UNIVERSITÄT GÖTTINGEN

Institut für Theoretische Physik

Fakultät für Physik
Friedrich-Hund-Platz 1
37077 Göttingen

Skriptum zur Vorlesung

Vielteilchentheorie des Festkörpers

Andreas Honecker

Wintersemester 2006/07

Beiträge von
Klaus Becker, Andreas Honecker, Joachim Keller,
Volker Meden, Thomas Pruschke

(Stand der Korrekturen: 20. März 2009)

PDF-Fassung dieses Skripts (mit Hyperlinks etc.) unter

`http://www.theorie.physik.uni-goettingen.de/~honecker/vtt06-07`

Inhaltsverzeichnis

1 Korrelationsfunktionen in der Physik

Korrelationsfunktionen sind wichtige Größen, um Messungen von dynamischen und strukturellen Eigenschaften von Vielteilchensystemen zu beschreiben, und werden dementsprechend vielseitig in der Festkörper- und Kernphysik angewendet. Zum Beispiel läßt sich der inelastische Streuquerschnitt für Streuung von Neutronen an einem nichtmagnetischem Kristall durch die Fouriertranformierte der Dichtekorrelationsfunktion der Atomkerne

$$C_{nn}(\boldsymbol{r},t;\boldsymbol{r}',t') = \langle n(\boldsymbol{r},t)n(\boldsymbol{r}',t')\rangle \tag{1.1}$$

ausdrücken. Andererseits wird die lineare Antwort eines Systems auf eine äußere, zeitabhängige Störung, zum Beispiel die Antwort der Dichte auf eine an die Dichte ankoppelnde Störung, durch die dynamische Suszeptibilität

$$\chi_{nn}(\boldsymbol{r},t;\boldsymbol{r}',t') = \frac{i}{\hbar}\,\Theta(t-t')\langle[\delta n(\boldsymbol{r},t),\delta n(\boldsymbol{r}',t')]\rangle \tag{1.2}$$

beschrieben, wobei

$$\delta n(\boldsymbol{r},t) = n(\boldsymbol{r},t) - \langle n\rangle \quad .$$

Im thermischen Gleichgewicht hängen beide Größen über das Dissipations-Fluktuations-Theorem zusammen und können durch eine einzige Funktion ausgedrückt werden, die spektrale Dichte. Diese Größe hängt auch mit der Leistungsaufnahme in einem zeitabhängigem äußeren Feld zusammen.

Andere Arten von Experimenten liefern Informationen über die Dynamik einzelner Teilchen in einem Vielteilchensystem. Beispiele sind hier Tunnel- und Photoemissionsexperimente. In diesen Fällen müssen wir mit sog. Einteilchen-Greenschen Funktionen arbeiten, die Korrelationsfunktionen zwischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind.

Eine letzte wichtige Anwendung von Greenschen Funktionen betrifft die Bestimmung thermodynamischer Größen wie z.B. der Freien Energie. Letztere benötigt man zur Berechnung der spezifischen Wärme und zur Charakterisierung von Phasenübergängen, beispielsweise in Supraleitern.

1.1 Lineare Antworttheorie

In diesem Abschnitt wollen wir die Antwort eines Systems auf eine äußere, zeitabhängige Störung bestimmen. Dazu berechnen wir den zeitabhängigen Erwartungswert $\langle A\rangle_t$ einer Observablen A unter dem Einfluß eines externen Feldes, welches an eine Systemvariable B koppelt. Der Gesamthamiltonian des Systems soll

$$\tilde{H}_t = H + H_{s,t} \tag{1.3}$$

sein, wobei H der zeitunabhängige Hamiltonian des Systems selbst ist und die äußere Störung durch

$$H_{s,t} = -B\,f(t) \tag{1.4}$$

beschrieben werde. Dabei ist $f(t)$ ein zeitabhängiges äußeres Feld. Der Einfachheit halber nehmen wir an, daß B ein hermitescher Operator und $f(t)$ ein reelles Feld ist. Ferner nehmen wir an, daß das System im thermischen Gleichgewicht war, bevor das äußere Feld zur Zeit t_0 eingeschaltet wurde, d.h. es gelte $f(t) = 0$ für $t < t_0$. Mit einiger Vorsicht kann man auch den Limes $t_0 \to -\infty$ durchführen.

Die Antwort ist in linearer Näherung gegeben durch

$$\langle A \rangle_t = \langle A \rangle + \int\limits_{-\infty}^{\infty} \chi_{AB}(t-t') f(t') dt' \quad . \tag{1.5}$$

Die Größe

$$\chi_{AB}(t,t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \langle [A(t), B(t')] \rangle \tag{1.6}$$

ist die *dynamische Suszeptibilität* (oder Antwortfunktion). Sie besteht aus dem thermischen Erwartungswert des Kommutators zweier Operatoren im Heisenbergbild

$$A(t) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht} A \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad ; \tag{1.7}$$

$\Theta(t)$ ist die Stufenfunktion

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t > 0, \\ 0 & \text{für } t < 0. \end{cases}$$

$\langle A \rangle$ ist der thermische Erwartungswert, welcher mit dem Hamiltonian H ohne die zeitabhängige äußere Störung berechnet wird. Genauer: Wenn $|n\rangle$ ein vollständiger Satz von Eigenzuständen zu H mit Eigenwerten E_n ist,

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad ,$$

dann gilt

$$\langle A \rangle = \sum_n p_n \langle n|A|n\rangle \quad , \tag{1.8}$$

wobei

$$p_n = \frac{\exp(-\beta\, E_n)}{Z}\,, \quad Z = \sum_n \exp(-\beta\, E_n) \ . \tag{1.9}$$

Der zeitabhängige Erwartungswert ist auf der anderen Seite gegeben durch

$$\langle A \rangle_t = \sum_n p_n \langle \tilde{n}(t)|A|\tilde{n}(t)\rangle \ ; \tag{1.10}$$

die Zustände $|\tilde{n}\rangle$ sind dabei die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial |\tilde{n}(t)\rangle}{\partial t} = \tilde{H}_t |\tilde{n}(t)\rangle \tag{1.11}$$

mit der Anfangsbedingung

$$|\tilde{n}(t_0)\rangle = |n(t_0)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht_0}|n\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t_0}|n\rangle \ . \tag{1.12}$$

Wir wollen nun zunächst zeigen, daß die Lösung der Schrödingergleichung als

$$|\tilde{n}(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht} S(t, t_0)|n\rangle \tag{1.13}$$

geschrieben werden kann, wobei

$$S(t, t_0) = \mathcal{T} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} dt' H_{s,t'}(t')} \tag{1.14}$$

vom Operator der externen Störung im Wechselwirkungsbild (Diracbild)

$$H_{s,t}(t) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}Ht} H_{s,t} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = -f(t)B(t) \tag{1.15}$$

abhängt. In Gleichung (1.13) haben wir die Zeitabhängigkeit infolge des Hamiltonians H von der zusätzlichen Zeitabhängigkeit, welche durch die äußere Störung eingeführt wird, abgetrennt. Der Operator S in (1.13) ist ohne äußeres Feld $\mathbb{1}$, d.h. insbesondere für Zeiten $t < t_0$. $\mathcal{T}$ stellt einen sog. Zeitordnungsoperator dar, den wir gleich genauer definieren werden. Um zu beweisen, daß der Zustand $|\tilde{n}(t)\rangle$, der durch die Gleichungen (1.11) und (1.12) festgelegt ist, wie in Gleichung (1.13) geschrieben werden kann, betrachten wir die Ableitung von Gleichung (1.13) nach der Zeit

$$\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{n}(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\tilde{n}(t)\rangle + \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \frac{\partial S}{\partial t}|n\rangle \ . \tag{1.16}$$

