xi}{2}}{\xi} \\ &= Vd(E_F) \int_0^{\beta_c \omega_D/2} dx \frac{\tanh x}{x}. \end{aligned} \quad (4.464)$$

Das Integral kann im Grenzfall $\beta_c \omega_D \gg 1$ ($k_B T_c \ll \omega_D$) analytisch ausgewertet werden:

$$\dots \cong Vd(E_F) \left(2 \ln 2 - \ln \pi + C + \ln \frac{\beta_c \omega_D}{2} \right) \quad (4.465)$$

mit der schon bekannten Euler-Konstanten $C \approx 0,577216$. Es folgt

$$k_B T_c \cong \frac{2e^C}{\pi} \omega_D \exp\left(-\frac{1}{Vd(E_F)}\right). \quad (4.466)$$

Die BCS-Mean-Field-Theorie liefert also dasselbe Ergebnis für T_c wie die Betrachtung der Divergenz des Streuvortex Λ (Cooper-Instabilität). Es ist typisch, dass RPA-artige Näherungen, wie die Bethe-Salpeter-Gleichung beschränkt auf Leiterdiagramme, eine Instabilität an derselben Stelle voraussagen, wo eine Mean-Field-Theorie einen Phasenübergang findet.

Wir erkennen, dass die Energielücke $\Delta(T=0)$ bei der Temperatur $T=0$ und die kritische Temperatur $k_B T_c$ in der BCS-Theorie eine ähnliche mathematische Form haben. Wir erhalten das universelle Verhältnis

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} = \frac{4}{\frac{2e^C}{\pi}} = \frac{2\pi}{e^C} \approx 3,53, \quad (4.467)$$

unabhängig von $d(E_F)$, V und ω_D . Dies ist für einfache Supraleiter im Grenzfall schwacher Kopplung gut erfüllt, z. B. für Zinn: $2\Delta(0)/k_B T_c = 3,46$. Für Hochtemperatur-Supraleiter wie die Kuprate und für Supraleiter mit starker Kopplung wie Quecksilber ist diese universelle Relation weniger gut erfüllt.

4.11.4 Der Isotopeneffekt

Wie können wir prüfen, ob Supraleitung tatsächlich auf einer von den Phononen vermittelten effektiven Wechselwirkung beruht? Die BCS-Theorie sagt die Proportionalitäten

$$k_B T_c, \Delta(0) \sim \omega_D \exp\left(-\frac{1}{Vd(E_F)}\right) \quad (4.468)$$

voraus. Es wäre hilfreich, $k_B T_c$ oder $\Delta(T)$ für Supraleiter zu vergleichen, die sich nur in der Debye-Frequenz ω_D , aber nicht in V oder $d(E_F)$ unterscheiden. Das ist zumindest näherungsweise dadurch möglich, dass man Proben untersucht, die unterschiedliche Isotope (oder allgemeiner Isotopenverhältnisse) desselben Elements enthalten.

Die Eigenfrequenz eines harmonischen Oszillators ist

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} \quad (4.469)$$

mit der Kraftkonstanten K und der Masse m . Die gesamte Phononendispersion und damit insbesondere die Debye-Frequenz skalieren daher wie

$$\omega_{\mathbf{q}\lambda}, \omega_D \sim \frac{1}{\sqrt{M}} \quad (4.470)$$

mit der Atommasse M (wir betrachten der Einfachheit halber einen elementaren Supraleiter). Denselben Zusammenhang haben wir auch für Jellium-Phononen gefunden:

$$\Omega \cong \sqrt{\frac{Z^2 e^2 n_+^0}{\varepsilon_0 M}}. \quad (4.471)$$

Demzufolge erwarten wir, falls die BCS-Theorie gilt,

$$k_B T_c, \Delta(0) \sim \omega_D \sim M^{-\alpha} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{1}{2} \quad (4.472)$$

für verschiedene Isotope desselben Elements. Das findet man tatsächlich für einfache elementare Supraleiter. Das ist ein weiterer starker Hinweis, neben dem universellen Wert von $2\Delta(0)/k_B T_c$, dass die BCS-Mean-Field-Entkopplung eine gute Näherung darstellt, und legt zusätzlich einen phononischen Mechanismus der Supraleitung nahe.

Der Exponent α ist dagegen kleiner oder sogar negativ für Materialien, für die nicht die Bedingung schwacher Kopplung, $Vd(E_F) \ll 1$, gilt oder für die die Supraleitung nicht auf Phononenaustausch beruht. Hat die effektive Paarwechselwirkung überhaupt nichts mit Phononen zu tun, erwarten wir $\alpha = 0$. Dies wird für optimal dotierte Kuprat-Hochtemperatursupraleiter, d. h. solche mit maximalem T_c , auch beobachtet.

Kapitel 5

Dichtefunktionaltheorie

Im ersten Kapitel hatten wir diskutiert, wieso es überhaupt einer Vielteilchentheorie jenseits der Quantenmechanik bedarf. Der Hauptgrund ist, dass wir die Lösung einer N -Teilchen-Schrödinger-Gleichung mit $N \approx 10^{23}$ noch nicht einmal angeben oder speichern könnten, selbst wenn wir eine Methode zur Lösung hätten. Die Grundzustandswellenfunktion (und auch jede andere) enthält einfach viel zu viel Information. Der Ausweg beruht auf der Erkenntnis, dass wir den ganz überwiegenden Teil dieser Informationen auch gar nicht benötigen.

Bis auf triviale und einige wenige interessante Fälle, lassen sich Vielteilchenprobleme nicht exakt lösen. Bisher haben wir zwei Arten von Näherungen kennengelernt:

1. Mean-Field-Theorien. Diese bilden das wechselwirkende System näherungsweise auf ein wechselwirkungsfreies Referenzsystem ab. Die im Hamiltonian dieses Referenzsystems auftretenden Parameter müssen selbstkonsistent bestimmt werden. Dies hatten wir für Fälle diskutiert, in denen die Anzahl der Parameter klein ist (Hartree-Fock-, Stoner-, BCS-Theorie), aber das ist nicht prinzipiell erforderlich. Wechselwirkungsfreie Systeme wie das Mean-Field-Referenzsystem sind im Prinzip einfach zu lösen: Für Fermionen müssen wir nur ein *Einteilchen*-Problem lösen, die Vielteilchenzustände ergeben sich dann als *Slater-Determinante* der Einteilchenzustände. (Für Bosonen benötigen wir stattdessen die Permanente.)
2. Störungsentwicklungen. Sinnvolle Näherungen hatten hier oft den Charakter von Summationen von unendlich vielen, aber nicht allen, Beiträgen zu einer bestimmten Größe. Die Dyson-Reihe für die elektronische Green-Funktion war schon für die einfachste (Hartree-) Näherung für die Selbstenergie von dieser Form. Ein fortgeschritteneres Beispiel war die Random-Phase-Approximation (RPA) für die Suszeptibilität. Störungsentwicklungen haben den Vorteil, *systematisch* zu sein in dem Sinne, dass wir durch Aufsummieren *aller* Beiträge im Prinzip das exakte Resultat erhalten würden. Allerdings kann es passieren, dass diese Reihe nicht konvergiert.

In diesem kurzen Kapitel gehen wir von der Idee aus, die Vorteile dieser beiden Zugänge zu kombinieren: *Können wir das wechselwirkende System in einer Weise auf ein wechselwirkungsfreies Referenzsystem abbilden, die im Prinzip exakt ist?*

Auf den ersten Blick scheint diese Idee kaum erfolgversprechend. Jedoch konnten Kohn und Sham 1965 zeigen, dass dies tatsächlich möglich ist. Die resultierende sogenannte *Dichtefunktionaltheorie* (DFT) beruht auf zwei Theoremen von Hohenberg und Kohn (1964), die wir zunächst besprechen. Dann diskutieren wir kurz die Grundideen der DFT.

5.1 Die Hohenberg-Kohn-Theoreme

Wir beschränken uns auf Elektronen in einem Kristall oder in einem Molekül. Dies sind auch die typischen Anwendungsgebiete der DFT. Es ist aber im Prinzip möglich, die DFT für andere Systeme zu formulieren.

Der Vielteilchen-Hamiltonian für Elektronen in einem Kristall oder Molekül hat die Form

$$H = T + V_1 + V_2. \quad (5.1)$$

Hier ist

$$T = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \nabla_i^2 \quad (5.2)$$

der Operator der kinetischen Energie,

$$V_1 = \sum_i V(\mathbf{r}_i) \quad (5.3)$$

enthält das Einteilchenpotential aufgrund der Kerne und evtl. ein äußeres Potential und

$$V_2 \equiv V_C = \frac{1}{2} \sum_{ij, i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (5.4)$$

ist die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen in der Coulomb-Eichung. Wir nehmen hier an, dass die Kerne unbeweglich sind. Die Kernbewegung, die ja auf einer längeren Zeitskala abläuft als die Elektrodynamik, kann nachträglich im Sinne einer Born-Oppenheimer-Näherung behandelt werden.

Eine wesentliche Einsicht besteht nun darin, dass die Anteile T und V_C für *alle* Kristalle und Moleküle identisch sind. Ein Diamant-Kristall und ein Hämoglobin-Molekül unterscheiden sich – neben der Elektronenzahl N – nur durch das Potential $V(\mathbf{r})$.

