

Vorlesung zur Vielteilchentheorie

**gehalten von Dr. Gerd Czycholl
im Sommersemester 1986
an der Universität Dortmund**

herausgegeben von Stefan Groote

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--------------------------------------------------------------------|-----------|
| Inhaltsverzeichnis | 2 |
| Vorwort | 3 |
| Literaturhinweise | 4 |
| 1. Die Antwortfunktion | 4 |
| 1.1 Einleitung | 4 |
| 1.2 Zeitliche Inhomogenitäten | 4 |
| 1.3 Räumliche Inhomogenitäten | 7 |
| 1.4 Die Korrelationsfunktion | 10 |
| 2. Greensfunktionen | 13 |
| 2.1 Verschiedene Gestalten der Greensfunktionen | 13 |
| 2.2 Die Kommutator-Greensfunktion | 14 |
| 2.3 Bewegungsgleichungen der Kommutator-Greensfunktion | 15 |
| 2.4 Die Matsubara- oder Temperatur-Greensfunktion | 17 |
| 2.5 Der Zusammenhang mit der Kommutator-Greensfunktion | 19 |
| 2.6 Beispiel: Das freie Fermion | 21 |
| 2.7 Spektralfunktion und Summenregeln | 23 |
| 2.8 Der Zusammenhang mit den Greensfunktionen | 25 |
| 3. Vielteilchensysteme | 27 |
| 3.1 Der Begriff des Propagators | 27 |
| 3.2 Beziehung zur Thermodynamik | 28 |
| 3.3 Das Wicksche Theorem | 31 |
| 3.4 Beweis des Wickschen Theorems | 33 |
| 3.5 Die Molekularfeld- oder Hartree-Fock-Näherung | 35 |
| 4. Die Polstruktur einfacher Modelle | 38 |
| 4.1 Mutator-Rechenregeln für Erzeuger und Vernichter | 39 |
| 4.2 Der freie Hamiltonoperator | 39 |
| 4.3 Das wechselwirkende System zweier Fermionen | 40 |
| 4.4 System zweier Elektronen in Hartree-Fock-Näherung | 42 |
| 4.5 Entkopplung der Bewegungsgleichungen | 44 |
| 5. Thermodynamische Störungsrechnung: Einteilchenprobleme . | 45 |
| 5.1 Reihenentwicklung der Greensfunktion | 45 |
| 5.2 Graphische Darstellung | 47 |
| 5.3 Das wechselwirkungsfreie System mit Störpotential | 48 |
| 5.4 Regeln für numerierte Graphen | 50 |
| 5.5 Das Theorem verbundener Graphen | 51 |
| 5.6 Der Kumulantensatz | 52 |
| 5.7 Die fouriertransformierte Form | 53 |
| 5.8 Störstellenstreuung und Konfigurationsmittel | 54 |

| | |
|-------------------------------------------------------------------|-----------|
| 6. Thermodynamische Störungsrechnung: Vielteilchenprobleme | 58 |
| 6.1 Graphische Darstellung | 59 |
| 6.2 Regeln für numerierte Graphen | 61 |
| 6.3 Das Theorem verbundener Graphen | 61 |
| 6.4 Symmetrien der Wechselwirkung | 62 |
| 6.5 Die fouriertransformierte Form | 63 |
| 6.6 Graphenregeln im Fourierbild | 64 |
| 6.7 Von den Kumulanten zu verbundenen Graphen | 65 |
| 6.8 Skelettgraphen und effektive Wechselwirkungslinien | 68 |
| 6.9 Näherungen und Rechnungen | 69 |
| 7. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung | 72 |
| 7.1 Die Einteilchengreensfunktion „freier“ Phononen | 72 |
| 7.2 Das Fröhlich-Modell der Elektron-Phonon-Wechselwirkung | 74 |
| 7.3 Störungstheoretische Behandlung | 75 |
| Stichwortverzeichnis | 77 |

Vorwort

Der vorliegende Band ist entstanden aus einer Vorlesung, die Herr Dr. Gerd Czycholl* im Sommersemester 1986 an der Universität Dortmund hielt. Diese Vorlesung verstand sich als Ergänzung und Fortführung der „Vorlesung zur Festkörpertheorie“, die parallel dazu in diesem Semester von Herrn Prof. Dr. Uwe Brandt¹ gehalten wurde. Zu dieser Vorlesung ist bereits von mir ein Skriptum erschienen, welches jedoch die störungstheoretischen Aspekte noch nicht enthält. Dieser Teil der Vorlesung ist hier mit eingeflossen.

Ich möchte mich bei den beiden Dozenten für die interessanten und gut aufeinander abgestimmten Vorlesungen bedanken, die mir einen sehr intuitiven Einstieg in die graphische Behandlung der Störungstheorie gaben. Ich habe mich bemüht, die Vorlesung „Einführung in die Vielteilchentheorie“ in ihrem Aufbau und Konzept weitgehend zu erhalten, habe mich aber an einigen Punkten zu Änderungen entschlossen. Ferner habe ich hier ausschließlich Einheiten des internationalen Systems (SI) benutzt. Ich hoffe, daß auch nachfolgende Generationen von Studentinnen und Studenten aus diesem Vorlesungsskript einen Nutzen ziehen werden.

Dortmund, im Juli 1994

Stefan Groote**

© Eine Produktion des christlichen Buchverlages Groote & Reiß

* Lehrstuhl für Theoretische Physik I der Universität,
Postfach 500500, 44221 Dortmund

** Lehrstuhl für Theoretische Physik III der Universität,
Postfach 500500, 44221 Dortmund

Literaturhinweise

- Fetter, Walecha: *Quantum Theory of Many Particle Systems*
- Makin: *Many Particle Physics*
- Ecommu: *Greens-Funktions in Solid State Theory*
- Els, Gasser: *Methode der Greenschen Funktionen in der Festkörperphysik*
- Landau, Lifschitz: *Band XI, Statistische Physik II*
- Radanoff, Bayn: *Quantum Statistical Mechanics*
- Doniak, Sondheimer: *Greens-Functions for Solid State Physics*

1. Die Antwortfunktion

1.1 Einleitung

Wir gehen ein auf die thermodynamische Störungsrechnung, also die Behandlung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen untereinander und mit der Umgebung unter der Annahme, daß eine solche Wechselwirkung „klein“ ist und folglich als „Störung“ behandelt werden kann. Dieses Ziel vor Augen erhalten wir Rechnungen, die ziemlich parallel zu denen der Hochenergiephysik laufen. Es gibt aber drei wesentliche Unterschiede in der Begriffsbildung:

- (1) Die hier benutzten „Zeiten“ sind rein imaginär. Wollen wir zu reellen Zeiten übergehen, so müssen wir die Funktionen analytisch fortsetzen.
- (2) Wir haben ein zwar sehr großes, aber immerhin endliches System vorliegen, so daß die Wellenzahl k diskrete Werte annimmt, über die summiert, nicht integriert wird. Erst beim Endergebnis können wir möglicherweise zur Integration übergehen.
- (3) Hier werden wir ein System sehr vieler Teilchen betrachten, die Hochenergiephysik betrachtet dagegen die Wechselwirkung einiger weniger Teilchen.

Um das Vorgehen, insbesondere die Einführung einer Greensfunktion zu motivieren, greifen wir auf Material aus dem Skript „Festkörpertheorie“ zurück, das dort nur angerissen, nicht aber weiter ausgeführt worden ist. Es handelt sich um die Störungsentwicklung in Form der Antwortfunktion oder Suszeptibilität.

1.2 Zeitliche Inhomogenitäten

Für den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{B} \cdot f(t) \quad (1.1)$$

läßt sich die Änderung des Erwartungswertes $\langle \hat{A} \rangle$ eines Operators \hat{A} darstellen als

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \hat{A} \rangle_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{AB}(t-t') f(t') dt', \quad (1.2)$$

wobei der Integralkern

$$\chi_{AB}(t-t') := -\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_- \rangle_0 \quad (1.3)$$

als *Antwortfunktion* oder *Suszeptibilität* bezeichnet wird. Es ist dabei

$$A(t) := \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right), \quad B(t) \text{ entsprechend.} \quad (1.4)$$

Die Theta-Funktion, die in der Antwortfunktion erscheint, drückt die Kausalität des Vorgangs aus. χ_{AB} heißt daher auch *retardierte Antwortfunktion*.

Als Beispiel behandeln wir ein freies geladenes Teilchen in einem homogenen elektrischen Wechselfeld

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}. \quad (1.5)$$

Das Vektorpotential erhalten wir mit $\vec{E} = -\partial \vec{A} / \partial t$ durch Integration über die Zeit:

$$\vec{A}(t) = \frac{\vec{E}_0}{i\omega} e^{-i\omega t}. \quad (1.6)$$

Der Hamiltonoperator, an das äußere Feld minimal gekoppelt, läßt sich aufspalten in einen ungestörten Anteil und einen Störterm,

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 \approx \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{j} \cdot \vec{A}, \quad (1.7)$$

und wir wollen für ein elektrisches Feld in x -Richtung den Erwartungswert der x -Komponente des Stromoperators

$$\vec{j} = \frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A} \quad (1.8)$$

berechnen:

$$\begin{aligned} \langle j_x \rangle(t) &= \langle j_x \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{j_x j_x}(t-t') \frac{E_0}{i\omega} e^{-i\omega t'} dt' = \chi_{j_x j_x}(\omega) \frac{E_0}{i\omega} e^{-i\omega t} = \\ &=: \sigma(\omega) \cdot E_x(t) \quad \text{mit } \langle j_x \rangle_0 = 0. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Wir haben somit die Imaginärteil der Suszeptibilität mit der *elektrischen Leitfähigkeit*, dem Realteil von σ , verbunden. Der Imaginärteil der Suszeptibilität beschreibt die Energieabsorption.

Das, was wir eben im Beispiel kennengelernt haben, nämlich den Zusammenhang zwischen elektrischer Leitfähigkeit und Energieabsorption, können wir noch allgemeiner fassen. Wir zerlegen die i.a. komplexe Antwortfunktion in einen Realteil χ' , den *reaktiven* oder *dispersiven Anteil*, und einen Imaginärteil χ'' , den *absorptiven Anteil*:

$$\chi_{AB}(\omega) = \chi'_{AB}(\omega) + i\chi''_{AB}(\omega). \quad (1.10)$$

$\{|n\rangle\}$ sei eine vollständige Eigenbasis des Vielteilchen-Hamiltonoperators \widehat{H}_0 mit Energieeigenwerten E_n . Dann ist (vgl. FKT(2.106))

$$\chi_{AB}(z) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{mn} \frac{(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \langle n | \widehat{A} | m \rangle \langle m | \widehat{B} | n \rangle}{\hbar z + E_n - E_m} \quad (1.11)$$

analytisch für $\text{Im}(z) > 0$ und besitzt Pole bei $z = (E_m - E_n)/\hbar$ längs der reellen Achse. Führen wir einen Integrationsweg um einen beliebigen Punkt z mit $\text{Im}(z) > 0$, der nicht Pol ist, so gilt nach dem Cauchyschen Integralsatz

$$\chi_{AB}(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\chi_{AB}(z') dz'}{z' - z}. \quad (1.12)$$

Wir erstrecken dieses Kreisintegral nun parallel zur reellen Achse und nähern uns dieser Achse. Dann können wir es im Grenzfall $z, z' \in \mathbb{R}$ durch zwei gegenläufige Hauptwertintegrale ersetzen:

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi i} V.p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{AB}(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega}, \quad (1.13)$$

und, in Real- und Imaginärteil aufgespalten, ergeben sich die *Kramers-Kronig-Relationen*

$$\chi'_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi} V.p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''_{AB}(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega}, \quad (1.14)$$

$$\chi''_{AB}(\omega) = -\frac{1}{\pi} V.p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi'_{AB}(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega}. \quad (1.15)$$

Der statische Grenzwert der Suszeptibilität wird als *adiabatische Suszeptibilität* bezeichnet:

$$\chi_{AB}^{\text{ad}} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{AB}(\omega). \quad (1.16)$$

Die Entropie ändert sich bei einer zeitlich langsamen Entwicklung aus dem ungestörten Zustand

$$\widehat{\rho}_0 = \frac{1}{\mathcal{Z}_0} e^{-\beta \widehat{H}_0} \quad (1.17)$$

nicht. Der Grenzwert $\omega \rightarrow 0$ im Fourierraum bedeutet aber gerade diese Langsamkeit im Zeitlichen. Daher ist der Begriff „adiabatisch“ hier legitim. Hiervon zu unterscheiden ist die *isotherme Suszeptibilität*. Als Beispiel hierzu berechnet sich die *magnetische Suszeptibilität* aus der Magnetisierung, diese wiederum erhalten wir durch Ableiten des Logarithmus der Zustandssumme nach dem Magnetfeld:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln(\text{Spur}(e^{-\beta(H_0 - M \cdot B)})) = \frac{\text{Spur}(M e^{-\beta(H_0 - M \cdot B)})}{\text{Spur}(e^{-\beta(H_0 - M \cdot B)})}, \quad (1.18)$$

$$\chi_M = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \Big|_T = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \tag{1.19}$$

Da die Temperatur hier konstant gehalten wird, ist die magnetische Suszeptibilität ein Beispiel für eine isotherme Suszeptibilität. Allgemeiner erhalten wir für $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{B} \cdot f(t)$ die isotherme Suszeptibilität

$$\chi_{AB}^T = - \lim_{f \rightarrow 0} \frac{\partial \langle \hat{A} \rangle_\rho}{\partial f} = \beta(\langle \hat{B} \hat{A} \rangle_0 - \langle \hat{B} \rangle_0 \langle \hat{A} \rangle_0) \tag{1.20}$$

$$\text{mit } \hat{\rho} = \frac{\exp(-\beta(\hat{H}_0 + \hat{B} \cdot f))}{\text{Spur}(\exp(-\beta(\hat{H}_0 + \hat{B} \cdot f)))}, \tag{1.21}$$

im allgemeinen ist

$$\chi_{AB}^T \geq \chi_{AB}^{\text{ad}}. \tag{1.22}$$

1.3 Räumliche Inhomogenitäten

Wir betrachten als Beispiel für eine räumliche Inhomogenität einen Stab der Länge L , dessen beide Enden unterschiedliche Temperaturen besitzen. Obwohl in diesem System keine Gleichgewichtsthermodynamik möglich ist, stellt sich die Temperatur nach genügend langer Zeit auf

$$T(x) = T(0) + x \cdot \frac{T(L) - T(0)}{L} \tag{1.23}$$

ein. Voraussetzen müssen wir dabei allerdings, daß der Temperatúrausgleich, verglichen mit dem charakteristischen Systemzeiten, langsam vonstatten geht. Die Veränderung geschieht adiabatisch, der Zustand des Systems ist in jedem Moment quasistationär.

Wir unterteilen dazu den Stab in feine Untereinheiten längs der Stabachse. Im i -ten System bestehe bei der Temperatur T_i ein thermodynamisches Gleichgewicht. Wir können daher für dieses Untersystem die kanonische Dichtematrix

$$\hat{\rho}_i = \frac{1}{Z_i} \exp(-\beta_i \hat{H}_i) \tag{1.24}$$

ansetzen. Wir können dann die Dichtematrix des Gesamtsystems durch das Produkt dieser Dichtematrizen berechnen:

$$\hat{\rho} = \prod_i \hat{\rho}_i = \frac{\exp(-\sum_i \beta_i \hat{H}_i)}{\text{Spur}(\exp(-\sum_i \beta_i \hat{H}_i))} \rightarrow \frac{\exp(-\int \beta(x) \hat{H}(x) dx)}{\text{Spur}(\exp(-\int \beta(x) \hat{H}(x) dx))}. \tag{1.25}$$

$\hat{H}(x)$ ist hierbei die *Hamiltondichte*, der Hamiltonoperator ist

$$\hat{H}_0 = \int \hat{H}(x) dx. \tag{1.26}$$

Setzen wir für die Temperaturverteilung

$$\frac{1}{k_B T(x)} = \beta(x) = \beta_0 + \beta_1(x), \quad (1.27)$$

wobei β_0 das Gleichgewicht, $\beta_1(x)$ eine schwache Störung darstellt, so ergibt sich

$$\int \beta(x) \widehat{H}(x) dx = \beta_0 (\widehat{H}_0 + \widehat{H}_1) \quad \text{mit} \quad \widehat{H}_1 := \frac{1}{\beta_0} \int \beta_1(x) \widehat{H}(x) dx \quad (1.28)$$

und

$$\widehat{\rho} = \frac{\exp(-\beta_0(\widehat{H}_0 + \widehat{H}_1))}{\text{Spur}(\exp(-\beta_0(\widehat{H}_0 + \widehat{H}_1)))} =: \widehat{\rho}_0 + \widehat{\rho}_1 \quad \text{mit} \quad \widehat{\rho}_0 = \frac{\exp(-\beta_0 \widehat{H}_0)}{\text{Spur}(\exp(-\beta_0 \widehat{H}_0))}. \quad (1.29)$$

$\widehat{\rho}$, $\widehat{\rho}_0$ und $\widehat{\rho}_1$ sind zeitunabhängige Größen. Wir gehen nun über zum Wechselwirkungsbild mit

$$\rho_1(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) \widehat{\rho}_1 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right). \quad (1.30)$$

Die von-Neumann-Gleichung für $\rho_1(t)$ lautet dann

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1(t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) \widehat{\rho}_1 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right)) = \\ &= -\exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) [\widehat{H}_0, \widehat{\rho}_1]_- \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right), \end{aligned} \quad (1.31)$$

und wegen

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widehat{\rho} &= [\widehat{H}, \widehat{\rho}]_- = [\widehat{H}_0 + \widehat{H}_1, \widehat{\rho}_0 + \widehat{\rho}_1]_- = \\ &= [\widehat{H}_0, \widehat{\rho}_0]_- + [\widehat{H}_1, \widehat{\rho}_0]_- + [\widehat{H}_0, \widehat{\rho}_1]_- + [\widehat{H}_1, \widehat{\rho}_1]_- = [\widehat{H}_1, \widehat{\rho}_0]_- + [\widehat{H}_0, \widehat{\rho}_1]_- \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \quad (1.32)$$

können wir in Gleichung (1.31) ersetzen und erhalten

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) [\widehat{H}_1, \widehat{\rho}_0]_- \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right). \quad (1.33)$$

Wir integrieren dies:

$$\rho_1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t'\right) [\widehat{H}_1, \widehat{\rho}_0]_- \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t'\right) dt' \quad (1.34)$$

und errechnen

$$\widehat{\rho}_1 = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 (t' - t)\right) [\widehat{H}_1, \widehat{\rho}_0]_- \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 (t' - t)\right) dt' \quad (1.35)$$

$$\text{oder} \quad \widehat{\rho} = \widehat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t''\right) [\widehat{H}_1, \widehat{\rho}_0]_- \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t''\right) dt'' \quad (1.36)$$

mit $t'' := t' - t$. Den Integranden können wir durch einen Trick weiter umformen,

$$\begin{aligned} [\widehat{H}_1, \widehat{\rho}_0] &= \frac{\exp(-\beta_0 \widehat{H}_0)}{\text{Spur}(\exp(-\beta_0 \widehat{H}_0))} \int_0^{\beta_0} \frac{d}{d\lambda} (\exp(\lambda \widehat{H}_0) \widehat{H}_1 \exp(-\lambda \widehat{H}_0)) d\lambda = \\ &= \int_0^{\beta_0} \widehat{\rho}_0 \exp(\lambda \widehat{H}_0) [\widehat{H}_0, \widehat{H}_1] \exp(-\lambda \widehat{H}_0) d\lambda \end{aligned} \quad (1.37)$$

und erhalten mit

$$H_1(t) := \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) \widehat{H}_1 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) \quad (1.38)$$

wegen

$$\frac{\partial}{\partial t} H_1(t) = \frac{i}{\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) [\widehat{H}_0, \widehat{H}_1] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) \quad (1.39)$$

die Dichte

$$\widehat{\rho} = \widehat{\rho}_0 - \int_{-\infty}^0 \int_0^{\beta_0} \widehat{\rho}_0 \dot{H}_1(t - i\hbar\lambda) d\lambda dt. \quad (1.40)$$

Unter Einführung des Energiestromoperators $q(x, t)$, der definiert ist durch

$$\frac{\partial}{\partial x} q(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} H(x, t) \quad \text{mit} \quad H(x, t) := \exp\left(\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) \widehat{H}(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \widehat{H}_0 t\right) \quad (1.41)$$

können wir weiter umformen, vorausgesetzt, der Temperaturgradient

$$\frac{1}{\beta_0} \frac{\partial \beta(x)}{\partial x} = -\frac{1}{T(0)} \frac{\partial T(x)}{\partial x} = -\frac{T(L) - T(0)}{LT(0)} \quad (1.42)$$

ist ortsunabhängig:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} H_1(t) &= \frac{1}{\beta_0} \int \beta(x) \frac{\partial H(x, t)}{\partial t} dx = -\frac{1}{\beta_0} \int \beta(x) \frac{\partial q(x, t)}{\partial x} dx = \\ &= \frac{1}{\beta_0} \int \frac{\partial \beta(x)}{x} q(x, t) dx = -\frac{T(L) - T(0)}{LT(0)} \cdot q(t), \end{aligned} \quad (1.43)$$

$$q(t) := \int q(x, t) dx. \quad (1.44)$$

Damit ist

$$\widehat{\rho} = \widehat{\rho}_0 + \int_{-\infty}^0 \int_0^{\beta_0} \widehat{\rho}_0 q(t - i\hbar\lambda) \frac{T(L) - T(0)}{LT(0)} d\lambda dt, \quad (1.45)$$

der Erwartungswert eines Operators \widehat{A} bezüglich der Dichte $\widehat{\rho}$ liefert

$$\langle \widehat{A} \rangle = \langle \widehat{A} \rangle_0 + \int_{-\infty}^0 \int_0^{\beta_0} \langle q(t - i\hbar\lambda) \widehat{A} \rangle_0 \frac{T(L) - T(0)}{LT(0)} d\lambda dt. \quad (1.46)$$

Auch hier ist

$$q(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t\right)\widehat{q}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t\right). \quad (1.47)$$

Für ein freies Teilchen ist der Energiestromoperator in jeder Komponente gegeben als

$$\widehat{q}_i = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar k_i}{m} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (1.48)$$

und gehen wir über zum großkanonischen Ensemble, so wird der Energiestrom ersetzt durch den *Wärmestrom*

$$\vec{j}_Q = \vec{q} - \mu\vec{j}. \quad (\vec{j} \text{ ist der Teilchenstrom}) \quad (1.49)$$

1.4 Die Korrelationsfunktion

Den Erwartungswert $K_{AB}(t) := \langle A(t)\widehat{B} \rangle_0 = \langle A(t)B(0) \rangle_0$ bezeichnen wir allgemein als *Korrelationsfunktion*. Sie erinnert etwas an die Antwortfunktion

$$\chi_{AB}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [A(t), B(0)]_- \rangle_0. \quad (1.50)$$

Außer durch die Kausalität und das Auftreten eines Kommutators unterscheiden sie sich noch dadurch, daß bei der Korrelationsfunktion im allgemeinen komplexe „Zeiten“ auftreten können. Wie die Antwortfunktion können wir auch die Korrelationsfunktion durch Eigenwerte von \widehat{H}_0 ausdrücken. Wir erhalten entsprechend die Spektraldarstellung

$$K_{AB}(t) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t\right) \langle n | \widehat{A} | m \rangle \langle m | \widehat{B} | n \rangle. \quad (1.51)$$

Definieren wir die *Spektralfunktion*

$$J_{AB}(\omega) := \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} \delta(\hbar\omega + E_n - E_m) \langle n | \widehat{A} | m \rangle \langle m | \widehat{B} | n \rangle, \quad (1.52)$$

so erhalten wir

$$K_{AB}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} J_{AB}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (1.53)$$

Es ist

$$\begin{aligned} J_{AB}(\omega) e^{-\beta\hbar\omega} &= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} e^{-\beta\hbar\omega} \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) \langle n | \widehat{A} | m \rangle \langle m | \widehat{B} | n \rangle = \\ &= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} e^{-\beta E_m} \delta(\hbar\omega + E_n - E_m) \langle n | \widehat{A} | m \rangle \langle m | \widehat{B} | n \rangle = \\ &= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} \delta(-\hbar\omega + E_m - E_n) \langle m | \widehat{B} | n \rangle \langle n | \widehat{A} | m \rangle = \\ &= J_{BA}(-\omega) \end{aligned} \quad (1.54)$$

Entsprechend gilt für die Antwortfunktion

$$\begin{aligned} \chi_{AB}(t) &= \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle A(t)B(0) - B(0)A(t) \rangle_0 = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) (K_{AB}(t) - K_{BA}(-t)) = \\ &= \frac{i}{2\pi\hbar} \Theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} J_{AB}(\omega) (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) e^{-i\omega t} d\omega. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Diese Antwortfunktion existiert nur dann, wenn das Spektrum nach unten beschränkt ist. Unter dieser Voraussetzung rechnen wir weiter und bestimmen das Fouriertransformierte zu $\chi(t)$ etwas oberhalb der reellen Achse:

$$\begin{aligned} \chi_{AB}(\omega + i0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{AB}(t) e^{i(\omega+i0)t} dt = \\ &= \frac{i}{2\pi\hbar} \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} J_{AB}(\omega') (1 - e^{-\beta\hbar\omega'}) e^{i(\omega+i0-\omega')t} d\omega' dt = \\ &= -\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} J_{AB}(\omega') \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega'}}{\omega + i0 - \omega'} d\omega'. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Damit ist

$$\text{Im}(\chi_{AB}(\omega + i0)) = \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) J_{AB}(\omega) \quad (1.57)$$

oder

$$J_{AB}(\omega) = 2\hbar(1 + b(\beta\hbar\omega)) \chi''_{AB}(\omega + i0) \quad (1.58)$$

mit der Bosefunktion

$$b(x) = \frac{1}{e^x - 1}. \quad (1.59)$$

Wir definieren schließlich eine *Fluktuationsfunktion*

$$\begin{aligned} F_{AB}(t) &:= \frac{1}{2} \langle [A(t) - A_0, B(0) - B_0]_+ \rangle_0 = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Delta A(t) \Delta B(0) + \Delta B(0) \Delta A(t) \rangle_0 \quad \text{mit } A_0 := \langle \hat{A} \rangle_0. \end{aligned} \quad (1.60)$$

In Spektraldarstellung ist

$$F_{AB}(t) = \frac{1}{2\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) E^{i(E_n - E_m)t} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle - A_0 B_0, \quad (1.61)$$

und die Fouriertransformation liefert

$$\begin{aligned} F_{AB}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} F_{AB}(t) e^{i\omega t} dt = \\ &= \frac{\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \delta(\hbar\omega + E_n - E_m) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle + \\ &\quad - 2\pi \delta(\omega) A_0 B_0. \end{aligned} \quad (1.62)$$

Andererseits erhalten wir aus der Spektraldarstellung der Antwortfunktion in Gleichung (1.11) unter der Annahme, daß die Matrixelemente $\langle n | \hat{A} | m \rangle$ und $\langle m | \hat{B} | n \rangle$ reell sind, für den Imaginärteil der Antwortfunktion, die *Dissipation*, die Spektraldarstellung

$$\chi''_{AB}(\omega + i0) = \frac{\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \delta(\hbar\omega + E_n - E_m) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle. \quad (1.63)$$

Damit sind Dissipation und Fluktuation im *Dissipations-Fluktuations-Theorem*

$$\chi''_{AB}(\omega + i0) = \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}{1 + e^{-\beta\hbar\omega}} F_{AB}(\omega) = \tanh\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right) F_{AB}(\omega) \quad (1.64)$$

miteinander verbunden. Die *Kubo-Identität* schließlich verallgemeinert Gleichung (1.40) und stellt einen weiteren Zusammenhang zwischen der Antwortfunktion und der Korrelationsfunktion her:

$$[B(t), \hat{\rho}_0]_- = -i\hbar\hat{\rho}_0 \int_0^\beta \dot{B}(t - i\hbar\lambda) d\lambda \quad (1.65)$$

Sie ist durch einen ähnlichen Trick wie dort zu beweisen:

$$[B(t), \hat{\rho}_0]_- = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right) [\hat{B}, \hat{\rho}_0]_- \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right) \quad (1.66)$$

und

$$\begin{aligned} [\hat{B}, \hat{\rho}_0]_- &= \hat{\rho}_0 \int_0^\beta \frac{d}{d\lambda} (e^{\lambda\hat{H}_0} \hat{B} e^{-\lambda\hat{H}_0}) d\lambda = \\ &= \hat{\rho}_0 \int_0^\beta e^{\lambda\hat{H}_0} [\hat{H}_0, \hat{B}]_- e^{-\lambda\hat{H}_0} d\lambda, \end{aligned} \quad (1.67)$$

also

$$\begin{aligned} [B(t), \hat{\rho}_0]_- &= \hat{\rho}_0 \int_0^\beta \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t - i\hbar\lambda)\right) [\hat{H}_0, \hat{B}]_- \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t - i\hbar\lambda)\right) d\lambda = \\ &= i\hbar\hat{\rho}_0 \int_0^\beta \frac{\partial}{\partial t} (\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t - i\hbar\lambda)\right) \hat{B} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t - i\hbar\lambda)\right)) d\lambda = \\ &= i\hbar\hat{\rho}_0 \int_0^\beta \frac{\partial}{\partial t} B(t - i\hbar\lambda) d\lambda. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Dies ergibt aber

$$\chi_{AB}(t) = \Theta(t) \int_0^\beta \langle \dot{B}(t - i\hbar\lambda) \hat{A} \rangle_0 d\lambda. \quad (1.69)$$

2. Greensfunktionen

Mit der Einführung einer Antwortfunktion und mit der Konstruktion einer Korrelationsfunktion haben wir zwei Grundsteine zu einer weitreichenden Theorie gelegt, die unter dem Namen *zeitabhängige Störungstheorie* bekannt geworden ist: Die Entwicklung eines Operators \hat{A} wird in Ordnungen einer kleinen Störung $\hat{H}_1(t)$ des ungestörten Hamiltonoperators \hat{H} betrachtet (der Einfachheit halber lassen wir in diesem Kapitel durchgehend den Index „0“ fort). Es lohnt sich, beide Funktionen nun in einem neuen Gewand erscheinen zu lassen, dem der *Greensfunktion*. Wir werden sie aber dennoch wiedererkennen.

2.1 Verschiedene Gestalten der Greensfunktionen

Die Antwortfunktion beinhaltet einen Kommutator. Ihr Partner ist die *Kommutator-Greensfunktion*, die zugleich eine Unterscheidung zulässt, ob ein Problem kausal betrachtet wird, wie wir es bisher von der Antwortfunktion her kannten, oder ob diese zeitlich kausale Struktur umgekehrt wird, wir also den antikausalen Fall vorliegen haben. Die Greensfunktionen heißen dementsprechend *retardiert* bzw. *avanciert*. Eine solche Unterscheidung machen die *Matsubara-Greensfunktionen* nicht. Es treten dort auch keine Kommutatoren auf. Und außerdem sind die „Zeiten“ hier wie bei der Korrelationsfunktion imaginär und beschreiben die Temperatur, weswegen sie auch häufig als *Temperatur-Greensfunktionen* bezeichnet werden.

Wir werden uns auch Gedanken darüber zu machen haben, welcher Art die Teilchensysteme sind, die wir behandeln. Um Fermionen und Bosonen gleichzeitig behandeln zu können, führen wir ein variables Vorzeichen $s = \pm 1$ ein, welches für Bosonen den Wert -1 , für Fermionen den Wert $+1$ annimmt. Es wird ein *s-Mutator* zu konstruieren sein,

$$[A, B]_s := AB + sBA, \quad (2.1)$$

der für $s = -1$ ein Kommutator, für $s = +1$ ein Antimutator ist.

Alle Erwartungswerte, die auftreten, sind gemäß dem Konzept der Störungstheorie, auf der Grundlage des ungestörten Systems zu rechnen, als Erwartungswerte bezüglich \hat{H} zu verstehen, wir schreiben

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Spur}(\hat{\rho}\hat{A}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Spur}(e^{-\beta\hat{H}}\hat{A}) \quad (2.2)$$

mit

$$\mathcal{Z} = \text{Spur}(e^{-\beta\hat{H}}). \quad (2.3)$$

Ein Übergang vom hier verwendeten kanonischen zum großkanonischen Ensemble ist hier unterlassen worden. Er ist jederzeit mit der Ersetzung von \hat{H} durch $\hat{H} - \mu\hat{N}$ zu realisieren.