Andererseits muß die Schrödingergleichung erfüllt sein, was genau dann der Fall ist, wenn $S(t, t_0)$ der Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} S(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} H_{s,t}(t)\, S(t, t_0) \tag{1.17}$$

gehorcht. Diese Bewegungsgleichung kann mit Hilfe eines Reihenansatzes

$$S(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 H_{s,t_1}(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_{s,t_1}(t_1) H_{s,t_2}(t_2) + \dots \quad . \tag{1.18}$$

gelöst werden. Die Reihe läßt sich formal als die Reihenentwicklung einer Exponentialfunktion auffassen, d.h.

$$S(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 H_{s,t_1}(t_1) + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \mathcal{T} H_{s,t_1}(t_1) H_{s,t_2}(t_2) + \dots \tag{1.19}$$

wenn man den Zeitordnungsoperator wie folgt definiert

$$\mathcal{T} A(t_1) B(t_2) = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & \text{für } t_1 > t_2, \\ B(t_2)A(t_1) & \text{für } t_1 < t_2. \end{cases} \tag{1.20}$$

Damit ist Gleichung (1.13) bewiesen.

Für den zeitabhängigen Erwartungswert erhält man mit (1.13) schließlich

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= \sum_n p_n \langle \tilde{n}(t)|A|\tilde{n}(t)\rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n \langle n|\mathrm{e}^{-\beta H} S^\dagger(t, t_0) A(t) S(t, t_0)|n\rangle \\ &= \langle S^\dagger(t, t_0) A(t) S(t, t_0)\rangle \quad , \end{aligned} \tag{1.21}$$

wobei der letzte Erwartungswert wieder bezüglich H alleine zu nehmen ist. Im Ausdruck (1.21) treten die Basiszustände nicht mehr explizit auf, d.h. unser Resultat ist unabhängig von der gewählten Basis.

Bis hierher wurde noch keine Näherung gemacht. Um den Ausdruck (1.21) weiter auswerten zu können, betrachten wir im Folgenden den Fall, daß das äußere Feld eine kleine Störung darstellt. Dann können wir den Zeitentwickler in linearer

Näherung zu

$$\begin{aligned} S(t,t_0) &\approx \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H_{s,t'}(t') \\ &= \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' f(t')B(t') \end{aligned} \tag{1.22}$$

berechnen. Mit der Hermitezität von B, $B = B^\dagger$, und $f(t) \in \mathbb{R}$ finden wir schließlich

$$\langle A\rangle_t = \langle A\rangle + \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \, \langle A(t)B(t') - B(t')A(t)\rangle \, f(t') + \mathcal{O}(f^2) \quad , \tag{1.23}$$

womit das Ergebnis (1.6)

$$\delta\langle A\rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \, \chi_{AB}(t,t')f(t') \tag{1.24}$$

folgt.

Einige Bemerkungen:

- Die obere Integrationsgrenze in Formel (1.24) ist aufgrund der Anwesenheit der Stufenfunktion eigentlich t. Hierin spiegelt sich die Kausalität wieder, denn die Antwort eines Systems muß stets zeitlich nach der Störung liegen.
- Die untere Integrationsgrenze ist wegen dem Verschwinden des äußeren Feldes für $t < t_0$ eigentlich t_0.
- Die Antwortfunktion χ_{AB} hängt nur von der Zeitdifferenz $t - t'$ ab. Dieser Sachverhalt kann einfach durch zyklische Rotation von $\exp(-iHt/\hbar)$ unter der Spur bewiesen werden, wobei man noch ausnutzt, daß $\exp(-iHt/\hbar)$ mit dem statistischen Operator vertauscht.

Ein einfaches Beispiel:

Bevor wir uns mit der weiteren Ausformulierung der Theorie beschäftigen werden zunächst ein einfaches Beispiel:

Wir betrachten ein geladenes Teilchen im harmonischen Potential in einer zeitabhängigen äußeren Störung. Der volle zeitabhängige Hamiltonian des Teilchens lautet

$$H_t = H - x \cdot f(t) \quad , \tag{1.25}$$

wobei der Hamiltonian H des Systems durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega_0^2 x^2 \tag{1.26}$$

gegeben ist. Wir interessieren uns für die Antwort $\delta\langle x\rangle_t = \langle x\rangle_t$ des Teilchens im Feld, das ebenfalls an die Auslenkung x ankoppelt. Daher benötigen wir die Antwortfunktion

$$\chi_{xx}(t) = \frac{i}{\hbar}\,\Theta(t)\big\langle\big[x(t), x(0)\big]\big\rangle \quad . \tag{1.27}$$

Für dieses einfache Beispiel kann die Zeitabhängigkeit im Heisenbergbild mittels der Bewegungsgleichungen berechnet werden mit dem Ergebnis

$$\begin{aligned}
\frac{dx(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\big[H, x(t)\big] &= \frac{p(t)}{m} \quad , \\
\frac{dp(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\big[H, p(t)\big] &= -m\omega_0^2\, x(t) \quad ,
\end{aligned} \tag{1.28}$$

wobei die Vertauschungsrelation zwischen Impuls p und Ort x zu gleichen Zeiten

$$\big[x(t), p(t)\big] = i\hbar\,\mathbb{1} \tag{1.29}$$

ausgenutzt wurde. Die Lösung für $x(t)$ mit den Anfangsbedingungen $x(0) = x$ und $\dot{x}(0) = p/m$ lautet

$$x(t) = x\cos\omega_0 t + \frac{p}{m\omega_0}\sin\omega_0 t \quad . \tag{1.30}$$

Die Form ist ähnlich zur Lösung in der klassischen Mechanik, nur daß hier x und p Operatoren sind.

Mit der Vertauschungsrelation erhalten wir weiter

$$[x(t), x(0)] = -\frac{i\hbar}{m\omega_0}\sin\omega_0 t \tag{1.31}$$

und somit für die dynamische Suszeptibilität

$$\chi_{xx}(t) = \Theta(t)\,\frac{\sin\omega_0 t}{m\omega_0} \quad . \tag{1.32}$$

Man beachte, daß im Endergebnis $\hbar$ nicht mehr auftritt. Dasselbe Ergebnis erhält man in der klassischen Mechanik, wenn man die Bewegungsgleichungen für einen Oszillator in Anwesenheit einer externen Störung löst. Das Ergebnis ist ferner von der Temperatur unabhängig, obwohl wir ein statistisches Ensemble von Oszillatoren betrachtet haben. Dies ist eine besondere Eigenschaft des harmonischen Oszillators; in Anwesenheit von anharmonischen Beiträgen wird das Ergebnis nicht mehr diese einfache Form haben.

In realistischen Berechnungen mit Phononen ist es bequemer, alle Observablen durch Phononerzeuger und -vernichter auszudrücken, wobei die grundlegende Vertauschungsrelation

$$[b, b^\dagger] = \mathbb{1} \tag{1.33}$$

lautet. Wenn wir

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\,\left(b^\dagger + b\right) &(1.34)\\ p &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_0}{2}}\,\left(b^\dagger - b\right) &(1.35)\end{aligned}$$

schreiben, so gilt

$$H = \hbar\omega_0 \left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right) \quad . \tag{1.36}$$

Die Bewegungsgleichung für die Operatoren $b(t)$, $b^\dagger(t)$ lautet

$$\begin{aligned} \frac{db(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\,[H, b(t)] = \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{e}^{iHt/\hbar}\,[H, b]\,\mathrm{e}^{-iHt/\hbar} = -i\omega_0 b(t)\,, &(1.37)\\ \frac{db^\dagger(t)}{dt} &= +i\omega_0 b^\dagger(t) &(1.38)\end{aligned}$$

und wird gelöst durch

$$\begin{aligned} b(t) &= \exp(-i\omega_0 t)\, b \quad , &(1.39)\\ b^\dagger(t) &= \exp(+i\omega_0 t)\, b^\dagger \quad . &(1.40)\end{aligned}$$

Für $x(t)$ erhalten wir damit

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\,\left(b^\dagger \mathrm{e}^{i\omega_0 t} + b\mathrm{e}^{-i\omega_0 t}\right) \tag{1.41}$$

und schließlich denselben Kommutator für $[x(t), x(0)]$ wie zuvor.