Es ist offensichtlich, dass es für jede Wahl von $V(\mathbf{r})$ (und N) eine *eindeutige* Grundzustandswellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ gibt, sofern der Grundzustand nicht entartet ist. In letzterem Fall existiert eine eindeutige Grundzustandsmannigfaltigkeit. Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass der Grundzustand nicht entartet ist. Dann gibt es natürlich auch eine *eindeutige* Grundzustandsdichte

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}) &= \int d^3r_2 d^3r_3 \cdots d^3r_N |\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 \\ &\quad + \int d^3r_1 d^3r_3 \cdots d^3r_N |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 + \dots \\ &\quad + \int d^3r_1 d^3r_2 \cdots d^3r_{N-1} |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r})|^2. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Die N Summanden sind aufgrund der Antisymmetrie von ψ unter Teilchenaustausch identisch und wir erhalten

$$n(\mathbf{r}) = N \int d^3r_2 d^3r_3 \cdots d^3r_N |\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)|^2. \quad (5.6)$$

Für gegebenes T und V_C (und N) haben wir also folgende eindeutige Abbildungen:

$$V(\mathbf{r}) \longrightarrow \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \longrightarrow n(\mathbf{r}). \quad (5.7)$$

Beachte, dass $n(\mathbf{r})$ eine Funktion von 3 reellen Koordinaten ist, während ψ von $3N$ Koordinaten abhängt.

5.1.1 Das erste Hohenberg-Kohn-Theorem

Dieses Theorem sagt aus, dass diese Abbildung *bijektiv* ist: Zu jeder Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ existiert eine *eindeutige* Grundzustandswellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Das ist zunächst überraschend, da ψ viel mehr Information zu enthalten scheint als n . Wir zeigen dies hier unter der Annahme eines nicht entarteten Grundzustandes. Das Theorem gilt auch ohne diese Annahme, der Beweis ist aber schwieriger.

Beweis: Es reicht hin zu zeigen, dass zu jeder Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ ein eindeutiges Potential $V(\mathbf{r})$ existiert, da dieses ja die Grundzustandswellenfunktion ψ eindeutig festlegt. Dies zeigen wir durch *reductio ad absurdum*: Angenommen, zur Dichte $n(\mathbf{r})$ existieren zwei wesentlich verschiedene Potentiale $V(\mathbf{r})$ und $\tilde{V}(\mathbf{r})$, d. h. $V(\mathbf{r}) - \tilde{V}(\mathbf{r})$ ist nicht eine konstante Funktion. Die entsprechenden Hamilton-Operatoren seien H und $\tilde{H}$, die normierten Grundzustände seien $|\psi\rangle$ und $|\tilde{\psi}\rangle$ und die Grundzustandsenergien seien E und $\tilde{E}$. Diese Größen erfüllen

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (5.8)$$

$$\tilde{H}|\tilde{\psi}\rangle = \tilde{E}|\tilde{\psi}\rangle. \quad (5.9)$$

Nun ist $|\psi\rangle \neq |\tilde{\psi}\rangle$, denn sonst würde gelten

$$(H - \tilde{H})|\psi\rangle = (E - \tilde{E})|\psi\rangle, \quad (5.10)$$

also in Ortsdarstellung

$$\sum_i [V(\mathbf{r}_i) - \tilde{V}(\mathbf{r}_i)] \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = (E - \tilde{E}) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (5.11)$$

was für alle $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ nur gilt, wenn $V(\mathbf{r}) - \tilde{V}(\mathbf{r})$ entgegen der Voraussetzung konstant ist, nämlich gleich $(E - \tilde{E})/N$ (hier gehen noch Annahmen von der Art ein, dass ψ fast überall von Null verschieden ist).

Da $|\psi\rangle$ der nicht entartete Grundzustand von H ist und $|\tilde{\psi}\rangle$ von $|\psi\rangle$ verschieden ist, gilt

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle < \langle \tilde{\psi} | H | \tilde{\psi} \rangle = \langle \tilde{\psi} | (\tilde{H} + H - \tilde{H}) | \tilde{\psi} \rangle = \tilde{E} + \int d^3r [V(\mathbf{r}) - \tilde{V}(\mathbf{r})] n(\mathbf{r}), \quad (5.12)$$

hier geht ein, dass die Dichte $n(\mathbf{r})$ für $|\psi\rangle$ und $|\tilde{\psi}\rangle$ gleich sein soll. Analog gilt

$$\tilde{E} = \langle \tilde{\psi} | \tilde{H} | \tilde{\psi} \rangle < \langle \psi | \tilde{H} | \psi \rangle = \langle \psi | (H + \tilde{H} - H) | \psi \rangle = E + \int d^3r [\tilde{V}(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r})] n(\mathbf{r}). \quad (5.13)$$

Die Summe der beiden Ungleichungen ist

$$E + \tilde{E} < E + \tilde{E}. \quad (5.14)$$

Wir finden einen Widerspruch, also war die Annahme falsch.

Zusammengefasst haben wir also gezeigt, dass die eindeutigen Abbildungen

$$n(\mathbf{r}) \longrightarrow V(\mathbf{r}) \longrightarrow \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \longrightarrow n(\mathbf{r}) \quad (5.15)$$

existieren. Das hat die bemerkenswerte Konsequenz, dass *alle* Grundzustandseigenschaften, die ja alle durch ψ festgelegt sind, durch die Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ eindeutig bestimmt sind. Mehr noch, alle Eigenschaften, nicht nur im Grundzustand, sind durch die Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ bestimmt, da diese $V(\mathbf{r})$ und damit den Hamiltonian H eindeutig festlegt. Es ist dann naheliegend, die Dichte $n(\mathbf{r})$ anstelle der Wellenfunktion als fundamentale Größe der Theorie zu betrachten. Das ist in der Tat die zentrale Idee der DFT.

5.1.2 Das zweite Hohenberg-Kohn-Theorem

Bisher kennen wir noch keine Methode, die Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ praktisch zu berechnen. Die Lösung dieses Problems beruht auf dem zweiten Hohenberg-Kohn-Theorem: Für festen Hamiltonian H , d. h. gegebenes Potential $V(\mathbf{r})$, und feste Elektronenzahl N minimiert die Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ das Energie-Funktional

$$E_V[n] := \langle \psi | H | \psi \rangle. \quad (5.16)$$

$E_V[n]$ ist tatsächlich ein Funktional von $n(\mathbf{r})$, da $|\psi\rangle$ ja von n *eindeutig* bestimmt wird. (Zur Dichte n gehört i. A. ein anderes Potential $V_n \neq V$. Das ist unerheblich, solange nur eine bijektive Abbildung zwischen n und ψ existiert.)

Der Beweis folgt direkt aus dem Rayleigh-Ritz-Prinzip: $\langle \psi | H | \psi \rangle$ für festes H und N als Funktional der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ ist für den (nicht entarteten) Grundzustand minimal. Da es aber eine bijektive Abbildung zwischen $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ und $n(\mathbf{r})$ gibt, ist $E_V[n]$ dann für die zugehörige Grundzustandsdichte minimal.

Wir schreiben nun

$$E_V[n] = \langle \psi | (T + V_C) | \psi \rangle + \int d^3r V(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) =: F[n] + \int d^3r V(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}). \quad (5.17)$$

Es ist wichtig zu bemerken, dass $F[n]$ ein *universelles* Funktional von n ist, d. h. es hängt nicht vom Potential V ab. Es ist wieder unerheblich, dass der Beweis des ersten Hohenberg-Kohn-Theorems jeder Dichte $n(\mathbf{r})$ ein spezielles Potential $V_n(\mathbf{r})$ zuordnet, für das $n(\mathbf{r})$ die Grundzustandsdichte ist. Dieses

Potential V_n kommt in der weiteren Betrachtung nicht mehr vor, es muss insbesondere nicht mit dem vorgegebenen Potential $V(\mathbf{r})$ übereinstimmen.

Eine alternative Herleitung verwendet die Legendre-Transformation. Die Grundzustandsenergie ist eine Funktion der Elektronenzahl N und ein Funktional des Einteilchenpotentials $V(\mathbf{r})$. Wir unterdrücken die N -Abhängigkeit und schreiben

$$E[V(\mathbf{r})] = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | (T + V_C) | \psi \rangle + \int d^3r_1 \cdots d^3r_N \psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \sum_i V(\mathbf{r}_i) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (5.18)$$

wobei $|\psi\rangle$ und $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ der Vielteilchen-Grundzustand bzw. die Grundzustandswellenfunktion sind. Nun ist die Funktionalableitung

$$\frac{\delta E[V]}{\delta V(\mathbf{r})} = \int d^3r_1 \cdots d^3r_N \psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = n(\mathbf{r}). \quad (5.19)$$

Die Legendre-Transformation von $E[V]$ als Funktional von V auf $F[n]$ als Funktional von n lautet dann

$$F[n(\mathbf{r})] = E[V(\mathbf{r})] - \int d^3r V(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}). \quad (5.20)$$

Das ist dasselbe Funktional, das wir oben gefunden hatten. Seine Existenz und Extremaleigenschaften folgen dann aus den Eigenschaften der Legendre-Transformation.