2.2 Die Kommutator-Greensfunktion

Wir haben auch von der Antwortfunktion verschiedene Formen kennengelernt: Neben der Ausgangsform eine Spektralform, und beide wiederum auch fouriertransformiert. Dieses Konzept läßt sich nun natürlich auch für die Greensfunktionen durchhalten.

Generell unterscheiden wir zwischen retardierten und avancierten Greensfunktionen, d.h. solchen, die die Wirkung ihrer Ursache folgen läßt und solchen, die diese Ordnung genau umkehren:

$$g_{AB}^r(t-t') := -i\Theta(t-t')\langle [A(t), B(t')]_s \rangle, \quad (2.4)$$

$$g_{AB}^a(t-t') := +i\Theta(t'-t)\langle [A(t), B(t')]_s \rangle. \quad (2.5)$$

Fouriertransformiert erhalten wir eine kombinierte Schreibweise beider Funktionen:

$$G_{AB}(z) := \int_{-\infty}^{\infty} g_{AB}^r(t)e^{izt} dt = \int_0^{\infty} g_{AB}^r(t)e^{izt} dt \quad (2.6)$$

ist für $Im(z) > 0$ beschränkt und daher nur dort definiert,

$$G_{AB}(z) := \int_{-\infty}^{\infty} g_{AB}^a(t)e^{izt} dt = \int_{-\infty}^0 g_{AB}^a(t)e^{izt} dt \quad (2.7)$$

dagegen für $Im(z) < 0$. Die Definitionsbereiche überlappen also nicht, wir können die kombinierte Form dieser Darstellung beibehalten. Eine andere Schreibweise ist die *Subarev-Notation*,

$$\langle\langle A, B \rangle\rangle(z) := G_{AB}(z). \quad (2.8)$$

Genauso läßt sich die Greensfunktion in den Eigenwerten $\{E_n\}$ des ungestörten Hamiltonoperators \hat{H}_0 ausdrücken, also eine *Spektraldarstellung* dafür finden:

$$g_{AB}^r(t) = -\frac{i}{Z}\Theta(t) \sum_{n,m} (e^{-\beta E_n} + se^{-\beta E_m}) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t\right) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle, \quad (2.9)$$

$$g_{AB}^a(t) = \frac{i}{Z}\Theta(-t) \sum_{n,m} (e^{-\beta E_n} + se^{-\beta E_m}) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t\right) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle, \quad (2.10)$$

und die Fouriertransformation liefert nun endlich eine geschlossene und nicht nur künstlich kombinierte Form beider Anteile, denn es ist für $Im(z) > 0$

$$\int_0^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\hbar z + E_n - E_m)t\right) dt = i\hbar(\hbar z + E_n - E_m)^{-1}, \quad (2.11)$$

ebenso, wie sich für $Im(z) < 0$

$$\int_{-\infty}^0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\hbar z + E_n - E_m)t\right) dt = -i\hbar(\hbar z + E_n - E_m)^{-1} \quad (2.12)$$

ergibt. Insgesamt erhalten wir also

$$G_{AB}(z) = \frac{\hbar}{z} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_n} + s e^{-\beta E_m}) \frac{\langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle}{\hbar z + E_n - E_m}. \quad (2.13)$$

2.3 Bewegungsgleichungen der Kommutator-Greensfunktion

Wir können festhalten: Die Greensfunktion $G_{AB}(z)$ ist in der ganzen komplexen Ebene definiert und analytisch für $Im(z) \neq 0$. Pole können längs der reellen Achse auftreten. Sie entsprechen den Anregungsenergien des Systems. Speziell in einem Vielteilchensystem liegen die Werte $E_n - E_m$ extrem dicht, und die im Prinzip diskrete Polstruktur läßt sich aufgrund der Energie-Zeit-Unschärfe bei normalen Meßzeiten nicht auflösen. Im *Thermodynamischen Grenzwert* $N \rightarrow \infty$, $Vol \rightarrow \infty$ mit $N/Vol = \text{konstant}$ gehen die dicht liegenden Pole der Greensfunktion über in einen Schnitt längs der reellen Achse. Summation wird durch Integration ersetzt,

$$\frac{1}{Vol} \sum_k \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (2.14)$$

Unter Beachtung von

$$A(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{A}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \quad (2.15)$$

lassen sich nun die Bewegungsgleichungen der Greensfunktionen bestimmen. Wir machen dies getrennt für den retardierten und avancierten Fall. Für $t \neq 0$ ist

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} g_{AB}^r(t) &= \\ &= \hbar\Theta(t) \frac{\partial}{\partial t} \langle [A(t), B(0)]_s \rangle = \hbar\Theta(t) \frac{\partial}{\partial t} \langle [\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{A}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right), \hat{B}]_s \rangle = \\ &= i\Theta(t) \langle [\hat{H}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{A}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) - \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{A}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{H}, \hat{B}]_s \rangle = \\ &= -i\Theta(t) \langle [[A(t), \hat{H}]_-, \hat{B}]_s \rangle = -i\Theta(t) \text{Spur}(\hat{\rho}[[A(t), \hat{H}]_-, \hat{B}]_s) = \\ &= -i\Theta(t) \text{Spur}(\hat{\rho}(A(t)\hat{H}\hat{B} - \hat{H}A(t)\hat{B} + s\hat{B}A(t)\hat{H} - s\hat{B}\hat{H}A(t))) = \\ &= -i\Theta(t) \text{Spur}(\hat{\rho}(A(t)\hat{H}\hat{B} - A(t)\hat{B}\hat{H} + s\hat{H}\hat{B}A(t) - s\hat{B}\hat{H}A(t))) = \\ &= -i\Theta(t) \langle A(t)[\hat{H}, \hat{B}]_+ + s[\hat{H}, \hat{B}]_- A(t) \rangle = -i\Theta(t) \langle [A(t), [\hat{H}, \hat{B}]_s] \rangle = \\ &= g_{A, [H, B]_-}^r(t), \end{aligned} \quad (2.16)$$

entsprechend

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} g_{AB}^a(t) = g_{A,[H,B]_-}^a(t). \quad (2.17)$$

Wir erhalten Anfangswertprobleme mit dem Anfangswerten

$$g_{AB}^r(+0) = -i\langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle, \quad g_{AB}^a(-0) = i\langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle. \quad (2.18)$$

Durch eine Fouriertransformation verwandeln wir dieses Problem in ein algebraisches. Wir erhalten für $t > 0$

$$\begin{aligned} G_{A,[H,B]_-}^r(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} g_{A,[H,B]_-}^r(t) e^{izt} dt = i\hbar \int_0^{\infty} \left(\frac{\partial}{\partial t} g_{AB}^r(t) \right) e^{izt} dt = \\ &= i\hbar g_{AB}^r(t) e^{izt} \Big|_0^{\infty} - i\hbar \int_0^{\infty} g_{AB}^r(t) \left(\frac{\partial}{\partial t} e^{izt} \right) dt = \\ &= -\hbar \langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle + \hbar z \cdot G_{AB}(z), \end{aligned} \quad (2.19)$$

und dasselbe für $t < 0$. In Subarev-Notation lautet die Bewegungsgleichung nun

$$\begin{aligned} \hbar z \langle \langle \hat{A}, \hat{B} \rangle \rangle (z) &= \hbar \langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle + \langle \langle \hat{A}, [\hat{H}, \hat{B}]_- \rangle \rangle = \\ &= \hbar \langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle + \langle \langle [\hat{A}, \hat{H}]_-, \hat{B} \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Als Beispiel betrachten wir Ein-Teilchen-Greensfunktionen für Fermionen und wählen dazu entsprechend $s = +1$. Es ist dann

$$\begin{aligned} \hbar z \langle \langle c_i, c_j^\dagger \rangle \rangle &= \hbar \langle [c_i, c_j^\dagger]_+ \rangle + \langle \langle [c_i, \hat{H}]_-, c_j^\dagger \rangle \rangle = \\ &= \hbar \delta_{ij} + \langle \langle [c_i, \hat{H}]_-, c_j^\dagger \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Enthält \hat{H} keinen Wechselwirkungsterm, d.h.

$$\hat{H} = \sum_{k,l} h_{kl} c_k^\dagger c_l, \quad (2.22)$$

so ergibt sich

$$[c_i, \hat{H}]_- = \sum_{k,l} h_{kl} [c_i, c_k^\dagger c_l]_- = \sum_l h_{il} c_l^\dagger \quad (2.23)$$

und damit

$$\sum_k (\hbar z \delta_{ik} - h_{ik}) \langle \langle c_k, c_j^\dagger \rangle \rangle = \hbar \delta_{ij}. \quad (2.24)$$

Für eine Zwei-Teilchen-Greensfunktion führt die Wahl $s = -1$ zu Vereinfachungen:

$$\hbar z \langle \langle c_k^\dagger c_l, c_m^\dagger c_n \rangle \rangle = \hbar \langle [c_k^\dagger c_l, c_m^\dagger c_n]_- \rangle + \langle \langle c_k^\dagger c_l, [\hat{H}, c_m^\dagger c_n]_- \rangle \rangle \quad (2.25)$$

Es ist

$$\begin{aligned}
[c_k^\dagger c_l, c_m^\dagger c_n] &= c_k^\dagger c_l c_m^\dagger c_n - c_m^\dagger c_n c_k^\dagger c_l = \\
&= c_k^\dagger c_l c_m^\dagger c_n + c_m^\dagger c_k^\dagger c_n c_l - c_m^\dagger c_l \delta_{kn} = \\
&= c_k^\dagger c_l c_m^\dagger c_n + c_k^\dagger c_m^\dagger c_l c_n - c_m^\dagger c_l \delta_{kn} = \\
&= c_k^\dagger c_l c_m^\dagger c_n - c_k^\dagger c_l c_m^\dagger c_n + c_k^\dagger c_n \delta_{lm} - c_m^\dagger c_l \delta_{kn} = \\
&= c_k^\dagger c_n \delta_{lm} - c_m^\dagger c_l \delta_{kn}.
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Merkregel:

Wir wählen $s = +1$, wenn \hat{A} und \hat{B} aus einer ungeraden Anzahl von Fermioperatoren besteht und $s = -1$, falls \hat{A} und \hat{B} aus einer geraden Anzahl von Fermioperatoren oder aus einer beliebigen Anzahl von Boseoperatoren besteht.

2.4 Die Matsubara- oder Temperatur-Greensfunktion

Der Korrelationsfunktion soll nun ebenfalls eine Greensfunktion zugeordnet werden. Diese enthält nun keinen Kommutator mehr und ist abhängig von einem Parameter τ , der umgekehrt einen Temperaturbereich parametrisiert und als eine imaginäre Zeit aufgefaßt werden kann. Mit

$$A(-i\tau) = \exp\left(\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}\right)\hat{A}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}\right) \tag{2.27}$$

(vgl. Gleichung (2.15)) ist die *Matsubara-Greensfunktion* definiert als

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau - \tau') := \begin{cases} -\langle A(-i\tau)B(-i\tau') \rangle & \text{für } 0 < \tau - \tau' < \beta\hbar, \\ s\langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle & \text{für } -\beta\hbar < \tau - \tau' < 0. \end{cases} \tag{2.28}$$

Wir haben mit dieser Definition eine Art „Zeitordnung“ eingeführt. Bei Fermionen ($s = +1$) dreht sich das Vorzeichen wie gewohnt um. Wir können diese Zeitordnung auch geschlossen durch einen *Zeitordnungsoperator*

$$T_s(A(-i\tau_1)B(-i\tau_2)) := \begin{cases} A(-i\tau_1)B(-i\tau_2) & \text{für } \tau_1 > \tau_2, \\ -sB(-i\tau_2)A(-i\tau_1) & \text{für } \tau_2 > \tau_1 \end{cases} \tag{2.29}$$

ausdrücken:

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = -\langle T_s(A(-i\tau)B(0)) \rangle. \tag{2.30}$$

Diese Greensfunktion ist im Gegensatz zur Kommutator-Greensfunktion nur auf dem endlichen Intervall $-\beta\hbar < \tau < \beta\hbar$ definiert und besitzt bei $\tau = 0$ eine Sprungstelle:

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{AB}(+0) - \mathcal{G}_{AB}(-0) &= -\langle A(+i0)B(0) \rangle - s\langle B(0)A(-i0) \rangle = \\
&= -\langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle.
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Trotz dieser Einschränkung auf ein endliches Intervall können wir die Greensfunktion fortsetzen, denn es gilt die *Periodizitätseigenschaft*

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau + \beta\hbar) = -s\mathcal{G}_{AB}(\tau). \quad (2.32)$$

Dies wollen wir für $\tau < 0$ zeigen:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{AB}(\tau + \beta\hbar) &= -\langle T_s(A(-i(\tau + \beta\hbar))B(0)) \rangle = -\langle A(-i(\tau + \beta\hbar))B(0) \rangle = \\ &= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Spur}(\exp(-\beta\hat{H}) \cdot \\ &\quad \cdot \exp(\frac{1}{\hbar}(\tau + \beta\hbar)\hat{H})\hat{A} \exp(-\frac{1}{\hbar}(\tau + \beta\hbar)\hat{H})\hat{B}) = \\ &= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Spur}(\exp(\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H})\hat{A} \exp(-\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}) \exp(-\beta\hat{H})\hat{B}) = \\ &= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Spur}(\exp(-\beta\hat{H})\hat{B} \exp(\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H})\hat{A} \exp(-\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H})) = \\ &= -\langle B(0)A(-i\tau) \rangle = -s\langle T_s(A(-i\tau)B(0)) \rangle = \\ &= -s\mathcal{G}_{AB}(\tau). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Diese periodische Fortsetzung führt dazu, daß wir $\mathcal{G}_{AB}(\tau)$ als Fourierreihe mit Intervalllänge $2\beta\hbar$ schreiben können:

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} G_{AB}^n \exp(-i\omega_n\tau) \quad \text{mit } \omega_n := \frac{n\pi}{\beta\hbar}. \quad (2.34)$$

Die Fourierkoeffizienten berechnen sich zu

$$G_{AB}^n := \frac{1}{2} \int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau. \quad (2.35)$$

Aufgrund der Periodizitätseigenschaft „überleben“ je nach dem Wert von s nur die Hälfte der Fourierkoeffizienten. Wir erhalten

$$\begin{aligned} G_{AB}^n &= \frac{1}{2} \int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\beta\hbar}^0 \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau + \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau = \\ &= -\frac{s}{2} \int_{-\beta\hbar}^0 \mathcal{G}_{AB}(\tau + \beta\hbar) \exp(i\omega_n\tau) d\tau + \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau = \\ &= -\frac{s}{2} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n(\tau - \beta\hbar)) d\tau + \frac{1}{2} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau = \\ &= \frac{1}{2} (1 - s \exp(-i\beta\hbar\omega_n)) \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Für $s = +1$ ergibt der Vorfaktor $1 - \exp(-in\pi)$, was für gerade Werte von n verschwindet. Ist dagegen $s = -1$, so verschwindet der Vorfaktor $1 + \exp(-in\pi)$ für ungerade Werte von n . Wir erhalten:

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} G_{AB}^{2n+1} \exp(-i\omega_{2n+1}\tau) \quad (2.37)$$

$$\text{für } s = +1 \quad \text{mit } \omega_{2n+1} = (2n + 1)\pi/\beta\hbar, \quad (2.38)$$

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} G_{AB}^{2n} \exp(-i\omega_{2n}\tau) \quad (2.39)$$

$$\text{für } s = -1 \quad \text{mit } \omega_{2n} = 2n\pi/\beta\hbar. \quad (2.40)$$

ω_{2n} und ω_{2n+1} heißen *gerade* und *ungerade Matsubara-Frequenzen*. Wie man leicht sieht, sind sie Nullstellen der Bosefunktion $b(i\beta\hbar\omega) = (1 - e^{i\beta\hbar\omega})^{-1}$ bzw. der Fermifunktion $f(i\beta\hbar\omega) = (1 + e^{i\beta\hbar\omega})^{-1}$. Dies wird wichtig werden, wenn wir den Integrationsweg auf die komplexe Ebene ausweiten wollen. Vorab bestimmen wir schon einmal die Residuen dieser Funktionen an den Polen nach der Regel von l'Hospital:

$$\text{Res}(b(\beta\hbar z); i\omega_{2n}) = \frac{1}{\frac{d}{dz}(1 - \exp(\beta\hbar z))} \Big|_{z=i\omega_{2n}} = -\frac{1}{\beta\hbar}, \quad (2.41)$$

$$\text{Res}(f(\beta\hbar z); i\omega_{2n+1}) = \frac{1}{\frac{d}{dz}(1 + \exp(\beta\hbar z))} \Big|_{z=i\omega_{2n+1}} = -\frac{1}{\beta\hbar}. \quad (2.42)$$

2.5 Der Zusammenhang mit der Kommutator-Greensfunktion

Wir können einen Zusammenhang der Matsubara-Greensfunktion mit der Kommutator-Greensfunktion herstellen, wenn wir $\mathcal{G}_{AB}(\tau)$ in die komplexe Ebene fortsetzen. Diese ist in einem Streifen $-\beta\hbar < \text{Re}(\tau) < \beta\hbar$ definiert. Es ist

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{AB}(it + 0) - \mathcal{G}_{AB}(it - 0) &= \langle A(t - i0)B(0) - (-s)B(0)A(t + i0) \rangle = \\ &= -\langle [A(t), B(0)]_s \rangle. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Dies ist $-ig_{AB}^r(t)$ für $t > 0$ und $ig_{AB}^a(t)$ für $t < 0$. Auch die Fourierkoeffizienten können wir in Beziehung setzen. Mit Gleichung (2.36) erhalten wir

$$G_{AB}^n = \frac{1}{2} \int_{-\beta\hbar}^{+\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau = \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau, \quad (2.44)$$

für $n > 0$ können wir zwei verschwindende Stammfunktionswerte hinzuaddieren:

$$\begin{aligned}
 G_{AB}^n &= \int_0^{i\infty} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau + \int_{\beta\hbar+i\infty}^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau = \\
 &= \int_0^{i\infty} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau + \int_{i\infty}^0 \mathcal{G}_{AB}(\tilde{\tau} + \beta\hbar) \exp(i\omega_n(\tilde{\tau} + \beta)) d\tilde{\tau} = \\
 &= \int_0^{i\infty} (\mathcal{G}_{AB}(\tau + 0) \exp(i\omega_n \tau) - \mathcal{G}_{AB}(\tau - 0) \exp(i\omega_n \tau)) d\tau = \\
 &= -i \int_0^\infty (\mathcal{G}_{AB}(it + 0) - \mathcal{G}_{AB}(it - 0)) \exp(i(i\omega_n) t) dt = \\
 &= \int_0^\infty g_{AB}^r(t) \exp(i(i\omega_n) t) = G_{AB}(i\omega_n).
 \end{aligned}
 \tag{2.45}$$

Für Bosonen müssen wir den nullten Fourierkoeffizienten gesondert betrachten. Es ist dann z.B.

$$G_{AB}^0 = - \sum_{n=-\infty, n \neq 0}^{+\infty} G_{AB}^{2n} - \beta\hbar \langle A(+i0)B \rangle = - \sum_{n=-\infty, n \neq 0}^{+\infty} G_{AB}^{2n} - \frac{\beta\hbar}{2} \langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \rangle.
 \tag{2.46}$$

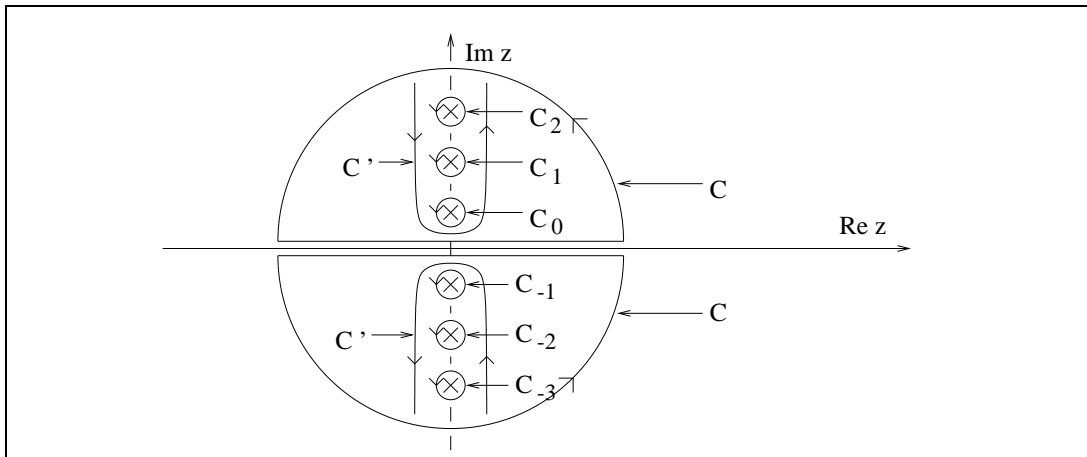


Abb. 2.1 Der Integrationsweg C aus Gleichungen (2.47) und (2.48)

Ferner ist für Fermionen, d.h. $s = +1$

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C G_{AB}(z) f(\beta\hbar z) \exp(-\tau z) dz
 \tag{2.47}$$

für den Bereich $-\beta\hbar < Re(\tau) < 0$ und

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C G_{AB}(z) (1 - f(\beta\hbar z)) \exp(-\tau z) dz
 \tag{2.48}$$

für den Bereich $0 < Re(\tau) < \beta\hbar$. Wir wollen dies beweisen.

$f(\beta\hbar z)$ besitzt Pole bei den ungeraden Matsubara-Frequenzen ω_{2n+1} , verschwindet aber zusammen mit der Exponentialfunktion für $Re(\tau) < 0$ in beiden komplexen Halbebenen für wachsenden Radius so schnell, so daß das Integral über einen unterbrochenen Kreis um den Ursprung keinen Beitrag liefern würde. Entsprechend verschwindet $(1 - f(\beta\hbar z))$ für $Re(t) > 0$.

Wir ersetzen daher die Integration längs des Weges C , der die reelle Achse eng umschließt, durch eine Integration längs des Weges C' (vgl. Abbildung 2.1) und erhalten nach dem Residuensatz das Ergebnis

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = \sum_n \frac{1}{\beta\hbar} G_{AB}(i\omega_{2n+1}) \exp(-i\omega_{2n+1}\tau). \tag{2.49}$$

Entsprechend gilt für Bosonen, $s = -1$:

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = \frac{1}{\beta\hbar} G_{AB}^0 + \frac{1}{2\pi i} \oint_C G_{AB}(z) \left\{ \frac{b(\beta\hbar z)}{1 + b(\beta\hbar z)} \right\} \exp(-\tau z) dz \tag{2.50}$$

für $-\beta\hbar < Re(\tau) < 0$ bzw. $0 < Re(\tau) < \beta\hbar$.

2.6 Beispiel: Das freie Fermion

Als Rechenbeispiel wollen wir begleitend ein freies Fermion betrachten. Es ist hier

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k \quad \text{mit } \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}. \tag{2.51}$$

Großkanonisch betrachtet wird ε_k noch um das chemische Potential μ reduziert. Als Operatoren \hat{A} und \hat{B} verwenden wir die Feldoperatoren

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\text{Vol}}} \sum_k c_k e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad \text{und} \quad \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\text{Vol}}} \sum_k c_k^\dagger e^{i\vec{k}\vec{r}}. \tag{2.52}$$

Die „Zeitabhängigkeit“ mittels Adjunktion gemäß Gleichung (2.27) überträgt sich direkt auf die Erzeuger und Vernichter. Es ist

$$\begin{aligned} c_k^\dagger \hat{H} &= c_k^\dagger \sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_q = - \sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_k^\dagger c_q = \sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_q c_k^\dagger - \sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger \delta_{kq} = \\ &= \left(\sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_q - \varepsilon_k \right) c_k^\dagger \quad \text{und} \end{aligned} \tag{2.53}$$

$$\begin{aligned} c_k \hat{H} &= c_k^\dagger \sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_q = - \sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_k c_q + \sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger \delta_{kq} = \\ &= \left(\sum_q \varepsilon_q c_q^\dagger c_q + \varepsilon_k \right) c_k \end{aligned} \tag{2.54}$$

und damit

$$\begin{aligned}
c_k^\dagger(\tau) &= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}\right)c_k^\dagger \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}\right) = \exp\left(\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\tau)^n}{\hbar^n n!} c_k^\dagger \hat{H}^n = \\
&= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\tau)^n}{\hbar^n n!} (\hat{H} - \varepsilon_k) c_k^\dagger = \exp\left(\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\tau(\hat{H} - \varepsilon_k)\right) c_k^\dagger = \\
&= \exp\left(\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\tau\right) c_k^\dagger, \quad c_k(\tau) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\tau\right) c_k.
\end{aligned} \tag{2.55}$$

Für $\tau > 0$ ist

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = -\frac{1}{\text{Vol}} \sum_{kk'} \langle c_k c_{k'}^\dagger \rangle e^{-i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{k}'\vec{r}'} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\tau\right). \tag{2.56}$$

Wir nutzen

$$\langle c_k c_{k'}^\dagger \rangle = \delta_{kk'} \langle 1 - c_k^\dagger c_k \rangle = \delta_{kk'} \left(1 - \frac{1}{1 + \exp(\beta\varepsilon_k)}\right) = \frac{\delta_{kk'}}{\exp(-\beta\varepsilon_k) + 1} \tag{2.57}$$

und erhalten

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = -\frac{1}{\text{Vol}} \sum_k \frac{\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\tau\right)}{\exp(-\beta\varepsilon_k) + 1} e^{i\vec{k}(\vec{r}' - \vec{r})} = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_k \tilde{\mathcal{G}}(\vec{k}, \tau) e^{i\vec{k}(\vec{r}' - \vec{r})}, \tag{2.58}$$

entsprechend für $\tau < 0$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) &= \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{kk'} \langle c_{k'}^\dagger c_k \rangle e^{i\vec{k}'\vec{r}'} e^{-i\vec{k}\vec{r}} e^{-\varepsilon_k\tau} = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_k \frac{\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\tau\right)}{1 + \exp(\beta\varepsilon_k)} e^{i\vec{k}(\vec{r}' - \vec{r})} = \\
&= \frac{1}{\text{Vol}} \sum_k \tilde{\mathcal{G}}(\vec{k}, \tau) e^{i\vec{k}(\vec{r}' - \vec{r})}.
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Dabei ist

$$\tilde{\mathcal{G}}(\vec{k}, \tau) := \begin{cases} -(\exp(-\beta\varepsilon_k) + 1)^{-1} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\tau\right) & \text{für } 0 < \tau < \beta\hbar, \\ (1 + \exp(\beta\varepsilon_k))^{-1} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\tau\right) & \text{für } -\beta\hbar < \tau < 0. \end{cases} \tag{2.60}$$

Wir können die Periodizitätseigenschaft rasch zeigen. Sie überträgt sich auf $\tilde{\mathcal{G}}(\vec{k}, \tau)$ und liefert für $\tau < 0$

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{G}}(\vec{k}, \tau + \beta\hbar) &= -\frac{\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k(\tau + \beta\hbar)\right)}{\exp(-\beta\varepsilon_k) + 1} = -\frac{\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\tau\right)}{1 + \exp(\beta\varepsilon_k)} = \\
&= -\tilde{\mathcal{G}}(\vec{k}, \tau).
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Schließlich können wir die Fourierkoeffizienten $G_k^n = G_k(i\omega_n)$ berechnen. Unter Verwendung von Gleichung (2.44) gilt

$$\begin{aligned}
 G_k^n &= \frac{1}{2} \int_{-\beta\hbar}^{+\beta\hbar} \tilde{G}(\vec{k}, \tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau = \int_0^{\beta\hbar} \tilde{G}(\vec{k}, \tau) \exp(i\omega_n \tau) d\tau = \\
 &= -\frac{1}{\exp(-\beta\varepsilon_k) + 1} \int_0^{\beta\hbar} \exp\left(\left(i\omega_n - \frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\right)\tau\right) d\tau = \\
 &= -\frac{1}{\exp(-\beta\varepsilon_k) + 1} \cdot \frac{\exp\left(\left(i\omega_n - \frac{1}{\hbar}\varepsilon_k\right)\tau\right)}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}\varepsilon_k} \Bigg|_{\tau=0}^{\beta\hbar} = \\
 &= -\frac{1}{\exp(-\beta\varepsilon_k) + 1} \cdot \frac{-\hbar(\exp(-\beta\varepsilon_k) + 1)}{i\hbar\omega_n - \varepsilon_k} = \\
 &= \frac{\hbar}{i\hbar\omega_n - \varepsilon_k}.
 \end{aligned} \tag{2.62}$$

Dabei benutzen wir, daß hier $\exp(i\beta\hbar\omega_n) = -s = -1$ ist.

2.7 Spektralfunktion und Summenregeln

Ähnlich, wie wir es in Gleichung (1.52) für die Korrelationsfunktion gemacht haben, konstruieren wir zur Greensfunktion $G_{AB}(z)$ eine Spektralfunktion. Sie kennzeichnet die Stufe in der Greensfunktion, die beim Überschreiten des Spektrums, welches sich längs der reellen Achse erstreckt, zu erklimmen ist.

Im Vorfeld wollen wir

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\omega' + i0 - \omega} \right) = -\pi \delta(\omega' - \omega) \tag{2.63}$$

zeigen, denn dies wird im folgenden recht häufig verwendet. Wir tun dies, indem wir den Ausdruck mit einer holomorphen Funktion $f(z)$ falten:

$$\begin{aligned}
 &\int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \left(\frac{1}{\omega' + i0 - \omega} \right) f(\omega') d\omega' = \\
 &= \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\omega' + i0 - \omega} - \frac{1}{\omega' - i0 - \omega} \right) f(\omega') d\omega' = \\
 &= \frac{1}{2i} \int_{-\infty+i0}^{\infty+i0} \frac{f(z-i0) dz}{z-\omega} - \frac{1}{2i} \int_{-\infty-i0}^{\infty-i0} \frac{f(z+i0) dz}{z-\omega} = \\
 &= -\frac{1}{2i} \oint_C \frac{f(z) dz}{z-\omega} = -\frac{2\pi i}{2i} f(\omega) = -\pi f(\omega),
 \end{aligned} \tag{2.64}$$

wobei C der Weg ist um die reelle Achse ist.

Die *Spektralfunktion* ist definiert als

$$C_{AB}(\omega) := i(G_{AB}(\omega + i0) - G_{AB}(\omega - i0)). \tag{2.65}$$

Die Frequenz ω ist dabei reell. In Spektraldarstellung ergibt sich

$$\begin{aligned} C_{AB}(\omega) &= \frac{i\hbar}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} + s e^{-\beta E_m}) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle \cdot \\ &\quad \cdot ((\hbar\omega + i0 + E_n - E_m)^{-1} - (\hbar\omega - i0 + E_n - E_m)^{-1}) = \\ &= -\frac{2\hbar}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} + s e^{-\beta E_m}) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle \cdot \\ &\quad \cdot \text{Im}((\hbar\omega + i0 + E_n - E_m)^{-1}). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Nach Gleichung (2.63) liefert der Imaginärteil eine Delta-Distribution. Wir erhalten somit

$$C_{AB}(\omega) = \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} \delta(\hbar\omega + E_n - E_m) (e^{-\beta E_n} + s e^{-\beta E_m}) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle. \quad (2.67)$$

Umgekehrt läßt sich aus der Spektralfunktion die Greensfunktion berechnen, und zwar

$$G_{AB}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C_{AB}(\omega)}{z - \omega} d\omega. \quad (2.68)$$

Und auch bei der Berechnung der nicht fouriertransformierten Form der Greensfunktion hilft die Spektralfunktion. Wir können so die Gleichungen (2.47) und (2.48), die für Fermionen galten, fortführen und erhalten

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{AB}(\tau) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C G_{AB}(z) \begin{Bmatrix} -f(z) \\ 1 - f(z) \end{Bmatrix} e^{-\tau z} dz = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} (G_{AB}(\omega + i0) - G_{AB}(\omega - i0)) \begin{Bmatrix} -f(\omega) \\ 1 - f(\omega) \end{Bmatrix} e^{-\omega\tau} d\omega = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{AB}(\omega) \begin{Bmatrix} f(\omega) \\ f(\omega) - 1 \end{Bmatrix} e^{-\omega\tau} d\omega. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Entsprechendes können wir in der Fortsetzung von Gleichung (2.50) erhalten.