Spezielle Zeitabhängigkeiten

a) $f(t) = f\delta(t)$.

Dann ist

$$\langle A \rangle_t = \langle A \rangle + \chi_{AB}(t) \cdot f \quad . \tag{1.42}$$

In diesem Fall beschreibt $\chi_{AB}(t)$ die Antwort auf einen Schlag bei $t = 0$. Für den Oszillator erhält man qualitativ das Ergebnis in Abb. 1.1.

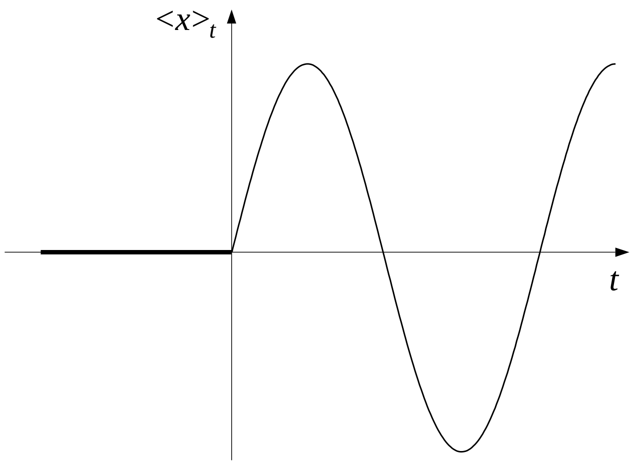


Abbildung 1.1: *Lineare Antwort des harmonischen Oszillators auf einen δ-Schlag.*

b) $f(t) = f\mathrm{e}^{\delta t} \cos \omega t$.
Dies ist eine harmonische Kraft, die in der Vergangenheit adiabatisch eingeschaltet wurde ($\delta \to +0$). In diesem Fall können wir $t_0 \to -\infty$ setzen, denn der adiabatische Einschaltfaktor $\mathrm{e}^{\delta t}$ garantiert ein wohldefiniertes Ergebnis in der Gegenwart.

Betrachten wir zunächst die einfachere Form

$$f(t) = f\mathrm{e}^{-izt}, \quad \text{mit} \quad \Im\mathrm{m} z > 0 \quad . \tag{1.43}$$

Diese Form verletzt zwar die Forderung $f(t) \in \mathbb{R}$, kann aber trotzdem als ein mathematisches Konstrukt verwendet werden. Wir erhalten in diesem Fall

$$\begin{aligned}
\delta\langle A\rangle_t &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt'\chi_{AB}(t-t')f(t') \\
&= \mathrm{e}^{-izt}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\chi_{AB}(t-t')f\mathrm{e}^{iz(t-t')} \\
&= \chi_{AB}(z)f(t) \quad , \qquad (1.44)
\end{aligned}$$

wobei die (verallgemeinerte) Laplacetransformierte der Antwortfunktion

$$\chi_{AB}(z) = \int\limits_{0}^{\infty} dt\,\mathrm{e}^{izt}\,\chi_{AB}(t) \qquad (1.45)$$

eingeführt wurde und wir ausgenutzt haben, daß im thermischen Gleichgewicht $\chi_{AB}(t,t')$ nur von der Zeitdifferenz $\bar{t} = t - t'$ abhängt.

Für eine adiabatisch eingeschaltete harmonische Störung mit Frequenz ω

$$f(t) = \frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{-i\omega t+\delta t} + \mathrm{e}^{+i\omega t+\delta t}\right) f \qquad (1.46)$$

ergibt sich dann

$$\delta\langle A\rangle_t = \frac{1}{2} f \left(\mathrm{e}^{-i\omega t+\delta t}\,\chi_{AB}(\omega+i\delta) + \mathrm{e}^{+i\omega t+\delta t}\,\chi_{AB}(-\omega+i\delta)\right) \quad . \qquad (1.47)$$

Für den wichtigen Fall, daß $A = B$ hermitesch ist, werden wir in Kapitel 3.2 zeigen, daß

$$\begin{aligned}
\Re\mathrm{e}\chi_{AA}(-\omega+i\delta) &= \Re\mathrm{e}\chi_{AA}(\omega+i\delta) \quad , \qquad (1.48) \\
\Im\mathrm{m}\chi_{AA}(-\omega+i\delta) &= -\Im\mathrm{m}\chi_{AA}(\omega+i\delta) \quad . \qquad (1.49)
\end{aligned}$$

Damit gilt

$$\delta\langle A\rangle_t = \Re\mathrm{e}\left(f\,\mathrm{e}^{-i\omega t+\delta t}\,\chi_{AA}(\omega+i\delta)\right) \quad . \qquad (1.50)$$

Für den harmonischen Oszillator findet man das in Abb. 1.2 gezeigte Verhalten für den Real- ($\chi'_{xx}(\omega)$) und Imaginärteil ($\chi''_{xx}(\omega)$) der Antwortfunktion.

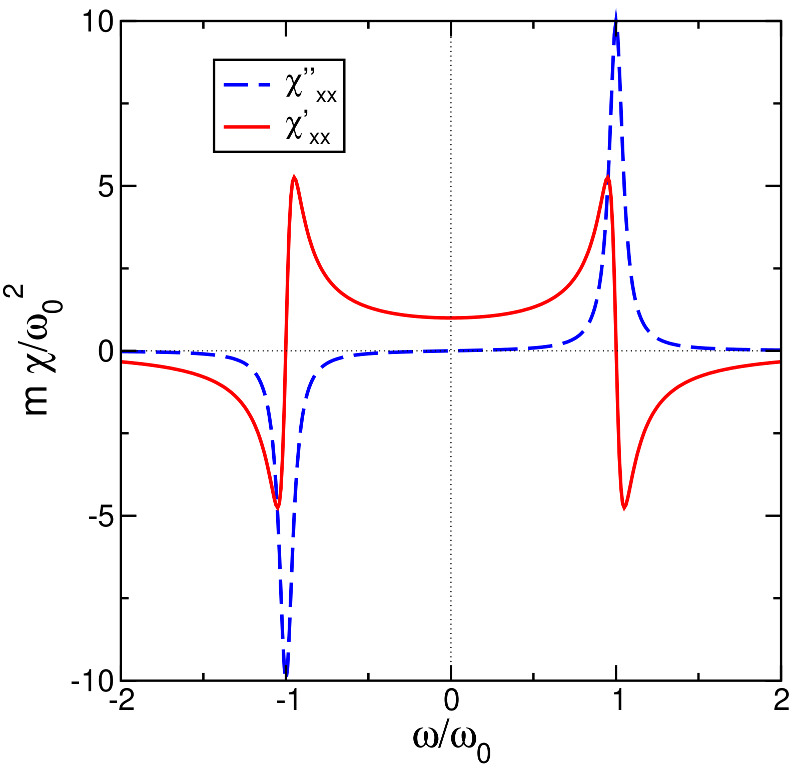


Abbildung 1.2: *Realteil χ'_{xx} (durchgezogene Linie) und Imaginärteil χ''_{xx} (gestrichelte Linie) der Antwortfunktion eines harmonischen Oszillators. Als Verbreiterung wurde $\delta = \omega_0/20$ eingesetzt.*