5.2 Die Kohn-Sham-Gleichung

Der letzte Abschnitt hat gezeigt, dass die Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ im Prinzip ausreicht, um alle Eigenschaften des Systems zu bestimmen, und dass sie ein gewisses Energie-Funktional $E_V[n]$ minimiert. Als nächstes werden wir untersuchen, wie diese Minimierung praktisch durchgeführt werden kann.

Dazu schreiben wir den universellen Teil des Energie-Funktionalen zunächst expliziter als

$$F[n] = T_0[n] + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{xc}[n]. \quad (5.21)$$

Hier ist $T_0[n]$ die kinetische Energie für ein *wechselwirkungsfreies* System, angedeutet durch den Index „0“, der zweite Term ist die elektrische (Hartree-) Energie einer Ladungsdichte $-en(\mathbf{r})$ in Coulomb-Eichung und E_{xc} ist der Rest. Diesen Term nennt man das *Austausch-Korrelations-Funktional*. Alle Terme sind universelle Funktionale von n . Für praktische Rechnungen müssen die Funktionale $T_0[n]$ und $E_{xc}[n]$ zumindest näherungsweise bekannt sein.

Kohn und Sham haben eine Methode für die praktische Berechnung von $n(\mathbf{r})$ entwickelt. Das erste Hohenberg-Kohn-Theorem gilt für beliebige, aber feste Wechselwirkung V_2 . Natürlich ist die konkrete bijektive Abbildung $n \leftrightarrow |\psi\rangle$ von V_2 abhängig; das Theorem zeigt nur die Existenz einer bijektiven Abbildung. Insbesondere gilt das erste Hohenberg-Kohn-Theorem auch für den wechselwirkungsfreien Fall $V_2 \equiv 0$. Daher können wir ein Potential $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ finden, so dass die Grundzustandsdichte des wechselwirkungsfreien Elektronengases gerade $n(\mathbf{r})$ ist. Für ein wechselwirkungsfreies System ist der Grundzustand aber eine Slater-Determinante der N Einteilchenzustände mit den niedrigsten Energien.

Die Einteilchen-Wellenfunktionen erfüllen die Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad (5.22)$$

die man in diesem Zusammenhang *Kohn-Sham-Gleichung* nennt.

Zur Bestimmung von $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ beachten wir, dass $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ für das wechselwirkungsfreie System dieselbe Grundzustandsdichte hervorrufen soll wie $V(\mathbf{r})$ für das wechselwirkende System. Daher gilt

$$0 = \frac{\delta E_{V_{\text{eff}},0}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = \frac{\delta T_0[n]}{\delta n(\mathbf{r})} + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \quad (5.23)$$

und

$$0 = \frac{\delta E_V[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = \frac{\delta T_0[n]}{\delta n(\mathbf{r})} + \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} + V(\mathbf{r}). \quad (5.24)$$

Auflösen nach $\delta T_0/\delta n$ und Gleichsetzen eliminiert $T_0[n]$:

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}[n](\mathbf{r}) &= V(\mathbf{r}) + \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} \\ &=: V(\mathbf{r}) + \underbrace{\int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}_{\text{elektrische Energie } -e\varphi(\mathbf{r})} + V_{xc}[n](\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Der letzte Term, das *Austausch-Korrelations-Potential*, ist ein Funktional der Dichte n und außerdem eine Funktion des Ortes $\mathbf{r}$. Dasselbe gilt also auch für das effektive Potential V_{eff} insgesamt, was die Schreibweise in Gl. (5.25) andeuten soll.

Die Kohn-Sham-Gleichung lautet damit

$$\left[-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{xc}[n](\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (5.26)$$

Wir ordnen die Einteilchenenergien ϵ_i so, dass $\epsilon_i \leq \epsilon_j$ für $i < j$ gilt, also aufsteigend. Dann ist die gesuchte Dichte

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (5.27)$$

das ist die Summe über die Wahrscheinlichkeitsdichten aller besetzten Einteilchenzustände des nicht wechselwirkenden Referenzsystems. Wir haben nun das Vielteilchenproblem auf die Lösung der Kohn-Sham-Gleichung, also auf ein Einteilchenproblem, zurückgeführt. Die elektrische (Hartree-) Energie und das Austausch-Korrelations-Potential hängen jedoch parametrisch von der Dichte $n(\mathbf{r})$ ab. Diese muss selbstkonsistent bestimmt werden. (Das erinnert an Mean-Field-Theorien, die DFT ist aber wie gesagt kein Näherung.) In der Praxis wird ein n angenommen, die Kohn-Sham-Gleichung für die $\phi_i(\mathbf{r})$ gelöst und daraus wieder n berechnet. Dieser Prozess wird bis zur Konvergenz iteriert:

$$n(\mathbf{r}) \longrightarrow \phi_i(\mathbf{r}) \longrightarrow n(\mathbf{r}) \longrightarrow \phi_i(\mathbf{r}) \longrightarrow \dots$$

Das Ergebnis wären die exakte Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ und die exakte Grundzustandsenergie $E_V[n]$, wenn wir das Austausch-Korrelations-Potential $V_{xc}[n](\mathbf{r})$ bzw. das Austausch-Korrelations-Funktional $E_{xc}[n]$ exakt kennen würden.

Für Kristalle kann man die Gittersymmetrie ausnutzen, um die (Kohn-Sham-) Einteilchenorbitale ϕ_i und (Kohn-Sham-) Einteilchenenergien ϵ_i nach Wellenvektoren $\mathbf{k}$ zu ordnen. Die bekannten DFT-Bandstrukturen zeigen die Kohn-Sham-Energien als Funktionen von $\mathbf{k}$. Man sollte aber folgenden Punkt beachten: Die Kohn-Sham-Orbitale ϕ_i und -Energien ϵ_i sind nur *Hilfsgrößen* der DFT. Sie gehen im Grenzfall verschwindender Wechselwirkung in die exakten Einteilchenorbitale und -energien über. Für den interessierenden, wechselwirkenden Fall gibt es aber keinen Grund, weshalb sie mit den Positionen der Quasiteilchen-Maxima der Spektralfunktion $A(\mathbf{k}, \omega)$ übereinstimmen sollten, die in der Fermi-Flüssigkeitstheorie die bestmögliche Einteilchen-Beschreibung liefern.

Darüber hinaus ist die hier besprochene Standard-DFT strikt eine Theorie für den Grundzustand. Die Energielücke eines Halbleiters ist aber z.B. eine Größe, die Anregungen beschreibt, es ist nämlich die minimale Energie für Ein-Elektronen-Anregungen bei $T = 0$. Diese Energielücke aus der Kohn-Sham-Bandstruktur zu extrahieren ist also in zweifacher Hinsicht problematisch: Die Kohn-Sham-Energien sind prinzipiell nur Hilfsgrößen und man versucht, eine Anregungsenergie aus einer Grundzustandstheorie zu ermitteln.

5.3 Lokale-Dichte-Näherung

Wie erwähnt ist die DFT eine exakte Theorie. Exakte Resultate berechnen könnte man aber nur bei exakter Kenntnis des Austausch-Korrelations-Potentials V_{xc} oder äquivalent des Austausch-Korrelations-Funktional E_{xc} . Da wir diese Funktionalen jedoch nicht kennen, sind wir auf Näherungen angewiesen. Wir besprechen hier die sogenannte Lokale-Dichte-Näherung (*local density approximation*, LDA).

Die LDA geht von der Erkenntnis aus, dass E_{xc} für *homogene* Dichten $n(\mathbf{r}) = \text{const}$ zumindest numerisch gut bekannt ist. Eine (zu) einfache Näherung hatten wir in Abschnitt 3.2.1 kennengelernt: In erster Ordnung Störungstheorie in der Coulomb-Wechselwirkung ist die Energie der homogenen Elektronengases pro Elektron,

$$\frac{e}{N} \cong 2,211 \text{ Ry} \frac{1}{r_s^2} - 0,916 \text{ Ry} \frac{1}{r_s} \quad (5.28)$$

mit

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \frac{n^{-1/3}}{a_B}. \quad (5.29)$$

Der erste Term ist der Beitrag nullter Ordnung, also die reine kinetische Energie im wechselwirkungsfreien Fall, $T_0[n]$. Der elektrische oder Hartree-Term wird durch das mittlere Kern-Potential kompensiert, ist also hier nicht vorhanden. Der zweite Term ist daher, wie wir in Abschnitt 3.2.1 gesehen haben, die (exakte) Austauschenergie des homogenen Elektronengases,

$$e_x[n] \equiv \frac{E_x[n]}{N} = -0,916 \text{ Ry} \frac{1}{r_s} \cong -1,48 \text{ Ry} a_B n^{1/3}. \quad (5.30)$$

Das Austausch-Korrelations-Funktional enthält jedoch auch noch einen Korrelationsanteil, $E_{\text{xc}}[n] = E_x[n] + E_c[n]$ bzw. $e_{\text{xc}}[n] = e_x[n] + e_c[n]$. Die Korrelationsenergie $E_c[n]$ des homogenen Elektronengases ist nicht analytisch exakt bekannt. Es existieren Entwicklungen um die Grenzfälle großer und kleiner Dichte sowie verschiedene näherungsweise Parametrisierungen, die zwischen diesen Grenzfällen interpolieren. Sie stellen für praktische Rechnungen geeignete analytische Ausdrücke für die Austausch-Korrelations-Energie pro Elektron,

$$e_{\text{xc}}[n] := \frac{E_{\text{xc}}[n]}{N} \quad (5.31)$$

zur Verfügung. Auf jeden Fall reduziert sich das *Funktional* $e_{\text{xc}}[n]$ für das homogene Elektronengas auf eine *Funktion* $e_{\text{xc}}(n)$ der homogenen Dichte n .