Entwickeln wir $f(\omega)$ in eine Potenzreihe, so läßt sich die Matsubara-Greensfunktion aus *Momenten der Spektralfunktion* aufbauen, wobei das n -te Moment die Form

$$M_n := \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n C_{AB}(\omega) d\omega \quad (2.70)$$

besitzt. Wir wollen dies für die ersten Ordnungen explizit berechnen. So erhalten wir für das nullte Moment

$$\begin{aligned} M_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} C_{AB}(\omega) d\omega = \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} + s e^{-\beta E_m}) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle = \\ &= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (\langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} e^{-\beta \hat{H}} | n \rangle + s \langle n | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle) = \\ &= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \text{Spur} (\hat{A} \hat{B} e^{-\beta \hat{H}} + s \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} \hat{B}) = \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \text{Spur} (e^{-\beta \hat{H}} (\hat{A} \hat{B} + s \hat{B} \hat{A})) = \\ &= 2\pi \langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Für das erste Moment ergibt sich mit den Bewegungsgleichungen (2.19)

$$\begin{aligned}
 M_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \omega C_{AB}(\omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} \omega (G_{AB}(\omega + i0) - G_{AB}(\omega - i0)) d\omega = \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (G_{[A,H]_-,B}(\omega + i0) - G_{[A,H]_-,B}(\omega - i0)) d\omega = \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} C_{[A,H]_-,B}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \langle [[\hat{A}, \hat{H}]_-, \hat{B}]_s \rangle. \tag{2.72}
 \end{aligned}$$

So könnten wir fortfahren, wobei jeweils mittels der Bewegungsgleichung \hat{A} durch $\hbar^{-1}[\hat{A}, \hat{H}]_-$ zu ersetzen ist:

$$M_n = \frac{2\pi}{\hbar^n} \langle [[\dots [[\hat{A}, \hat{H}]_-, \hat{H}]_-, \dots, \hat{H}]_-, \hat{B}]_s \rangle. \tag{2.73}$$

Als Kriterium für die Güte einer Näherung kann gelten, bis zu welcher Ordnung die Momente exakt reproduziert werden.

2.8 Der Zusammenhang mit den Greensfunktionen

Wir wollen Relationen für die vorgestellten Greensfunktionen zusammentragen, die sich auf die *Argumente* dieser Greensfunktionen beziehen. Für $t > 0$ ist so

$$\begin{aligned}
 g_{AB}^a(-t) &= i\Theta(t) \langle A(-t)\hat{B} + s\hat{B}A(-t) \rangle = \\
 &= \frac{i}{\mathcal{Z}} \Theta(t) \text{Spur} (e^{-\beta\hat{H}} (\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)\hat{A} \exp(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)\hat{B} + \\
 &\quad + s\hat{B} \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)\hat{A} \exp(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)) = \\
 &= \frac{i}{\mathcal{Z}} \Theta(t) \text{Spur} (e^{-\beta\hat{H}} (\hat{A} \exp(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)\hat{B} + s \exp(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)\hat{B} \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)\hat{A})) = \\
 &= i\Theta(t) \langle \hat{A}B(t) + sB(t)\hat{A} \rangle = is\Theta(t) \langle B(t)\hat{A} + s\hat{A}B(t) \rangle = \\
 &= -sg_{BA}^r(t). \tag{2.74}
 \end{aligned}$$

Entsprechend gilt

$$G_{AB}(-z) = -sG_{BA}(z), \tag{2.75}$$

weiter ist

$$\begin{aligned}
 G_{AB}^*(\omega) &= \frac{\hbar}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} + se^{-\beta E_m}) \frac{\langle n | \hat{A} | m \rangle^* \langle m | \hat{B} | n \rangle^*}{\hbar\omega + E_n - E_m} = \\
 &= \frac{\hbar}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} + se^{-\beta E_m}) \frac{\langle n | \hat{B}^\dagger | m \rangle \langle m | \hat{A}^\dagger | n \rangle}{\hbar\omega + E_n - E_m} = \\
 &= G_{B^\dagger A^\dagger}(\omega), \tag{2.76}
 \end{aligned}$$

und für $\omega \rightarrow \infty$ gilt asymptotisch

$$G_{AB}(\omega) \rightarrow \frac{\hbar}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} + s e^{-\beta E_m}) \frac{\langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle}{\hbar \omega} = \frac{1}{\omega} \langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle. \quad (2.77)$$

Schließlich betrachten wir diesen Grenzfall für eine reelle Spektralfunktion. Dann ist nach Gleichung (2.68)

$$\begin{aligned} \text{Im } G_{AB}(\omega + i0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} \left(\frac{1}{\omega + i0 - \omega'} \right) C_{AB}(\omega') d\omega' = \\ &= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega' - \omega) C_{AB}(\omega') d\omega' = -\frac{1}{2} C_{AB}(\omega), \end{aligned} \quad (2.78)$$

also

$$G_{AB}(z) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } G_{AB}(\omega + i0)}{z - \omega} d\omega \quad (2.79)$$

und damit

$$\omega' \text{Re } G_{AB}(\omega' + i0) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im } G_{AB}(\omega + i0) \text{Re} \left(\frac{\omega'}{\omega' + i0 - \omega} \right) d\omega, \quad (2.80)$$

also im Grenzfall $\omega' \rightarrow \infty$ gemäß Gleichung (2.77)

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}]_s \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im } G_{AB}(\omega + i0) d\omega. \quad (2.81)$$

Für den Fall $\hat{B} = \hat{A}^\dagger$ ist die Spektralfunktion reell. Es ist hier

$$G_{AA^\dagger}(\omega + i0) = G_{AA^\dagger}^*(\omega - i0) \quad (2.82)$$

und damit

$$\begin{aligned} C_{AA^\dagger}(\omega) &= -2 \text{Im}(G_{AA^\dagger}(\omega + i0)) = \\ &= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{nm} \delta(\hbar\omega + E_n - E_m) (e^{-\beta E_n} + s e^{-\beta E_m}) |\langle n | \hat{A} | m \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.83)$$

Nun läßt sich der Erwartungswert von $\hat{A}^\dagger \hat{A}$, der für $\hat{A} = \hat{\psi}(x)$ nichts anderes ist als die Zustandsdichte, mittels der Matsubara-Greensfunktion berechnen. Wir tun dies wiederum für Fermionen, $s = +1$, und erhalten

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle &= \langle \hat{A}^\dagger \hat{A}(\tau = -0) \rangle = \mathcal{G}_{AA^\dagger}(\tau = -0) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_{AA^\dagger}(\omega) f(\omega) e^{+0\omega} d\omega. \end{aligned} \quad (2.84)$$

3. Vielteilchensysteme

Bislang haben wir immer mit einer Greensfunktion gearbeitet, welche die Wahl der Operatoren \hat{A} und \hat{B} freistellte. In diesem Kapitel betrachten wir nun Wechselwirkungen zwischen Teilchen. Zu ihrer Beschreibung dienen, wie wir bereits aus dem Skript über Festkörpertheorie wissen, die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der zweiten Quantisierung und in Ortsdarstellung die Feldoperatoren.

3.1 Der Begriff des Propagators

Ausgangspunkt ist der wechselwirkungsfreie Hamiltonoperator

$$\hat{H}_0 = \int \int \hat{\psi}^\dagger(x) h_0(x, x') \hat{\psi}(x') dx' dx, \quad (3.1)$$

wie wir ihn aus der Festkörpertheorie kennen. Die Feldoperatoren bilden sich aus den Eigenfunktionen des zugehörigen Einteilchenproblems und den Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren,

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_i a_i^\dagger \psi_i^*(x), \quad \hat{\psi}(x) = \sum_i a_i \psi_i(x). \quad (3.2)$$

Wir schreiben hier a_i^\dagger und a_i sowohl für Fermionen als auch für Bosonen, die Unterscheidung wird nur mit dem Vorzeichen s vorgenommen. Im Diagonalfall $h_0(x, x') = h_0(x) \delta(x - x')$ können wir \hat{H}_0 durch Erzeuger und Vernichter ausdrücken,

$$\hat{H}_0 = \sum_{i,j} h_{ij} a_i^\dagger a_j \quad \text{mit} \quad h_{ij} := \int \psi_i^*(x) h_0(x) \psi_j(x) dx. \quad (3.3)$$

Allgemein gilt:

Einen Vielteilchenoperator wird konstruiert, indem der Erwartungswert des zugehörigen Ein-Teilchen-Operators gebildet und die dort auftretenden Wellenfunktionen durch Feldoperatoren ersetzt werden.

Die zu \hat{H}_0 gehörige Eigenwertgleichung wird gelöst durch die Matsubara-Greensfunktion

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau - \tau') := -\langle T_s(\hat{\psi}(\vec{r}, -i\tau) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}', -i\tau')) \rangle. \quad (3.4)$$

Dabei erhält man die „Zeitabhängigkeit“ erneut durch die Adjunktion

$$\hat{\psi}(\vec{r}, -i\tau) := \exp\left(\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau\right) \hat{\psi}(\vec{r}) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau\right). \quad (3.5)$$

Für den Spezialfall eines freien Teilchens haben wir diese zeit- und ortsabhängige Greensfunktion bereits in Kapitel 2.6 kennengelernt. Die Fourierkoeffizienten der Matsubara-Greensfunktion sind gleich dem Fouriertransformation der Kommutator-Greensfunktion an diskreten Stellen $i\omega_n$, wobei ω_n die

Matsubara-Frequenzen sind. Diese fouriertransformierte Ein-Teilchen-Kommutator-Greensfunktion schreibt sich mit den Erzeugern und Vernichtern als

$$G_{ij}(z) := \langle\langle a_i, a_j^\dagger \rangle\rangle(z) := G_{a_i a_j^\dagger}(z). \quad (3.6)$$

Die Greensfunktion in ihrer fouriertransformierten Form bezeichnet man häufig als *Propagator*. Den Grund für diese Bezeichnung erkennen wir beim Übergang zu reellen Zeiten. Dann vernichtet $\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', it)$ ein Teilchen bei $(\vec{r}', 0)$ und erzeugt eines bei (\vec{r}, t) , beschreibt also die Bewegung (Propagation) eines Teilchens vom Ort \vec{r}' an den Ort \vec{r} in der Zeit t . Der Propagator enthält somit die Information über die Dynamik des Teilchens.

3.2 Beziehung zur Thermodynamik

Für eine thermodynamische Behandlung rechnen wir mit Erwartungswerten von Operatoren. Zudem lassen wir im folgenden die Ortsabhängigkeit wieder fallen. Für einen Ein-Teilchen-Operator

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} a_i^\dagger a_j \quad \text{mit} \quad A_{ij} = \langle i | \hat{A} | j \rangle \quad \text{ist} \quad (3.7)$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i,j} A_{ij} \langle a_i^\dagger a_j \rangle = s \sum_{i,j} A_{ij} \mathcal{G}_{ji}(-0) = \frac{s}{\beta \hbar} \sum_{i,j} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_{ij} G_{ji}(i\omega_n) e^{i\omega_n 0}. \quad (3.8)$$

Für die Berechnung von Erwartungswerten von Zwei-Teilchen-Operatoren ist im allgemeinen mehr nötig als die Ein-Teilchen-Greensfunktion. Eine Ausnahme bildet der Hamiltonoperator selber, da die Greensfunktion ja gerade die Bewegungsgleichung enthält.

Für ein wechselwirkendes System berechnen wir die *innere Energie* als Erwartungswert des Hamiltonoperators

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_0 = \sum_{i,j} h_{ij} a_i^\dagger a_j, \quad \hat{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,j} u_{ik,lj} a_i^\dagger a_k^\dagger a_l a_j. \quad (3.9)$$

Bevor wir diese Rechnung durchführen, formen wir die Anteile \hat{H}_0 und \hat{H}_1 noch etwas um. Es ist

$$\begin{aligned} [a_h, \hat{H}_1]_- &= \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,j} u_{ik,lj} [a_h, a_i^\dagger a_k^\dagger a_l a_j]_- = \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{k,l,j} u_{hk,lj} a_k^\dagger a_l a_j - \sum_{i,l,j} u_{ih,lj} a_i^\dagger a_l a_j \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

und wegen $a_h^\dagger a_i^\dagger = -a_i^\dagger a_h^\dagger$ dann

$$\sum_h a_h^\dagger [a_h, \hat{H}_1]_- = 2\hat{H}_1. \quad (3.11)$$

Entsprechend läßt sich \hat{H}_0 verändern:

$$[a_h, \hat{H}_0]_- = \sum_{i,j} h_{ij} [a_h, a_i^\dagger a_j]_- = \sum_j h_{hj} a_j, \quad (3.12)$$

also

$$\sum_h a_h^\dagger [a_h, \hat{H}_0]_- = 2\hat{H}_0. \quad (3.13)$$

Es ist

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_0 \rangle &= \sum_{i,j} h_{ij} \langle a_i^\dagger a_j \rangle = s \sum_{i,j} \mathcal{G}_{a_j, a_i^\dagger}(-0) = \\ &= \frac{s}{\beta\hbar} \sum_{i,j} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} h_{ij} \langle\langle a_j, a_i^\dagger \rangle\rangle(i\omega_n) e^{i\omega_n 0}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

Andererseits ergeben sich aus den soeben durchgeführten Rechnungen die Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_0 \rangle &= \sum_h \langle a_h^\dagger [a_h, \hat{H}_0]_- \rangle = s \sum_h \mathcal{G}_{[a_h, \hat{H}_0]_-, a_h^\dagger}(-0) = \\ &= \frac{s}{\beta\hbar} \sum_h \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \langle\langle [a_h, \hat{H}_0], a_h^\dagger \rangle\rangle(i\omega_n) e^{i\omega_n 0} \end{aligned} \quad (3.15)$$

und

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_1 \rangle &= \frac{1}{2} \sum_h \langle a_h^\dagger [a_h, \hat{H}_1]_- \rangle = \frac{s}{2} \sum_h \mathcal{G}_{[a_h, \hat{H}_1]_-, a_h^\dagger}(-0) = \\ &= \frac{s}{2\beta\hbar} \sum_h \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \langle\langle [a_h, \hat{H}_1], a_h^\dagger \rangle\rangle(i\omega_n) e^{i\omega_n 0}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Wir fassen nun geeignet zusammen:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle_{(3.14)} + \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle_{(3.15)} + \langle \hat{H}_1 \rangle_{(3.16)} = \\ &= \frac{s}{2\beta\hbar} \sum_{i,j} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(\delta_{ij} \langle\langle [a_i, \hat{H}]_-, a_i^\dagger \rangle\rangle(i\omega_n) + h_{ij} \langle\langle a_j, a_i^\dagger \rangle\rangle(i\omega_n) \right) e^{i\omega_n 0}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Benutzen wir die Bewegungsgleichungen (2.20),

$$\begin{aligned} \langle\langle [a_i, \hat{H}]_-, a_i^\dagger \rangle\rangle(i\omega_n) &= \hbar(i\omega_n \langle\langle a_i, a_i^\dagger \rangle\rangle - \langle\langle [a_i, a_i^\dagger]_s \rangle\rangle) = \\ &= \hbar(i\omega_n \langle\langle a_i, a_i^\dagger \rangle\rangle - 1), \end{aligned} \quad (3.18)$$

so ergibt sich letztendlich

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{s}{2\beta\hbar} \sum_{i,j} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left((i\hbar\omega\delta_{ij} + h_{ij}) \langle \langle a_j, a_i^\dagger \rangle \rangle (i\omega_n) + \hbar\delta_{ij} \right) e^{i\omega_n 0}. \quad (3.19)$$

Dies ist die innere Energie E .

Für unser fermionisches Beispiel wählen wir $s = +1$. Erneut können wir die Summation über die Matsubara-Frequenzen ω_n , wobei $\beta\hbar(i\omega_n)$ Pole der Fermifunktion $f(\beta\hbar z)$ sind, durch eine Integration über den die reelle Achse umschließenden komplexen Weg C ersetzen. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \frac{1}{2\pi i} \oint_C \sum_{i,j} \left((\hbar z \delta_{ij} + h_{ij}) \langle \langle a_j, a_i^\dagger \rangle \rangle (z) - \hbar\delta_{ij} \right) e^{z0} f(\beta\hbar z) dz = \\ &= -\frac{1}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i,j} (\hbar\omega\delta_{ij} + h_{ij}) \cdot \\ &\quad \cdot (\langle \langle a_j, a_i^\dagger \rangle \rangle (\omega + i0) - \langle \langle a_j, a_i^\dagger \rangle \rangle (\omega - i0)) e^{\omega 0} f(\beta\hbar\omega) d\omega \end{aligned} \quad (3.20)$$

und speziell für $\hat{H}_0 = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i$

$$E = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_i (\hbar\omega + \varepsilon_i) \cdot \text{Im}(\langle \langle a_i, a_i^\dagger \rangle \rangle (\omega + i0)) f(\beta\hbar\omega) d\omega. \quad (3.21)$$

Läßt sich auch die *freie Energie* $F(T)$ durch den Propagator ausdrücken, und wie sieht sie aus? Ein erster Zugang fußt auf den Maxwell-Beziehungen

$$F = E - TS \quad \text{und} \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad (3.22)$$

aus denen sich

$$E = F - T \frac{\partial F}{\partial T} \Big|_{\text{Vol}} = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right) \Big|_{\text{Vol}} \quad (3.23)$$

ergibt. Nach dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik ist $TS(T) \rightarrow 0$ für $T \rightarrow 0$, wir erhalten den Anfangswert

$$F(T=0) = E(T=0) \quad (3.24)$$

und können Gleichung (3.22) integrieren:

$$\begin{aligned} E(T) - E(0) &= -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F(T) - F(0)}{T} \right) \Big|_{\text{Vol}} \\ \Leftrightarrow F(T) &= E(0) - T \int_0^T \frac{E(T') - E(0)}{T'^2} dT'. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Der zweite Zugang wird als *Kopplungskonstantenintegration* bezeichnet und parametrisiert den Wechselwirkungsanteil,

$$\widehat{H}_\lambda := \widehat{H}_0 + \lambda \widehat{H}_1, \quad 0 \leq \lambda \leq 1. \quad (3.26)$$

Es ist

$$F_\lambda = -\frac{1}{\beta} \ln(\text{Spur}(e^{-\beta \widehat{H}_\lambda})) \quad (3.27)$$

und damit

$$\frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda} = -\frac{1}{\beta} \frac{\text{Spur}(-\beta \widehat{H}_1 e^{-\beta \widehat{H}_\lambda})}{\text{Spur}(e^{-\beta \widehat{H}_1})} = \langle \widehat{H}_1 \rangle_\lambda, \quad (3.28)$$

also

$$F_{\lambda=1} = F_{\lambda=0} + \int_0^1 \langle \widehat{H}_1 \rangle_\lambda d\lambda. \quad (3.29)$$

Speziell für die Diagonalgestalt $\widehat{H}_0 = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i$ von \widehat{H}_0 ergibt sich

$$F(T) = F_0 - \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int \sum_i (\hbar\omega + \varepsilon_i) \cdot \text{Im}(\langle \langle a_i, a_i^\dagger \rangle \rangle_\lambda(\omega + i0)) f(\beta\hbar\omega) d\omega d\lambda. \quad (3.30)$$

Obwohl die Formel einfach erscheint, besitzt der Imaginärteil unter Umständen eine komplizierte, nichtlineare λ -Abhängigkeit.

Die freie Energie und damit die gesamte Thermodynamik sind also auf Ein-Teilchen-Propagatoren zurückzuführen. Wir erkennen, daß diese Propagatoren bereits sehr viel „Dynamik“ enthalten.

3.3 Das Wicksche Theorem

Mit Hilfe des Wickschen Theorems, daß wir im Skript zur Festkörpertheorie bereits für zwei Erzeuger und zwei Vernichter kennenlernten, lassen sich Erwartungswerte und damit auch Propagatoren auf einfachere Erwartungswerte zurückführen und damit im Endeffekt auf die Ein-Teilchen-Propagatoren.

Der n -Teilchen-Propagator ist definiert als

$$\begin{aligned} G_n(q_1, \tau_1, \dots, q_n, \tau_n; q'_1, \tau'_1, \dots, q'_n, \tau'_n) = \\ := (-1)^n \langle T_s(a_{q_1}(\tau_1) \cdots a_{q_n}(\tau_n) a_{q'_1}^\dagger(\tau'_1) \cdots a_{q'_n}^\dagger(\tau'_n)) \rangle \end{aligned} \quad (3.31)$$

mit dem *Zeitordnungsoperator* T_s ,

$$T_s(A_1(\tau_1) \cdots A_m(\tau_m)) := (-s)^{\chi[p]} A_{p(1)}(\tau_{p(1)}) \cdots A_{p(m)}(\tau_{p(m)}), \quad (3.32)$$

wobei $p \in S_n$ eine Permutation ist, die sich aus $\chi[p]$ Vertauschungen zusammensetzt, und zwar gerade die, welche die richtige Zeitordnung

$$\beta\hbar \geq \tau_{p(1)} \geq \dots \geq \tau_{p(m)} \geq 0 \quad (3.33)$$

liefert. $\chi[p]$ heißt *Charakter* der Permutation.

Wicksches Theorem: Für $\hat{H} = \sum_{q,q'} h_{qq'} a_q^\dagger a_{q'}$ gilt

$$G_n(q_1, \tau_1, \dots; \dots, q'_n, \tau'_n) = \sum_{p \in S_n} (-s)^{\mu[p]} \prod_{\nu=1}^n G_1(q_\nu, \tau_\nu; q'_{p(\nu)}, \tau'_{p(\nu)}).$$

(3.34)

Dabei ist $\mu[p]$ der Charakter der durch

$$p : (1, 2, \dots, n) \mapsto (p(1), p(2), \dots, p(n)) \quad (3.35)$$

induzierten Permutation

$$(1, 2, \dots, n; 1', 2', \dots, n') \mapsto (1, p(1'), 2, p(2'), \dots, n, p(n')), \quad (3.36)$$

es gilt

$$\mu[p] = \frac{n(n-1)}{2} + \chi[p], \quad (3.37)$$

wobei $\chi[p]$ der Charakter der Permutation p ist. Für $n = 2$ erhalten wir beispielsweise

$$\begin{aligned} G_2(q_1, \tau_1, q_2, \tau_2; q'_1, \tau'_1, q'_2, \tau'_2) &= \\ &= \langle T_s(a_{q_1}(\tau_1) a_{q_2}(\tau_2) a_{q'_1}^\dagger(\tau'_1) a_{q'_2}^\dagger(\tau'_2)) \rangle = \langle T_s(a_{q_1}(\tau_1) a_{q'_2}^\dagger(\tau'_2) a_{q_2}(\tau_2) a_{q'_1}^\dagger(\tau'_1)) \rangle = \\ &= \langle T_s(a_{q_1}(\tau_1) a_{q'_2}^\dagger(\tau'_2)) \rangle \langle T_s(a_{q_2}(\tau_2) a_{q'_1}^\dagger(\tau'_1)) \rangle + \\ &\quad - s \langle T_s(a_{q_1}(\tau_1) a_{q'_1}^\dagger(\tau'_1)) \rangle \langle T_s(a_{q_2}(\tau_2) a_{q'_2}^\dagger(\tau'_2)) \rangle = \\ &= G_1(q_1, \tau_1; q'_2, \tau'_2) G_1(q_2, \tau_2; q'_1, \tau'_1) + \\ &\quad - s G_1(q_1, \tau_1; q'_1, \tau'_1) G_1(q_2, \tau_2; q'_2, \tau'_2). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Es ist

$$\langle a_{q_1}^\dagger a_{q_1} a_{q_2}^\dagger a_{q_2} \rangle = \langle a_{q_1}^\dagger a_{q_1} \rangle \langle a_{q_2}^\dagger a_{q_2} \rangle + \langle a_{q_1}^\dagger a_{q_2} \rangle \langle a_{q_1} a_{q_2}^\dagger \rangle, \quad (3.39)$$

denn wir können schreiben:

$$\begin{aligned} \langle a_{q_1}^\dagger a_{q_1} a_{q_2}^\dagger a_{q_2} \rangle &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \langle a_{q_1}^\dagger(4\tau) a_{q_1}(3\tau) a_{q_2}^\dagger(2\tau) a_{q_2}(\tau) \rangle = \\ &= (-s) \lim_{\tau \rightarrow 0} \langle T_s(a_{q_1}(3\tau) a_{q_2}(\tau) a_{q_1}^\dagger(4\tau) a_{q_2}^\dagger(2\tau)) \rangle = \\ &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \langle T_s(a_{q_1}(3\tau) a_{q_1}^\dagger(4\tau) a_{q_2}(\tau) a_{q_2}^\dagger(2\tau)) \rangle = \\ &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \langle T_s(a_{q_1}(3\tau) a_{q_1}^\dagger(4\tau)) \rangle \langle T_s(a_{q_2}(\tau) a_{q_2}^\dagger(2\tau)) \rangle + \\ &\quad + (-s) \lim_{\tau \rightarrow 0} \langle T_s(a_{q_1}(3\tau) a_{q_2}^\dagger(2\tau)) \rangle \langle T_s(a_{q_2}(\tau) a_{q_1}^\dagger(4\tau)) \rangle = \\ &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \langle a_{q_1}^\dagger(4\tau) a_{q_1}(3\tau) \rangle \langle a_{q_2}^\dagger(2\tau) a_{q_2}(\tau) \rangle + \\ &\quad + \lim_{\tau \rightarrow 0} \langle a_{q_1}(3\tau) a_{q_2}^\dagger(2\tau) \rangle \langle T_s(a_{q_1}^\dagger(4\tau) a_{q_2}(\tau)) \rangle = \\ &= \langle a_{q_1}^\dagger a_{q_1} \rangle \langle a_{q_2}^\dagger a_{q_2} \rangle + \langle a_{q_1} a_{q_2}^\dagger \rangle \langle a_{q_1}^\dagger a_{q_2} \rangle. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Speziell erhalten wir für $q_1 = q_2$ Ausdrücke in den *Besetzungszahloperatoren* $n_q = a_q^\dagger a_q$,

$$\begin{aligned} \langle n_q^2 \rangle &= \langle a_q^\dagger a_q a_q^\dagger a_q \rangle = \langle n_q \rangle^2 + \langle a_q^\dagger a_q \rangle \langle a_q a_q^\dagger \rangle = \\ &= \langle n_q \rangle^2 + \langle n_q \rangle (1 - s \langle n_q \rangle) = (1 - s) \langle n_q \rangle^2 + \langle n_q \rangle. \end{aligned} \quad (3.41)$$

3.4 Beweis des Wickschen Theorems

Wir betrachten $G_n(q_1, \tau_1, q_2, \tau_2, \dots; \dots, q'_n, \tau'_n)$ mit disjunkten „Zeiten“ als eine Funktion nur von q_1 und $\tau = \tau_1$. Es ist dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} G_n(q_1, \tau, q_2, \tau_2, \dots; \dots, q'_n, \tau'_n) &= \\ &= (-1)^n \frac{\partial}{\partial \tau} \langle T_s(a_{q_1}(\tau) a_{q_2}(\tau_2) \cdots a_{q'_n}(\tau'_n)) \rangle = \\ &= (-1)^n (-s)^\chi \frac{\partial}{\partial \tau} \langle \cdots \exp(\frac{1}{\hbar} \hat{H} \tau) a_q \exp(-\frac{1}{\hbar} \hat{H} \tau) \cdots \rangle = \\ &= \frac{(-1)^n}{\hbar} \langle T_s([\hat{H}, a_{q_1}]_-(\tau), a_{q_2}(\tau_2) \cdots a_{q'_n}(\tau'_n)) \rangle = \\ &= \sum_q h_{q_1 q} G_n(q, \tau, q_2, \tau_2, \dots; \dots, q'_n, \tau'_n). \end{aligned} \quad (3.42)$$

An den Stellen $\tau = \tau'_j$ für $j \in \{1, \dots, n\}$ springt der Propagator,

$$\begin{aligned} G_n(q_1, \tau'_j + 0, \dots) - G_n(q_1, \tau'_j - 0, \dots) &= \\ &= (-1)^n (\langle T_s(a_{q_1}(\tau'_j + 0), \dots, a_{q'_j}^\dagger(\tau'_j), \dots) \rangle + \\ &\quad - \langle T_s(a_{q_1}(\tau'_j - 0) \cdots a_{q'_j}^\dagger(\tau'_j) \cdots) \rangle) = \\ &= (-1)^n (-s)^\chi ((-s)^{n-1+j-1} \langle \cdots a_{q_1}(\tau'_j + 0) a_{q'_j}^\dagger(\tau'_j) \cdots \rangle + \\ &\quad + (-s)^{n-1+j} \langle \cdots a_{q'_j}^\dagger(\tau'_j) a_{q_1}(\tau'_j + 0) \cdots \rangle) = \\ &= (-1)^n (-s)^\chi (-s)^{n+j-2} \langle \cdots [a_{q_1}, a_{q'_j}^\dagger]_s(\tau'_j) \cdots \rangle = \\ &= \delta_{q_1 q'_j} (-1)^n (-s)^{n+j-2} \langle T_s(a_{q_2}^\dagger(\tau_2) \cdots a_{q'_j}^\dagger(\tau'_j) \cdots) \rangle = \\ &= -\delta_{q_1 q'_j} (-s)^{n+j-2} G_{n-1}(q_2, \tau_2, \dots; \dots, q'_j, \tau'_j, \dots, q'_n, \tau'_n). \end{aligned} \quad (3.43)$$

In beiden Fällen bezeichnet χ den Charakter der restlichen Erzeuger und Vernichter, der sich bei den Zwischenrechnungen nicht ändert. Wir können Gleichung (3.43) auch anders schreiben:

$$\begin{aligned} \int_{\tau'_j-0}^{\tau'_j+0} \frac{\partial}{\partial \tau} G_n(q, \tau, \dots) d\tau &= \\ &= - \int_{\tau'_j-0}^{\tau'_j+0} (-s)^{n+j-2} \delta_{q_1 q} \delta(\tau - \tau'_j) \cdot \\ &\quad \cdot G_{n-1}(q_2, \tau_2, \dots; \dots, q'_j, \tau'_j, \dots, q'_n, \tau'_n), \end{aligned} \quad (3.44)$$

so daß für $\tau = \tau'_j$ der Ausdruck in Gleichung (3.42) durch den Term

$$(-s)^{n+j-2} \delta_{q_1 q} \delta(\tau - \tau'_j) G_{n-1}(q_2, \tau_2, \dots; \dots, \hbar'_j, \hbar'_j, \dots, q'_n, \tau'_n) \quad (3.45)$$

ergänzt wird. Mit diesem Wissen ausgerüstet, lassen wir nun den Operator $\delta_{q_1 q} \partial / \partial \tau - h_{q_1 q}$ auf beide Seiten der Gleichung (3.34) wirken. Es ist für die linke Seite

$$\begin{aligned} \sum_q (\delta_{q_1 q} \frac{\partial}{\partial \tau} - h_{q_1 q}) G_n(q, \tau, \dots) &= \\ &= - \sum_{j=1}^n (-s)^{n+j-2} \delta_{q_1 q'_j} \delta(\tau - \tau'_j) G_{n-1}(q_2, \tau_2, \dots; \dots, \hbar'_j, \hbar'_j, \dots). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Verwenden wir Gleichung (3.34) für $n-1$ als Induktionsannahme und beachten, daß sowohl (q_1, τ_1) wie auch (q'_j, τ'_j) nicht mehr auftreten, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \sum_q (\delta_{q_1 q} \frac{\partial}{\partial \tau} - h_{q_1 q}) G_n(q, \tau, \dots) &= \\ &= - \sum_{j=1}^n (-s)^{n+j-2} \delta_{q_1 q'_j} \delta(\tau - \tau'_j) \sum_{\tilde{p} \in S_{n-1}} (-s)^{\mu[\tilde{p}]} \prod_{\nu=2}^n G_1(q_\nu, \tau_\nu; q'_{p_j(\nu)}, \tau'_{p_j(\nu)}). \end{aligned} \quad (3.47)$$

Die Permutationen werden in zwei Schritten verwandelt. Zunächst ist $\tilde{p} \in S_{n-1}$ Permutation der Werte $(2, \dots, n)$. Sodann werden die Werte bis einschließlich j um Eins verringert, um den Wert 1 zu erhalten und den Wert j freizumachen. Wir erhalten

$$p_j(\nu) := \begin{cases} \tilde{p}(\nu) - 1 & \text{für } \tilde{p}(\nu) = 2, \dots, j, \\ \tilde{p}(\nu) & \text{für } \tilde{p}(\nu) = j - 1, \dots, n, \end{cases} \quad (3.48)$$

und mit der Ergänzung $p_j(1) = j$ wird daraus eine Permutation aus S_n . Ist $\chi_{\tilde{p}}$ der Charakter der Permutation \tilde{p} , so verändert die Verschiebung der ersten $j-1$ Werte zunächst nichts am Charakter. Erst die Ergänzung zu einer Permutation in S_n , wie sie p_j darstellt, führt zu einem Summanden $j-1$. Es ist dann

$$\begin{aligned} \mu_{p_j} &= \frac{n(n-1)}{2} + \chi_{p_j} = \frac{n(n-1)}{2} + (j-1) + \chi_{\tilde{p}} = \\ &= (n-1) + (j-1) + \frac{(n-1)(n-2)}{2} + \chi_{\tilde{p}} = n + j - 2 + \mu_{\tilde{p}}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Die Summe über j kann mit der Summe über $\tilde{p} \in S_{n-1}$ zu einer Summe über $p \in S_n$ zusammengefaßt werden, es ergibt sich

$$\begin{aligned} \sum_q (\delta_{q_1 q} \frac{\partial}{\partial \tau} - h_{q_1 q}) G_n(q, \tau, \dots) &= \\ &= - \sum_{p \in S_n} (-s)^{\mu_p} \delta_{q_1 q'_{p(1)}} \delta(\tau - \tau'_{p(1)}) \prod_{\nu=2}^n G_1(q_\nu, \tau_\nu; q'_{p(\nu)}, \tau'_{p(\nu)}). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Dasselbe Ergebnis liefert nun auch die Wirkung des Operators auf die rechte Seite von Gleichung (3.34), die sich schreiben läßt als

$$\sum_{p \in S_n} (-s)^{\mu_p} G_1(q_1, \tau; q'_{p(1)}, \tau'_{p(1)}) \prod_{\nu=2}^n G_1(q_\nu, \tau_\nu; q'_{p(\nu)}, \tau'_{p(\nu)}), \quad (3.51)$$

denn es ist

$$\sum_q (\delta_{q_1 q} \frac{\partial}{\partial \tau} + h_{q_1 q}) G_1(q, \tau; q'_j, \tau'_j) = \delta_{q_1 q'_j} \delta(\tau - \tau'_j). \quad (3.52)$$

Also erfüllen beide Seiten von Gleichung (3.34) dieselbe lineare inhomogene Differentialgleichung. Sie sind demnach gleich, wenn die zugehörige homogene Gleichung nur die triviale Lösung besitzt. Wir wollen also zeigen, daß die Funktion $Y_q(\tau)$ mit

$$\sum_q (\delta_{q_1 q} \frac{\partial}{\partial \tau} - h_{q_1 q}) Y_q(\tau) = 0 \quad (3.53)$$

verschwindet. Gelöst wird diese Gleichung formal durch

$$Y_q(\tau) = \sum_{q'} (\exp(-\frac{1}{\hbar} \hat{h} \tau))_{qq'} Y_{q'}(0). \quad (3.54)$$

Die Randbedingungen sind dieselben wie für die Greensfunktion,

$$Y_q(\beta \hbar) = -s Y_q(0). \quad (3.55)$$

Es ergibt sich, daß die Matrix $\exp(-\frac{1}{\hbar} \hat{h} \tau)$ den Eigenwert $-s$ haben muß. Dies geht nicht für $s = +1$, da \hat{h} hermitesch ist. Also muß $s = -1$ sein. Der zugehörige Eigenwert von \hat{h} ist 0, ist aber im Bosonenspektrum wegen der Divergenz an diesem Punkt ausgeschlossen. Damit ist gezeigt, daß $Y_q(\tau)$ verschwindet. Wir haben somit das Wicksche Theorem bewiesen.