Dynamische Spin-Suszeptibilität

Wir betrachten einen Spinfreiheitsgrad mit Spin $\boldsymbol{S}$ und magnetischem Moment $\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{S}$ in einem statischen Feld $B_0\, \boldsymbol{e}_z$ in z-Richtung und untersuchen die Antwort der Spin-Polarisation $\langle S_x \rangle_t$ auf ein (adiabatisch eingeschaltetes) oszillierendes Feld $\boldsymbol{B}_s(t) = \boldsymbol{e}_x\, B_1 \cos(\omega t)$ in x-Richtung. Gesucht ist die transversale Suszeptiblität

$$\chi_{S_x S_x}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [S_x(t), S_x] \rangle, \quad \chi_{S_x S_x}(z) = \int_0^\infty dt\, \chi_{S_x S_x}(t)\, \mathrm{e}^{izt} \tag{1.51}$$

und die Antwort der Spinpolarisation $\langle S_x \rangle_t$.

Lösung:

Der Hamilton-Operator des Gesamtsystems ist:

$$\tilde{H}_t = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}(t) = H + H_{s,t} \tag{1.52}$$

mit

$$H = -\gamma S_z B_0, \quad H_{s,t} = -\gamma B_1 S_x \cos(\omega t)\,. \tag{1.53}$$

Tip: Es ist zweckmäßig, anstelle von $S_x(t)$ die Zeitabhängigkeit von $S_\pm(t)$ mit $S_\pm = S_x \pm iS_y$ zu untersuchen und dabei die Spin-Vertauschungsregeln $\big[S_x, S_y\big] = i\hbar S_z$ usw. zu verwenden.

Für $S_+(t)$ gilt die Bewegungsgleichung:

$$\frac{d}{dt} S_+(t) = \frac{i}{\hbar}\big[H, S_+(t)\big] \tag{1.54}$$

$$\big[S_z, S_+\big] = \big[S_z, S_x + iS_y\big] = (i\hbar S_y + \hbar S_x) = \hbar S_+\,. \tag{1.55}$$

Damit

$$\frac{d}{dt} S_+(t) = -i\omega_0 S_+(t) \tag{1.56}$$

mit $\omega_0 = \gamma B_0$. Lösung:

$$S_+(t) = \mathrm{e}^{-i\omega_0 t} S_+, \quad S_-(t) = \mathrm{e}^{+i\omega_0 t} S_-\,. \tag{1.57}$$

Daraus erhält man mit $S_x = (S_+ + S_-)/2$:

$$S_x(t) = \frac{1}{2}(S_+(t) + S_-(t)) = S_x \cos(\omega_0 t) + S_y \sin(\omega_0 t)\,. \tag{1.58}$$

Für die Berechnung der dynamischen Suszeptibilität brauchen wir

$$\big[S_x(t), S_x(0)\big] = -i\hbar S_z \sin(\omega_0 t) \tag{1.59}$$

und damit

$$\chi_{S_x S_x}(t) = \Theta(t)\langle S_z\rangle \sin(\omega_0 t)\,, \tag{1.60}$$

$$\chi_{S_x S_x}(z) = \frac{1}{2}\langle S_z\rangle \left(\frac{1}{z+\omega_0} - \frac{1}{z-\omega_0}\right)\,. \tag{1.61}$$

Hier zeigt sich die Ähnlichkeit zum harmonischen Oszillator: S_- ist ein Anregungsoperator, der einen Spinumklapp aus der Vorzugsrichtung erzeugt, S_+ der dazu adjungierte Operator. S_x ist eine Kombination aus beiden. Im Unterschied zum harmonischen Oszillator ist allerdings der Kommutator $[S_x(t), S_x(0)]$ ein Operator und keine einfache komlexe Funktion wie beim harmonischen Oszillator.

Für die Spin-Polarisation erhält man nach den allgemeinen Regeln:

$$\langle S_x\rangle_t = \frac{1}{2}\gamma B_1 \left(\mathrm{e}^{-i\omega t}\chi_{S_x S_x}(\omega + i\delta) + \mathrm{e}^{+i\omega t}\chi_{S_x S_x}(-\omega + i\delta)\right)\,. \tag{1.62}$$

An der Resonaz $\omega = \pm\omega_0$ divergiert die lineare Antwort. Außerhalb der Resonanz gilt

$$\langle S_x\rangle_t = \gamma\, B_1\, \langle S_z\rangle\, \frac{\omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2}\, \cos(\omega t)\,. \tag{1.63}$$

Die Polarisation folgt dem anregenden Feld. Im Limes $\omega \to 0$ erhält man daraus die statische transversale Suszeptibilität, d.h. die Antwort der Spinpolarisation auf ein kleines Zusatzfeld B_1 in x-Richtung in Gegenwart eines starken Feldes B_0 in z-Richtung.

In ähnlicher Weise berechnet man:

$$\begin{aligned}
\chi_{S_yS_x}(t) &= \frac{i}{\hbar}\,\Theta(t)\,\langle[S_y(t), S_x]\rangle = \Theta(t)\langle S_z\rangle\cos(\omega_0 t) && (1.64)\\
\chi_{S_yS_x}(z) &= -\frac{1}{2i}\,\langle S_z\rangle\left(\frac{1}{z+\omega_0} + \frac{1}{z-\omega_0}\right) && (1.65)\\
\langle S_y\rangle_t &= \frac{1}{2}\,\gamma B_1\big(\mathrm{e}^{-i\omega t}\chi_{S_yS_x}(\omega+i\delta) + \mathrm{e}^{+i\omega t}\chi_{S_yS_x}(-\omega+i\delta)\big)\,. && (1.66)
\end{aligned}$$

Außerhalb der Resonanz:

$$\langle S_y\rangle_t = \gamma B_1\langle S_z\rangle\frac{\omega}{\omega_0^2-\omega^2}\sin(\omega t)\,. \tag{1.67}$$

Im statischen Limes $\omega \to 0$ verschwindet hier, wie erwartet, die Polarisation, aber bei endlichen Frequenzen erhält man auch eine oszillierende Polarisation in y-Richtung bei Anregung in x-Richtung. Das liegt an der Spin-Präzession im statischen Feld.

1.2 Statische isotherme Suszeptibilität

Im vorangegangenen Abschnitt haben wir uns mit der Antwort eines Systems auf eine zeitabhängige äußere Störung beschäftigt. Daneben benötigen wir später auch die Antwort eines Systems auf ein statisches äußeres Feld. Wie wir im Folgenden sehen werden, ist diese nicht notwendigerweise äquivalent zur dynamischen Antwort im Grenzfall $\omega \to 0$. Daher benötigen wir einen separaten Weg, um die statische Antwortfunktion zu berechnen.