Die LDA besteht nun darin, einen für homogene Dichten i. W. exakten Ausdruck für $e_{\text{xc}}(n)$ für *beliebige*, auch inhomogene, Dichten zu verwenden. Dazu schreibt man

$$E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] \stackrel{\text{LDA}}{\approx} \int d^3r n(\mathbf{r}) e_{\text{xc}}(n(\mathbf{r})) = -1,48 \text{ Ry} a_B \int d^3r n^{4/3}(\mathbf{r}) + \int d^3r n(\mathbf{r}) e_c(n(\mathbf{r})). \quad (5.32)$$

Wichtig ist, dass der Integrand nur eine Funktion der lokalen Dichte am Ort $\mathbf{r}$ ist, daher der Name „Lokale-Dichte-Näherung“. Physikalisch nehmen wir an, dass die Austausch-Korrelations-Energie eine rein lokale Größe ist, anders als z. B. die elektrische (Hartree-) Energie. Die LDA ist offenbar gut, wenn $n(\mathbf{r})$ fast homogen ist, d. h., wenn sich $n(\mathbf{r})$ räumlich hinreichend langsam ändert. Für $n(\mathbf{r}) = \text{const}$ erhält man das exakte Ergebnis $N e_{\text{xc}}(n)$.

Wir bemerken noch, dass das Austausch-Korrelations-Potential in der LDA lautet

$$V_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] = \frac{\delta E_{\text{xc}}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} \stackrel{\text{LDA}}{\approx} \frac{d}{dn} n e_{\text{xc}}(n) \Big|_{n=n(\mathbf{r})} = e_{\text{xc}}(n(\mathbf{r})) + n(\mathbf{r}) e'_{\text{xc}}(n(\mathbf{r})). \quad (5.33)$$

Damit können wir nun die Kohn-Sham-Gleichung für gegebene Dichte $n(\mathbf{r})$ hinschreiben, numerisch lösen und iterieren.

Fortgeschrittenere Näherungen gehen über die LDA hinaus, indem sie z. B. Gradienten von $n(\mathbf{r})$ mitnehmen: $e_{\text{xc}}[n] \approx e_{\text{xc}}(n, \nabla n)$. Sie führen jedoch im Allgemeinen nicht zu sehr viel besseren Ergebnissen.

5.4 Zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie

Die Standard-DFT ist, wie wir gesehen haben, eine Theorie für den Grundzustand. Dies schränkt ihre Anwendbarkeit stark ein. Sie gilt auch nur für zeitunabhängige Potentiale, was wir nicht betont haben, denn für zeitabhängige Potentiale ist das Konzept des Grundzustands nicht besonders sinnvoll. Wir erwähnen kurz eine Erweiterung, die zeitabhängige Potentiale und angeregte Zustände beschreiben kann, nämlich die *zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie* (time-dependent DFT, TDDFT).

Der Vielteilchen-Hamiltonian hat weiterhin die Form

$$H = T + V_1 + V_2, \quad (5.34)$$

aber nun darf das Einteilchenpotential

$$V_1 = \sum_i V(\mathbf{r}_i, t) \quad (5.35)$$

von der Zeit abhängen. Die Operatoren T und $V_2 \equiv V_C$ sind weiterhin zeitunabhängig und für alle Elektronensysteme identisch.

Für gegebenen Anfangszustand $|\psi(t_0)\rangle$ ist der Vielteilchenzustand zur Zeit t durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H(t) |\psi\rangle \quad (5.36)$$

bestimmt. Natürlich ist dann auch die zeitabhängige Einteilchendichte

$$n(\mathbf{r}, t) = N \int d^3r_2 d^3r_3 \cdots d^3r_N |\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 \quad (5.37)$$

festgelegt. An die Stelle des ersten Hohenberg-Kohn-Theorems tritt nun das *Runge-Gross-Theorem* (1984): Für einen gegebenen Anfangszustand $|\psi(t_0)\rangle$ und eine gegebene, damit kompatible zeitabhängige Einteilchendichte $n(\mathbf{r}, t)$ existiert ein *eindeutiges* zeitabhängiges Potential $V(\mathbf{r}, t)$, also

$$n(\mathbf{r}, t) \leftrightarrow V(\mathbf{r}, t). \quad (5.38)$$

Dabei betrachten wir zwei Potentiale $V(\mathbf{r}, t)$ und $\tilde{V}(\mathbf{r}, t)$ als gleich, wenn sie sich nur um eine ortsunabhängige (aber evtl. zeitabhängige) Größe $\Delta V(t)$ unterscheiden. (Spitzfindige mathematische Voraussetzungen hinsichtlich Analytizität in der Zeit haben wir hier ignoriert.) Den Beweis geben wir hier nicht an.

Das Runge-Gross-Theorem zeigt, dass das Potential $V(\mathbf{r}, t)$, der Vielteilchen-Hamiltonian $H(t)$ und damit die zeitabhängige Vielteilchenwellenfunktion Funktionale des Anfangszustands und der zeitabhängigen Dichte sind. Das weitere Vorgehen ist ganz analog zum zeitunabhängigen Fall: Man betrachtet ein wechselwirkungsfreies Referenzsystem mit derselben Dichte $n(\mathbf{r}, t)$ und einem effektiven, aber jetzt zeitabhängigen Einteilchenpotential $V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t)$. Das wechselwirkungsfreie System führt auf eine nun zeitabhängige Kohn-Sham-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi_i(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) \right] \phi_i(\mathbf{r}, t). \quad (5.39)$$

Das effektive Potential erhalten wir aus der Bedingung, dass das Referenzsystem die Dichte $n(\mathbf{r}, t)$ haben soll. Dies führt auf

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}, t) + \int d^3r' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{n(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{\text{xc}}[n(\mathbf{r}, t)]. \quad (5.40)$$

Der Hartree-Term ist instantan, da wir die Coulomb-Eichung verwenden. Überlichtschnelle Wirkungen müssen von V_{xc} verhindert werden. Damit erhalten wir im Prinzip die Zeitentwicklung der Dichte $n(\mathbf{r}, t)$ für beliebige Anfangszustände $n(\mathbf{r}, t_0)$.

In diesem Schema ist das Austausch-Korrelations-Potential $V_{\text{xc}}[n(\mathbf{r}, t)]$ nun ein Funktional der gesamten, zeitabhängigen Dichte $n(\mathbf{r}, t)$. Es gibt keinen Grund, wieso es lokal in der Zeit sein sollte. Es muss jedoch kausal (retardiert) sein, d. h. V_{xc} darf nur von Dichten zu Zeiten $t' \leq t$ (und $t' \geq t_0$) abhängen. $V_{\text{xc}}[n(\mathbf{r}, t)]$ ist hier ein weitaus komplizierteres Funktional als im statischen Fall. Natürlich sind wieder Näherungen für V_{xc} nötig.

Die TDDFT führt also das zeitabhängige Vielteilchenproblem auf die Lösung der zeitabhängigen Kohn-Sham-Gleichung zurück. Die zeitabhängige Dichte muss dabei wieder durch geeignete Iteration bestimmt werden. Insbesondere können wir natürlich für *zeitunabhängige* Potentiale nach angeregten Eigenzuständen suchen – für diese bleibt die Einteilchendichte stationär.

Kapitel 6

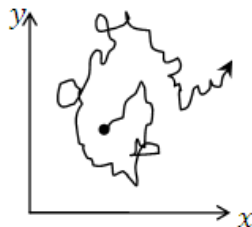
Diffusion und die Boltzmann-Gleichung

Bisher hatten wir Systeme im Grundzustand (Kapitel 3) und im thermischen Gleichgewicht (Kapitel 4) betrachtet. Im Gleichgewicht ist bekanntlich die Entropie maximal und der Zustand ändert sich nicht in der Zeit. Teilchen bewegen sich mit derselben Wahrscheinlichkeit von A nach B wie von B nach A . Oft interessieren uns Situationen, in denen diese Bedingungen nicht erfüllt sind.

Das ist zum Beispiel beim elektronischen Transport der Fall. Wir hatten aber gesehen, dass die Leitfähigkeit für ein hinreichend kleines angelegtes elektrisches Feld aus *Gleichgewichtseigenschaften* bestimmt werden kann. Dies wird konkret durch die Kubo-Formel aus der Lineare-Antwort-Theorie (4.3) realisiert. In diesem Kapitel interessieren wir uns aber für Fälle, in denen die Lineare-Antwort-Theorie nicht anwendbar ist.