3.5 Die Molekularfeld- oder Hartree-Fock-Näherung

Zum Hamiltonoperator \hat{H} aus Gleichung (3.9) suchen wir denjenigen Hamiltonoperator eines Einteilchenproblems, der die physikalischen Eigenschaften des durch \hat{H} bestimmten Systems am besten nähert. Wir setzen ihn an als

$$\hat{H}' = \sum_{i,j} x_{ij} a_i^\dagger a_j. \quad (3.56)$$

Die Dichtematrix zum Hamiltonoperator \hat{H} war

$$\hat{\rho}_H = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Spur}(e^{-\beta \hat{H}})}, \quad (3.57)$$

die freie Energie in Abhängigkeit von dieser Dichtematrix

$$F_H = -\frac{1}{\beta} \ln(\text{Spur}(e^{-\beta\hat{H}})) = \text{Spur}(\hat{\rho}_H(\hat{H} + \frac{1}{\beta} \ln \hat{\rho}_H)) = U - TS. \quad (3.58)$$

Betrachten wir die freie Energie nun allgemein als Funktional auf der Menge der Dichteoperatoren,

$$F[\hat{\rho}] := \text{Spur}(\hat{\rho}(\hat{H} + \frac{1}{\beta} \ln \hat{\rho})), \quad (3.59)$$

so nimmt dieses Funktional sein absolutes Minimum gerade für den kanonischen Dichteoperator $\hat{\rho}_H$ an, und

$$F[\hat{\rho}] \geq F[\hat{\rho}_H] = F_H \quad (3.60)$$

ist ein Minimalisierungsprinzip für die freie Energie. Dies gilt es zu zeigen, ehe wir es verwenden.

Zunächst gilt für Dichteoperatoren $\hat{\rho}$ und $\hat{\rho}'$ mit zugehörigen Eigenzuständen $|n\rangle$ von \hat{H} und $|n'\rangle$ von \hat{H}'

$$\begin{aligned} \text{Spur}(\hat{\rho}(\ln \hat{\rho} - \ln \hat{\rho}')) &= \sum_n \rho_n (\langle n | \ln \hat{\rho}' | n \rangle - \ln \rho_n) = \sum_n \rho_n \langle n | \ln(\frac{\hat{\rho}'}{\rho_n}) | n \rangle = \\ &= \sum_{n,n'} \rho_n \langle n | n' \rangle \ln(\frac{\rho_{n'}}{\rho_n}) \langle n' | n \rangle \leq \sum_{n,n'} \rho_n |\langle n | n' \rangle|^2 (\frac{\rho_{n'}}{\rho_n} - 1) = \\ &= \sum_{n,n'} |\langle n | n' \rangle|^2 (\rho_{n'} - \rho_n) = \text{Spur} \hat{\rho}' - \text{Spur} \hat{\rho} = 0 \end{aligned}$$

und damit

$$\text{Spur}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \geq \text{Spur}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}'). \quad (3.61)$$

Dann ist aber

$$\begin{aligned} F[\hat{\rho}] &= \text{Spur}(\hat{\rho}\hat{H} + \frac{1}{\beta}\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) \geq \text{Spur}(\hat{\rho}\hat{H}) + \frac{1}{\beta}\text{Spur}(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}_H) = \\ &= \text{Spur}(\hat{\rho}\hat{H}) + \frac{1}{\beta}\text{Spur}(\hat{\rho}\ln\left(\frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\text{Spur}(e^{-\beta\hat{H}})}\right)) = \\ &= \text{Spur}(\hat{\rho}\hat{H}) - \text{Spur}(\hat{\rho}\hat{H}) - \frac{1}{\beta}\text{Spur}(\hat{\rho}\ln(\text{Spur}(e^{-\beta\hat{H}}))) = \\ &= -\frac{1}{\beta}\text{Spur}(\hat{\rho}\ln(\text{Spur}(e^{-\beta\hat{H}}))) = F_H. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Für $\hat{\rho} = \hat{\rho}' = \hat{\rho}_{H'}$ gilt

$$\begin{aligned}
 F_H \leq F[\hat{\rho}'] &= \text{Spur} \left(\hat{\rho}' \left(\hat{H} + \frac{1}{\beta} \ln \hat{\rho}' \right) \right) = \\
 &= \text{Spur} \left(\hat{\rho}' \left(\hat{H}' + \frac{1}{\beta} \ln \hat{\rho}' \right) \right) + \text{Spur} \left(\hat{\rho}' \left(\hat{H} - \hat{H}' \right) \right) = \\
 &= F_{H'} + \langle \hat{H} - \hat{H}' \rangle'. \tag{3.63}
 \end{aligned}$$

Speziell für den Ansatz (3.56) erhalten wir

$$\begin{aligned}
 F \leq F[\hat{\rho}'] &= F' + \sum_{n,m} ((h_{nm} - x_{nm}) \langle a_n^\dagger a_m \rangle') + \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{n,m,l,k} u_{nm lk} \langle a_n^\dagger a_m^\dagger a_l a_k \rangle_{H'}. \tag{3.64}
 \end{aligned}$$

Wir kommen der tatsächlichen freien Energie also am nächsten, wenn wir $F[\hat{\rho}']$ bezüglich \hat{H}' und damit bezüglich der Koeffizienten x_{nm} minimieren. Für den Vierfacherwartungswert benutzen wir dabei das Wicksche Theorem

$$\begin{aligned}
 \langle a_n^\dagger a_m^\dagger a_l a_k \rangle' &= -s \langle a_n^\dagger a_l \rangle' \langle a_m^\dagger a_k \rangle' + \langle a_m^\dagger a_l \rangle' \langle a_n^\dagger a_k \rangle' + \\
 &+ \delta_{mk} \langle a_n^\dagger a_l \rangle' + s \delta_{ml} \langle a_n^\dagger a_k \rangle' \tag{3.65}
 \end{aligned}$$

ohne die beiden letzten Terme, die nur zu einer Umnormierung von h_{nm} führen. Es ergibt sich die Forderung

$$\begin{aligned}
 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial F[\hat{\rho}']}{\partial x_{nm}} &= \frac{\partial F'}{\partial x_{nm}} - \langle a_n^\dagger a_m \rangle' + \sum_{l,k} (h_{lk} - x_{lk}) \frac{\partial \langle a_l^\dagger a_k \rangle'}{\partial x_{nm}} + \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j,l,k} u_{ij, lk} \left(\frac{\partial \langle a_i^\dagger a_k \rangle'}{\partial x_{nm}} \langle a_j^\dagger a_l \rangle' + \frac{\partial \langle a_j^\dagger a_l \rangle'}{\partial x_{nm}} \langle a_i^\dagger a_k \rangle' + \right. \\
 &\left. - s \frac{\partial \langle a_i^\dagger a_l \rangle'}{\partial x_{nm}} \langle a_j^\dagger a_k \rangle' - s \frac{\partial \langle a_j^\dagger a_k \rangle'}{\partial x_{nm}} \langle a_i^\dagger a_l \rangle' \right). \tag{3.66}
 \end{aligned}$$

Es ist

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial F'}{\partial x_{nm}} &= \frac{\partial}{\partial x_{nm}} \left(-\frac{1}{\beta} \ln \left(\text{Spur} \left(\exp \left(-\beta \sum_{l,k} x_{lk} a_l^\dagger a_k \right) \right) \right) \right) = \\
 &= \frac{1}{\text{Spur} \left(\exp \left(-\beta \hat{H}' \right) \right)} \cdot \text{Spur} \left(\exp \left(-\beta \hat{H}' \right) a_n^\dagger a_m \right) = \langle a_n^\dagger a_m \rangle'. \tag{3.67}
 \end{aligned}$$

Durch geeignete Umnormierung können wir aus den verbleibenden Termen die partielle Ableitung ausklammern, es ergibt sich als spezielle Lösung des Minimierungsproblems die Wahl

$$x_{lk} = h_{lk} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left((u_{lj, ik} - s u_{lj, ki}) \langle a_j^\dagger a_i \rangle' + (u_{il, kj} - s u_{il, jk}) \langle a_i^\dagger a_j \rangle' \right) \tag{3.68}$$

und mit $u_{li,jk} = u_{il,kj}$

$$x_{lk} = h_{lk} + \sum_{i,j} (u_{li,jk} - su_{li,kj}) \langle a_i^\dagger a_j \rangle'. \quad (3.69)$$

Die Koeffizienten enthalten dabei offensichtlich Erwartungswerte des durch sie gebildeten Hamiltonoperators. Wir sprechen von einem *Selbstkonsistenzproblem*, das eine hochgradige Nichtlinearität für die zu ermittelnde Größen x_{nm} darstellt. Die Lösung ist darüber hinaus nicht unbedingt eindeutig. Treten mehrere mögliche Lösungen auf, so muß im nächsten Schritt in das Funktional $F[\hat{\rho}]$ eingesetzt werden, wenn entschieden werden soll, welche Lösung den kleinsten Wert für die freie Energie liefert. Die selbstkonsistente freie Energie ist nicht F' , sondern der Wert dieses Funktionals für die Lösung,

$$\begin{aligned} F_{\text{HF}} &= F' - \sum_{l,k,i,j} (u_{li,jk} - su_{li,kj}) \langle a_i^\dagger a_j \rangle' \langle a_l^\dagger a_k \rangle' + \sum_{n,m,l,k} u_{nm,lk} \langle a_n^\dagger a_m^\dagger a_l a_k \rangle' = \\ &= F' - \frac{1}{2} \sum_{i,j,l,k} (u_{li,jk} - su_{li,kj}) \langle a_i^\dagger a_j \rangle' \langle a_l^\dagger a_k \rangle'. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Zum Abschluß berechnen wir zu \hat{H}' die Greensfunktion, indem wir in Gleichung (2.24) einsetzen. Die Einteilchengreensfunktionen sind dabei stets bezüglich \hat{H}' zu verstehen.

$$\begin{aligned} \hbar z \langle \langle a_l, a_m^\dagger \rangle \rangle' &= \hbar \delta_{lm} + \sum_k x_{lk} \langle \langle a_k, a_m^\dagger \rangle \rangle' = \\ &= \hbar \delta_{lm} + \sum_k \left(h_{lk} + \sum_{i,j} (u_{li,jk} - su_{li,kj}) \langle a_i^\dagger a_j \rangle' \right) \langle \langle a_k, a_m^\dagger \rangle \rangle'. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Durch Ersetzen der Greensfunktion erhalten wir eine Art quadratische Gleichung für die Einteilchengreensfunktion, im allgemeinen aber eine Integralgleichung, die es zu lösen gilt.

4. Die Polstruktur einfacher Modelle

An einigen Beispielen wollen wir hier sehen, wie die Polstruktur der Matsubara-Greensfunktionen für verschiedene Hamiltonoperatoren aussieht. Mit hineingenommen sind hier natürlich dann auch die Näherungen exakter Hamiltonoperatoren wie die Hartree-Fock-Näherung des vorangegangenen Kapitels. Ausgehend von Fermionen läßt sich das ganze auch auf Bosonen übertragen. Doch bevor wir ins Detail gehen, schieben wir ein paar Mutatorregeln vor, die für das folgende sehr nützlich sind und für beide Arten von Teilchen gelten.

4.1 Mutator-Rechenregeln für Erzeuger und Vernichter

Aus den Grundregeln

$$\begin{aligned}
[A, BC]_- &= [A, B]_- C + B[A, C]_- = [A, B]_+ C - B[A, C]_+ \\
[AB, C]_- &= A[B, C]_- + [A, C]_- B = A[B, C]_+ - [A, C]_+ B \\
[A, BC]_+ &= [A, B]_+ C + B[A, C]_+ = [A, B]_- C - B[A, C]_- \\
[AB, C]_+ &= A[B, C]_+ + [A, C]_+ B = A[B, C]_- - [A, C]_- B
\end{aligned} \tag{4.1}$$

und den Mutatoren für die Erzeuger und Vernichter,

$$[a_i, a_j]_s = [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_s = 0, \quad [a_i, a_j^\dagger]_s = \delta_{ij} \tag{4.2}$$

ergibt sich über mehr oder weniger lange Rechnungen (ohne Summationsregel)

$$[a_i, a_j^\dagger a_k]_- = \delta_{ij} a_k \tag{4.3}$$

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger a_k]_- = -\delta_{ik} a_j^\dagger \tag{4.4}$$

$$[a_i, a_j^\dagger a_j]_- = \delta_{ij} a_j \tag{4.5}$$

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger a_j]_- = -\delta_{ij} a_j^\dagger \tag{4.6}$$

$$[a_i^\dagger a_i, a_j^\dagger a_j]_- = 0 \tag{4.7}$$

$$a_i^\dagger a_i a_i^\dagger a_i = a_i^\dagger a_i \tag{4.8}$$

$$[a_i a_j^\dagger a_j, a_k^\dagger a_k]_- = \delta_{ik} a_i a_j^\dagger a_j \tag{4.9}$$

$$[a_i, a_j^\dagger a_k^\dagger a_l a_m]_- = \delta_{ij} a_k^\dagger a_l a_m - s \delta_{ik} a_j^\dagger a_l a_m \tag{4.10}$$

$$[a_i, a_j^\dagger a_j a_k^\dagger a_k]_- = \delta_{ij} a_j a_k^\dagger a_k + \delta_{ik} a_j^\dagger a_j a_k \tag{4.11}$$

$$[a_i^\dagger a_i, a_j^\dagger a_j a_k^\dagger a_k]_- = 0 \tag{4.12}$$

$$[a_i a_j^\dagger a_j, a_k^\dagger a_k a_l^\dagger a_l]_- = (\delta_{il} a_k^\dagger a_k a_l + \delta_{ik} a_k a_l^\dagger a_l) a_j^\dagger a_j \tag{4.13}$$

4.2 Der freie Hamiltonoperator

Wir haben das freie Fermion bereits in Kapitel 2 behandelt. Dennoch findet es auch hier noch einmal seinen Platz, um dann zu komplizierteren Problemen zu führen.

Der Hamiltonoperator \hat{H}_0 des freien Fermions ist

$$\hat{H}_0 = \sum_{k,l} h_{kl} c_k^\dagger c_l. \tag{4.14}$$

Diesen setzen wir in die Bewegungsgleichung (2.20) ein und erhalten

$$\begin{aligned}\hbar z \langle\langle c_i, c_j^\dagger \rangle\rangle &= \hbar \delta_{ij} + \sum_{k,l} h_{kl} \langle\langle [c_i, c_k^\dagger c_l]_-, c_j^\dagger \rangle\rangle = \\ &= \hbar \delta_{ij} + \sum_k h_{ik} \langle\langle c_l, c_j^\dagger \rangle\rangle.\end{aligned}\quad (4.15)$$

Bereits die erste Generation der Bewegungsgleichungen ist in sich geschlossen und liefert ein lineares Gleichungssystem,

$$\sum_k (\hbar z \delta_{ik} - h_{ik}) \langle\langle c_k, c_j^\dagger \rangle\rangle = \hbar \delta_{ij}.\quad (4.16)$$

Es handelt sich um eine Matrixgleichung der Form $(\hat{1}\hbar z - \hat{h})\hat{G} = \hat{1}\hbar$, die sich formal durch $\hat{G} = \hbar(\hat{1}\hbar - \hat{h})^{-1}$ lösen läßt. Ist der Hamiltonoperator diagonal,

$$\hat{H}_0 = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k,\quad (4.17)$$

so ist diese Matrixgleichung eine skalare Gleichung, wir erhalten

$$\langle\langle c_k, c_k^\dagger \rangle\rangle = \frac{\hbar}{\hbar z - \varepsilon_k}.\quad (4.18)$$

4.3 Das wechselwirkende System zweier Fermionen

Hamiltonoperator ist hier

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \sum_{k,l} h_{kl} c_k^\dagger c_l + \frac{1}{2} \sum_{j,k,l,m} u_{jklm} c_j^\dagger c_k^\dagger c_l c_m\quad (4.19)$$

und nach Diagonalisierung des freien Anteils

$$\hat{H}_0 = \varepsilon_1 c_1^\dagger c_1 + \varepsilon_2 c_2^\dagger c_2,\quad (4.20)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= \frac{1}{2} (u_{12,21} c_1^\dagger c_2^\dagger c_2 c_1 + u_{12,12} c_1^\dagger c_2^\dagger c_1 c_2 + \\ &\quad + u_{21,12} c_2^\dagger c_1^\dagger c_1 c_2 + u_{21,21} c_2^\dagger c_1^\dagger c_2 c_1) = \\ &= \frac{1}{2} (u_{12,21} - u_{12,12} + u_{21,12} - u_{21,21}) c_1^\dagger c_1 c_2^\dagger c_2 = \\ &= (u_{12,21} - u_{12,12}) c_1^\dagger c_1 c_2^\dagger c_2 =: u c_1^\dagger c_1 c_2^\dagger c_2.\end{aligned}\quad (4.21)$$

Dabei beschränken wir uns hier auf zwei mögliche Zustände der Teilchen,

$$c_1^\dagger |0,0\rangle = |1,0\rangle \quad \text{und} \quad c_2^\dagger |0,0\rangle = |0,1\rangle.\quad (4.22)$$

Ferner benutzen wir, daß für punktsymmetrische Potentiale $u(-\vec{r}) = u(\vec{r})$

$$\begin{aligned}
 u_{12,21} &= \int \int \varphi_1^*(\vec{r})\varphi_2^*(\vec{r}')u(\vec{r}-\vec{r}')\varphi_2(\vec{r}')\varphi_1(\vec{r})d^3r'd^3r = u_{21,12} \\
 u_{12,12} &= \int \int \varphi_1^*(\vec{r})\varphi_2^*(\vec{r}')u(\vec{r}-\vec{r}')\varphi_1(\vec{r}')\varphi_2(\vec{r})d^3r'd^3r = u_{21,21}
 \end{aligned}
 \tag{4.23}$$

gilt. $u_{12,21}$ bezeichnet die Wechselwirkung, bei der die Teilchen ihre Quantenzahlen behalten, $u_{12,12}$ diejenige, bei der sie diese Quantenzahlen austauschen. Die Anteile werden daher *direkter Term* und *Austauschterm* genannt und sind in Abbildung 4.1 symbolisch dargestellt.

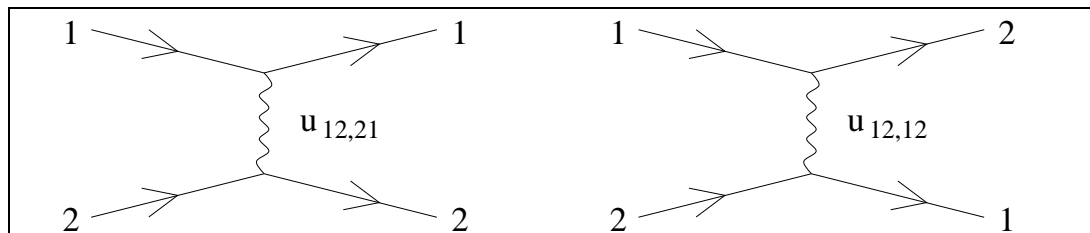


Abb. 4.1 direkter Term und Austauschterm

Auch diesen Hamiltonoperator wollen wir in die Bewegungsgleichung (2.20) einsetzen. Wir berechnen dazu

$$\begin{aligned}
 [c_1, \hat{H}]_- &= \varepsilon_1[c_1, c_1^\dagger c_1]_- + \varepsilon_2[c_1, c_2^\dagger c_2]_- + u[c_1, c_1^\dagger c_1 c_2^\dagger c_2]_- = \\
 &= \varepsilon_1 c_1 + u c_1 c_2^\dagger c_2
 \end{aligned}
 \tag{4.24}$$

und erhalten damit

$$\hbar z \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle = \hbar + \varepsilon_1 \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle + u \langle\langle c_1 c_2^\dagger c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle
 \tag{4.25}$$

oder

$$(\hbar z - \varepsilon_1) \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle = \hbar + u \langle\langle c_1 c_2^\dagger c_2, c_1^\dagger \rangle\rangle.
 \tag{4.26}$$

Auch für die höhere Greensfunktion läßt sich eine Bewegungsgleichung aufstellen, die dann in sich geschlossen ist. Dazu berechnen wir

$$\begin{aligned}
 [c_1 c_2^\dagger c_2, \hat{H}]_- &= \varepsilon_1[c_1 c_2^\dagger c_2, c_1^\dagger c_1]_- + \varepsilon_2[c_1 c_2^\dagger c_2, c_2^\dagger c_2]_- + u[c_1 c_2^\dagger c_2, c_1^\dagger c_1 c_2^\dagger c_2]_- = \\
 &= \varepsilon_1 c_1 c_2^\dagger c_2 + u c_1 c_2^\dagger c_2 c_2^\dagger c_2 = (\varepsilon_1 + u) c_1 c_2^\dagger c_2
 \end{aligned}
 \tag{4.27}$$

sowie

$$[c_1 c_2^\dagger c_2, c_1^\dagger]_+ = c_2^\dagger c_2
 \tag{4.28}$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
 \hbar z \langle\langle c_1 c_2^\dagger c_2, c_1^\dagger \rangle\rangle &= \hbar \langle c_2^\dagger c_2 \rangle + (\varepsilon_1 + u) \langle\langle c_1 c_2^\dagger c_2, c_1^\dagger \rangle\rangle \\
 \Leftrightarrow \langle\langle c_1 c_2^\dagger c_2, c_1^\dagger \rangle\rangle &= \frac{\hbar \langle c_2^\dagger c_2 \rangle}{\hbar z - \varepsilon_1 - u}.
 \end{aligned}
 \tag{4.29}$$

Dies wiederum in Gleichung (4.26) eingesetzt ergibt mit Partialbruchzerlegung

$$\begin{aligned} (\hbar z - \varepsilon_1) \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle &= \hbar + \frac{\hbar u \langle c_2^\dagger c_2 \rangle}{\hbar z - \varepsilon_1 - u} \\ \Leftrightarrow \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle &= \frac{\hbar(1 - \langle c_2^\dagger c_2 \rangle)}{\hbar z - \varepsilon_1} + \frac{\hbar \langle c_2^\dagger c_2 \rangle}{\hbar z - \varepsilon_1 - u}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Die Greensfunktion hat also eine Zweipolstruktur mit vertauschten Gewichten ($\langle c_2^\dagger c_2 \rangle$ anstatt $\langle c_1^\dagger c_1 \rangle$). Physikalisch läßt sich die erhaltene Lösung interpretieren, daß für $\langle c_2^\dagger c_2 \rangle = 0$ Teilchen 2 nicht vorhanden ist, Teilchen 1 also auch nicht mit diesem wechselwirken kann, dagegen für $\langle c_2^\dagger c_2 \rangle = 1$ sehr wohl eine solche Wechselwirkung auftritt.

Wir können dieses Ergebnis auch mit Hilfe der Spektraldarstellung der Einteilchen-Greensfunktion (Gleichung (2.13)) erhalten. Dazu beachten wir

$$\begin{aligned} \hat{H} |0, 0\rangle &= 0 |0, 0\rangle, & \hat{H} |1, 0\rangle &= \varepsilon_1 |1, 0\rangle, \\ \hat{H} |0, 1\rangle &= \varepsilon_2 |0, 1\rangle, & \hat{H} |1, 1\rangle &= (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + u) |1, 1\rangle. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle &= \frac{\hbar}{\mathcal{Z}} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \frac{\langle n | c_1 | m \rangle \langle m | c_1^\dagger | n \rangle}{\hbar z + E_n - E_m} = \\ &= \frac{\hbar}{\mathcal{Z}} \left((1 + e^{-\beta \varepsilon_1}) \frac{1}{\hbar z - \varepsilon_1} + (e^{-\beta \varepsilon_2} + e^{-\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + u)}) \frac{1}{\hbar z - \varepsilon_1 - u} \right), \end{aligned} \quad (4.32)$$

der erste Term vermittelt dabei zwischen den Fockraumzuständen $|m\rangle = |1, 0\rangle$ und $|n\rangle = |0, 0\rangle$, der zweite Term zwischen $|m\rangle = |1, 1\rangle$ und $|n\rangle = |0, 1\rangle$. Mit

$$\mathcal{Z} = 1 + e^{-\beta \varepsilon_1} + e^{-\beta \varepsilon_2} + e^{-\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + u)} \quad (4.33)$$

und

$$\langle c_2^\dagger c_2 \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} (e^{-\beta \varepsilon_2} + e^{-\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + u)}) \quad (4.34)$$

ergibt sich das vorherige Ergebnis. Allerdings ist diese Rechnung für hohe Fockraumdimensionen nicht mehr sinnvoll.

4.4 System zweier Elektronen in Hartree-Fock-Näherung

Für den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \varepsilon_1 c_1^\dagger c_1 + \varepsilon_2 c_2^\dagger c_2 + u c_1^\dagger c_1 c_2^\dagger c_2, \quad (4.35)$$

der für die Wechselwirkung zweier Fermionen in zwei Zuständen zuständig ist (Gleichungen (4.21) und (4.22)), bestimmen wir den Hartree-Fock-Ansatz

$$\hat{H}' = \sum_{i,j=1}^2 x_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger \quad (4.36)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} x_{11} &= \varepsilon_1 + u \langle c_2^\dagger c_2 \rangle', & x_{22} &= \varepsilon_2 + u \langle c_1^\dagger c_1 \rangle', \\ x_{12} &= -u \langle c_2^\dagger c_1 \rangle' & \text{und} & \quad x_{21} = -u \langle c_1^\dagger c_2 \rangle'. \end{aligned} \tag{4.37}$$

Das Einsetzen in die Bewegungsgleichung liefert dann

$$\begin{aligned} \hbar z \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle &= \hbar + (\varepsilon_1 + u \langle c_2^\dagger c_2 \rangle') \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle - u \langle c_2^\dagger c_1 \rangle' \langle\langle c_2, c_1^\dagger \rangle\rangle, \\ \hbar z \langle\langle c_2, c_1^\dagger \rangle\rangle &= \hbar + (\varepsilon_2 + u \langle c_1^\dagger c_1 \rangle') \langle\langle c_2, c_1^\dagger \rangle\rangle - u \langle c_1^\dagger c_2 \rangle' \langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \tag{4.38}$$

Für $\langle c_1^\dagger c_2 \rangle' = \langle c_2^\dagger c_1 \rangle' = 0$ ergibt sich als Lösung $\langle\langle c_2, c_1^\dagger \rangle\rangle = 0$ und damit

$$\langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle = \frac{\hbar}{\hbar z - \varepsilon_1 - u \langle c_2^\dagger c_2 \rangle'}. \tag{4.39}$$

Diese Greensfunktion ist wegen des Erwartungswertes temperaturabhängig, wie wir noch sehen werden. Dies ist realistisch für eine Greensfunktion zweier Teilchen. Sie besitzt allerdings nur eine Einpolstruktur. Die Entwicklung dieser wie der exakten Greensfunktion (4.30) in u als Kleinheitsparameter liefert eine Übereinstimmung bis zur ersten Ordnung. Die Besetzungszahlen sind nun

$$\begin{aligned} n_1 = \langle c_1^\dagger c_1 \rangle &= -\frac{1}{\pi \hbar} \int \text{Im}(\langle\langle c_1, c_1^\dagger \rangle\rangle(E + i0)) f(E) dE = \\ &= -\frac{1}{\pi \hbar} \int \text{Im} \left(\frac{\hbar}{E + i0 - \varepsilon_1 - u n_2} \right) f(E) dE = \\ &= f(\varepsilon_1 + u n_2) \end{aligned} \tag{4.40}$$

und entsprechend

$$n_2 = f(\varepsilon_2 + u n_1). \tag{4.41}$$

Angenommen, ε_1 und ε_2 seien gleich, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 =: \varepsilon$, und kleiner als das chemische Potential, also $\varepsilon < 0$, jedoch $\varepsilon + u > 0$, so ist für niedrige Temperaturen $n_1 = 1, n_2 = 0$ eine mögliche Lösung, $n_1 = n_2 =: n$ eine weitere. Die Fermifunktion wird bei höheren Temperaturen jedoch „aufgeweicht“, wie es Abbildung 4.2 zeigt. Die Entscheidung darüber, welche der Lösungen nun diejenige mit niedrigster Energie ist, liefert erst der Vergleich mit dem exakten Resultat.