Wir schreiben die äußere Störung als

$$H_{\mathrm{ex}} = -Bh \tag{1.68}$$

und erhalten für den thermischen Erwartungswert einer Observablen A

$$\langle A\rangle_h = \mathrm{Tr}\,(\rho_h A)\ \ , \tag{1.69}$$

wobei

$$\rho_h = \frac{\exp\Big(-\beta(H - Bh)\Big)}{Z_h} \quad , \tag{1.70}$$

$$Z_h = \text{Tr}\,(\exp\{-\beta(H - Bh)\}) \quad . \tag{1.71}$$

Wir interessieren uns für die (isotherme) statische Suszeptibilität χ^T_{AB}, die als

$$\chi^T_{AB} = \lim_{h\to 0} \frac{\partial \langle A\rangle_h}{\partial h}. \tag{1.72}$$

definiert ist. Um die Ableitung bezüglich des externen Feldes zu berechnen, müssen wir die Ableitung der Exponentialfunktion in (1.69) bestimmen. Dies ist nicht trivial für den quantenmechanischen Fall, da i.a. $[H, B] \neq 0$. Die korrekte Reihenentwicklung bezüglich des Störoperators H_{ex} erhält man, indem man zunächst

$$\mathrm{e}^{-\beta(H+H_{\text{ex}})} = \mathrm{e}^{-\beta H}\mathcal{T}\mathrm{e}^{-\int_0^\beta d\lambda H_{\text{ex}}[\lambda]} \tag{1.73}$$

schreibt, wobei die Abhängigkeit eines Operators von λ als

$$C[\lambda] = \mathrm{e}^{\lambda H} C \mathrm{e}^{-\lambda H} \tag{1.74}$$

definiert ist, und $\mathcal{T}$ wiederum ein Zeitordnungsoperator ist, der die „Zeiten" λ in den Vielfachintegralen in der Entwicklung von (1.73) von links nach rechts in abfallender Größe ordnet. Gleichung (1.73) kann am schnellsten durch ableiten nach β bewiesen werden.

Behält man nur den Term erster Ordnung im Feld,

$$\mathrm{e}^{-\beta(H-Bh)} \simeq \mathrm{e}^{-\beta H}\Big(\mathbb{1} + \int_0^\beta d\lambda B[\lambda]h\Big) \quad , \tag{1.75}$$

so findet man

$$\langle A\rangle_h = \frac{Z}{Z_h}\left(\langle A\rangle + \int_0^\beta d\lambda \langle B[\lambda]A\rangle h\right) + \mathcal{O}(h^2) \quad , \tag{1.76}$$

$$Z_h = Z\Big(1 + \beta h\langle B\rangle\Big) + \mathcal{O}(h^2) \quad . \tag{1.77}$$

Dabei ist $Z = \text{Tr}\,(\mathrm{e}^{-\beta H})$ und der thermische Erwartungswert $\langle \ldots \rangle$ wird mit dem Hamiltonian H des Systems ohne äußeres Feld gebildet.

Mit (1.76) und (1.77) erhält man schließlich

$$\chi_{AB}^T = \int_0^\beta d\lambda \langle B[\lambda] A\rangle - \beta\langle B\rangle\langle A\rangle \quad , \tag{1.78}$$

mit $B[\lambda]$ gemäß Gleichung (1.74).

Für klassische Systeme findet man das einfachere Ergebnis[1]

$$\chi_{AB}^T = \beta\Big(\langle BA\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle\Big). \tag{1.79}$$

In diesem Fall fällt die Zeitabhängigkeit $B[\lambda]$ weg, denn man muß sich nicht um die Reihenfolge der Größen in der Entwicklung des statistischen Operators kümmern.

Beispiele:

a) Harmonischer Oszillator im externen Feld.
Wir wollen für dieses bereits im Abschnitt 1.1 besprochene Beispiel die statische Antwortfunktion χ_{xx}^T berechnen.

Behandeln wir das System klassisch, so finden wir mit (1.79)

$$\chi_{xx}^T = \beta\langle x^2\rangle \tag{1.80}$$

wegen $\langle x\rangle = 0$ ohne äußeres Feld.

Der thermische Mittelwert läßt sich mittels des Gleichverteilungssatzes der klassischen statistischen Mechanik für die potentielle Energie

$$\left\langle \frac{m}{2}\omega_0^2 x^2\right\rangle = \frac{1}{2\,\beta} \tag{1.81}$$

einfach berechnen und man erhält

$$\chi_{xx}^T = \frac{1}{m\omega_0^2} \quad . \tag{1.82}$$

Für dieses Beispiel kann man die statische Antwortfunktion auch mittels des Kräftegleichgewichts im äußeren Feld

$$\frac{d}{dx}\Big(\frac{m}{2}\omega_0^2 x^2 - hx\Big) = 0. \tag{1.83}$$

[1] Das Ergebnis gilt ebenfalls, wenn $[H, B] = 0$.

bestimmen: Es muß

$$\langle x\rangle_h = \frac{h}{m\omega_0^2} \tag{1.84}$$

gelten, und wir müssen nicht einmal mehr den thermischen Erwartungswert berechnen.

Im quantenmechanischen Fall müssen wir

$$\chi_{xx}^T = \int\limits_0^\beta d\lambda \langle x[\lambda]x\rangle \tag{1.85}$$

berechnen. Die Abhängigkeit des Auslenkungsoperators x von λ erhält man mittels Gleichung (1.41) durch formale Ersetzung von t durch $-i\hbar\lambda$. Damit ist

$$x[\lambda] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\left(b^\dagger \mathrm{e}^{\hbar\omega_0\lambda} + b\mathrm{e}^{-\hbar\omega_0\lambda}\right) \tag{1.86}$$

und

$$\chi_{xx}^T = \frac{\left(\mathrm{e}^{\hbar\omega_0\beta}-1\right)\left\langle\left(b^\dagger b^\dagger + b^\dagger b\right)\right\rangle - \left(\mathrm{e}^{-\hbar\omega_0\beta}-1\right)\left\langle\left(bb^\dagger + bb\right)\right\rangle}{2m\omega_0^2}\,. \tag{1.87}$$

Die Temperaturabhängigkeit von der λ-Integration wird gerade durch die Bosefaktoren

$$\langle b^\dagger b\rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{\hbar\omega_0\beta}-1} \tag{1.88}$$

gekürzt und wir erhalten wieder das Ergebnis (1.82).

b) Nichtwechselwirkende Spins im Magnetfeld.
Wir wollen ein System isolierter Spins mit Quantenzahl S betrachten, die mit einem äußeren Feld der Form

$$H_{\mathrm{ex}} = -S_z\, h \tag{1.89}$$

wechselwirken. Wir interessieren uns für die Spinpolarisation in Richtung des äußeren Feldes, d.h. wir müssen

$$\chi_{S_zS_z}^T = \int\limits_0^\beta \langle S_z[\lambda]S_z\rangle d\lambda. \tag{1.90}$$

berechnen. Wenn $h = 0$, ist $S_z[\lambda] = S_z$ und damit folgt für ein isotropes System wegen $\langle S_z^2\rangle = \langle S_x^2\rangle = \langle S_y^2\rangle = \langle \boldsymbol{S}^2\rangle/3$

$$\chi_{S_zS_z}^T = \beta\,\langle S_z^2\rangle = \beta\,\frac{S\,(S+1)}{3} \quad , \tag{1.91}$$

also die bekannte Curiesuszeptibilität.

Für die zugehörige dynamische Antwortfunktion erhalten wir andererseits mit (1.45)

$$\chi_{S_z S_z}(z) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \mathrm{e}^{izt} \langle [S_z(t), S_z(0)] \rangle = 0 \tag{1.92}$$

für alle z. Offensichtlich ist die dynamische Suszeptibilität im Grenzfall $z \to 0$ nicht identisch mit der statischen Suszeptibilität. Der Grund dafür ist, daß die dynamische Variable S_z eine Erhaltungsgröße ist, und daher kann ein Zustand mit $\langle S_z \rangle_h \neq 0$ im thermischen Gleichgewicht nicht durch adiabatisches Einschalten eines externen Feldes in z-Richtung erreicht werden.