6.1 Brownsche Bewegung und Diffusion

Ein leichtes, aber unter dem Mikroskop sichtbares Teilchen führt in einer Flüssigkeit zufällige Bewegungen aus, wie R. Brown 1827 an Pollen auf einer Wasseroberfläche beobachtete.



Erst später wurde klar, dass diese *Brownsche Bewegung* auf Stößen mit selbst nicht sichtbaren Molekülen in der Flüssigkeit beruht. Ein konzeptionell ähnliches Bild der Bewegung von Elektronen in ungeordneten Leitern geht auf Drude zurück, die Stöße erfolgen hier mit Störstellen oder Gitterschwingungen, wie wir in Kap. 4 gesehen haben.

Wenn viele Brownsche Teilchen vorliegen, können wir über kleine Volumina ΔV , die dennoch viele Teilchen enthalten, mitteln und eine ortsabhängige Konzentration $n(\mathbf{r}, t)$ einführen. Während die Brownsche Bewegung eines einzelnen Teilchens praktisch nicht voraussagbar ist, können wir über die gemittelte Größe $n(\mathbf{r}, t)$ Aussagen machen. Wir wissen aus der Erfahrung, dass Inhomogenitäten in $n(\mathbf{r}, t)$ zu einem Strom führen, der diese auszugleichen sucht. Die Stromdichte $\mathbf{j}$ wird also vom *Gradienten* von n abhängen, diesem entgegenwirken („bergab“) und für verschwindenden Gradienten ebenfalls verschwinden. Der einfachste Ansatz mit diesen Eigenschaften ist

$$\mathbf{j} = -D\nabla n, \quad (6.1)$$

dieser wird auch experimentell bestätigt. Da die Teilchenzahl erhalten ist, gilt eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}. \quad (6.2)$$

Aus den letzten beiden Gleichungen folgt

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 n. \quad (6.3)$$

Das ist die Diffusionsgleichung mit der Diffusionskonstante D .

Die Diffusionsgleichung ist formal sehr ähnlich der Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen,

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \nabla^2 \psi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{2m} \nabla^2 \psi. \quad (6.4)$$

Der einzige Unterschied ist, dass wir D durch eine imaginäre Größe ersetzen müssen. Daher lassen sich Lösungsmethoden für die Schrödinger-Gleichung auf die Diffusionsgleichung übertragen. Z. B. können wir eine Green-Funktion P definieren:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D \nabla^2 \right) P(\mathbf{r}t, \mathbf{r}_0 t_0) = 0 \quad \text{für } t > t_0 \quad (6.5)$$

mit der Anfangsbedingung $P(\mathbf{r}t, \mathbf{r}_0 t_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$. $P(\mathbf{r}t, \mathbf{r}_0 t_0)$ ist hier die bedingte Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zur Zeit $t > t_0$ bei $\mathbf{r}$ zu finden, wenn es zur Zeit t_0 bei $\mathbf{r}_0$ war. $P(\mathbf{r}t, \mathbf{r}_0 t_0)$ hängt von den Randbedingungen (etwa dem Vorliegen von Wänden) ab. Ist $P(\mathbf{r}t, \mathbf{r}_0 t_0)$ bestimmt, so lautet die Lösung der Diffusionsgleichung für die Anfangsbedingung $n(\mathbf{r}_0, t_0) = n_0(\mathbf{r}_0)$

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d^3 r_0 P(\mathbf{r}t, \mathbf{r}_0 t_0) n_0(\mathbf{r}_0) \quad \text{für } t \geq t_0. \quad (6.6)$$

Der Beweis ist sehr einfach.

Beispielsweise lautet die Green-Funktion für Diffusion in einer Dimension ohne Wände

$$P(xt, x_0 t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t_0)}} \exp \left(-\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)} \right). \quad (6.7)$$

Für festes $t - t_0 > 0$ beschreibt P eine Normalverteilung mit der Varianz $\sigma^2 = 2D(t - t_0)$. Die Breite der Verteilung nimmt also mit der Zeit wie $\sqrt{D(t - t_0)}$ zu. (Dies gilt allgemein, nicht nur in einer Dimension, da $\sqrt{D(t - t_0)}$ die einzige Größe von der Dimension einer Länge ist, die man aus D und $t - t_0$ konstruieren kann.) Das ist das erwartete Verhalten für die Verteilungsfunktion für die Anfangsbedingung $n(x, t_0) = \delta(x - x_0)$.

6.2 Die Langevin-Gleichung

Wir wollen die Diffusion bzw. Brownsche Bewegung auf einer mikroskopischeren Ebene verstehen. Ein Brownsches Teilchen, z. B. ein Pollenkorn in Browns Experiment, führt zahlreiche Stöße mit Molekülen aus. Dies führt zum Einen sicherlich zu *Reibung*. Wenn sich das Brownsche Teilchen hinreichend langsam in einer Flüssigkeit bewegt, ist die Reibungskraft in guter Näherung durch Newtonsche Reibung

$$\mathbf{F}_R = -m\gamma \dot{\mathbf{r}} \quad (6.8)$$

beschrieben. $m\gamma$ ist der Reibungskoeffizient.

Die Bewegungsgleichung $m\ddot{\mathbf{r}} = -m\gamma \dot{\mathbf{r}}$ beschreibt exponentielle Dämpfung der Bewegung, aber noch keine Diffusion. Dazu ist also eine zusätzliche Kraft $\mathbf{F}_s$ notwendig. Auch drückt $\mathbf{F}_R$ noch nicht die Idee von zufälligen Stößen mit Molekülen aus. Diese Überlegungen führen zur *Langevin-Gleichung*:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -m\gamma \dot{\mathbf{r}} + \mathbf{F}_s(t), \quad (6.9)$$

wobei $\mathbf{F}_s(t)$ eine *zufällige, zeitabhängige Kraft* ist. Für eine bestimmte Realisierung von $\mathbf{F}_s(t)$ erhalten wir eine bestimmte Bahnkurve $\mathbf{r}(t)$. Für eine Zufallsverteilung der $\mathbf{F}_s(t)$ erhalten wir eine Zufallsverteilung von $\mathbf{r}(t)$. Da die Langevin-Gleichung Zufallsgrößen enthält, bezeichnet man sie als *stochastische Gleichung*.

Die *Verteilung* der $\mathbf{r}(t)$ hängt natürlich von der Verteilung der $\mathbf{F}_s(t)$ ab. Wir fragen uns, unter welchen Bedingungen wir Diffusion erhalten. Wir schreiben die Langevin-Gleichung als

$$\dot{\mathbf{v}} = -\gamma \mathbf{v} + \frac{\mathbf{F}_s(t)}{m} \quad (6.10)$$

mit dem Integral

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(t_0) e^{-\gamma(t-t_0)} + \int_{t_0}^t dt' e^{-\gamma(t-t')} \frac{\mathbf{F}_s(t')}{m}. \quad (6.11)$$

Wir setzen o. B. d. A. $t_0 = 0$ und $\mathbf{r}(t_0) \equiv \mathbf{r}_0 = 0$. Durch nochmalige Integration erhalten wir

$$\mathbf{r}(t) = \underset{=\mathbf{v}(t_0)}{\mathbf{v}_0} \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\gamma} + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{-\gamma(t_1-t_2)} \frac{\mathbf{F}_s(t')}{m}. \quad (6.12)$$

Wir nehmen zur Vereinfachung $\mathbf{v}_0 = 0$ an und vertauschen die Integrationen über t_1 und t_2 :

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t) &= \int_0^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 e^{-\gamma(t_1-t_2)} \frac{\mathbf{F}_s(t_2)}{m} \\ &= \int_0^t dt_2 \frac{\mathbf{F}_s(t_2)}{m} e^{\gamma t_2} \frac{e^{-\gamma t} - e^{-\gamma t_2}}{-\gamma} \\ &= \frac{1}{m\gamma} \int_0^t dt_2 \mathbf{F}_s(t_2) [1 - e^{-\gamma(t-t_2)}]. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Die Langevin-Gleichung enthält eine typische Zeitskala $1/\gamma$, die offenbar die Dämpfung beschreibt. Wir betrachten hier lange Zeiten $t \gg 1/\gamma$. Dann ist der Term $e^{-\gamma(t-t_2)}$ im Integranden fast immer klein und wir schreiben

$$\mathbf{r}(t) \cong \frac{1}{m\gamma} \int_0^t dt_2 \mathbf{F}_s(t_2). \quad (6.14)$$

Der Ortsvektor des Teilchens ist also die Summe vieler zufälliger Verrückungen $dt/(m\gamma) \mathbf{F}_s(t)$. Diskretisiert man die Zeit,

$$\mathbf{r}(n\Delta t) = \frac{\Delta t}{m\gamma} \sum_{n'=1}^n \mathbf{F}_s(n'\Delta t), \quad (6.15)$$

so erhält man einen *Random Walk*.