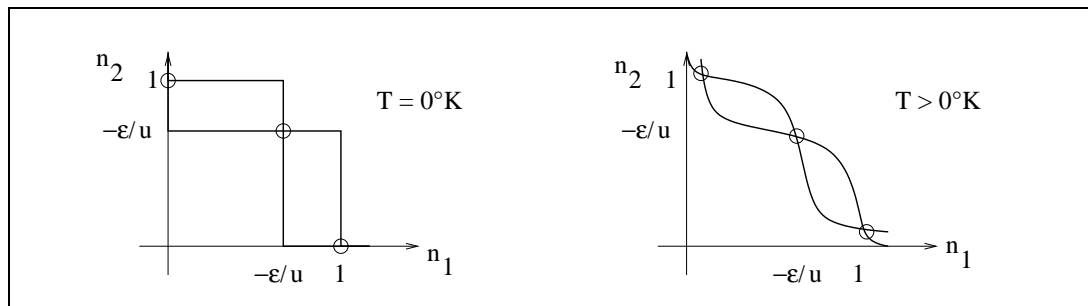


Abb. 4.2 Abhängigkeit der Besetzungszahlen für $T = 0$ und $T > 0$

4.5 Entkopplung der Bewegungsgleichungen

Es stellt sich die Frage, ob sich bessere Näherungen als die Hartree-Fock-Näherung finden lassen. Eine solche Näherung ist möglich und läßt die Hartree-Fock-Näherung als einen Spezialfall erscheinen. Wir führen sie hier durch und verallgemeinern gleichzeitig auf allgemeine Teilchen (Fermionen und Bosonen).

Ziel ist zunächst, die Einteilchen-Greensfunktion $\langle\langle a_i, a_j^\dagger \rangle\rangle$ zum Hamiltonoperator (4.19) zu bestimmen. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
 [a_i, \hat{H}]_- &= \sum_{k,l} h_{kl} [a_i, a_k^\dagger a_l]_- + \frac{1}{2} \sum_{j,k,l,m} u_{jk,lm} [a_i, a_j^\dagger a_k^\dagger a_l a_m]_- = \\
 &= \sum_{k,l} h_{kl} \delta_{ik} a_l + \frac{1}{2} \sum_{j,k,l,m} u_{jk,lm} (\delta_{ij} a_k^\dagger a_l a_m - s \delta_{ik} a_j^\dagger a_l a_m) = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_k h_{ik} a_k + \sum_{k,l,m} (u_{ik,lm} - s u_{ki,lm}) a_k^\dagger a_l a_m
 \end{aligned} \tag{4.42}$$

und damit

$$\begin{aligned}
 \hbar z \langle\langle a_i, a_j^\dagger \rangle\rangle &= \langle [a_i, a_j^\dagger]_- \rangle + \langle\langle [a_i, \hat{H}]_-, a_j^\dagger \rangle\rangle = \\
 &= \hbar \delta_{ij} + \sum_k h_{ik} \langle\langle a_k, a_j^\dagger \rangle\rangle + \frac{1}{2} \sum_{k,l,m} (u_{ik,lm} - s u_{ki,lm}) \langle\langle a_k^\dagger a_l a_m, a_j^\dagger \rangle\rangle
 \end{aligned} \tag{4.43}$$

oder

$$\sum_k (\hbar z \delta_{ik} - h_{ik}) \langle\langle a_k, a_j^\dagger \rangle\rangle = \hbar \delta_{ij} + \sum_{k,l,m} (u_{ik,lm} - s u_{ki,lm}) \langle\langle a_k^\dagger a_l a_m, a_j^\dagger \rangle\rangle. \tag{4.44}$$

Die Bewegungsgleichungen haben sich nicht geschlossen, da Greensfunktionen höherer Ordnung auftreten. Das Wicksche Theorem läßt sich hier strenggenommen nicht anwenden, da in ihm die Erwartungswerte bezüglich des freien Hamiltonoperators gebildet werden. Unsere Näherung besteht nun darin, die Gültigkeit des Wickschen Theorems dennoch anzunehmen. Mit

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_{a_k^\dagger a_l a_m, a_j^\dagger}(\tau) &= -\langle T_s((a_k^\dagger a_l a_m)(\tau)(a_j^\dagger)(0)) \rangle = \\
 &= -G_2(l, \tau + \delta\tau, m, \tau; k, \tau + 2\delta\tau, j, 0) = \\
 &= sG_1(l, \tau + \delta\tau; k, \tau + 2\delta\tau)G_1(m, \tau; j, 0) + \\
 &\quad - G_1(l, \tau + \delta\tau; j, 0)G_1(m, \tau; k, \tau + 2\delta\tau) = \\
 &= \langle a_k^\dagger a_l \rangle \mathcal{G}_{a_m, a_j^\dagger}(\tau) - s \mathcal{G}_{a_l, a_j^\dagger}(\tau) \langle a_k^\dagger a_m \rangle
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

für $k \neq l$ und $k \neq m$ erhalten wir

$$\langle\langle a_k^\dagger a_l a_m, a_j^\dagger \rangle\rangle = \langle a_k^\dagger a_l \rangle \langle\langle a_m, a_j^\dagger \rangle\rangle - s \langle a_k^\dagger a_m \rangle \langle\langle a_l, a_j^\dagger \rangle\rangle \tag{4.46}$$

und folglich

$$\sum_k (\hbar z \delta_{ik} - h_{ik}) \langle\langle a_k, a_j^\dagger \rangle\rangle = \hbar \delta_{ij} + \sum_{k,l,m} (u_{ik,lm} - su_{ki,lm}) \langle a_k^\dagger a_l \rangle \langle\langle a_m, a_j^\dagger \rangle\rangle. \quad (4.47)$$

Dies ist äquivalent zur Hartree-Fock-Näherung. Eine Verbesserung ist nun, wenn wir auf den (3,1)-Propagator $\langle\langle a_k^\dagger a_l a_m, a_j^\dagger \rangle\rangle$ erneut die Bewegungsgleichung anwenden. Wir erhalten diese Funktion dann in Abhängigkeit eines (5,1)-Propagators. Dieser Prozeß läßt sich fortsetzen. Das System der Bewegungsgleichungen schließt sich theoretisch erst nach etwa 10^{23} solchen Schritten. Wir können es jedoch jederzeit wieder durch die „Wicksche Näherung“ abbrechen. Die Güte der Näherung steigt mit jedem Schritt, da bei n Schritten die ersten n Momente der Spektralfunktion berechnet sind. Ein natürlicher Punkt für den Abbruch dieser Iteration ist das Überschreiten einer vorher festgelegten maximalen Ordnung des Potentials, die in jedem Schritt steigt.

5. Thermodynamische Störungsrechnung: Einteilchenprobleme

Wir werden in diesem Kapitel zunächst auf Probleme einzelner Teilchen in einem von außen vorgegebenen Potential eingehen. Teilchen seien hier Bosonen oder Fermionen, der Unterschied wird auf die Zahl s ($s = +1$ für Fermionen, $s = -1$ für Bosonen) übertragen. Bevor wir jedoch diese konkrete Situation behandeln, gehen wir auf die Grundprinzipien der Störungsentwicklung ein.

5.1 Reihenentwicklung der Greensfunktion

Gegeben sei ein Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (5.1)$$

wobei \hat{H}_0 das ungestörte Problem und \hat{H}_1 die Störung beschreibt. Die Eigenzustände zu \hat{H}_0 und damit die Gleichgewichtsdynamik seien bekannt. Ist \hat{A} ein Operator im Schrödingerbild, so lautet der entsprechende Operator im Wechselwirkungsbild

$$\hat{A}^{\text{W}}(\tau) := \exp\left(\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau\right). \quad (5.2)$$

mit imaginärer „Zeit“ τ . Wir setzen für die Exponentialabbildung des Hamiltonoperators, die zur Konstruktion der Erwartungswerte benötigt wird,

$$\exp\left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H}(\tau - \tau')\right) = \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau\right) S(\tau, \tau') \exp\left(\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau'\right) \quad (5.3)$$

an und definieren so den *Zeitentwicklungsoperator*

$$\hat{S}(\tau, \tau') := \exp\left(\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H}(\tau - \tau')\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 \tau'\right) \quad (5.4)$$

mit den folgenden Eigenschaften:

$$\widehat{S}(\tau, \tau) = 1, \quad (5.5)$$

$$\widehat{S}(\tau, \tau')\widehat{S}(\tau', \tau'') = \widehat{S}(\tau, \tau''), \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \widehat{S}(\tau, \tau') &= -\exp\left(\frac{1}{\hbar} \widehat{H}_0 \tau\right) \widehat{H}_1 \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \widehat{H}_0 \tau\right) \widehat{S}(\tau, \tau') = \\ &= -\widehat{H}_1^{\text{W}}(\tau) \widehat{S}(\tau, \tau'), \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} \langle \widehat{S}(\beta \hbar, 0) \rangle_{H_0} &= \text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H})) / \text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H}_0)) = \mathcal{Z} / \mathcal{Z}_0 = \\ &= \exp(-\beta(F - F_0)). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Die Differentialgleichung (5.7) ist unter Verwendung der Anfangsbedingung (Gleichung (5.5)) äquivalent zur Integralgleichung

$$\widehat{S}(\tau, \tau') = 1 - \int_{\tau'}^{\tau} \widehat{H}_1^{\text{W}}(\tau'') \widehat{S}(\tau'', \tau) d\tau''. \quad (5.9)$$

Ihre *iterative Lösung* ist

$$\begin{aligned} \widehat{S}(\tau, \tau') &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_{\tau'}^{\tau} \int_{\tau'}^{\tau_1} \cdots \int_{\tau'}^{\tau_n} \widehat{H}_1^{\text{W}}(\tau_1) \widehat{H}_1^{\text{W}}(\tau_2) \cdots \widehat{H}_1^{\text{W}}(\tau_n) d\tau_n \cdots d\tau_2 d\tau_1 = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{\tau'}^{\tau} T_s(\widehat{H}_1^{\text{W}}(\tau_1) \widehat{H}_1^{\text{W}}(\tau_2) \cdots \widehat{H}_1^{\text{W}}(\tau_n)) d\tau^n \end{aligned} \quad (5.10)$$

mit $d\tau^n := d\tau_n \cdots d\tau_2 d\tau_1$. Unser Ziel in diesem Abschnitt soll die Greensfunktion $G_{AB}(\tau - \tau')$ bezüglich \widehat{H} sein. Dazu berechnen wir für $\tau' < \tau < \beta \hbar$

$$\begin{aligned} &\text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H}) \widehat{A}^{\text{H}}(\tau) \widehat{B}^{\text{H}}(\tau')) = \\ &= \text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H}) \exp\left(\frac{1}{\hbar} \tau \widehat{H}\right) \widehat{A} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \tau \widehat{H}\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \tau' \widehat{H}\right) \widehat{B} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \tau' \widehat{H}\right)) = \\ &= \text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H}_0) \widehat{S}(\beta \hbar, \tau) \widehat{A}^{\text{W}}(\tau) \widehat{S}(\tau, \tau') \widehat{B}^{\text{W}}(\tau') \widehat{S}(\tau', 0)) = \\ &= \text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H}_0) T_s(\widehat{S}(\beta \hbar, \tau) \widehat{S}(\tau, \tau') \widehat{S}(\tau', 0) \widehat{A}^{\text{W}}(\tau) \widehat{B}^{\text{W}}(\tau'))) = \\ &= \text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H}_0) T_s(\widehat{S}(\beta \hbar, 0) \widehat{A}^{\text{W}}(\tau) \widehat{B}^{\text{W}}(\tau'))) \end{aligned} \quad (5.11)$$

und damit

$$\begin{aligned} G_{AB}(\tau, \tau') &= -\langle T_s(\widehat{A}^{\text{H}}(\tau) \widehat{B}^{\text{H}}(\tau')) \rangle_H = \\ &= -\text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H}) T_s(\widehat{A}^{\text{H}}(\tau) \widehat{B}^{\text{H}}(\tau'))) / \text{Spur}(\exp(-\beta \widehat{H})) = \\ &= -\langle T_s(\widehat{S}(\beta \hbar, 0) \widehat{A}^{\text{W}}(\tau) \widehat{B}^{\text{W}}(\tau')) \rangle_{H_0} / \langle \widehat{S}(\beta \hbar, 0) \rangle_{H_0}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Für den Zähler gilt schließlich mit Gleichung (5.10)

$$\begin{aligned} \langle T_s(\widehat{S}(\beta\hbar, 0)\widehat{A}^W(\tau)\widehat{B}^W(\tau')) \rangle_{H_0} &= \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta\hbar} \langle T_s(\widehat{H}_1^W(\tau_1) \dots \widehat{H}_1^W(\tau_n)\widehat{A}^W(\tau)\widehat{B}^W(\tau')) \rangle_{H_0}. \end{aligned} \tag{5.13}$$

Wir haben hier eine Reihe, die sogenannte *Störungsreihe* vorliegen, und können über sie eine mehr oder weniger gute Näherung für die Greensfunktion erzielen, je nachdem, wie viele Glieder der Reihe wir mitnehmen. Ersetzen wir nun die Operatoren \widehat{A} und \widehat{B} durch Kombinationen von Erzeugern und Vernichtern und beachten wir, daß \widehat{H}_0 und \widehat{H}_1 sich ebenfalls durch solche ausdrücken lassen, so erhalten wir Vielteilchenpropagatoren im Sinne von Gleichung (3.31).

5.2 Graphische Darstellung

Einfacher, als alle Summenglieder in ihrer abstrakten Form zu berücksichtigen ist es, diese durch symbolische Bilder oder *Graphen* sichtbar zu machen. Die „Zeitpunkte“ τ werden durch Punkte in diesem Graphen verbildlicht und als *Vertizes* bezeichnet.

Der Erzeugungsoperator $a_k^\dagger(\tau)$ wird ausgedrückt durch eine Linie, die aus diesem Vertex entspringt, der Vernichtungsoperator $a_k(\tau)$ durch eine Linie, die dort endet. Für die Übersichtlichkeit lassen wir den Index „W“ für das Wechselwirkungsbild fort, nehmen dieses Bild immer dann stillschweigend an, wenn die Erzeuger und Vernichter als Funktion einer „Zeit“ τ geschrieben sind.



Abb. 5.1 Erzeuger und Vernichter im Graphen

Die Greensfunktion

$$\mathcal{G}_k^0(\tau, \tau') := \mathcal{G}_{a_k a_k^\dagger}^0(\tau, \tau') = -\langle a_k(\tau)a_k^\dagger(\tau') \rangle_{H_0} \tag{5.14}$$

ist die Kombination einer auslaufenden mit einer einlaufenden Linie.

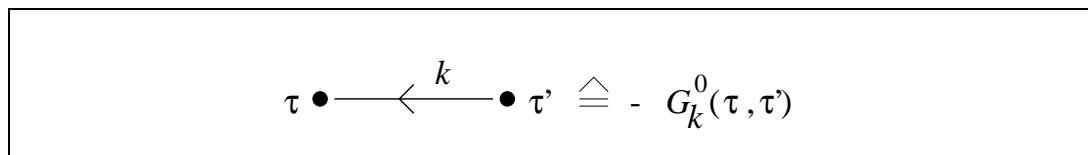


Abb. 5.2 Die Matsubara-Greensfunktion

5.3 Das wechselwirkungsfreie System mit Störpotential

Der Hamiltonoperator sei gegeben durch

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_{k,k'} v_{kk'} a_k^\dagger a_{k'}. \quad (5.15)$$

Ein Beispiel dafür sind Leitungselektronen in Blochzuständen $|k\rangle$, ein weiteres die Störstellenstreuung. Gesucht ist in diesem Fall die Greensfunktion des Einteilchenproblems,

$$\mathcal{G}_{kk'}(\tau, \tau') = -\langle a_k(\tau) a_{k'}^\dagger(\tau') \rangle_H = Z\mathcal{G}_{kk'}(\tau, \tau')/N\mathcal{G} \quad (5.16)$$

mit Zählerreihe

$$\begin{aligned} Z\mathcal{G}_{kk'}(\tau, \tau') := & -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \prod_{i=1}^n \sum_{k_i, k'_i} v_{k_i k'_i} \cdot \\ & \cdot \int_0^{\beta\hbar} \langle T_s((a_{k_1}^\dagger a_{k'_1})(\tau_1) \dots (a_{k_n}^\dagger a_{k'_n})(\tau_n) a_k(\tau) a_{k'}^\dagger(\tau')) \rangle_{H_0} d\tau^n \end{aligned} \quad (5.17)$$

und Nennerreihe

$$\begin{aligned} N\mathcal{G} := & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \prod_{i=1}^n \sum_{k_i, k'_i} v_{k_i k'_i} \cdot \\ & \cdot \int_0^{\beta\hbar} \langle T_s((a_{k_1}^\dagger a_{k'_1})(\tau_1) \dots (a_{k_n}^\dagger a_{k'_n})(\tau_n)) \rangle_{H_0} d\tau^n. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Wir betrachten die Erwartungswerte des zeitgeordneten Produktes in Nenner und Zähler als Graphen in verschiedenen Ordnungen der Störungsreihe. Dabei beachten wir, daß das Wicksche Theorem gültig ist, da der Erwartungswert bezüglich des Einteilchen-Hamiltonoperators \hat{H}_0 gebildet wird. Für das Potential $v_{k_i k'_i}$ zeichnen wir eine gestrichelte Linie an den Punkt τ_i .

Nennergraphen für $n = 0$:

$$\langle T_s(1) \rangle_{H_0} = 1 \quad (5.19)$$

... für $n = 1$:

$$-\langle T_s(a_{k_1}^\dagger(\tau_1 + \delta\tau) a_{k'_1}(\tau_1)) \rangle_{H_0} = -s\mathcal{G}_{k_1}^0(\tau_1, \tau_1 + \delta\tau) \delta_{k_1 k'_1} \quad (5.20)$$

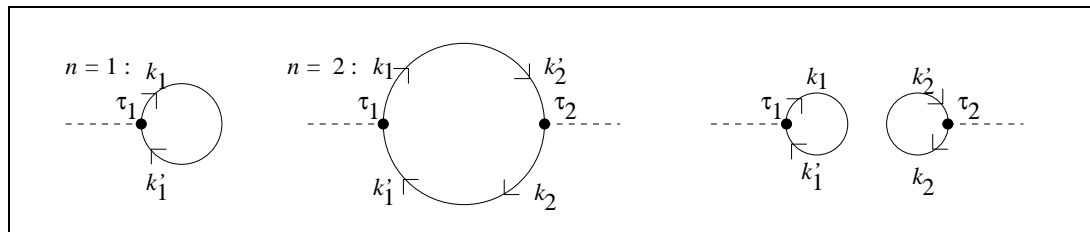


Abb. 5.3 Nennergraphen für $n = 1$ und $n = 2$

... für $n = 2$:

$$\begin{aligned}
 & (-1)^2 \langle T_s(a_{k_1}^\dagger(\tau_1 + \delta\tau)a_{k'_1}(\tau_1)a_{k_2}^\dagger(\tau_2 + \delta\tau)a_{k'_2}(\tau_2)) \rangle_{H_0} = \\
 & = -s\mathcal{G}_{k_1}^0(\tau_2, \tau_1)\mathcal{G}_{k_2}^0(\tau_1, \tau_2)\delta_{k_1 k'_2}\delta_{k_2 k'_1} + \\
 & + \mathcal{G}_{k_1}^0(\tau_1, \tau_1 + \delta\tau)\mathcal{G}_{k_2}^0(\tau_2, \tau_2 + \delta\tau)\delta_{k_1 k'_1}\delta_{k_2 k'_2}
 \end{aligned}
 \tag{5.21}$$

... für $n = 3$:

$$(-1)^3 \langle T_s(a_{k_1}^\dagger(\tau_1 + \delta\tau)a_{k'_1}(\tau_1)a_{k_2}^\dagger(\tau_2 + \delta\tau)a_{k'_2}(\tau_2)a_{k_3}^\dagger(\tau_3 + \delta\tau)a_{k'_3}(\tau_3)) \rangle_{H_0}
 \tag{5.22}$$

Dieses Reihenglied soll nur graphisch aufgelöst werden.

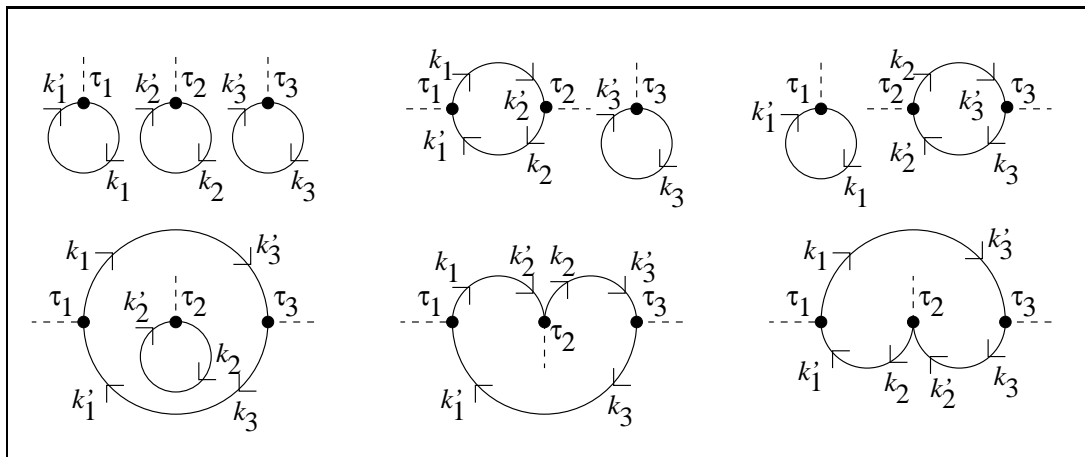


Abb. 5.4 Nennergraphen für $n = 3$

Beispielsweise liefert der vierte Graph einen Beitrag

$$\begin{aligned}
 & (-1)^3 \langle T_s(a_{k_1}^\dagger(\tau_1)a_{k'_3}(\tau_3)) \rangle_{H_0} \delta_{k'_3 k_1} \cdot \\
 & \cdot \langle T_s(a_{k_3}^\dagger(\tau_3)a_{k'_1}(\tau_1)) \rangle_{H_0} \delta_{k'_1 k_3} \cdot \\
 & \cdot \langle T_s(a_{k_2}^\dagger(\tau_2 + \delta\tau)a_{k'_2}(\tau_2)) \rangle_{H_0} \delta_{k'_2 k_2} = \\
 & = -s\mathcal{G}_{k_1}^0(\tau_3, \tau_1)\mathcal{G}_{k_3}^0(\tau_1, \tau_3)\mathcal{G}_{k_2}^0(\tau_2, \tau_2 + \delta\tau)\delta_{k'_3 k_1}\delta_{k'_1 k_3}\delta_{k'_2 k_2}.
 \end{aligned}
 \tag{5.23}$$

Zählergraphen für $n = 0$:

$$-\langle T_s(a_k(\tau)a_{k'}^\dagger(\tau')) \rangle_{H_0} = -\langle a_k(\tau)a_{k'}^\dagger(\tau') \rangle_{H_0} \delta_{kk'} = \mathcal{G}_k^0(\tau, \tau')\delta_{kk'}
 \tag{5.24}$$

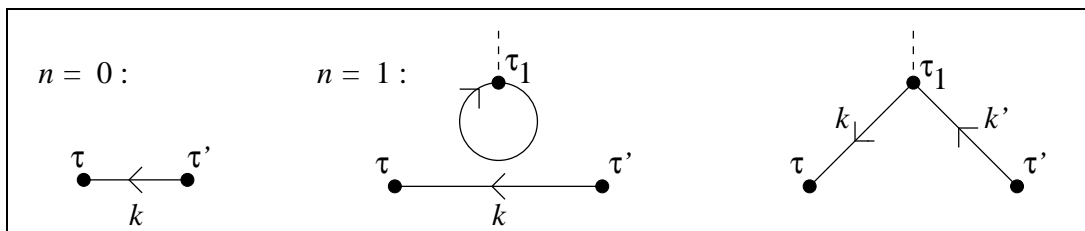


Abb. 5.5 Zählergraphen für $n = 0$ und $n = 1$

... für $n = 1$:

$$\begin{aligned}
 & (-1)^2 \langle T_s(a_{k_1}^\dagger(\tau_1 + \delta\tau)a_{k'_1}(\tau_1)a_k(\tau)a_{k'}^\dagger(\tau')) \rangle_{H_0} = \\
 & = -s\mathcal{G}_{k_1}^0(\tau_1, \tau_1 + \delta\tau)\mathcal{G}_k^0(\tau, \tau')\delta_{k_1 k'_1}\delta_{kk'} + \\
 & + \mathcal{G}_{k'}^0(\tau_1, \tau')\mathcal{G}_k^0(\tau, \tau_1)\delta_{k' k'_1}\delta_{kk_1}
 \end{aligned}
 \tag{5.25}$$

... für $n = 2$:

$$(-1)^3 \langle T_s(a_{k_1}^\dagger(\tau_1 + \delta\tau)a_{k'_1}(\tau_1)a_{k_2}^\dagger(\tau_2 + \delta\tau)a_{k'_2}(\tau_2)a_k(\tau)a_{k'}^\dagger(\tau')) \rangle_{H_0} \tag{5.26}$$

Die entstehenden Graphen werden hier wieder nur gezeichnet.

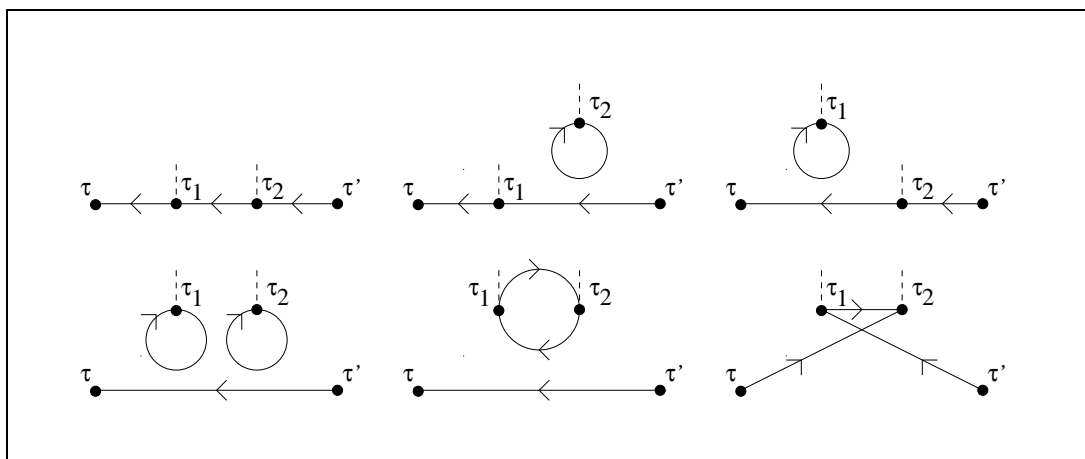


Abb. 5.6 Zählergraphen für $n = 2$

5.4 Regeln für numerierte Graphen

Um aus den Graphen, die in der jeweiligen Ordnung alle möglichen Verbindungen zwischen den Vertices darstellen, auf die Greensfunktionen zurückschließen zu können, stellen wir eine Reihe von *Graphenregeln* auf:

1. Für jede aus einem Vertex τ auslaufende Linie schreiben wir einen Erzeuger $a_k^\dagger(\tau)$, für jede in einen Vertex einlaufende Linie einen Vernichter $a_k(\tau)$. Die Verbindungslinie vom Vertex τ zum Vertex τ' steht für den Einteilchenpropagator $\mathcal{G}_k(\tau, \tau')$.
2. Eine an einem Vertex ansetzende gestrichelte Linie steht für eine Wechselwirkung v_{k_i, k'_i} zu einer inneren Zeit τ_i , wenn eine Linie mit Quantenzahl k_i in den Vertex einläuft und eine andere mit Quantenzahl k'_i von ihm fortläuft. Über die innere Zeit τ_i ist zu integrieren, über die inneren Quantenzahlen k_i, k'_i ist zu summieren.
3. Für einen geschlossenen Linienzug erhalten wir einen Faktor $(-s)$.
4. Ein (numerierter) Graph n -ter Ordnung hat den Vorfaktor $1/n!$.

5.5 Das Theorem verbundener Graphen

Lassen wir die Angaben der *inneren* „Zeiten“ τ_i an den Vertices fort, so können mehrere Graphen zu einem zusammengefaßt werden. Wir sprechen hier von *unnummerierten Graphen*. Die zusammengefaßten Graphen nennen wir *topologisch äquivalent*. Einfache kombinatorische Überlegungen zeigen, daß die vierte Graphenregel zu ersetzen ist durch

- 4'. Ein unnumerierter Graph hat den Vorfaktor $1/S$, wobei die *Symmetriezahl* S die Zahl der Permutationen der Vertices angibt, die den Graphen in eine topologisch äquivalente Form überführen.

So erkennen wir in Abbildung 5.6, daß wir bei Fortlassen der Zeitangaben statt sechs nur noch vier verschiedene Graphen erhalten. Wir erhalten so für die unnummerierten Zählergraphen bei $n = 2$ die in Abbildung 5.7 gezeigten Anteile.

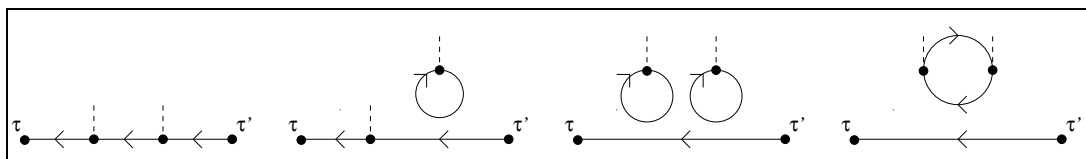


Abb. 5.7 Unnummerierte Zählergraphen für $n = 2$

Die dargestellten Graphen bestehen teilweise aus zwei getrennten Graphen. Wir erkennen, daß wir aus der gesamten Graphensumme des Zählers die nicht mit τ und τ' zusammenhängenden Anteile ausklammern können. Es verbleiben die sogenannten *verbundenen Graphen*, andererseits ist der ausgeklammerte Anteil gleich dem Nenner der Greensfunktion, denn die Symmetriezahlen der abgetrennten Anteile sind dieselben wie im Nenner. Diesen Anteil können wir kürzen, es gilt also das

Theorem verbundener Graphen (Linked-Graph-Theorem):

Die Einteilchengreensfunktion ist die Summe aller verbundenen und nicht-numerierten Graphen $G_{kk'}(\tau, \tau')$, wie in Abbildung 5.8 links dargestellt.

$$\tau \xrightarrow{k} \tau' + \tau \xrightarrow{k} \overset{\vdots}{\bullet} \xrightarrow{k'} \tau' + \tau \xrightarrow{k} \overset{\vdots}{\bullet} \xrightarrow{k_1} \overset{\vdots}{\bullet} \xrightarrow{k'} \tau' \quad (5.27)$$

Abb. 5.8 Einteilchengreensfunktion (links) und geschlossener Linienzug (rechts)

Auch die dritte Graphenregel verlangt nach einer Erklärung. Der Rückschluß im Graphen in Abbildung 5.8 entsteht aus

$$a_{k_1}^\dagger(\tau_1) a_{k'_1}(\tau_1) \dots a_{k_\nu}^\dagger(\tau_\nu) a_{k'_\nu}(\tau_\nu) \quad (5.28)$$

durch die Kontraktion $\langle a_{k_\nu}(\tau_\nu) a_{k_1}^\dagger(\tau_1) \rangle_{H_0}$ gemäß dem Wick'schen Theorem. Dieser Term erhält als Vorfaktor eine Potenz von $(-s)$, dessen Exponent die Anzahl der Paarvertauschungen angibt, die nötig sind, um den ersten Operator in (5.28) hinter den letzten zu bringen. Es sind $(2\nu - 1)$ solcher Vertauschungen notwendig, daher ist der Faktor einfach $(-s)$.