1.3 Streuquerschnitte und Korrelationsfunktionen

In inelastischen Streuexperimenten mißt man den differentiellen Wirkungsquerschnitt $(d^2\sigma/d\Omega d\hbar\omega)$. Diese Größe, multipliziert mit $\Delta\Omega\Delta\hbar\omega$, ergibt die Anzahl der Teilchen pro Zeiteinheit, die in den Raumwinkelbereich $\Delta\Omega$ mit Energieverlust $\hbar\omega$ im Intervall $\Delta\hbar\omega$ gestreut werden, dividiert durch die Zahl der einfallenden Teilchen pro Einheitsfläche und -zeit. In der niedrigsten Ordnung, der ersten Born'schen Näherung, kann man diese Größe über Fermis goldene Regel (für eine Ableitung siehe z.B. [22]) zu

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\hbar\omega} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \sum_{i,f} p_i |\langle \boldsymbol{k}', f | H_{\mathrm{int}} | \boldsymbol{k}, i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - E_f + E_i) \tag{1.93}$$

berechnen. Dabei ist H_{int} der Wechselwirkungshamiltonian zwischen den gestreuten Teilchen mit Masse m und einem massiven Target, $\hbar\boldsymbol{k}, \hbar\boldsymbol{k}'$ sind die Impulse der einfallenden und gestreuten Teilchen (Abb. 1.3), i und f bezeichnen den Anfangs- (**i**nitial) und Endzustand (**f**inal) des Targets und p_i ist die Wahrscheinlichkeit für einen gegebenen Anfangszustand des Targets. Die δ-Funktion sorgt für die Energieerhaltung. Die Vorfaktoren resultieren von der Zustandsdichte pro Energie der Streuzustände und von der Änderung der Geschwindigkeit der inelastisch gestreuten Teilchen.

Der orbitale Anteil der Wellenfunktion der gestreuten Teilchen kann durch ebene Wellen $\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ beschrieben werden, so daß das Übergangsmatrixelement sich

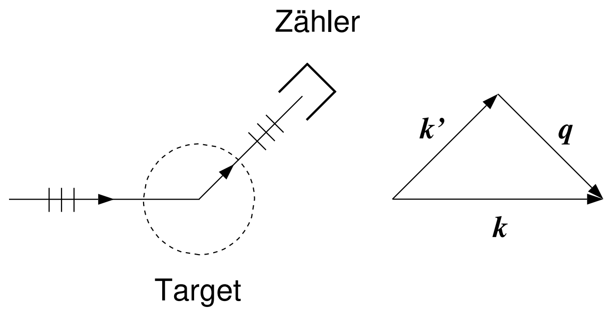


Abbildung 1.3: *Streugeometrie.*

als (der Einfluß des Spins wird später diskutiert)

$$\langle \boldsymbol{k}', f | H_{\text{int}} | \boldsymbol{k}, i \rangle = \langle f | H_{\text{int}}(-\boldsymbol{q}) | i \rangle \tag{1.94}$$

schreiben läßt, wobei

$$H_{\text{int}}(\boldsymbol{q}) = \int d^3\boldsymbol{r}\, \mathrm{e}^{-i\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} H_{\text{int}}(\boldsymbol{r}) \tag{1.95}$$

und $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$ der Streuwellenvektor ist (s. Abb. 1.3).

Wir können weiterhin die explizit auftretenden Energien der Targetzustände und die Besetzungswahrscheinlichkeiten beseitigen [36], indem wir die Darstellung

$$\delta(\hbar\omega) = \frac{1}{\hbar}\delta(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \tag{1.96}$$

der δ-Funktion und Heisenbergoperatoren

$$H_{\text{int}}(\boldsymbol{q}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H t\right) H_{\text{int}}(\boldsymbol{q}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) \tag{1.97}$$

einführen, wobei H der Hamiltonian des Targets ist.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt kann dann ausgedrückt werden als

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\hbar\omega} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{2\pi\hbar} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle H_{\text{int}}^{\dagger}(-\boldsymbol{q}, t) H_{\text{int}}(-\boldsymbol{q}, 0) \rangle \,. \tag{1.98}$$

Die weitere Auswertung der Korrelationsfunktion hängt vom Typ der Wechselwirkung zwischen Target und Streuteilchen ab. Für die Streuung von Neutronen an nichtmagnetischen Kristallen kann die Wechselwirkung als Summe von Potentialen zwischen den gestreuten Neutronen und den Targetkernen an den Positionen

$\boldsymbol{R}_j$

$$H_{\rm int}(\boldsymbol{r}) = \sum_j V_j(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_j) \tag{1.99}$$

geschrieben werden. Wegen der Kurzreichweitigkeit dieser Wechselwirkung gilt näherungsweise

$$V_j(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_j) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a_j \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_j) \quad , \tag{1.100}$$

wobei die sog. Streulänge a_j auftritt. Damit ergibt sich als Streuquerschnitt

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\hbar\omega} = \frac{k'}{k}\frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\,\omega\,t} \sum_{jl} \langle a_j a_l \mathrm{e}^{-i\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_j(t)} \mathrm{e}^{i\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l(0)} \rangle \quad . \tag{1.101}$$

Die Streulängen a_j hängen vom Spin der Targetkerne und dessen Richtung bezüglich des Spins der gestreuten Neutronen ab. Für nichtmagnetische Kristalle und unpolarisierte Neutronen sind die Streulängen verschiedener Kerne unkorreliert und ihr Erwartungswert kann durch

$$\begin{aligned} \langle a_j a_l \rangle &= \langle a^2 \rangle + \delta_{jl} \left(\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2 \right) \\ &\equiv a_{\rm coh}^2 \quad + \delta_{jl} a_{\rm inc}^2 \end{aligned} \tag{1.102}$$

ausgedrückt werden. Dadurch erhält man zwei Beiträge zum Streuquerschnitt, die als Kohärent und Inkohärent bezeichnet werden. Für den Kohärenten Anteil findet man

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\hbar\omega} = \frac{k'}{k}\frac{a_{\rm coh}^2}{\hbar} S(\boldsymbol{q},\omega) \quad , \tag{1.103}$$

mit dem dynamischen Strukturfaktor

$$S(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\,\omega\,t} \sum_{jl} \langle \mathrm{e}^{-i\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_j(t)} \mathrm{e}^{i\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l(0)} \rangle \quad . \tag{1.104}$$

Führt man die Kerndichte und ihre Fouriertransformierte

$$n(\boldsymbol{r}) = \sum_l \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_l)\,, \quad n(\boldsymbol{q}) = \int d\boldsymbol{r}^3\, \mathrm{e}^{-i\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} n(\boldsymbol{r}) = \sum_l \mathrm{e}^{-i\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l} \tag{1.105}$$

ein, kann der dynamische Strukturfaktor auch als

$$\begin{aligned} S(\boldsymbol{q},\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\, \mathrm{e}^{i\omega t} \langle n(\boldsymbol{q},t) n^\dagger(\boldsymbol{q},0)\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\, \mathrm{e}^{i\omega t} \int d^3\boldsymbol{r} \int d^3\boldsymbol{r}'\, \mathrm{e}^{-i\,\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \langle n(\boldsymbol{r},t) n(\boldsymbol{r}',0)\rangle \end{aligned} \tag{1.106}$$

geschrieben werden. Damit haben wir einen Zusammenhang zwischen Streuquerschnitt und einer die strukturellen und dynamischen Eigenschaften des Targets (Atomkerne) beschreibenden Korrelationsfunktion hergestellt.