Wir haben bisher keine Annahmen über die Verteilung der Zufallsgrößen $\mathbf{F}_s(t)$ gemacht. Man kann zeigen, dass für sehr viele Stöße mit Molekülen im thermischen Gleichgewicht folgende Annahmen gerechtfertigt sind:

1. $\mathbf{F}_s(t)$ und $\mathbf{F}_s(t')$ zu verschiedenen Zeiten $t \neq t'$ sind unkorreliert. D. h. $\mathbf{F}_s$ hat kein Gedächtnis. Dies nennt man die *Markov-Eigenschaft*.
2. $\mathbf{F}_s(t)$ ist normalverteilt. Dann bezeichnet man $\mathbf{F}_s(t)$ als *Gauß-Prozess*.

Wir betrachten nun den eindimensionalen Fall, um Schreibarbeit zu sparen. Höhere Dimensionen lassen sich analog behandeln.

Eigenschaft 1 lässt sich dann schreiben als

$$\langle F_s(t) F_s(t') \rangle = \frac{S}{2} \delta(t - t'). \quad (6.16)$$

Dann ist das Rauschspektrum

$$S(\omega) := 2 \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{i\omega(t-t')} \underbrace{\langle F_s(t) F_s(t') \rangle}_{=\frac{S}{2} \delta(t-t')} = S = \text{const.} \quad (6.17)$$

Ein solches konstantes Rauschspektrum bezeichnet man als *weißes Rauschen*. Wir diskretisieren nun die Zeit und schreiben

$$x_n = \frac{\Delta t}{m\gamma} \sum_{n'=1}^n F_s(n'\Delta t) \equiv \frac{\Delta t}{m\gamma} \sum_{n'=1}^n F_{n'}. \quad (6.18)$$

Nun ist

$$\langle F_n F_{n'} \rangle = \frac{S}{2} \frac{\delta_{nn'}}{\Delta t}. \quad (6.19)$$

Insbesondere ist die Varianz der Verteilung von $F_s(t)$ nun $\sigma^2 = S/2\Delta t$.

Eigenschaft 2 führt dann auf die Verteilungsfunktion der Zufallskraft

$$p(F_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{F_n^2}{2\sigma^2}\right) = \sqrt{\frac{\Delta t}{\pi S}} \exp\left(-\frac{\Delta t}{S} F_n^2\right). \quad (6.20)$$

Die Verteilungsfunktion des zurückgelegten Weges, $P(x_n)$, ist dann, vgl. Gl. (6.18),

$$\begin{aligned} P(x_n) &= \int dF_1 \cdots dF_n \delta\left(x_n - \frac{\Delta t}{m\gamma} \sum_{n'=1}^n F_{n'}\right) p(F_1) \cdots p(F_n) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\kappa}{2\pi} \int dF_1 \cdots dF_n \exp\left[i\kappa \left(x_n - \frac{\Delta t}{m\gamma} \sum_{n'=1}^n F_{n'}\right)\right] p(F_1) \cdots p(F_n) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\kappa}{2\pi} e^{i\kappa x_n} \prod_{l=1}^n \int dF_l \exp\left(-i \frac{\kappa \Delta t}{m\gamma} F_l\right) \sqrt{\frac{\Delta t}{\pi S}} \exp\left(-\frac{\Delta t}{S} F_l^2\right). \end{aligned} \quad (6.21)$$

Die F_l -Integrale kann man mittels quadratischer Ergänzung im Exponenten ausführen. Man erhält

$$P(x_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\kappa}{2\pi} e^{i\kappa x_n} \left[\exp\left(-\frac{S\Delta t}{4m^2\gamma^2} \kappa^2\right) \right]^n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\kappa}{2\pi} e^{i\kappa x_n} \exp\left(-\frac{nS\Delta t}{4m^2\gamma^2} \kappa^2\right). \quad (6.22)$$

Das kann man wieder ausrechnen:

$$P(x_n) = \frac{\gamma m}{\sqrt{\pi} \sqrt{n\Delta t} \sqrt{S}} \exp\left(-\frac{\gamma^2 m^2}{n\Delta t S} x_n^2\right). \quad (6.23)$$

Wir sehen, dass dies eine sehr ähnliche Form zur Green-Funktion für die Diffusionsgleichung hat, vgl. Gl. (6.7). Die Zeit ist offensichtlich $t = n\Delta t$ und der Ort nach der Zeit t ist $x_n = x(t)$. Wir haben hier tatsächlich die Green-Funktion für die eindimensionale Langevin-Gleichung unter den Annahmen 1 und 2 und $t \gg 1/\gamma$ ausgerechnet:

$$P(xt, 00) = \frac{\gamma m}{\sqrt{\pi} \sqrt{St}} \exp\left(-\frac{\gamma^2 m^2}{St} x^2\right). \quad (6.24)$$

Das ist genau die Green-Funktion (6.7) für die Diffusionsgleichung, wenn wir für die Diffusionskonstante setzen

$$D = \frac{S}{4\gamma^2 m^2}. \quad (6.25)$$

Diese Beziehung ist sinnvoll: Je größer die Rauschamplitude, desto schneller ist die Diffusion. Je größer die Reibung, desto langsamer ist die Diffusion. Im Grenzfall langer Zeiten, $t \gg 1/\gamma$, beschreibt die Diffusionsgleichung also dieselbe Physik wie die Langevin-Gleichung unter den gemachten Annahmen über die Zufallskraft.

6.3 Die Boltzmann-Gleichung

Die Diffusionsgleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung der Dichte $n(\mathbf{r}, t)$ im Ortsraum. Es ist oft nützlich, stattdessen die Dichte im *Phasenraum* zu betrachten. Die Anzahl der Brownschen Teilchen mit

ihrem Ort $\mathbf{r}$ im Volumenelement d^3r und ihrem Impuls $\mathbf{p}$ im Impulselement d^3p sei $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p$. Die Ortsraumdicke ist dann

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d^3p f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (6.26)$$

Für wechselwirkungsfreie klassische Teilchen ergibt sich die Bewegungsgleichung für f aus dem Liouville-Theorem, das eine Kontinuitätsgleichung für f darstellt:

$$0 = \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}, \quad (6.27)$$

mit offensichtlichen Definitionen von $\partial/\partial \mathbf{r}$ und $\partial/\partial \mathbf{p}$. Also gilt

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0. \quad (6.28)$$

Wechselwirkungen zwischen den Teilchen führen zur Streuung aus Zuständen mit Ort $\mathbf{r}$ und Impuls $\mathbf{p}$ in Zustände mit Ort $\mathbf{r}'$ (in realistischen Anwendungen meist identisch zu $\mathbf{r}$, da die Teilchen nicht instantan springen können) und Impuls $\mathbf{p}'$. Diese Streuprozesse induzieren also zusätzliche zeitliche Änderungen in f , die man formal in einem *Streuterm* auf der rechten Seite von Gl. (6.28) zusammengefasst:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f = -\mathcal{S}[f]. \quad (6.29)$$

Dies ist die berühmte *Boltzmann-Gleichung*. Die Schreibweise drückt aus, dass der Streuterm ein noch zu bestimmendes Funktional der Phasenraumdicke f ist.

6.3.1 Relaxationszeitansatz

Ein oft verwendeter phänomenologischer Ansatz für $\mathcal{S}[f]$ geht von der Beobachtung aus, dass das System für Zeiten $t \rightarrow \infty$ ins thermische Gleichgewicht kommen muss, sofern keine äußere Kraft $\mathbf{F}$ wirkt. Die Gleichgewichtsverteilung sei $f_0(\mathbf{p})$. Ist die Einteilchenenergie $E(\mathbf{p})$, so erwarten wir für klassische Teilchen $f_0(\mathbf{p}) \sim \exp(-\beta E(\mathbf{p}))$ und für Elektronen $f_0(\mathbf{p}) \sim n_F(E(\mathbf{p}))$.

Der *Relaxationszeitansatz* besteht nun in

$$\mathcal{S}[f] \stackrel{!}{=} \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - f_0(\mathbf{p})}{\tau} \quad (6.30)$$

mit der Relaxationszeit τ . Dies erzwingt, dass f auf der Zeitskala τ gegen f_0 konvergiert.

Man kann mit der Boltzmann-Gleichung im Relaxationszeitansatz die Leitfähigkeit berechnen. Wir führen dies hier nicht durch. Man erhält wieder die Drude-Formel.

Aber wieso stimmt das Resultat mit dem aus der quantenmechanischen Vielteilchentheorie überein? Die Boltzmann-Gleichung beschreibt die *klassische* Phasenraumverteilung f . Es ist nicht klar, wieso sie auf Elektronen anwendbar sein sollte. Wir werden im folgenden Abschnitt skizzieren, auf welchem Weg sich die Boltzmann-Gleichung aus der Quantenmechanik von Vielteilchensystemen ergibt.

6.3.2 Wigner-Funktion und Quanten-Boltzmann-Gleichung

Es ist nicht offensichtlich, was in der Quantenmechanik an die Stelle der Phasenraumverteilung $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ tritt. Diese gibt nämlich an, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Teilchen den Ortsvektor $\mathbf{r}$ und den Impuls $\mathbf{p}$ hat. Die Heisenbergsche Unschärferelation zeigt aber, dass wir dies aus prinzipiellen Gründen gar nicht genau angeben können.