5.6 Der Kumulantensatz

Auch wenn er sich eben herausgekürzt hat, wollen wir dennoch den Nenner $N\mathcal{G}$ in Gleichung (5.16) betrachten, hängt er doch über Gleichung (5.8) mit der freien Energie zusammen. Jeder einzelne Graph ist aufgebaut aus den in Abbildung 5.9 gezeigten Grundtypen, die jeweils bereits den Vorfaktor $-1/S_\nu$ gemäß Regeln (3) und (4') enthalten sollen. Der Graph ist also charakterisiert durch den Satz $\{n_\nu\} := (n_1, \dots, n_\nu, \dots)$, wobei n_ν die Anzahl der Exemplare des Grundtyps Γ_ν beschreibt, die er enthält. Die verbleibende Symmetriezahl ist damit $S = (n_1!) \cdot \dots \cdot (n_\nu!) \cdot \dots$, der analytische Beitrag dieses Graphen

$$\Gamma(\{n_\nu\}) = \prod_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{n_\nu!} \Gamma_\nu^{n_\nu}. \tag{5.29}$$

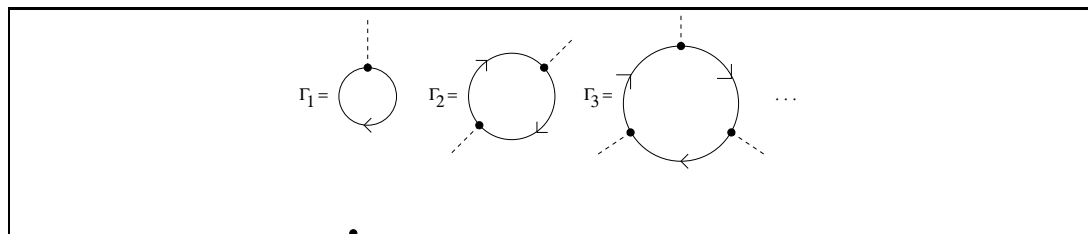


Abb. 5.9 Grundtypen zusammenhängender, unverbundener und unnumerierter Graphen

Wir erhalten

$$\begin{aligned} \langle \widehat{S}(\beta\hbar, 0) \rangle_{H_0} &= \sum_{\{n_\nu\}} \Gamma(\{n_\nu\}) = \sum_{\{n_\nu\}} \prod_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{n_\nu!} \Gamma_\nu^{n_\nu} = \prod_{\nu=1}^{\infty} \sum_{n_\nu=0}^{\infty} \frac{1}{n_\nu!} \Gamma_\nu^{n_\nu} = \\ &= \prod_{\nu=1}^{\infty} \exp(\Gamma_\nu) = \exp\left(\sum_{\nu=1}^{\infty} \Gamma_\nu\right). \end{aligned} \tag{5.30}$$

Es gilt der

Kumulantensatz:

Die Änderung der freien Energie ist gleich der Summe aller zusammenhängenden, unverbundenen und unnumerierten Graphen,

$$-\beta(F - F_0) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \Gamma_\nu. \tag{5.31}$$

5.7 Die fouriertransformierte Form

Wir wollen die nach Gleichung (5.27) erhaltene Greensfunktion durch eine Fouriertransformation in eine Gleichung für die wellenzahlabhängigen Greensfunktionen $G_{kk'}(z)$ verwandeln. Die Fouriertransformation lautet (vgl. dazu Gleichung (2.44))

$$\mathcal{G}_{kk'}(\tau) = \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} G_{kk'}(i\omega_n) \exp(-i\omega_n\tau), \tag{5.32}$$

$$G_{kk'}(i\omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{kk'}(\tau) \exp(i\omega_n\tau) d\tau. \tag{5.33}$$

Dabei sind ω_n die Matsubara-Frequenzen, für die

$$\int_0^{\beta\hbar} \exp(i(\omega_n - \omega_{n'})\tau) = \beta\hbar\delta_{nn'} \tag{5.34}$$

gilt. Wir erhalten mit den Ergebnissen aus Abschnitt 5.3

$$\begin{aligned} G_{kk'}(i\omega_n) &= \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_k^0(\tau) \delta_{kk'} \exp(i\omega_n\tau) d\tau + \\ &+ v_{kk'} \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{k'}^0(\tau_1) \mathcal{G}_k^0(\tau - \tau_1) \exp(i\omega_n\tau) d\tau_1 d\tau + \\ &+ \sum_{k_1} v_{kk_1} v_{k_1k'} \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_k^0(\tau - \tau_2) \mathcal{G}_{k_2}^0(\tau_2 - \tau_1) \mathcal{G}_{k_1}^0(\tau_1) d\tau_2 d\tau_1 d\tau + \\ &+ \dots = \end{aligned} \tag{5.35}$$

$$\begin{aligned} &= G_k^0(i\omega_n) \delta_{kk'} + v_{kk'} G_k^0(i\omega_n) G_{k'}^0(i\omega_n) + \\ &+ \sum_{k_1} v_{kk_1} v_{k_1k'} G_k^0(i\omega_n) G_{k_1}^0(i\omega_n) G_{k'}^0(i\omega_n) + \\ &+ \dots \end{aligned} \tag{5.36}$$

Diese Formel läßt sich nun ohne weiteres auf die komplexe Ebene übertragen und liefert

$$\begin{aligned} G_{kk'}(z) &= G_k^0(z) \delta_{kk'} + G_k^0(z) v_{kk'} G_{k'}^0(z) + \\ &+ \sum_{k_1} G_k^0(z) v_{kk_1} G_{k_1}^0(z) v_{k_1k'} G_{k'}^0(z) + \dots \end{aligned} \tag{5.37}$$

Abbildung 5.10 zeigt die Summe graphisch. Dabei ist die Doppellinie ein Symbol für die exakte Greensfunktion, die einfache Linie ohne Endpunkte steht für die fouriertransformierte freie Greensfunktion, und die gestrichelte Linie mit Endpunkt für das fouriertransformierte Potential $v_{kk'}$. Über innere Quantenzahlen k_i ist zu summieren.

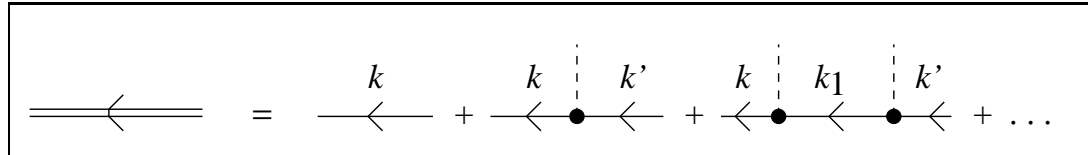


Abb. 5.10 Entwicklung der fouriertransformierten Greensfunktion

Wir können Gleichung (5.37) auch iterativ schreiben,

$$G_{kk'}(z) = G_k^0(z)\delta_{kk'} + G_k^0(z) \sum_{k''} v_{kk''} G_{k''k'}(z), \tag{5.38}$$

wie in Abbildung 5.10 rechts dargestellt. Dieses Gleichungssystem läßt sich zumindest formal nach $G_{kk'}(z)$ auflösen und bringt uns auf den Gedanken, daß wir die Entwicklung in Gleichung (5.37) auch durch Entwicklung der Green-schen Matrix $G(z) = (z - h)^{-1}$, $h = h_0 + h_1$ erhalten hätten:

$$\begin{aligned} G(z) &= (z - h_0 - h_1)^{-1} = (z - h_0)^{-1}(1 - h_1(z - h_0)^{-1})^{-1} = \\ &= G^0(z) + G^0(z)h_1G^0(z) + G^0(z)h_1G^0(z)h_1G^0(z) + \dots \end{aligned} \tag{5.39}$$

An die Stelle des Potentials v wird im folgenden die *Selbstenergie* Σ treten.

5.8 Störstellenstreuung und Konfigurationsmittel

Eine erste Hinführung auf die Selbstenergie stellt die Berechnung eines Konfi-gurationsmittels dar. Betrachtet wird ein System aus N Elektronen und N_S Störstellen, das in erster Quantisierung beschrieben wird durch den Zusatzterm

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^{N_S} v(\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha). \tag{5.40}$$

In zweiter Quantisierung erhalten wir für ebene Wellen

$$\begin{aligned} v_{kk'} &= \sum_{\alpha=1}^{N_S} \langle k | v(\vec{r} - \vec{R}_\alpha) | k' \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N_S} \int \psi_k^*(\vec{r}) v(\vec{r} - \vec{R}_\alpha) \psi_{k'}(\vec{r}) d^3r = \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{1}{\text{Vol}} \int v(\vec{r} - \vec{R}_\alpha) e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}} d^3r = \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{1}{\text{Vol}} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{r} - \vec{R}_\alpha)} v(\vec{r} - \vec{R}_\alpha) e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{R}_\alpha} d^3r = \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{1}{\text{Vol}} \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{R}_\alpha}. \end{aligned} \tag{5.41}$$

Unter dem *Konfigurationsmittel* einer Größe, die von den Störstellenplatzie-rungen abhängt, verstehen wir

$$\bar{A} = \frac{1}{\text{Vol}^{N_S}} \int \dots \int A(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_S}) d^3R_{N_S} \dots d^3R_1. \tag{5.42}$$

Wir wollen in diesem Kapitel natürlich das Konfigurationsmittel über die Einteilchengreensfunktion bestimmen. So erhalten wir

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k}) \frac{1}{\text{Vol}} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{R}_{\alpha}} d^3 R_{\alpha} &= \sum_{\alpha} \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k}) \delta_{kk'} = N_S v_{kk} \delta_{kk'} = \\ &= N_S \tilde{v}(\vec{0}) \delta_{kk'} = \frac{N_S}{\text{Vol}} \int v(\vec{r}) d^3 r \delta_{kk'} = \frac{N_S}{\text{Vol}} \bar{v} \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (5.43)$$

und

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{k_1} \tilde{v}(\vec{k}_1 - \vec{k}) \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k}_1) \frac{1}{\text{Vol}^2} \int \int e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k})\vec{R}_{\alpha}} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}_1)\vec{R}_{\beta}} d^3 R_{\beta} d^3 R_{\alpha} &= \\ = \sum_{\alpha = \beta} \sum_{k_1} \tilde{v}(\vec{k}_1 - \vec{k}) \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k}_1) \delta_{kk'} + \\ + \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{k_1} \tilde{v}(\vec{k}_1 - \vec{k}) \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k}_1) \delta_{kk_1} \delta_{k_1 k'} &= \\ = N_S \sum_{k_1} v_{kk_1} v_{k_1 k'} \delta_{kk'} + N_S(N_S - 1) v_{kk} \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Unterschieden wird hier zwischen den Fällen $\alpha = \beta$ und $\alpha \neq \beta$. Die gemittelte Greensfunktion ist in Abbildung 5.11 symbolisch angegeben.

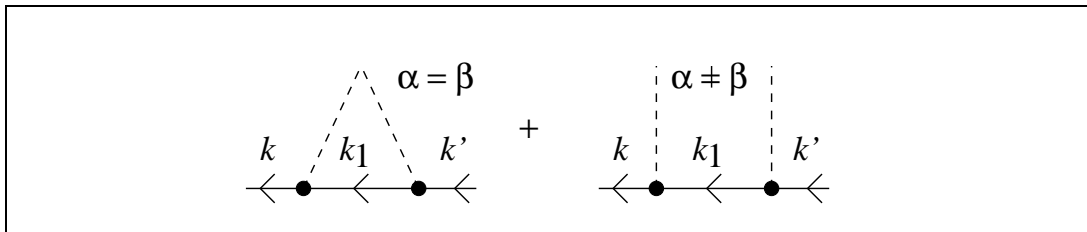


Abb. 5.11 Die konfigurationsgemittelte Einteilchengreensfunktion

Für den allgemeineren Fall (keine ebenen Wellen) schreiben wir für den ersten Term in Gleichung (5.44)

$$N_S \sum_{k_1} |v_{k_1 k}|^2 G_{k_1}^0(z) \delta_{kk'}. \quad (5.45)$$

Wie im letzten Abschnitt angedeutet definieren wir hier eine *Selbstenergie* $\Sigma_k(z)$ über die Relation

$$\overline{G}_k(z) = G_k^0(z) + G_k^0(z) \Sigma_k(z) \overline{G}_k(z). \quad (5.46)$$

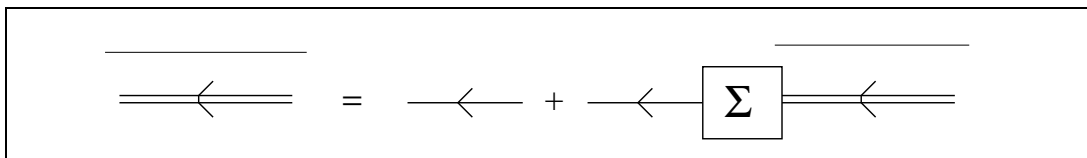


Abb. 5.12 Definition der Selbstenergie

Definition der Selbstenergie:

Die Selbstenergie schreibt sich als Summe aller irreduziblen Graphen, von denen die äußeren Linien entfernt wurden.

Ein *reduzierbarer Graph* ist einer, der durch das Auftrennen einer Teilchenlinie (Greensfunktion) in zwei Anteile zerfallen kann. Bei einem *irreduzierbaren Graphen* geht dies nicht mehr.

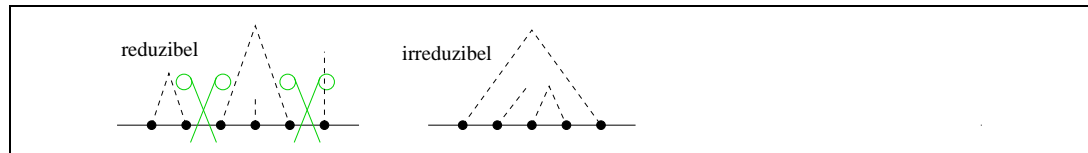


Abb. 5.13 reduzierbarer und irreduzierbarer Graph

Abbildung 5.13 zeigt ein Beispiel für ein reduzierbares und ein irreduzierbares Graph. Der abgespaltene Anteil des reduzierbaren Graphen kann der Greensfunktion $\overline{G}_k(z)$ zugefügt werden, daher ist angegebene Definition sinnvoll. Abbildung 5.14 zeigt die Reihenentwicklung der konfigurationsgemittelten Selbstenergie.

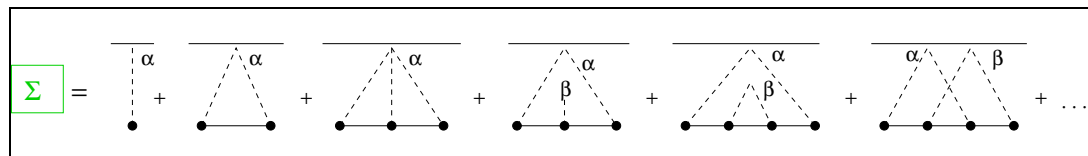


Abb. 5.14 Reihenentwicklung der Selbstenergie

Mit Hilfe der Selbstenergiegraphen können wir nun Näherungen für die Greensfunktionsentwicklung konstruieren. Die triviale Näherung besteht im ersten Term der Abbildung 5.14, die einfachste nichttriviale Näherung ist dagegen

$$\Sigma_k(z) = N_S v_{kk} + N_S \sum_{k_1} |v_{k_1 k}|^2 G_{k_1}^0(z). \tag{5.47}$$

Diese Näherung berücksichtigt die ersten beiden Graphen in Abbildung 5.14 und wird *Bornsche Näherung* genannt. Als Spezialfall betrachten wir ein kurzreichweitiges Streupotential, $v(\vec{r}) = u\delta^3(\vec{r})$ an allen Störstellen. Damit ist

$$\bar{v}(\vec{q}) = \frac{u}{\text{Vol}} = \text{konstant} \tag{5.48}$$

und

$$\begin{aligned} \Sigma_k(z) &= \frac{N_S u}{\text{Vol}} + \frac{N_S u^2}{\text{Vol}^2} \sum_{k_1} G_{k_1}^0(z) = \\ &= \frac{N_S u}{\text{Vol}} + \frac{N_S u^2}{\text{Vol}^2} \sum_{k_1} \frac{\hbar}{\hbar z - \varepsilon_{k_1}} = \frac{N_S}{\text{Vol}} (u + u^2 F_0(z)) \end{aligned} \tag{5.49}$$

mit $F_0(z) = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_k \frac{\hbar}{\hbar z - \varepsilon_k} \rightarrow \int \frac{\rho_0(\varepsilon)}{\hbar z - \varepsilon} d\varepsilon,$ (5.50)

was die fouriertransformierte Greensfunktion des ungestörten Problems ist. $F_0(z)$ hat einen Schnitt längs der reellen Achse, die notwendige infinitesimale Verschiebung des Integrationsbereiches sorgt für einen Real- und Imaginärteil, wobei der Imaginärteil sich ergibt als

$$\text{Im}(\Sigma_k(E/\hbar + i0)) = -\frac{N_S\pi}{\text{Vol}}\rho_0(E) =: \frac{\hbar}{2\tau_L}. \tag{5.51}$$

$\rho_0(E)$ ist die Einteilchenzustandsdichte des ungestörten Problems an der Fermikante. Setzen wir nun den Realteil der Selbstenergie auf Null und lösen Gleichung (5.46) nach $\overline{G}(z)$ auf, so finden wir

$$\overline{G}(z) = \hbar(\hbar z + \frac{i\hbar}{2\tau_L} - \varepsilon_k)^{-1}. \tag{5.52}$$

τ_L läßt sich verstehen als endliche Lebensdauer der Elektronen im Eigenzustand $|k\rangle$, die abhängig ist von der Zustandsdichte ρ_0 , der Störstellenkonzentration N_S/V und der Stärke des Störpotentials u .

Eine mögliche Verbesserung dieser Näherung wäre die *selbstkonsistente Bornsche Näherung*

$$\Sigma_k(z) = \frac{N_S}{\text{Vol}} \left(u + u^2 \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{k_1} \frac{\hbar}{\hbar z - \Sigma_{k_1}(z) - \varepsilon_{k_1}} \right), \tag{5.53}$$

wie sie in Abbildung 5.15 dargestellt ist. Es handelt sich dabei um eine nicht-lineare Gleichung für $\Sigma_k(z)$.

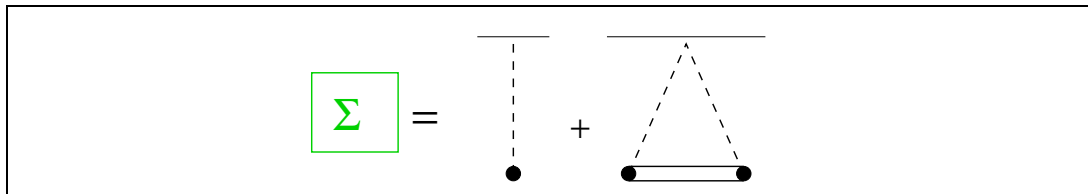


Abb. 5.15 Die selbstkonsistente Bornsche Näherung

Eine andere mögliche Verbesserung ließe sich durch Mitnahme der Vielfachstreuungsterme erreichen. Dies ließe auf

$$\Sigma_k(z) = \frac{N_S u}{\text{Vol}} \left(\hbar - \frac{u}{\text{Vol}} \sum_k G_k^0(z) \right)^{-1} \tag{5.54}$$

hinaus. Diese Näherung wird *T-Matrix-Approximation* genannt. Entsprechend gibt es auch ein konsistentes Analogon dazu. Nicht enthalten sind jedoch in allen diesen Näherungen Graphen, in denen sich die gestrichelten Linien überkreuzen, wie in Abbildung 5.16 dargestellt.

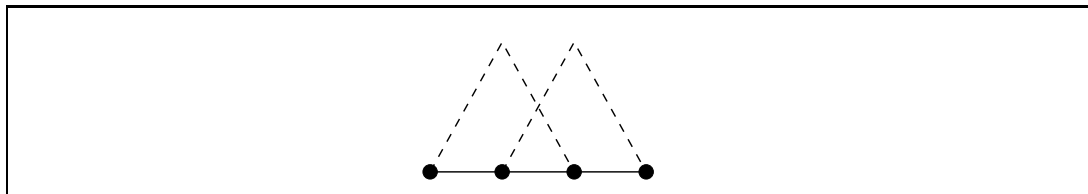


Abb. 5.16 Graph mit überkreuzten Potentiallinien

6. Thermodynamische Störungsrechnung: Vielteilchenprobleme

In diesem Kapitel geht es nicht mehr um das Teilchen, welches von einem äußeren Potential gestört wird, sondern um ein System von Teilchen, die einer Wechselwirkung unterliegen, in die jeweils zwei Teilchen einbezogen sind. Das Problem wird beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \sum_{k,k'} h_{kk'} a_k^\dagger a_{k'} + \frac{1}{2} \sum_{k_1,k_2,k'_1,k'_2} u_{k_1 k_2 k'_2 k'_1} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k'_2} a_{k'_1}. \quad (6.1)$$

\hat{H}_1 wird hier durch zwei Erzeuger und zwei Vernichter beschrieben. Diese Wechselwirkung stellen wir durch den in Abbildung 6.1 gegebenen Graphen dar, welches zusammen mit dem Erzeuger bei τ' und dem Vernichter bei τ die Nenner- und Zählergraphen der Störungsreihe aufbaut.

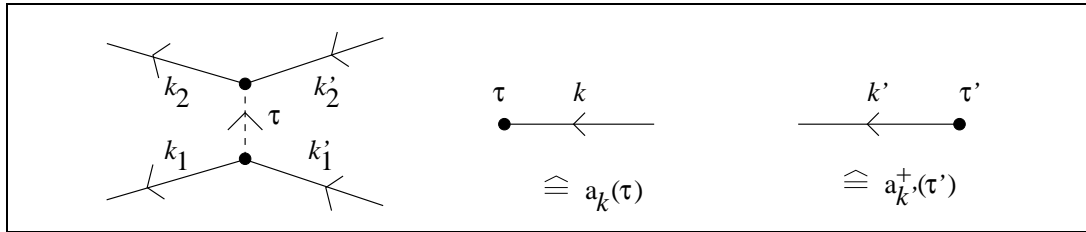


Abb. 6.1 Zweiteilchenwechselwirkung

Aus der Schreibweise

$$(a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k'_2} a_{k'_1})(\tau) = \lim_{\delta\tau \rightarrow 0} a_{k_1}^\dagger(\tau + 3\delta\tau) a_{k_2}^\dagger(\tau + 2\delta\tau) a_{k'_2}(\tau + \delta\tau) a_{k'_1}(\tau) \quad (6.2)$$

ergibt sich folgende „zeitliche“ Reihenfolge, die im Graphen durch Pfeile und die Bezeichnung der Linien angedeutet ist: Ein Teilchen mit Wellenzahl k'_1 läuft in den Graphen ein und wird vernichtet. Die entstehende Wechselwirkungslinie (deren Länge quasi durch $\delta\tau$ festgelegt wird) trifft ein weiteres Teilchen mit Wellenzahl k'_2 , welches ebenfalls vernichtet wird. An seiner Stelle entsteht ein Teilchen mit Wellenzahl k_2 , das aus dem Graphen ausläuft. Die Wechselwirkung fällt nun im letzten Schritt gewissermaßen auf das erste Teilchen zurück und erzeugt statt ihm ein Teilchen mit der Wellenzahl k_1 , das nun auch den Graphen verläßt.

Gesucht ist die Einteilchengreensfunktion $\mathcal{G}_{kk'}(\tau, \tau')$. Weiterhin gültig ist die Entwicklungsformel (5.12) sowie (5.10) und (5.13), wobei der Nenner nun Reihenglieder der Form

$$-\frac{(-1)^n}{n!} \langle T_s((a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k'_2} a_{k'_1})(\tau_1) \dots (a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k'_2} a_{k'_1})(\tau_n)) \rangle_{H_0} \quad (6.3)$$

und der Zähler solche der Form

$$\frac{(-1)^n}{n!} \langle T_s((a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k'_2} a_{k'_1})(\tau_1) \dots (a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k'_2} a_{k'_1})(\tau_n) a_k(\tau) a_{k'}^\dagger(\tau')) \rangle_{H_0} \quad (6.4)$$

enthält.

6.1 Graphische Behandlung

Der Nennersummand ist ein $2n$ -Teilchen-Propagator, der Zähler ein $(2n + 1)$ -Teilchen-Propagator. Wir können auf sie das Wickste Theorem anwenden, da \hat{H}_0 ein Einteilchenpropagator ist. Das ergibt $(2n)!$ bzw. $(2n + 1)!$ Summanden der Störungsreihe. Wir wollen sie gleich graphisch behandeln.

Nennergraphen:

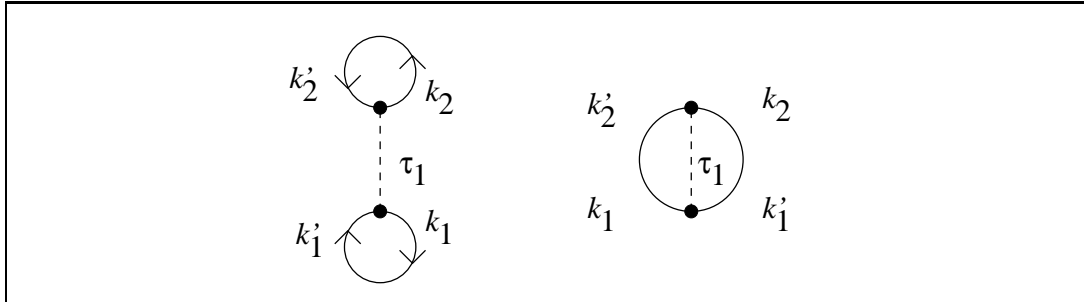


Abb. 6.2 Nennergraphen für $n = 1$

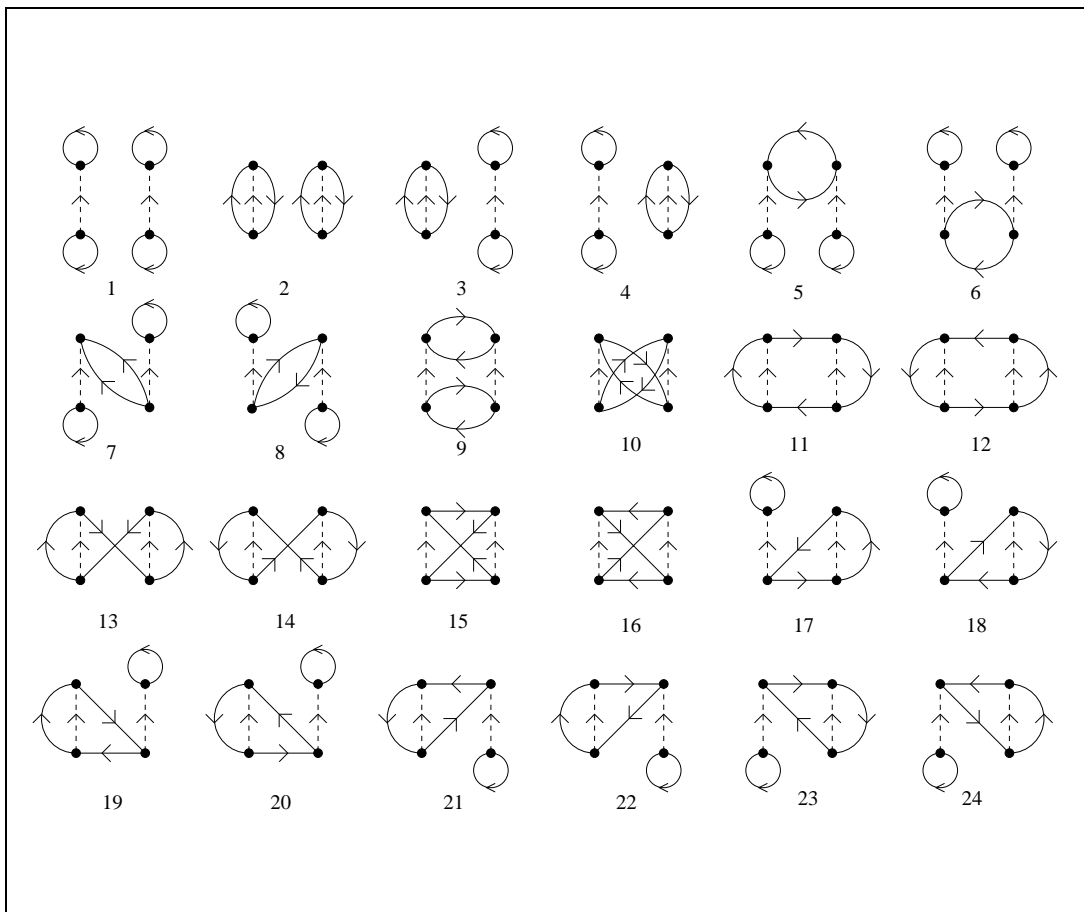


Abb. 6.3 Nennergraphen für $n = 2$

Sehen wir von den Nummern und Pfeilen an den Wechselwirkungslinien ab, so gibt es für $n = 2$ acht *topologisch verschiedene Grundtypen* von Graphen, die

in Abbildung 6.4 noch einmal zusammengestellt sind.

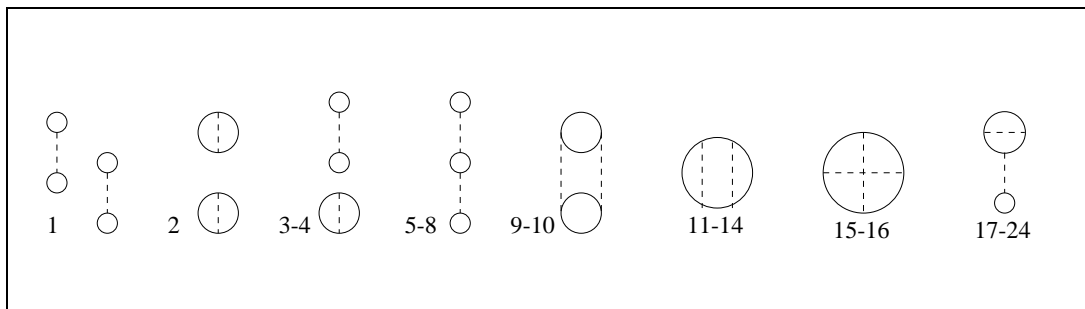


Abb. 6.4 Die topologisch verschiedenen Grundtypen von Nennergraphen für $n = 2$

Zählergraphen:

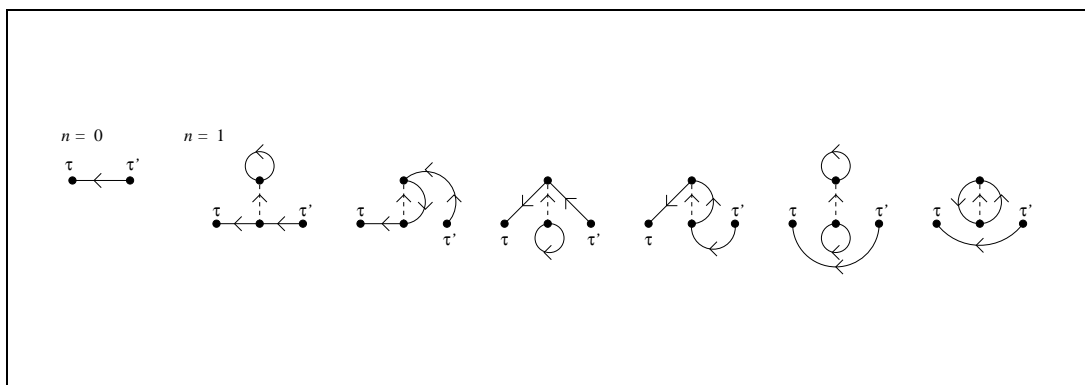


Abb. 6.5 Zählergraphen für $n = 0$ und $n = 1$

Nach Streckung der verbundenen Teilchenlinie erhalten wir die in Abbildung 6.6 gezeigten Graphen. Wir erkennen, daß ein Teil der Graphen einen unverbundenen Anteil enthält.