2 Systeme identischer Teilchen

2.1 Symmetrien

Der Hamiltonian H eines Systems von N identischen (ununterscheidbaren), über eine Paarwechselwirkung $V_{i,j}$ wechselwirkender Teilchen der Masse m in einem äußeren Potential u_i ist durch

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m} + u(\hat{\boldsymbol{x}}_i) \right) + \sum_{i>j} V_{i,j}(\hat{\boldsymbol{x}}_i - \hat{\boldsymbol{x}}_j) \\ &= \sum_{i=1}^{N} h(i) + \sum_{i>j} V(i,j) = H_0 + V \end{aligned} \tag{2.1}$$

gegeben. Dabei bezeichnen $\hat{\boldsymbol{p}}_i$ und $\hat{\boldsymbol{x}}_i$ den Impuls- bzw. Ortsoperator des i-ten Teilchens.[2] Für verschwindende Wechselwirkung $V = 0$ sind die Produktzustände der normierten Eigenzustände $|\varepsilon, \nu\rangle_{(i)}$ zu $h(i)$ Vielteilcheneigenzustände zu H

$$|\varepsilon_1, \nu_1; \varepsilon_2, \nu_2; \ldots; \varepsilon_N, \nu_N\rangle = |\varepsilon_1, \nu_1\rangle_{(1)} \otimes |\varepsilon_2, \nu_2\rangle_{(2)} \otimes \ldots \otimes |\varepsilon_N, \nu_N\rangle_{(N)} \ . \tag{2.2}$$

Die Energie des Zustandes ergibt sich zu $\sum_l \varepsilon_l$ wobei $h(i)\,|\varepsilon, \nu\rangle_{(i)} = \varepsilon\,|\varepsilon, \nu\rangle_{(i)}$ gilt und ν die zusätzlichen Quantenzahlen bezeichnet.

Da die durch Glg. (2.1) beschriebenen Teilchen ununterscheidbar sind, hat der Produktzustand im allgemeinen nicht das für Fermionen bzw. Bosonen zu fordernde Symmetrieverhalten unter Teilchenvertauschung (bzw. "Zustandsvertauschung"; siehe unten). Um diesen Aspekt genauer zu beleuchten definieren wir unitäre Permutationsoperatoren $\mathcal{P}_\alpha$, mit $\alpha = 1, 2, \ldots, N!$, die die $N!$ möglichen Permutationen der Zustände der N Teilchen generieren und sich als Produkte von Paarvertauschungsoperatoren $P_{i,j}$ schreiben lassen. Je nachdem, ob in $\mathcal{P}_\alpha$ eine gerade oder ungerade Anzahl von Paarvertauschungen vorkommt, bezeichnet man die Permutation als gerade oder ungerade. Alle erlaubten Vielteilchenzustände von Bosonen sind gerade unter jeder beliebigen Paarvertauschung, während sie für Fermionen ungerade sind. Ausgehend von den $\mathcal{P}_\alpha$ definieren wir den Symmetrisierungsoperator

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha=1}^{N!} \mathcal{P}_\alpha \tag{2.3}$$

[2] Wir werden in den Fällen, in denen die Gefahr der Verwechslung besteht, Operatoren mit einem "Hut" versehen.

und den Antisymmetrisierungsoperator

$$\mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha=1}^{N!} (-1)^{p_\alpha} \mathcal{P}_\alpha \; , \tag{2.4}$$

wobei $(-1)^{p_\alpha} = 1$ für $\mathcal{P}_\alpha$ gerade und $(-1)^{p_\alpha} = -1$ für $\mathcal{P}_\alpha$ ungerade. Man überzeugt sich leicht davon, daß $\mathcal{S}$ und $\mathcal{A}$ selbstadjungierte Operatoren sind, da die inverse Permutation $\mathcal{P}_\alpha^{-1} = \mathcal{P}_\alpha^\dagger$ die gleiche Symmetrie (gerade/ungerade) wie $\mathcal{P}_\alpha$ hat. Es gilt

$$\mathcal{P}_\alpha \mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha'=1}^{N!} \mathcal{P}_\alpha \mathcal{P}_{\alpha'} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha''=1}^{N!} \mathcal{P}_{\alpha''} = \mathcal{S} = \mathcal{S}\mathcal{P}_\alpha \tag{2.5}$$

und

$$\mathcal{P}_\alpha \mathcal{A} \;=\; \frac{1}{N!} \sum_{\alpha'=1}^{N!} \mathcal{P}_\alpha (-1)^{p_{\alpha'}} \mathcal{P}_{\alpha'} = (-1)^{p_\alpha} \frac{1}{N!} \sum_{\alpha''=1}^{N!} (-1)^{p_{\alpha''}} \mathcal{P}_{\alpha''} = (-1)^{p_\alpha} \mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{P}_\alpha \; . \tag{2.6}$$

Durch Summation über α ergibt sich aus Glg. (2.5)

$$\mathcal{S}^2 = \mathcal{S} \tag{2.7}$$

und nach Multiplikation mit $(-1)^{p_\alpha}$ und Summation über α folgt aus Glg. (2.6)

$$\mathcal{A}^2 = \mathcal{A} \; . \tag{2.8}$$

$\mathcal{S}$ und $\mathcal{A}$ sind Projektionsoperatoren. Weiterhin ergibt sich aus Glg. (2.5)

$$\mathcal{A}\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha=1}^{N!} (-1)^{p_\alpha} \mathcal{P}_\alpha \mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha=1}^{N!} (-1)^{p_\alpha} \mathcal{S} = 0 = \mathcal{S}\mathcal{A} \; , \tag{2.9}$$

da es sowohl $N!/2$ gerade wie ungerade Permutationen gibt. $\mathcal{S}$ und $\mathcal{A}$ sind somit orthogonal zueinander.

Mit Hilfe von $\mathcal{A}$ läßt sich nun aus dem Produktzustand Glg. (2.2) ein für Fermionen zulässiger total antisymmetrischer Zustand erzeugen. Man nutzt dabei aus, daß für jede beliebige Paarvertauschung $P_{i,j}$, $P_{i,j}\mathcal{A} = -\mathcal{A}$ gilt. Mit einer noch zu bestimmenden Normierungskonstanten C_a folgt

$$\begin{aligned} |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a \;&=\; C_a \mathcal{A}\, |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle \\ &=\; \frac{C_a}{N!} \det \begin{pmatrix} |k_1\rangle_{(1)} & |k_1\rangle_{(2)} & \ldots & |k_1\rangle_{(N)} \\ |k_2\rangle_{(1)} & |k_2\rangle_{(2)} & \ldots & |k_2\rangle_{(N)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ |k_N\rangle_{(1)} & |k_N\rangle_{(2)} & \ldots & |k_N\rangle_{(N)} \end{pmatrix} \; , \end{aligned} \tag{2.10}$$

wobei k_l für $\{\varepsilon_l, \nu_l\}$ steht und $|k_l\rangle_{(i)}$ den Zustand des i-ten Teilchens bezeichnet. Man nennt die Determinante in Glg. (2.10) auch Slaterdeterminante. Für den resultierenden Zustand gilt wie zu fordern $|k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a = -|k_2, k_1, \ldots, k_N\rangle_a$ und analog für jede andere Paarvertauschung. Aufgrund der Antisymmetrie unter Paarvertauschung kann keiner der Einteilchenzustände $|k_l\rangle$ doppelt vorkommen (Pauliprinzip). Die Normierungskonstante ergibt sich aus

$$\begin{aligned} 1 &= {}_a\langle k_1, k_2, \ldots, k_N|\, k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a \\ &= |C_a|^2 \langle k_1, k_2, \ldots, k_N| \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A} |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle \\ &= |C_a|^2 \langle k_1, k_2, \ldots, k_N| \mathcal{A}^2 |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle \\ &= |C_a|^2 \langle k_1, k_2, \ldots, k_N| \mathcal{A} |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle \\ &= \frac{|C_a|^2}{N!} , \end{aligned}$$

zu $C_a = \sqrt{N!}$.