Eine sinnvolle Frage im Rahmen der quantenmechanischen Vielteilchentheorie ist sicherlich, mit welcher Wahrscheinlichkeitsamplitude wir ein Teilchen zur Zeit t bei $\mathbf{r}$ finden, wenn es zur Zeit t' bei $\mathbf{r}'$ war. Dies wird natürlich durch die Green-Funktion ausgedrückt. Wir betrachten hier

$$G^<(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = i \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (6.31)$$

für Fermionen und unterdrücken die Spin-Indizes. Hier ist $\langle \dots \rangle = \text{Tr } \varrho \dots$. Im Gleichgewicht ist $\varrho = Z^{-1} e^{-\beta H}$, aber die Definition von $G^<$ gilt ganz allgemein für beliebige Dichteoperatoren ϱ .

Wir führen Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

$$\mathbf{R} := \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}, \quad T := \frac{t + t'}{2}, \quad (6.32)$$

$$\Delta \mathbf{r} := \mathbf{r} - \mathbf{r}', \quad \Delta t := t - t' \quad (6.33)$$

ein und schreiben, unter Änderung der Notation,

$$G^<(\Delta \mathbf{r}, \Delta t; \mathbf{R}, T) = i \left\langle \Psi^\dagger \left(\mathbf{R} - \frac{\Delta \mathbf{r}}{2}, T - \frac{\Delta t}{2} \right) \Psi \left(\mathbf{R} + \frac{\Delta \mathbf{r}}{2}, T + \frac{\Delta t}{2} \right) \right\rangle. \quad (6.34)$$

Nun Fourier-transformieren wir nach den Relativkoordinaten und erhalten

$$G^<(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) = \int d^3 \Delta r d\Delta t e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{r} + i\omega \Delta t} G^<(\Delta \mathbf{r}, \Delta t; \mathbf{R}, T). \quad (6.35)$$

Diese Funktion enthält natürlich noch immer dieselbe Information wie die ursprüngliche Green-Funktion aus Gl. (6.31). Nun definieren wir die *Wigner-Funktion*:

$$f(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) := -i G^<(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T). \quad (6.36)$$

Wir zeigen, dass diese Funktion eng mit der Phasenraumverteilung zusammenhängt: Es gilt nämlich

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) &= -i G^<(\Delta \mathbf{r} = 0, \Delta t = 0; \mathbf{R}, T) \\ &= \langle \Psi^\dagger(\mathbf{R}, T) \Psi(\mathbf{R}, T) \rangle, \end{aligned} \quad (6.37)$$

was offenbar die Teilchenzahldichte ist. Andererseits ist

$$\begin{aligned} \int d^3 R \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) &= \int d^3 R d^3 \Delta r e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{r}} (-i) G^<(\Delta \mathbf{r}, \Delta t = 0; \mathbf{R}, T) \\ &= \int d^3 R d^3 \Delta r e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{r}} \left\langle \Psi^\dagger \left(\mathbf{R} - \frac{\Delta \mathbf{r}}{2}, T \right) \Psi \left(\mathbf{R} + \frac{\Delta \mathbf{r}}{2}, T \right) \right\rangle \\ &= \int d^3 r d^3 r' e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}', T) \Psi(\mathbf{r}, T) \rangle \\ &= \langle \Psi^\dagger(\mathbf{k}, T) \Psi(\mathbf{k}, T) \rangle. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Das ist die Teilchenzahldichte im Impulsraum. Dies legt nahe,

$$f_W(\mathbf{R}, \mathbf{k}, T) := \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) \quad (6.39)$$

als Verteilungsfunktion im Phasenraum zu interpretieren. Die so definierte Funktion f_W hängt mit der *gleichzeitigen* kleineren Green-Funktion $G^<$ zusammen:

$$\begin{aligned} f_W(\mathbf{R}, \mathbf{k}, T) &= -i \int d^3 \Delta r e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{r}} G^<(\Delta \mathbf{r}, 0; \mathbf{R}, T) \\ &= \int d^3 \Delta r e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{r}} \left\langle \Psi^\dagger \left(\mathbf{R} - \frac{\Delta \mathbf{r}}{2}, T \right) \Psi \left(\mathbf{R} + \frac{\Delta \mathbf{r}}{2}, T \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Man nennt sie oft ebenfalls *Wigner-Funktion*. f_W ist aber i. A. nicht positiv semidefinit, so dass man f_W nicht direkt als Phasenraumdichte deuten kann. Das ist eine Folge der Quantenmechanik.

Die Bewegungsgleichung für $f(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T)$ ist die Quantum-Boltzmann-Gleichung, die wir nun motivieren wollen. Sie folgt aus der Bewegungsgleichung für $G^<$, die wir analog zu Abschnitt 3.1 herleiten können. Wir betrachten zunächst wechselwirkungsfreie Elektronen in einem statischen elektromagnetischen Feld. Der Einteilchen-Hamiltonian lautet

$$H_0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{1}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right)^2 - e\phi(\mathbf{r}). \quad (6.41)$$

Wir erhalten

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_0^<(\mathbf{r}t, \mathbf{r}', t') &= i \left\langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t') i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \right\rangle \\ &= i \left\langle \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{1}{i} \nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 - e\phi(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \right\rangle. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Also ist

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_0^<(\mathbf{r}t, \mathbf{r}', t') = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{1}{i} \nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 - e\phi(\mathbf{r}) \right] G_0^<(\mathbf{r}t, \mathbf{r}', t'). \quad (6.43)$$

Analog gilt

$$i \frac{\partial}{\partial t'} G_0^<(\mathbf{r}t, \mathbf{r}', t') = - \left[\frac{1}{2m} \left(-\frac{1}{i} \nabla' + e\mathbf{A}(\mathbf{r}') \right)^2 - e\phi(\mathbf{r}') \right] G_0^<(\mathbf{r}t, \mathbf{r}', t'). \quad (6.44)$$

Damit können wir die Ableitung von $f_0(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T)$ nach der Schwerpunktszeit T ausrechnen:

$$\frac{\partial}{\partial T} f_0(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) = -i \frac{\partial}{\partial T} \int d^3\Delta r d\Delta t e^{-i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{r} + i\omega \Delta t} G_0^< \left(\underbrace{\mathbf{R} + \frac{\Delta \mathbf{r}}{2}}_{\mathbf{r}}, \underbrace{T + \frac{\Delta t}{2}}_t, \underbrace{\mathbf{R} - \frac{\Delta \mathbf{r}}{2}}_{\mathbf{r}'}, \underbrace{T - \frac{\Delta t}{2}}_{t'} \right). \quad (6.45)$$

Die Rechnung führen wir hier nicht explizit durch. Sie findet sich z. B. in Mahans Buch. Unter der Annahme eines räumlich und zeitlich schwach veränderlichen elektromagnetischen Feldes erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial T} f_0(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) = \left\{ -\frac{\mathbf{k}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\mathbf{k}}{m} \cdot e\mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \omega} \right\} f_0(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) \quad (6.46)$$

Es folgt

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\mathbf{k}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \underbrace{e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}}_{=+\mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}} - \underbrace{\frac{\mathbf{k}}{m} \cdot e\mathbf{E} \frac{\partial}{\partial \omega}}_{=+\frac{\mathbf{k}}{m} \cdot \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \omega}} \right) f_0(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) = 0. \quad (6.47)$$

Beiträge aufgrund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung, die hier vernachlässigt wurde, drücken wir wieder durch Streuterme auf der rechten Seite der Gleichung aus:

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\mathbf{k}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\mathbf{k}}{m} \cdot \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \omega} \right) f(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T) = -S_{\text{QB}}[f]. \quad (6.48)$$

$S_{\text{QB}}[f]$ kann man durch elektronische Green-Funktionen und Selbstenergien ausdrücken, was wir hier nicht zeigen. Die Gleichung heißt *Quanten-Boltzmann-Gleichung*, da sie sehr ähnlich zur klassischen Boltzmann-Gleichung

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\mathbf{k}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) f(\mathbf{R}, \mathbf{k}, T) = -S[f] \quad (6.49)$$

ist. Den zusätzlichen Term in der Quanten-Boltzmann-Gleichung, $(\mathbf{k}/m) \cdot \mathbf{F} \partial/\partial \omega$, kann man interpretieren: $\mathbf{v} \cdot \mathbf{F} = \partial E/\partial t$ ist die Verlustleistung aufgrund von Joulescher Wärme.

Tatsächlich erhält man eine Boltzmann-Gleichung für die Wigner-Funktion f_W durch Integration der Quanten-Boltzmann-Gleichung über ω , was

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\mathbf{k}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) f_W(\mathbf{R}, \mathbf{k}, T) = - \int \frac{d\omega}{2\pi} S_{\text{QB}}[f] \quad (6.50)$$

ergibt. Hier ist die rechte Seite aber i. A. noch kein Funktional allein von f_W , also sind noch Näherungen für S_{QB} nötig, um den Streuterm auf die Form $-S[f_W]$ zu bringen. Man spricht in diesem Zusammenhang von der *semiklassischen* Boltzmann-Gleichung, um auszudrücken, dass sie zwar die Form einer klassischen Gleichung hat, aber aus einer quantenmechanischen Herleitung resultiert.