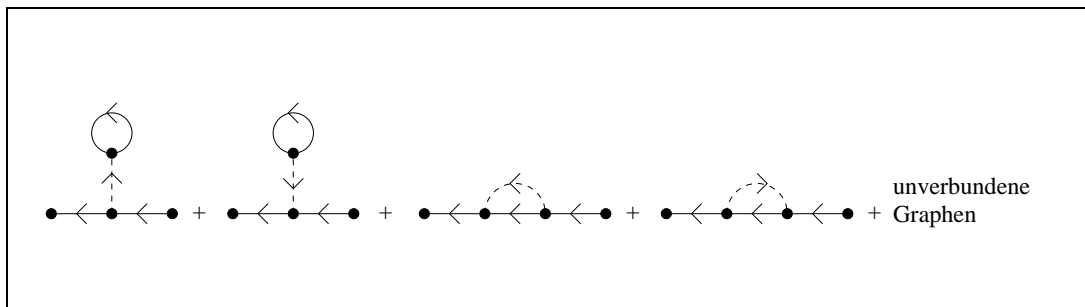


Abb. 6.6 gestreckte Zählergraphen für $n = 1$

Zu bemerken ist noch, daß die Wechselwirkung, die durch die gestrichelte Linie angedeutet wird, trotz deren endlicher Länge instantan ist. Eine Wechselwirkung mit endlicher Ausbreitungsgeschwindigkeit finden wir in einem Modell mit Wechselwirkungsteilchen, die ausgetauscht werden. Ein Beispiel ist die elektromagnetische Wechselwirkung über ein Photon oder die in Kapitel 7 behandelte Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

6.2 Regeln für numerierte Graphen

Wie im letzten Kapitel, so können wir auch hier Regeln aufstellen, um aus den Graphen die Beiträge zur Greensfunktion bestimmen zu können. Es gilt:

1. Jede Teilchenlinie zwischen Vertizes τ_i und τ_j verschiedener Wechselwirkungslinien entspricht einem freien Einteilchenpropagator

$$\tau_j \bullet \xleftarrow{k} \tau_i = \mathcal{G}_k^0(\tau_j, \tau_i), \tag{6.5}$$

jede Teilchenlinie zwischen Vertizes τ_i derselben Wechselwirkungslinie entspricht einem freien gleichzeitigen Einteilchenpropagator

$$\tau_i \bullet \xleftarrow{\text{---}} \tau_i = \mathcal{G}_k^0(\tau_i, \tau_i + \delta\tau). \tag{6.6}$$

2. Jede Wechselwirkungslinie τ_i entspricht einem Faktor

$$\bullet \text{---} \tau_i \text{---} \bullet = -\frac{1}{2} v_{k_1 i k_2 i k'_2 i k'_1 i} \tag{6.7}$$

Über alle inneren Quantenzahlen k ist zu summieren, über die inneren Zeiten τ_i ist zu integrieren.

3. Für einen geschlossenen Linienzug erhalten wir einen Faktor $(-s)$.
4. Ein numerierter Graph n -ter Ordnung hat den Vorfaktor $1/n!$.

6.3 Das Theorem verbundener Graphen

Erneut lassen wir die Angaben τ_i fort, die sich jetzt jedoch an den Wechselwirkungslinien befinden. Das hat zur Konsequenz, daß wir auf die Richtung des Pfeiles achten müssen, der an der Wechselwirkungslinie steht. So gilt die in Abbildung 6.7 verbildlichte Beziehung.

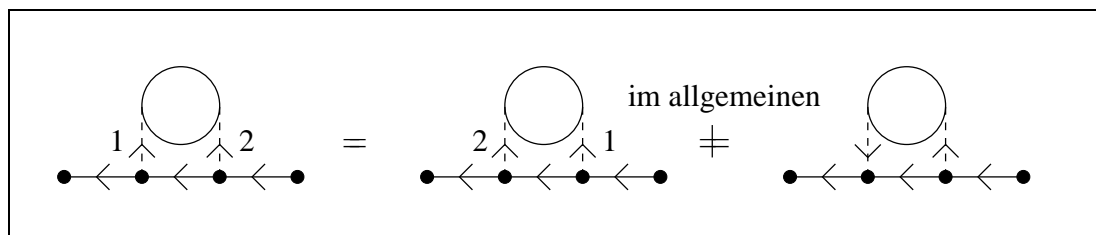


Abb. 6.7 Übergang zu unnummerierten Graphen

Zu beachten ist beim Zusammenfassen jedoch, daß einige Graphen tatsächlich nur einmal vorkommen, wie der rechts in Abbildung 6.7 gezeigte.

Die Zahl der Permutationen innerer Indizes τ_i , die den Graphen in eine topologisch äquivalente Form überführen, wird erneut als Symmetriezahl S bezeichnet. Dies liefert erneut eine modifizierte Form der vierten Regel:

- 4'. Ein unnumerierter Graph hat den Vorfaktor $1/S$.

Aus der Gesamtsumme der unnummerierten Zählergraphen können wir wie im letzten Kapitel die Summe der Nennergraphen als ihren unverbundenen Anteil ausklammern und gelangen so erneut zum

Theorem verbundener Graphen (Linked-Graph-Theorem):
 Die Einteilchengreensfunktion ist die Summe aller verbundenen und nicht-nummerierten Graphen $G_{kk'}(\tau, \tau')$, wie in Abbildung 6.8 gezeigt.

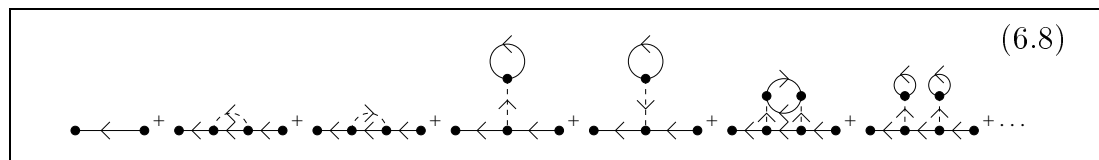


Abb. 6.8 Einteilchengreensfunktion

6.4 Symmetrien der Wechselwirkung

Durch Ausnutzen der Symmetrien der Wechselwirkung erhalten wir Vereinfachungen der Graphen. So sorgt die Symmetrie

$$v_{k_1 k_2 k'_2 k'_1} = v_{k_2 k_1 k'_1 k'_2} \tag{6.9}$$

für den Wegfall der Pfeile für die Wechselwirkung und damit zu einem Faktor 2, der den Faktor 1/2 in der ersten Graphenregel aufhebt.

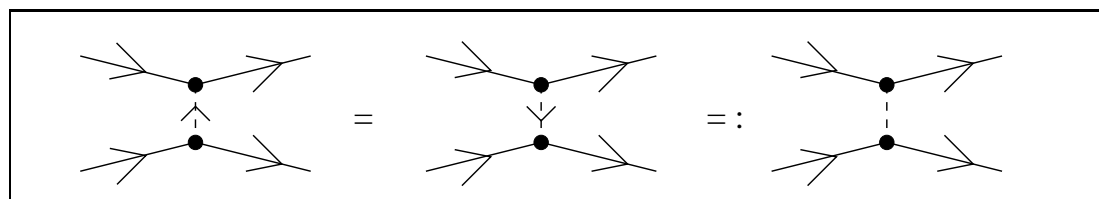


Abb. 6.9 Vereinfachung für Gleichung (6.9)

In einigen wenigen Fällen, insbesondere in Spinproblemen, tritt zusätzlich die Symmetrie

$$v_{k_1 k_2 k'_2 k'_1} = -s v_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} \tag{6.10}$$

auf. Dann wird die Wechselwirkungslinie, die sowohl vertikal als auch horizontal verlaufen kann, durch ein Quadrat ersetzt, wie in Abbildung 6.10 gezeigt.

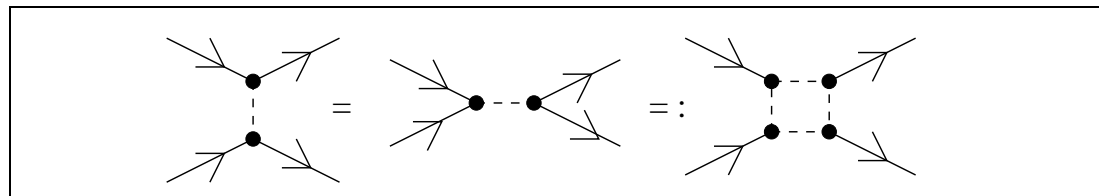


Abb. 6.10 Vereinfachung für Gleichungen (6.9) und (6.10)

Ein Beispiel für eine Störungsreihe mit dieser Wechselwirkungssymmetrie ist in Abbildung 6.11 wiedergegeben.

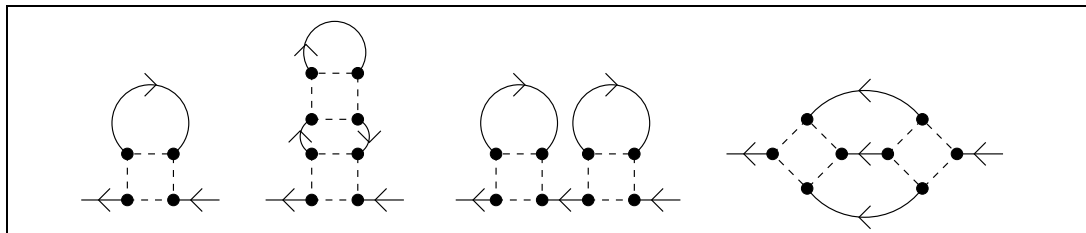


Abb. 6.11 Beispiel für eine Störungsreihe

6.5 Die fouriertransformierte Form

Für den Fall der Symmetrie aus Gleichung (6.9) wollen wir bezüglich des Parameters τ fouriertransformieren. Die Transformation können wir aus den Gleichungen (5.32) und (5.33) übernehmen. So ergibt sich für den Graphen in Abbildung 6.1 die τ -Integration

$$\int_0^{\beta\hbar} \mathcal{G}_{k_1}^0(\tau_1 - \tau) \mathcal{G}_{k_2}^0(\tau_2 - \tau) \mathcal{G}_{k'_2}^0(\tau - \tau'_2) \mathcal{G}_{k'_1}^0(\tau - \tau'_1) d\tau = \tag{6.11}$$

$$= \frac{1}{(\beta\hbar)^4} \sum_{\{n\}} G_{k_1}^0(i\omega_1) G_{k_2}^0(i\omega_2) G_{k'_2}^0(i\omega'_2) G_{k'_1}^0(i\omega'_1) \cdot$$

$$\cdot \exp(-i(\omega_1\tau_1 + \omega_2\tau_2 - \omega'_2\tau'_2 - \omega'_1\tau'_1)) \cdot$$

$$\cdot \int_0^{\beta\hbar} \exp(i(\omega_1 + \omega_2 - \omega'_2 - \omega'_1)\tau) d\tau,$$

wobei τ_1, τ_2, τ'_1 und τ'_2 weiter außen liegende Vertizes als Abschluß der jeweiligen Linien sind. Wir konzentrieren uns hier zunächst nur auf das Integral. Für die Matsubara-Frequenzen gilt

$$\omega_1 + \omega_2 - \omega'_2 - \omega'_1 = \frac{\pi}{\beta\hbar} (2n_1 + 1 + 2n_2 + 1 - 2n'_2 - 1 - 2n'_1 - 1) = \frac{2\pi}{\beta\hbar} (n_1 + n_2 - n'_2 - n'_1). \tag{6.12}$$

Damit verschwindet der Exponent des Integranden nur für den Spezialfall $n_1 + n_2 = n'_1 + n'_2$, also $\omega_1 + \omega_2 = \omega'_1 + \omega'_2$. In diesem Fall liefert das Integral einen Beitrag $\beta\hbar$. Die Integration über τ ist also ersetzt durch eine Summation über die Matsubarafrequenzen, wobei an jeder Wechselwirkungslinie Frequenzerhaltung gilt.

Wie verhält sich das jedoch für die anderen Quantenzahlen wie Wellenvektor \vec{k} und Spin σ ? Wir betrachten das Störungsproblem, das durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_{k,\sigma} a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int \int \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) d^3r' d^3r \tag{6.13}$$

mit

$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\text{Vol}}} \sum_k a_{k,\sigma} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (6.14)$$

$$v(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_q \tilde{v}(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (6.15)$$

gegeben ist. Es ergibt sich

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{q,k_1,k_2,k'_2,k'_1} \tilde{v}(\vec{q}) a_{k_1,\sigma}^\dagger a_{k_2,\sigma'}^\dagger a_{k'_2,\sigma'} a_{k'_1,\sigma} \delta_{k_1,k'_1+q} \delta_{k_2,k'_2+q}. \quad (6.16)$$

Beschriften wir die Linien mit den Wellenzahlen und Spins, so stellen wir fest, daß die Impulse an jedem Vertex erhalten sind und die Spins an den Teilchenlinien verbleiben.

6.6 Graphenregeln im Fourierbild

Für die fouriertransformierte Form ergeben sich folgende Regeln:

1. Teilchenlinien behalten ihre Quantenzahlen bis zum nächsten Vertex, sind *diagonal*. Der Spin verbleibt auch nach dem Vertex an der Teilchenlinie. Für eine Teilchenlinie mit Quantenzahlen ω , \vec{k} und σ schreiben wir einen Faktor

$$\frac{\hbar \delta_{\sigma\sigma'}}{i\hbar\omega + \varepsilon_{k,\sigma}} \quad (6.17)$$

Eine Teilchenlinie, die von einer Wechselwirkungslinie überbrückt wird, erhält zusätzlich einen Faktor $\exp(i\omega\delta)$.

2. Jeder Vertex erhält einen Faktor

$$-\frac{\tilde{v}(\vec{q})}{\text{Vol}}. \quad (6.18)$$

Für die Coulomb-Wechselwirkung ist dies $-e^2/\varepsilon_0 \vec{q}^2 \text{Vol}$. An jedem Vertex gilt Wellenzahl- und Frequenzerhaltung. Wir summieren ferner über alle inneren Quantenzahlen, für jede Summe über die Frequenzen erhalten wir zusätzlich einen Faktor $1/\beta\hbar$.

3. Für jeden geschlossenen Linienzug erhalten wir einen Faktor $(-s)$.
4. Der Graph hat den Vorfaktor $1/S$, wobei die Symmetriezahl S die Zahl der Permutationen der Vertices angibt, die den Graphen in eine topologisch äquivalente Form überführen.

6.7 Von den Kumulanten zu verbundenen Graphen

Die Einführung der Funktionalableitung in den bestehenden Formalismus verleiht uns in noch stärkerem Maße, mit den Graphen anstelle der entsprechenden Greensfunktionsanteile regelrecht zu rechnen. Diese Funktionalableitung wollen wir in einem ersten Schritt motivieren. Dazu betrachten wir die Einteilchengreensfunktion in Subarev-Notation für den Fall eines diagonalen Hamiltonoperators \hat{H}_0 ,

$$\langle\langle a_k, a_k^\dagger \rangle\rangle = \frac{\hbar}{\hbar z - \varepsilon_k} \quad \text{für} \quad \hat{H}_0 = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k. \quad (6.19)$$

Wir erkennen hieraus die Regel

$$\langle\langle a_k, a_k^\dagger \rangle\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{(\hbar z - \varepsilon_k)^2} = -\hbar \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \langle\langle a_k, a_k^\dagger \rangle\rangle. \quad (6.20)$$

Diese Regel können wir nun auch auf die fouriertransformierte Form

$$\mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) = -\langle a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) \rangle_{H_0} \quad (6.21)$$

übertragen. Es ist $\hat{H}_0 = \hat{H}_0(\tau_3)$ und damit

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar}{\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_l} \text{Spur} (a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) e^{-\beta \hat{H}_0}) = \\ & = \frac{1}{\mathcal{Z}} (\tau_1 - \tau_2) \delta_{kl} \text{Spur} (a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) e^{-\beta \hat{H}_0}) + \\ & \quad + \frac{\beta \hbar}{\mathcal{Z}} \text{Spur} (a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) a_l^\dagger(\tau_3) a_l(\tau_3) e^{-\beta \hat{H}_0}) = \\ & = (\tau_1 - \tau_2) \delta_{kl} \langle a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) \rangle_{H_0} + \\ & \quad + \beta \hbar \langle a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) a_l^\dagger(\tau_3) a_l(\tau_3) \rangle_{H_0} = \\ & = (\tau_1 - \tau_2) \delta_{kl} \langle a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) \rangle_{H_0} + \\ & \quad - s \beta \hbar \langle a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) \rangle_{H_0} \langle a_l(\tau_3) a_l^\dagger(\tau_3) \rangle_{H_0} + \\ & \quad + \beta \hbar \langle a_k(\tau_1) a_l^\dagger(\tau_3) \rangle_{H_0} \langle a_l(\tau_3) a_k^\dagger(\tau_2) \rangle_{H_0} = \\ & = (\tau_1 - \tau_2) \delta_{kl} \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) + \\ & \quad - s \beta \hbar \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) \mathcal{G}_l^0(\tau_3, \tau_3) + \beta \hbar \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_3) \mathcal{G}_k^0(\tau_3, \tau_2) \delta_{kl} \end{aligned} \quad (6.22)$$

und

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar}{\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_l} \text{Spur} (e^{-\beta \hat{H}_0}) = \frac{\beta \hbar}{\mathcal{Z}} \text{Spur} (a_l^\dagger(\tau_3) a_l(\tau_3) e^{-\beta \hat{H}_0}) = \\ & = -s \beta \hbar \langle a_l(\tau_3) a_l^\dagger(\tau_3) \rangle_{H_0} = -s \beta \hbar \mathcal{G}_l^0(\tau_3, \tau_3), \end{aligned} \quad (6.23)$$

über die Quotientenregel also

$$\begin{aligned}
-\hbar \frac{\partial}{\partial \varepsilon_l} \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) &= (\tau_1 - \tau_2) \delta_{kl} \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) - s\beta\hbar \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) \mathcal{G}_l^0(\tau_3, \tau_3) + \\
&+ \beta\hbar \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_3) \mathcal{G}_k^0(\tau_3, \tau_2) \delta_{kl} + s\beta\hbar \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) \mathcal{G}_l^0(\tau_3, \tau_3) = \\
&= (\tau_1 - \tau_2) \delta_{kl} \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) + \beta\hbar \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_3) \mathcal{G}_k^0(\tau_3, \tau_2) \delta_{kl}. \tag{6.24}
\end{aligned}$$

Wir erhalten für $l = k$

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) = (\tau_1 - \tau_2) \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_2) + \beta\hbar \mathcal{G}_k^0(\tau_1, \tau_3) \mathcal{G}_k^0(\tau_3, \tau_2). \tag{6.25}$$

Die Ableitung einer Einteilchengreensfunktion nach dem Energieeigenwert ε_k führt somit graphisch neben einer Korrektur zur Ausgangsgreensfunktion zum Einfügen eines Punktes τ_3 in die Linie, wie es in Abbildung 6.12 zu sehen ist. Die Ableitung nach ε_l für $l \neq k$ verschwindet demgegenüber völlig. Ist ein geschlossener Linienzug gegeben, so fällt dieser Korrekturterm fort, da sich die „Zeit“-differenzen zu Null addieren.

$$-\hbar \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \left(\begin{array}{c} k \\ \bullet \leftarrow \bullet \\ \tau_1 \quad \tau_2 \end{array} \right) = (\tau_1 - \tau_2) \begin{array}{c} k \\ \bullet \leftarrow \bullet \\ \tau_1 \quad \tau_2 \end{array} + \beta\hbar \begin{array}{c} \bullet \leftarrow \bullet \leftarrow \bullet \\ \tau_1 \quad \tau_3 \quad \tau_2 \end{array}$$

Abb. 6.12 Ableitung einer Einteilchengreensfunktion nach ε_k

Nun betrachten wir nicht länger die normale Ableitung nach ε_k , sondern eine Funktionalableitung. Wir variieren dazu \hat{H}_0 um einen Term, der Erzeuger und Vernichter an zwei verschiedenen Vertizes τ und τ' miteinander verbindet,

$$\begin{aligned}
\delta \hat{H}_0 &=: \sum_{k,k'} \delta \hat{H}_{kk'} = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_{k,k'} \eta_{kk'} \delta \langle a_k a_{k'}^\dagger \rangle a_k^\dagger a_{k'} = \\
&= \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_{k,k'} \eta_{kk'} \delta \langle a_k(\tau') a_{k'}^\dagger(\tau) \rangle a_k^\dagger(\tau') a_{k'}(\tau). \tag{6.26}
\end{aligned}$$

Um die Variation des Erwartungswertes bestimmen zu können, berechnen wir

$$[\hat{H}_0, a_k^\dagger(\tau') a_{k'}^\dagger(\tau)]_- = (\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) a_k^\dagger(\tau') a_{k'}(\tau), \tag{6.27}$$

damit ist dann

$$\begin{aligned}
(\hat{H}_0 + \delta \hat{H}_0)^n &= (\hat{H}_0 + \sum_{k,k'} \delta \hat{H}_{kk'})^n \approx \hat{H}_0^n + \sum_{m=1}^n \hat{H}_0^{n-m} \left(\sum_{k,k'} \delta \hat{H}_{kk'} \right) \hat{H}_0^{m-1} = \\
&= \hat{H}_0^n + \sum_{k,k'} \sum_{m=1}^n \hat{H}_0^{n-m} \delta \hat{H}_{kk'} \hat{H}_0^{m-1} = \dots = \\
&= \hat{H}_0^n + \sum_{k,k'} \delta \hat{H}_{kk'} \sum_{m=1}^n \binom{n}{m-1} (\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})^{n-m} \hat{H}_0^{m-1} \tag{6.28}
\end{aligned}$$

und folglich

$$\begin{aligned}
 e^{-\beta(\widehat{H}_0 + \delta\widehat{H}_0)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\beta(\widehat{H}_0 + \delta\widehat{H}_0))^n = \\
 &\approx \left(1 + \sum_{k,k'} \frac{\delta\widehat{H}_{kk'}}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}} (1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})})\right) e^{-\beta\widehat{H}_0}. \quad (6.29)
 \end{aligned}$$

Für

$$\eta_{kk'} = \frac{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})}{1 - \exp(-\beta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}))} \quad (6.30)$$

erhalten wir schließlich

$$e^{-\beta(\widehat{H}_0 + \delta\widehat{H}_0)} \approx \left(1 + \sum_{k,k'} \langle a_k(\tau') a_{k'}^\dagger(\tau) \rangle a_k^\dagger(\tau') a_{k'}(\tau)\right) e^{-\beta\widehat{H}_0}. \quad (6.31)$$

Damit ergibt sich, wenn wir die Erwartungswerte als Erwartungswerte bezüglich $\widehat{H}_0 + \delta\widehat{H}_0$ auffassen und sie im Grenzfall gegen Erwartungswerte zu \widehat{H}_0 laufen lassen, für $\tau_2 > \tau_1$ die Variation

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta\mathcal{G}_{ll'}^0(\tau_2, \tau_1)}{\delta\mathcal{G}_{kk'}^0(\tau', \tau)} &= \frac{\delta \langle a_l(\tau_2) a_{l'}^\dagger(\tau_1) \rangle_{H_0}}{\delta \langle a_k(\tau') a_{k'}^\dagger(\tau) \rangle_{H_0}} = \\
 &= \langle a_l(\tau_2) a_{l'}^\dagger(\tau_1) a_k^\dagger(\tau') a_{k'}(\tau) \rangle_{H_0} + \\
 &\quad - \langle a_l(\tau_2) a_{l'}^\dagger(\tau_1) \rangle_{H_0} \langle a_k^\dagger(\tau') a_{k'}(\tau) \rangle_{H_0} = \\
 &= \langle a_l(\tau_2) a_k^\dagger(\tau') \rangle_{H_0} \langle a_{k'}(\tau) a_{l'}^\dagger(\tau_1) \rangle_{H_0} = \\
 &= \delta_{kl} \delta_{k'l'} \mathcal{G}_k^0(\tau_2, \tau') \mathcal{G}_{k'}^0(\tau, \tau_1). \quad (6.32)
 \end{aligned}$$

Die Linie eines Einteilchenpropagators wird durch die Funktionalableitung also aufgespalten in zwei einzelne Propagatorlinien, die neue Endpunkte τ und τ' besitzen. Diese Funktionalableitung ist in Abbildung 6.13 symbolisch dargestellt.

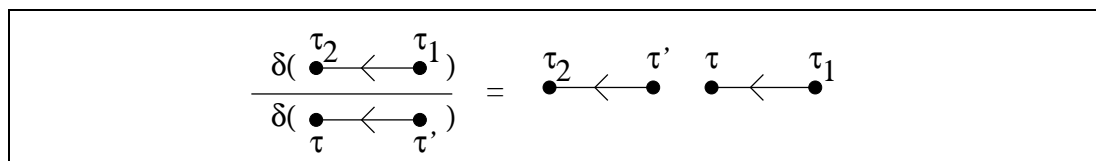


Abb. 6.13 Funktionalableitung eines Propagators

Mit Hilfe dieses Formalismus kann so eine geschlossene Linie in eine einlaufende und eine auslaufende Linie zerteilt werden. Der Faktor $(-s)$ verschwindet wieder, da in diesem Fall die „Startzeit“ $\tau_1 = \tau_2 + \delta\tau$ nicht mehr kleiner, sondern größer als die „Zielzeit“ τ_2 ist. Die Kumulantengraphen werden durch Ableitung in verbundene Graphen verwandelt, wie es Abbildung 6.14 an einigen Beispielen zeigt.

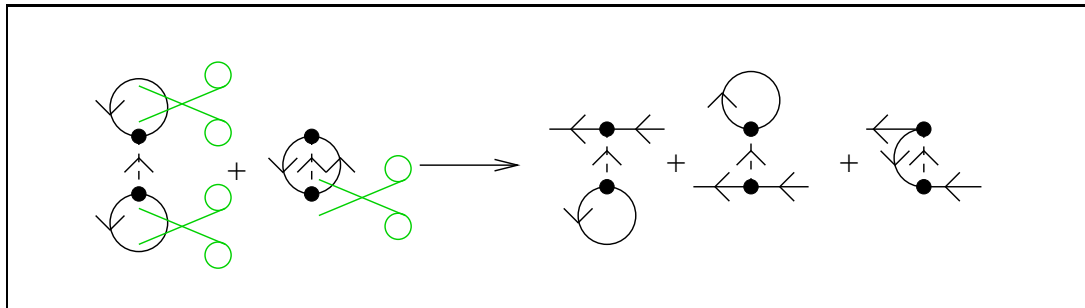


Abb. 6.14 Funktionalableitung der Kumulanten

Zweiteilchengraphen erhalten wir durch nochmaliges Ableiten oder „Aufschneiden“ der Teilchenlinien.

6.8 Skelettgraphen und effektive Wechselwirkungslinien

Ähnlich wie im Fall der konfigurationsgemittelten Greensfunktion können wir auch im Fall des wechselwirkenden Vielteilchensystems eine *Selbstenergie* konstruieren, indem wir von allen irreduziblen verbundenen Graphen die äußeren Linien entfernen. Wiederum bezeichnen wir hier als *reduzible Graphen* solche, die durch Zerschneiden einer Teilchenlinie in zwei Graphen zerlegt werden können. Mit einer so definierten Selbstenergie können wir eine implizite Gleichung für die exakte Greensfunktion aufstellen, die in Abbildung 6.15 graphisch dargestellt ist. Diese Gleichung heißt *Dyson-Gleichung* und lautet

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}^0 + \frac{1}{\hbar} \mathcal{G}^0 \Sigma \mathcal{G}. \tag{6.33}$$

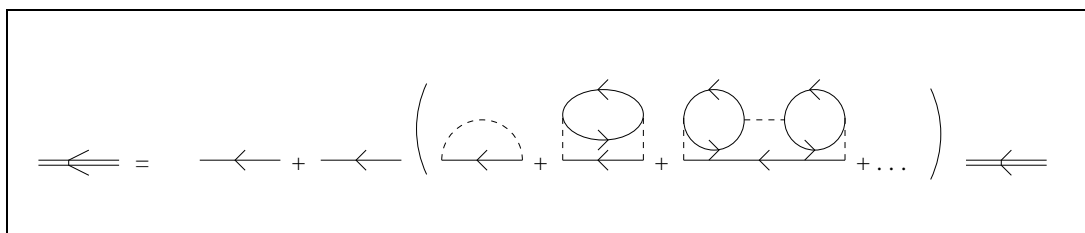


Abb. 6.15 Implizite Konstruktion der exakten Greensfunktion über die Selbstenergie

Ist die Selbstenergie in einem hier nicht bestimmten Maße klein, so können wir diese Dyson-Gleichung in eine explizite Gleichung verwandeln,

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}^0 (1 - \frac{1}{\hbar} \mathcal{G}^0 \Sigma)^{-1} = \hbar (\hbar (\mathcal{G}^0)^{-1} - \Sigma)^{-1}. \tag{6.34}$$

Wir erhalten im konkreten Fall

$$\mathcal{G}(\vec{k}, \omega_n) = \frac{\hbar}{i\hbar\omega_n - \varepsilon_k - \Sigma(\vec{k}, \omega_n)}, \tag{6.35}$$

also eine Energiekorrektur (durch die Selbstwechselwirkung der Elektronenlinie, wie der Name es ausdrückt) bzw. im Falle einer imaginären Selbstenergie eine Dämpfung.

Skelettgraphen entstehen, wenn wir die inneren Elektronenlinien der Selbstennergiegraphen durch exakte Linien ersetzen.

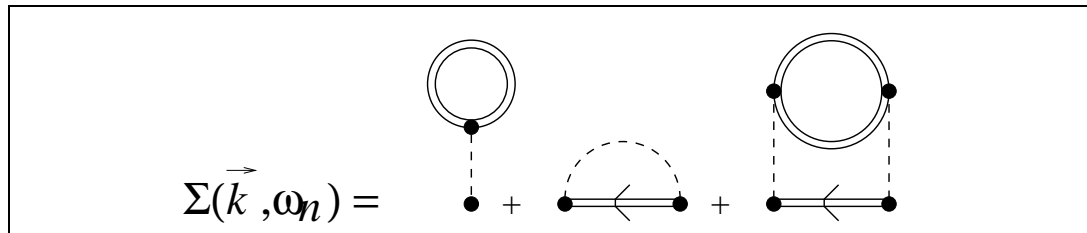


Abb. 6.16 Skelettgraphen

Schließlich lassen sich auch die (Teil-)Graphen mit äußeren Wechselwirkungslinien zusammenfassend durch eine effektive Wechselwirkungslinie ausdrücken, und es existiert ein Analogon zur Dyson-Gleichung,

$$v_{\text{eff}}(\vec{k}, \omega_n) = v(\vec{k}) + v(\vec{k})\Lambda(\vec{k}, \omega_n)v_{\text{eff}}(\vec{k}, \omega_n). \tag{6.36}$$

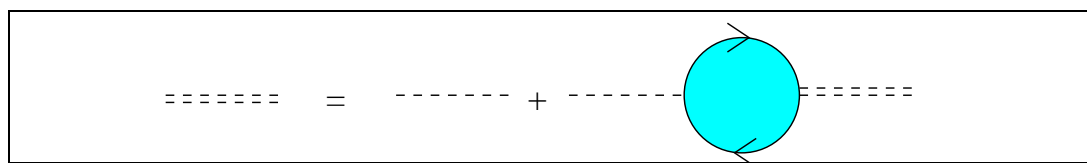


Abb. 6.17 Konstruktion der effektiven Wechselwirkungslinie

Das Gegenstück zur Selbstenergie, der *Polarisationspropagator* Λ , enthält zwei gegenläufige Elektronenlinien und alle Einschlüsse, d.h. alle inneren Wechselwirkungslinien und beschreibt damit eine dynamische Abschirmung der Wechselwirkung. Ist dieser Term klein, so können wir erneut in eine explizite Form für die effektive Wechselwirkung auflösen. Es ist dann

$$v_{\text{eff}}(\vec{k}, \omega_n) = \frac{v(\vec{k})}{1 - v(\vec{k})\Lambda(\vec{k}, \omega_n)} = \frac{v(\vec{k})}{\epsilon(\vec{k}, \omega_n)}. \tag{6.37}$$

$\epsilon(\vec{k}, \omega_n)$ ist die *Dielektrizitätsfunktion*.