Wir fassen noch einmal zusammen:

- Die Bewegungsgleichung für $G^<$ ist äquivalent zur Quanten-Boltzmann-Gleichung für die Wigner-Verteilungsfunktion $f(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T)$.

- Durch Integration über ω und Näherungen erhält man eine Boltzmann-Gleichung für

$$f_W(\mathbf{R}, \mathbf{k}, T) = \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{R}, T). \quad (6.51)$$

Dies gestattet, die Boltzmann-Gleichung im Rahmen der Vielteilchentheorie zu begründen.

Anhang A

Literatur

Es existieren zahlreiche Lehrbücher zu den Themen dieses Skripts. Da es Elemente von Quantenfeldtheorie, Vielteilchentheorie und Statistischer Physik im Nichtgleichgewicht beinhaltet, kann man nicht erwarten, den Inhalt in einem einzigen Buch wiederzufinden. Hier folgt eine subjektive Auswahl von Lehrbüchern, die entweder noch im Druck oder in der Bibliothek zu finden sein sollten, mit kurzen Kommentaren.

Quantenfeldtheorie

K. Huang, *Quantum Field Theory* (Wiley, New York, 1998): Überwiegend elegante, moderne und klar strukturierte Darstellung, die anders als andere Bücher nicht ausschließlich Anwendungen in der Elementarteilchenphysik im Sinn hat. Der Teil, den wir hier benötigen, ungefähr die erste Hälfte, verwendet ausschließlich den Operator-Formalismus, keine Pfadintegrale. Enthält leider viele Druckfehler in den Formeln. Die Qualität des Textes variiert, insgesamt aber didaktisch gut aufbereitet.

C. Itzykson und J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, New York, 1980): Ein klassisches Lehrbuch der Quantenfeldtheorie aus Sicht der Elementarteilchenphysik. Führt Pfadintegrale ebenfalls erst spät ein. Enthält weitaus mehr als wir für die Vielteilchentheorie brauchen.

A. M. Tselik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, 2. Auflage (Cambridge University Press, Cambridge, 2003): Führt in die Quantenfeldtheorie aus Sicht der Vielteilchentheorie ein, wäre insofern ein ideales Lehrbuch für diese Vorlesung, benutzt aber Pfadintegrale und behandelt viele grundlegende Themen nicht. Die diskutierten Anwendungen sind relativ modern und fortgeschritten und spiegeln die Interessen des Autors wider. Inakzeptables Stichwortverzeichnis. Enthält zahlreiche von Tselik gezeichnete Karikaturen, sein Markenzeichen.

Vielteilchentheorie

G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 2. Auflage (Plenum, New York, 1990): Ein Klassiker, vielleicht *der* Klassiker. Beruht auf dem Operator-Formalismus, der auch in der Vorlesung verwendet wird. Etwas leichter lesbar als Negele und Orland. Argumentiert eher physikalisch. Umfangreich, deckt fast alles ab, was zu einer Einführung in die Vielteilchentheorie gehört, einschließlich Superfluidität und Supraleitung. Geht fast sofort zum Matsubara-Formalismus (typischerweise verwendet für Temperaturen $T > 0$) über.

J. W. Negele und H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley, Reading, 1988): Ein weiterer Klassiker. Baut auf dem Pfadintegral-Formalismus auf und ist in diesem Sinne moderner als Mahan. Supraleitung wird nicht behandelt. Vielleicht das am besten durchdachte Buch, aber nicht leicht zu lesen, auch wegen des abschreckenden Layouts zumindest der genannten Ausgabe.

W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie*, 6. Auflage (Springer, Berlin, 2005): Gutes, deutschsprachiges Lehrbuch, klar gegliedert, didaktisch

besser aufbereitet als die vorgenannten Klassiker. Starkes Gewicht auf Formalismen. Supraleitung wird nicht behandelt, dafür relativ fortgeschrittene Themen zum Magnetismus (Interessengebiet des Autors).

H. Bruus und K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics* (Oxford University Press, Oxford, 2004): Empfehlenswertes, didaktisch recht gut aufbereitetes neues Lehrbuch, das den Operator-Formalismus verwendet, keine Pfadintegrale. Teilweise etwas inexakt in der Interpretation. Deckt im Wesentlichen den gesamten Stoff einer Einführung in die Vielteilchentheorie ab, einschließlich Supraleitung, ist aber kompakter und besser strukturiert als Mahans Buch. Kapitel über Transport in mesoskopischen Systemen und über eindimensionale Systeme gehen über den Standard-Stoff hinaus.

A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov und I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, New York, 1963): Ein weiterer Klassiker. Trotz des Titels ein fortgeschrittenes Lehrbuch über Vielteilchentheorie. Sehr dicht, vergleichbar mit Negele und Orland, verwendet aber den Operator-Formalismus. Enthält ein Kapitel zur Supraleitung. Unzureichendes Stichwortverzeichnis.

X.-G. Wen, *Quantum Field Theory of Many-Body Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2004): Die erste Hälfte des Buches enthält eine knappe Darstellung von Standard-Stoff der Vielteilchentheorie im Pfadintegral-Bild. Die zweite Hälfte behandelt hochaktuelle Fragen, überwiegend aus der eigenen Forschung des Autors, und liegt teilweise weit außerhalb des allgemein akzeptierten Kenntnisstandes. Enthält einsichtsvolle Bemerkungen, z. B. zum Vergleich von Vielteilchentheorie und Elementarteilchentheorie. Das erste Kapitel lohnt sich zu lesen.

A. Altland und B. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, 2. Auflage (Cambridge University Press, Cambridge, 2010): Ein sehr schönes, didaktisch sehr gutes Buch, das überwiegend den Pfadintegral-Formalismus verwendet. Geht über den Stoff der Vorlesung hinaus. Starkes Gewicht auf erklärender Prosa. Sehr empfehlenswert für breiter Interessierte.

E. M. Lifshitz und L. P. Pitaevskii, *Landau and Lifshitz, Course of Theoretical Physics 9: Statistical Physics Part 2* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1980) bzw. *Landau und Lifshitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik 9: Statistische Physik Teil 2*, 4. Aufl. (Akademie Verlag, Berlin, 1992): Der „Landau-Lifshitz“ zum Thema Vielteilchentheorie. Baut auf der Landau-Theorie der Fermi-Flüssigkeiten auf, was zu einer ungewohnten Reihenfolge der Kapitel führt. Wie üblich für Landau und Lifshitz überwiegend inhaltlich gut durchdacht, aber sehr dicht und didaktisch nicht sehr freundlich.

M. El-Batanouny, *Quantum Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2020): Ganz neues Lehrbuch, das versucht, einen großen Bogen zu schlagen. Beginnt mit Standard-Festkörpertheorie à la Ashcroft und Mermin, aber viel knapper, führt in topologische Konzepte (Berry-Phase, topologische Klassifizierung von Festkörpern) ein, behandelt Green-Funktionen im Operator-Formalismus und auch kurz im Pfadintegral-Formalismus und bringt schließlich typische Anwendungen auf Magnetismus und Supraleitung. Dem großen Stoffumfang geschuldet ist die Darstellung relativ knapp.

J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, überarbeiteter Nachdruck (Addison-Wesley, Redwood City, 1983): Wie der Titel sagt, ein Lehrbuch über die (BCS-) Theorie der Supraleitung. Enthält jedoch eine knappe, klare Darstellung der ihr zu Grunde liegenden Vielteilchentheorie im Operator-Formalismus, überwiegend für Temperatur $T = 0$.

H. Eschrig, *The Fundamentals of Density Functional Theory*, 2. Aufl. (Edition am Gutenbergplatz, Leipzig, 2003): Ein Buch speziell zur Dichtefunktionaltheorie und ihren Zusammenhang mit anderen Zugängen der Vielteilchentheorie. Geschrieben von einem leider verstorbenen Dresdner Experten auf diesem Gebiet, mathematisch manchmal nicht einfach. Interessenten am Thema Dichtefunktionaltheorie können leicht mehrere weitere Fachbücher finden, die hier nicht aufgeführt sind.

Statistische Physik im Nichtgleichgewicht

Der überwiegende Teil des Stoffs, den das entsprechende Kapitel des Skripts behandelt, ist in den vorgenannten Lehrbüchern der Vielteilchentheorie enthalten. Brownsche Bewegung, Markov-Prozesse und semiklassische Boltzmann-Theorie werden in verschiedenen Lehrbüchern der Statistischen Physik besprochen.

C. Kittel, *Elementary Statistical Physics* (Wiley, New York, 1958): Klassisches Lehrbuch mit einem relativ hohen Anteil von Formeln. Enthält eine knappe aber klare Darstellung der genannten Aspekte.

R. Kubo, M. Toda und N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*, 2. Auflage (Springer, Berlin, 1991): Ein neueres Lehrbuch, das die hier wichtigen Aspekte ausführlicher behandelt als Kittel, aber die wesentlichen Punkte manchmal nicht so klar herausarbeitet.

H.-P. Breuer und F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Clarendon Press, Oxford, 2006): Sehr gutes Buch zur Statistischen Physik von Quantensystemen außerhalb des Gleichgewichts. Noch modern, aber trotzdem schon ein Klassiker. Empfohlen für Interessierte.