6.9 Näherungen und Rechnungen

Die Hartree-Fock-Näherung mit unterdrücktem Spin und unter Beschränkung auf Fermionen verzichtet bei der Berechnung der Skelettgraphen auf die dynamische Abschirmung. Dies führt dazu, daß die Selbstenergie nicht von den Matsubara-Frequenzen ω_n abhängt.

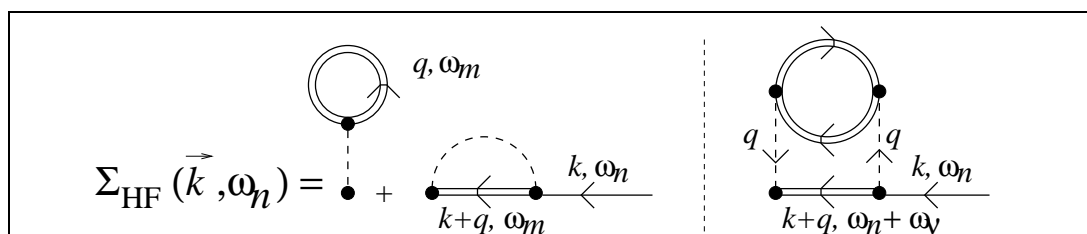


Abb. 6.18 Skelettgraphen in Hartree-Fock-Näherung und ein Ergänzungsterm

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{HF}}(\vec{k}, \omega_n) &= \frac{v(0)}{\text{Vol}} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{q,m} e^{i\omega_m\delta\tau} \mathcal{G}(\vec{q}, \omega_m) + \\ &\quad - \frac{1}{\text{Vol}} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{q,m} e^{i\omega_m\delta\tau} \mathcal{G}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_m) v(\vec{q}).\end{aligned}\quad (6.38)$$

Die erste triviale Summe über m ergibt die selbstkonsistent zu bestimmende Elektronendichte,

$$\frac{1}{\beta\hbar} \sum_m e^{i\omega_m\delta\tau} \mathcal{G}(\vec{q}, \omega_m) = \langle a_q^\dagger a_q \rangle, \quad (6.39)$$

in der zweiten ist lediglich \vec{q} durch $\vec{k} + \vec{q}$ zu ersetzen. Die Dyson-Gleichung hat dann die Form

$$i\hbar\omega_n \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle_{\text{HF}} = 1 + (\varepsilon_k + \frac{1}{\text{Vol}} \sum_q (v(\vec{0}) - v(\vec{q})) \langle a_q^\dagger a_q \rangle) \langle \langle a_k, a_k^\dagger \rangle \rangle_{\text{HF}}. \quad (6.40)$$

Wir können die Hartree-Fock-Näherung ergänzen durch den Term, der in Abbildung 6.18 rechts dargestellt ist. Es liefert ohne Selbstenergiekorrekturen des Polarisationspropagators einen Beitrag

$$\Sigma^{(2)}(\vec{k}, \omega_n) = -\frac{1}{\text{Vol}} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_{q,\nu} (v(\vec{q}))^2 \mathcal{G}^0(\vec{k} - \vec{q}, \omega_n - \omega_\nu) \Lambda^0(\vec{q}, \omega_\nu). \quad (6.41)$$

Dieser Graph ist wegen $(v(\vec{q}))^2 \sim q^{-4}$ divergent, ω_ν sind die *Bose-Matsubara-Frequenzen*. Für Λ^0 , die effektive Wechselwirkungslinie ohne Einschlüsse, erhalten wir

$$\begin{aligned}\Lambda^0(\vec{q}, \omega_\nu) &= \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{q'} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m \mathcal{G}^0(\vec{q} + \vec{q}', \omega_\nu + \omega_m) \mathcal{G}^0(\vec{q}', \omega_m) = \\ &= \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{q'} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m \frac{\hbar}{i\hbar(\omega_\nu + \omega_m) - \varepsilon_{q+q'}} \frac{\hbar}{i\hbar\omega_m - \varepsilon_{q'}} = \\ &= \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{q'} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m \left(\frac{\hbar e^{i\omega_m\delta\tau}}{i\hbar(\omega_\nu + \omega_m) - \varepsilon_{q+q'}} - \frac{\hbar e^{i\omega_m\delta\tau}}{i\hbar\omega_m - \varepsilon_{q'}} \right) \frac{\hbar}{i\hbar\omega_\nu - \varepsilon_{q+q'} + \varepsilon_{q'}} = \\ &= \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{q'} \frac{f(\varepsilon_{q+q'}) - f(\varepsilon_{q'})}{i\hbar\omega_\nu - \varepsilon_{q+q'} + \varepsilon_{q'}}.\end{aligned}\quad (6.42)$$

Die Exponentialfunktionen haben wir zwischenzeitig zur Konvergenz eingeführt. Wir erhalten so eine Näherung für die Dielektrizitätsfunktion ϵ_{RPA} , die sich für den gesamten Polarisationspropagator ergibt.

Die *Ringgraphen-Summation* schließlich ersetzt die Wechselwirkungslinie nicht nur durch den ersten Term, sondern durch die gesamte effektive Wechselwirkungslinie, wie es Abbildung 6.19 darstellt.

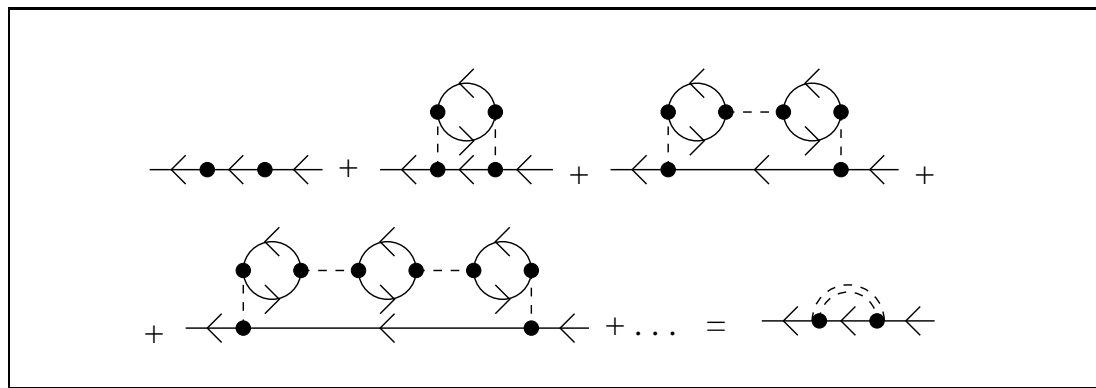


Abb. 6.19 Ringgraphen-Summation

Gell-Mann und Brückner erhielten damit die Formel

$$\Sigma_{\text{RPA}}(\vec{k}, \omega_n) = -\frac{1}{\text{Vol}} \sum_m e^{i\omega_m \delta\tau} \sum_q \mathcal{G}(\vec{k} + \vec{q}, \omega_m) \frac{v(\vec{q})}{\epsilon_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n - \omega_m)}. \quad (6.43)$$

Die Berechnung dieser Selbstenergie ist umfangreich. Das Ergebnis für die Grundzustandsenergie ist

$$\frac{E_0}{N} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} \left(\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + \frac{2}{\pi} (1 - \ln 2) \ln r_s - 0.094 + O(r_s \ln r_s) \right). \quad (6.44)$$

Dabei ist r_B der Bohrsche Radius und r_s der Entwicklungsparameter des Elektronengases,

$$\frac{4\pi}{3} r_s^3 = \frac{1}{n_0 r_B^3} \quad \text{mit } n_0 = \frac{N}{\text{Vol}}. \quad (6.45)$$

7. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Als ausführlicheres Beispiel für die vorgestellte Störungsentwicklung wollen wir die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Phononen behandeln. Phononen sind die quantisierten Gitterschwingungen in einem Kristall, der aus Ionen besteht.

7.1 Die Einteilchengreensfunktion „freier“ Phononen

Ausgangspunkt ist der Hamiltonoperator des Gitters,

$$\hat{H}_{\text{Ion}} = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2M} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \quad (7.1)$$

mit $\vec{x}_i = \vec{R}_i + \vec{u}_i$, wobei \vec{R}_i die Ruhelagen der Ionen bezeichnen. Entwickeln wir die potentielle Energie in die Auslenkungen u_i bis zur zweiten Ordnung, so

verschwindet der lineare Term dieser Entwicklung, und es ergibt sich

$$\begin{aligned} V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) &= V(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) + \sum_{i,j,\mu,\nu} \frac{\partial^2 V}{\partial x_{i\mu} \partial x_{j\nu}} \Big|_{\vec{R}_i} u_{i\mu} u_{j\nu} = \\ &=: V_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\mu,\nu} V_{ij}^{\mu\nu} u_{i\mu} u_{j\nu}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Wir quantisieren die Größen $u_{i\mu}$ und $p_{j\nu}$ mit $[u_{i\mu}, p_{j\nu}]_- = i\hbar \delta_{ij} \delta_{\mu\nu}$ und stellen für die *Auslenkungsgreensfunktion* $\langle\langle u_{i\mu}, u_{j\nu} \rangle\rangle$ die Bewegungsgleichung auf,

$$\hbar\omega \langle\langle u_{i\mu}, u_{j\nu} \rangle\rangle = \hbar \langle [u_{i\mu}, u_{j\nu}]_- \rangle + \langle\langle [u_{i\mu}, \hat{H}_{\text{Ion}}]_-, u_{j\nu} \rangle\rangle. \quad (7.3)$$

Es ist

$$[u_{i\mu}, \hat{H}_{\text{Ion}}]_- = [u_{i\mu}, \frac{p_{i\mu}^2}{2M}]_- = \frac{i\hbar}{M} p_{i\mu} \quad (7.4)$$

und damit

$$\hbar\omega \langle\langle u_{i\mu}, u_{j\nu} \rangle\rangle = \frac{i\hbar}{M} \langle\langle p_{i\mu}, u_{j\nu} \rangle\rangle, \quad (7.5)$$

entsprechend ergibt sich

$$\hbar\omega \langle\langle p_{i\mu}, u_{j\nu} \rangle\rangle = -i\hbar^2 \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} - i\hbar \sum_{l\rho} V_{il}^{\mu\rho} \langle\langle u_{l\rho}, u_{j\nu} \rangle\rangle. \quad (7.6)$$

Ineinander eingesetzt erhalten wir

$$\hbar^2 \omega^2 \langle\langle u_{i\mu}, u_{j\nu} \rangle\rangle = \frac{\hbar^3}{M} \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} + \frac{\hbar^2}{M} \sum_{l\rho} V_{il}^{\mu\rho} \langle\langle u_{l\rho}, u_{j\nu} \rangle\rangle. \quad (7.7)$$

Die Auslenkungsgreensfunktion, die diese Gleichung löst, muß die Form einer $3N \times 3N$ -Matrix besitzen. Nutzen wir jedoch die Translationsinvarianz des Gitters aus, so wird die Greensfunktion nur noch von der Differenz $\vec{R}_i - \vec{R}_j$ abhängen. Es bietet sich hier die Fouriertransformation

$$\begin{aligned} \langle\langle u_{i\mu}, u_{j\nu} \rangle\rangle &= \frac{1}{N} \sum_k \tilde{G}_k^{\mu\nu}(\omega) e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}, \\ V_{ij}^{\mu\nu} &= \frac{1}{N} \sum_k V_k^{\mu\nu} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \end{aligned} \quad (7.8)$$

an, welche die Gleichung in eine Gleichung für 3×3 -Matrizen verwandelt,

$$\hbar^2 \omega^2 \tilde{G}_k^{\mu\nu}(\omega) - \frac{\hbar^2}{M} \sum_{\rho} V_k^{\mu\rho} \tilde{G}_k^{\rho\nu}(\omega) = \frac{\hbar^3}{M} \delta_{\mu\nu}. \quad (7.9)$$

Die Matrix $V_{ij}^{\mu\nu}$ ist positiv definit, die Matrix $V_k^{\mu\nu} = V_{-k}^{\mu\nu}$ diagonalisierbar bezüglich der Indizes μ und ν , sie besitzt drei Eigenwerte $M\omega_{k\alpha}^2$. In diesem Eigensystem läßt sich die Matrixgleichung lösen, wir erhalten

$$\tilde{G}_k^{\mu\nu}(\omega) = \frac{\hbar}{M} \frac{\delta_{\mu\nu}}{\omega^2 - \omega_{k\mu}^2} \quad (7.10)$$

und

$$\langle\langle u_{i\mu}, u_{j\nu} \rangle\rangle = \delta_{\mu\nu} \frac{\hbar}{NM} \sum_k \frac{e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}}{\omega^2 - \omega_{k\mu}^2}. \quad (7.11)$$

Schließlich lassen sich die quantisierten Größen $u_{i\mu}$ und $p_{i\mu}$ in herkömmlicher Weise durch Erzeuger und Vernichter ausdrücken,

$$u_{i\mu} = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_k \frac{e^{i\vec{k}\vec{R}_i}}{\sqrt{\omega_{k\mu}}} (a_{k\mu} + a_{-k\mu}^\dagger), \quad (7.12)$$

$$p_{i\mu} = i\sqrt{\frac{\hbar M}{2N}} \sum_k \sqrt{\omega_{k\mu}} e^{i\vec{k}\vec{R}_i} (a_{k\mu}^\dagger - a_{-k\mu}). \quad (7.13)$$

Es folgt

$$\hat{H}_{\text{Ion}} = \sum_{k,\mu} \hbar\omega_{k\mu} (a_{k\mu}^\dagger a_{k\mu} + \frac{1}{2}) \quad \text{mit} \quad [a_{k\mu}, a_{k'\nu}^\dagger]_- = \delta_{kk'} \delta_{\mu\nu}, \quad (7.14)$$

die Einteilchengreensfunktion ist

$$\langle\langle a_{k\mu}, a_{k\mu}^\dagger \rangle\rangle = \frac{\hbar}{\hbar(\omega - \omega_{k\mu}) - i\varepsilon}. \quad (7.15)$$

7.2 Das Fröhlich-Modell der Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Der Hamiltonoperator des Gitters ist zu ergänzen durch die Anteile, die nur Elektronen beinhalten sowie durch die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Gitter. Das Fröhlich-Modell vernachlässigt die Wechselwirkung der Elektronen untereinander, wir erhalten den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_{\text{Ion}} + \hat{H}_{\text{Elektron}} + \hat{H}_{\text{Elektron-Ion}} = \\ &= \hat{H}_{\text{Ion}} + \int \hat{\psi}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \sum_{i=1}^N u(\vec{r} - \vec{x}_i) \right) \hat{\psi}(\vec{r}) d^3r. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Der potentielle Anteil kann um die Ruhelagen der Ionen entwickelt werden und ergibt

$$\sum_i u(\vec{r} - \vec{x}_i) = \sum_i u(\vec{r} - \vec{R}_i) - \sum_{i,\mu} \frac{\partial u(\vec{r} - \vec{R}_i)}{\partial r_\mu} u_{i\mu} + \dots \quad (7.17)$$

Wir können dies fouriertransformieren und erhalten

$$\sum_i u(\vec{r} - \vec{R}_i) = \sum_{i,q} u_q e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{R}_i)}, \quad (7.18)$$

$$\sum_{i,\mu} \frac{\partial u(\vec{r} - \vec{R}_i)}{\partial r_\mu} = \sum_{i,q,\mu} ik_\mu u_q e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{R}_i)}. \quad (7.19)$$

Mit

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_k c_k e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_k c_k^\dagger e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (7.20)$$

erhalten wir für das Integral über den linearen Entwicklungsterm

$$\begin{aligned} & - \int \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \sum_{i,\mu} \frac{\partial u(\vec{r} - \vec{R}_i)}{\partial r_\mu} u_{i\mu} \hat{\psi}(\vec{r}) d^3r = \\ & = - \int \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \sum_{i,q,\mu} iq_\mu u_q e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{R}_i)} u_{i\mu} \hat{\psi}(\vec{r}) d^3r = \\ & = - \sum_{i,k,k',q,\mu} iq_\mu u_q c_k^\dagger c_{k'} u_{i\mu} e^{-i\vec{q}\vec{R}_i} \int e^{i(\vec{q} - \vec{k} + \vec{k}')\vec{r}} d^3r = \\ & = - \sum_{i,k,q,\mu} iq_\mu u_q c_k^\dagger c_{k-q} u_{i\mu} e^{-i\vec{q}\vec{R}_i} = \\ & = - \sum_{i,k,p,q,\mu} i\hbar q_\mu u_q c_k^\dagger c_{k-q} \frac{e^{i(\vec{p} - \vec{q})\vec{R}_i}}{\sqrt{2MN\hbar\omega_{p\mu}}} (a_{p\mu} + a_{-p\mu}^\dagger) = \\ & = - \sum_{k,q,\mu} i\hbar q_\mu u_q \sqrt{\frac{N}{2M\hbar\omega_{q\mu}}} c_k^\dagger c_{k-q} (a_{q\mu} + a_{-q\mu}^\dagger) = \\ & =: \sum_{k,q,\mu} M_q c_k^\dagger c_{k-q} (a_{q\mu} + a_{-q\mu}^\dagger), \end{aligned} \quad (7.21)$$

während der konstante Entwicklungsterm ein Potential für das Elektron darstellt und mit dessen kinetischer Energie zu einem Term

$$\hat{H}_{\text{Elektron}} + \hat{H}_{\text{Elektron-Ion}}^0 = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k \quad (7.22)$$

zusammengefaßt werden kann. Wir behandeln also das Problem $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ mit

$$\hat{H}_0 = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_{q,\mu} \hbar\omega_{q\mu} (a_{q\mu}^\dagger a_{q\mu} + \frac{1}{2}), \quad (7.23)$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{k,q,\mu} M_q c_k^\dagger c_{k-q} (a_{q\mu} + a_{-q\mu}^\dagger). \quad (7.24)$$

Für quasifreie Elektronen wird die Wellenzahlabhängigkeit des Matrixelementes M_q vernachlässigt.

7.3 Störungstheoretische Behandlung

Die graphische Störungsreihe für die Greensfunktion des Elektrons ist in Abbildung 7.1 zu sehen, Abbildung 7.2 zeigt die Störungsreihe für das Phonon.

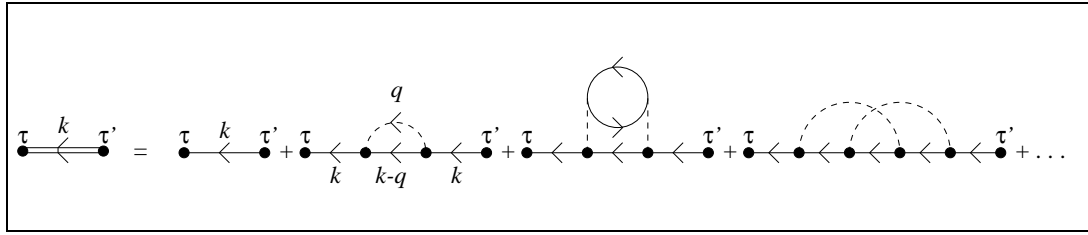


Abb. 7.1 Störungsreihe des Elektrons

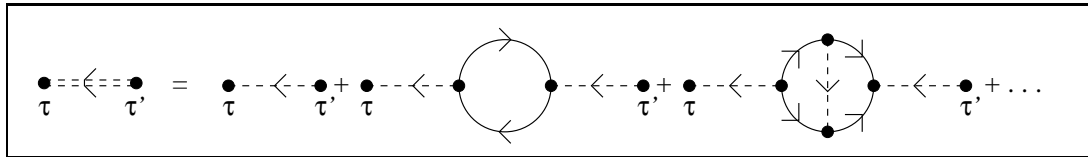


Abb. 7.2 Störungsreihe des Phonons

Die Zustandssumme, die Nennergraphen also, zeigt Abbildung 7.3.

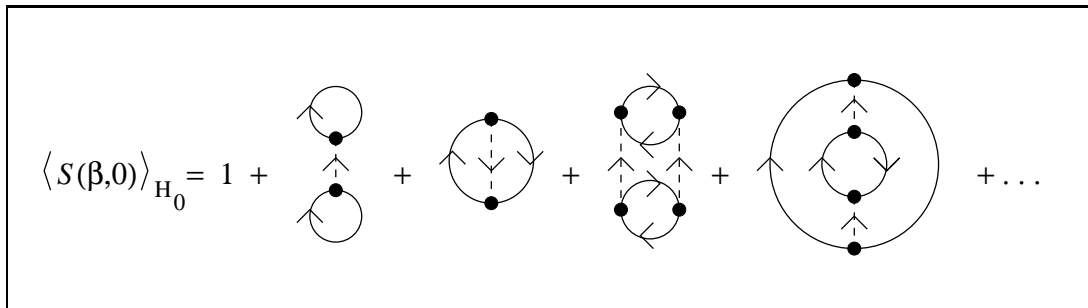


Abb. 7.3 Zustandssumme

Für akustische Phononen existiert der zweite Term der Reihe nicht, da die Elektronschleifen diagonal im Impuls sind und der Impuls des Phonons, das zwischen ihnen läuft, damit verschwinden muß. Für optische Phononen nehmen wir diesen Term jedoch mit. Das Theorem verbundener Graphen ist gültig. Verbundene Elektronengraphen erhalten wir aus der Zustandssumme durch Aufschneiden einer Elektronenlinie, verbundene Phonongraphen durch Aufschneiden einer Phononlinie. Es gelten die folgenden *Graphenregeln* (vgl. Abbildung 7.4):

1. Jeder innere Vertex τ_i enthält das Matrixelement M_q .
2. Eine durchgezogene Linie vom Vertex τ_1 zum Vertex τ_2 steht für eine ungestörte Elektronengreensfunktion $\mathcal{G}_k^0(\tau_2, \tau_1)$, jede geschlängelte Linie für eine ungestörte Phonongreensfunktion. Eine geschlängelte Linie ohne Richtungsangabe bezeichnet die Summe

$$\langle a_q(\tau_2) a_q^\dagger(\tau_1) \rangle + \langle a_{-q}^\dagger(\tau_2) a_{-q}(\tau_1) \rangle. \tag{7.25}$$

Dies führt für die frequenzabhängige Phonongreensfunktion zur Konstruktion einer Art *Auslenkungs-Auslenkungs-Greensfunktion*

$$\mathcal{D}^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega_q} - \frac{1}{\omega + \omega_q} = \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2} \quad (\omega_{-q} = \omega_q) \quad (7.26)$$

3. Jede geschlossene Elektronenlinie erhält einen Faktor (-1) .
4. Summiert wird über die inneren Quantenzahlen q_i und k_i und integriert über die inneren „Zeiten“ τ_i . An jedem Vertex muß dabei Impulserhaltung gewährleistet sein. Diese Integration ist äquivalent zur Summation über die inneren Matsubara-Frequenzen mit Energieerhaltung an jedem Vertex.

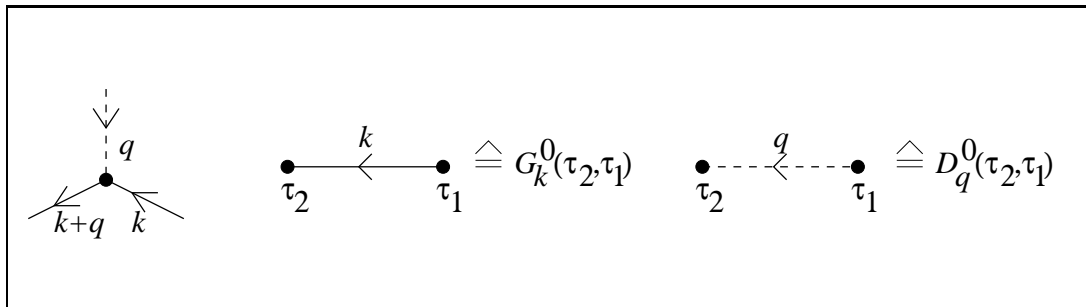


Abb. 7.4 Grundgraphen der Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Mit diesen Regeln können wir Elektron- und Phononselbstenergie berechnen und diese in die *Dyson-Gleichungen*

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}^0 + \frac{1}{\hbar} \mathcal{G}^0 \Sigma \mathcal{G} \quad \text{beziehungsweise} \quad (7.27)$$

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}^0 + \frac{1}{\hbar} \mathcal{D}^0 \Pi \mathcal{D} \quad (7.28)$$

einsetzen, um iterativ die exakten Greensfunktionen zu berechnen. Dies ist in den Abbildungen 7.5 und 7.6 dargestellt.

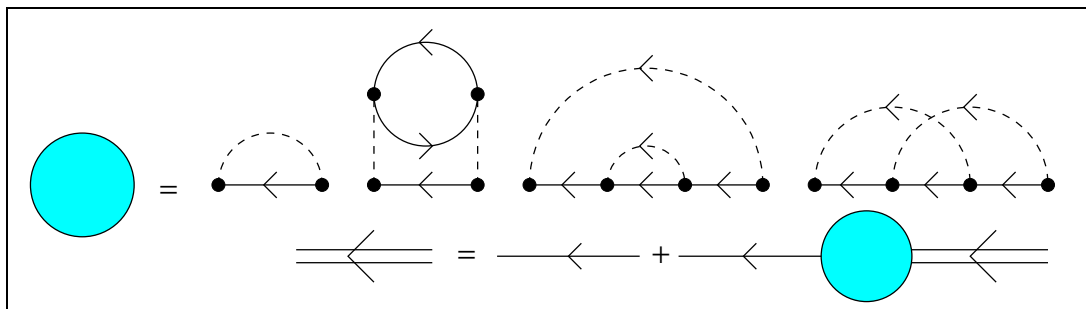


Abb. 7.5 Elektronen- und Phononselbstenergie und Dyson-Gleichung

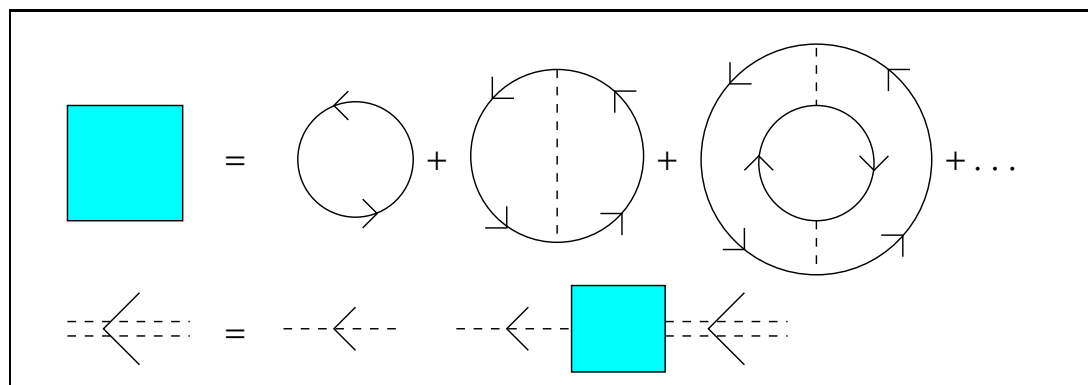


Abb. 7.6 Phononselbstenergie und Dysongleichung

Stichwortverzeichnis

| | |
|-----------------------------------------------------|-----------|
| absorptiver Anteil der Antwortfunktion | 5 |
| adiabatische Suszeptibilität | 6 |
| Antwortfunktion | 5 |
| Antwortfunktion, absorptiver Anteil | 5 |
| Antwortfunktion, dispersiver Anteil | 5 |
| Antwortfunktion, reaktiver Anteil | 5 |
| Antwortfunktion, retardierte | 5 |
| Auslenkungsgreensfunktion | 72 |
| Auslenkungs-Auslenkungs-Greensfunktion | 76 |
| Austauschterm einer Wechselwirkung | 41 |
| avancierte Greensfunktion | 13 |
| Besetzungszahloperator | 33 |
| Bornsche Näherung | 56 |
| Bornsche Näherung, selbstkonsistente | 57 |
| Bose-Matsubara-Frequenzen | 70 |
| Charakter einer Permutation | 31 |
| Dielektrizitätsfunktion | 69 |
| direkter Term einer Wechselwirkung | 41 |
| dispersiver Anteil der Antwortfunktion | 5 |
| Dissipations-Fluktuations-Theorem | 12 |
| Dissipationsfunktion | 11 |
| Dyson-Gleichung | 68, 76 |
| effektive Wechselwirkungslinien | 69 |
| elektrische Leitfähigkeit | 5 |
| Energie, freie | 30 |
| Energie, innere | 28 |
| Fluktuationsfunktion | 11 |
| freie Energie | 30 |

| | |
|----------------------------------------------------------|-----------|
| Graph, Graphen | 47 |
| Graphen, irreduzible | 56 |
| Graphen, numerierte | 51 |
| Graphen, reduzible | 56 |
| Graphen, Skelett- | 69 |
| Graphen, topologisch äquivalente | 51 |
| Graphen, topologisch verschiedene | 51 |
| Graphen, unnumerierte | 51 |
| Graphen, unverbundene | 51 |
| Graphen, verbundene | 51 |
| Graphenregeln | 50, 76 |
| Greensfunktion | 13 |
| Greensfunktion, Auslenkungs- | 72 |
| Greensfunktion, Auslenkungs-Auslenkungs- | 76 |
| Greensfunktion, avancierte | 13 |
| Greensfunktion, Kommutator- | 13 |
| Greensfunktion, Matsubara- | 13, 17 |
| Greensfunktion, Periodizitätseigenschaft | 17 |
| Greensfunktion, retardierte | 13 |
| Greensfunktion, Temperatur- | 13 |
| Hamiltondichte | 7 |
| innere Energie | 28 |
| innere „Zeiten“ | 51 |
| irreduzible Graphen | 56 |
| isotherme Suszeptibilität | 6 |
| iterative Lösung | 46 |
| Kopplungskonstantenintegration | 30 |
| Kommutator-Greensfunktion | 13 |
| Konfigurationsmittel | 54 |
| Korrelationsfunktion | 10 |
| Kramers-Kronig-Relationen | 6 |
| Kubo-Identität | 12 |
| Leitfähigkeit, elektrische | 5 |
| magnetische Suszeptibilität | 6 |
| Matsubara-Frequenzen, Bose- | 70 |
| Matsubara-Frequenzen, gerade | 19 |
| Matsubara-Frequenzen, ungerade | 19 |
| Matsubara-Greensfunktion | 13, 17 |
| Momente der Spektralfunktion | 24 |
| numerierte Graphen | 51 |
| Periodizitätseigenschaft der Greensfunktion | 17 |
| Polarisationspropagator | 69 |

| | |
|---------------------------------------------------|------------|
| Propagator | 28 |
| Propagator, Polarisations- | 69 |
| reaktiver Anteil der Antwortfunktion | 5 |
| reduzible Graphen | 56 |
| retardierte Antwortfunktion | 5 |
| retardierte Greensfunktion | 13 |
| Ringgraphen-Summation | 70 |
| s-Mutator | 14 |
| Selbstenergie | 54, 55, 68 |
| selbstkonsistente Bornsche Näherung | 57 |
| Selbstkonsistenzproblem | 38 |
| Skelettgraphen | 69 |
| Spektraldarstellung | 14 |
| Spektralfunktion | 10, 23 |
| Spektralfunktion, Momente | 24 |
| Störungsreihe | 47 |
| Störungstheorie, zeitabhängige | 13 |
| Subarev-Notation | 14 |
| Suszeptibilität | 5 |
| Suszeptibilität, adiabatische | 6 |
| Suszeptibilität, isotherme | 6 |
| Suszeptibilität, magnetische | 6 |
| Symmetriezahl | 51 |
| T-Matrix-Approximation | 57 |
| Temperatur-Greensfunktion | 13 |
| thermodynamischer Grenzwert | 15 |
| topologisch äquivalente Graphen | 51 |
| topologisch verschiedene Graphen | 59 |
| unnumerierte Graphen | 51 |
| unverbundene Graphen | 51 |
| verbundene Graphen | 51 |
| Vertex, Vertizes | 47 |
| Wärmestrom | 10 |
| Wechselwirkungslinien, effektive | 69 |
| zeitabhängige Störungstheorie | 13 |
| Zeitentwicklungsoperator | 45 |
| Zeitordnungsoperator | 17, 31 |