Auf dem Unterraum $\mathcal{H}_a$ des N-Teilchen Hilbertraums $\mathcal{H}$, der nur die total antisymmetrischen Zustände enthält, gilt die Vollständigkeitsrelation[3]

$$\frac{1}{N!} \sum_{k_1, k_2, \ldots, k_N} |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a \, {}_a\langle k_1, k_2, \ldots, k_N| = \mathbb{1}_a \, . \tag{2.11}$$

Da über die $k_1, k_2, \ldots, k_N$ unabhängig voneinander summiert wird, tritt jeder Zustand $N!$ mal auf und wir müssen durch $N!$ teilen. Alternativ kann man die antisymmetrisierten Produktzustände auch durch so genannte Besetzungszahlen ausdrücken. Die Vielteilchenzustände sind eindeutig dadurch festgelegt, daß man die Häufigkeit angibt, mit der jede Quantenzahl auftritt. Für Fermionen kann diese Häufigkeit nur 1 oder 0 sein. Bringen wir die möglichen k in eine beliebige, aber feste Reihenfolge, und bezeichnen mit n_r die Häufigkeit, mit der die r-te Quantenzahl gemäß dieser Reihen vorkommt, so können wir total antisymmetrische Zustände in der Form $|\{n_r\}\rangle = |n_0, n_1, \ldots, n_m, \ldots\rangle$ angeben. Für die Vollständigkeitsrelation ergibt sich in diesen

$$\sum_{\{n_r\}; \sum_r n_r = N} |\{n_r\}\rangle \langle\{n_r\}| = \mathbb{1}_a \, , \tag{2.12}$$

wobei das Symbol

$$\sum_{\{n_r\}; \sum_r n_r = N}$$

[3]Wir gehen hier davon aus, daß die Quantenzahlen diskret sind. Wir werden weiter unten auch den Fall kontinuierlicher Quantenzahlen betrachten.

für

$$\sum_{n_0=0,1} \sum_{n_1=0,1} \cdots \sum_{n_m=0,1} \cdots$$

unter der Nebenbedingung $\sum_r n_r = N$ steht.

Für Bosonen erhält man aus dem Produktzustand Glg. (2.2) einen total symmetrischen Zustand aus $\mathcal{H}_s$ durch Anwenden von $\mathcal{S}$

$$|k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_s \;=\; C_s \mathcal{S} \, |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle \;, \tag{2.13}$$

da $P_{i,j}\mathcal{S} = \mathcal{S}$. Dabei tritt bei Bosonen keine Beschränkung der Besetzungszahlen auf. Der Normierungsfaktor ergibt sich zu (siehe Übungen)

$$C_s = \sqrt{N!} \left(\prod_{r=0}^{\infty} n_r! \right)^{-1/2} \;,$$

mit $0! = 1$, wobei n_r wieder die Häufigkeit des Auftretens der r-ten Quantenzahl bezüglich einer festen Ordnung bezeichnet. Der Unterschied zum Resultat für Fermionen kommt dadurch zustande, daß Einteilchenzustände im Falle der Bosonen mehrfach besetzt sein dürfen. In den Besetzungszahlen n_r ergibt sich die Vollständigkeitsrelation auf $\mathcal{H}_s$ zu

$$\sum_{\{n_r\};\sum_r n_r = N} |\{n_r\}\rangle \langle\{n_r\}| = \mathbb{1}_s \;, \tag{2.14}$$

wobei die Summen für die einzelnen n_r jetzt von 0 bis N laufen.

Der Grundzustand eines Systems von N wechselwirkungsfreien Bosonen ergibt sich indem man den niedrigsten Einteilchenzustand N-fach besetzt (hat bereits die korrekte Symmetrie). Für Fermionen besetzt man dagegen die N niedrigsten Niveaus mit je einem Teilchen und antisymmetrisiert (bildet die Slaterdeterminante). Das höchste besetzte Niveau bezeichnet man als das Ferminiveau, die zugehörige Einteilchenenergie als die Fermienergie. Es ist wichtig festzustellen, daß die Antisymmetrisierung (Symmetrisierung) nur dann physikalische Konsequenzen (z.B. in quantenmechanischen Erwartungswerten) hat, wenn die Wellenfunktionen der betrachteten Teilchen räumlich überlappen. Sind also Teilchen hinreichend (hängt vom Problem ab!) weit voneinander entfernt, so kann man auf die Antisymmetrisierung (Symmetrisierung) verzichten. Die Symmetrieforderung führt dazu, daß die Frage, welches Teilchen sich in welchem Einteilchenzustand innerhalb des Vielteilchenzustandes befindet nicht sinnvoll ist! Nur auf die Frage, ob sich ein Teilchen in einem bestimmten Einteilchenzustand befindet (für Fermionen) bzw. wieviele Teilchen sich in diesem befinden (für Bosonen) gibt es einen Antwort.

2.2 Zweite Quantisierung

Wir wollen nun eine aus der quantenmechanischen Vielteilchentheorie nicht mehr wegzudenkende Methode vorstellen das "Symmetriepostulat" elegant in die Formulierungen einzubauen — die zweite Quantisierung.[4] Dabei beginnen wir mit einer ausführlichen Darstellung für den Fall der Fermionen und werden die relevanten Ergebnisse für die Bosonen ohne detaillierte Herleitung weiter unten angeben.

Für eine fest vorgegebene Zahl von Fermionen N findet die physikalische Beschreibung im Raum $\mathcal{H}_a^{(N)}$ statt. Wir führen nun einen neuen Hilbertraum — den Fockraum $\mathcal{F}$ — ein, der sich als direkte Summe aller $\mathcal{H}_a^{(N)}$, mit $N = 0, 1, 2, \ldots$ ergibt

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}_a^{(2)} \oplus \mathcal{H}_a^{(3)} \oplus \ldots \oplus \mathcal{H}_a^{(N)} \oplus \ldots \, . \tag{2.15}$$

Der Raum $\mathcal{H}^{(0)}$ wird dabei von einem Zustand $|\text{vac}\rangle = |0\rangle$ aufgespannt, den man als den Vakuumzustand bezeichnet. Der Fockraum enthält die antisymmetrischen Zustände mit beliebiger Teilchenzahl. Das Skalarprodukt in $\mathcal{F}$ ergibt sich auf natürliche Weise aus den Skalarprodukten auf den Unterräumen zu fester Teilchenzahl, wenn wir zusätzlich

$$0 = {}_a\big\langle k_1, k_2, \ldots, k_{N_1} \,|\, k_1', k_2', \ldots, k_{N_2}' \big\rangle_a \tag{2.16}$$

für $N_1 \neq N_2$ definieren. Bilden die $|k\rangle$ ein vollständiges Orthonormalsystem auf $\mathcal{H}^{(1)}$, so ergibt sich für jedes $|\phi\rangle \in \mathcal{F}$ die Zerlegung

$$\begin{aligned} |\phi\rangle \;&=\; |0\rangle \langle 0|\,\phi\rangle + \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k_1} |k_1\rangle \langle k_1|\,\phi\rangle + \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k_1<k_2} |k_1, k_2\rangle_a \, {}_a\langle k_1, k_2|\,\phi\rangle + \ldots \\ &\quad + \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k_1<k_2<\ldots<k_N} |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a \, {}_a\langle k_1, k_2, \ldots, k_N|\,\phi\rangle + \ldots \, . \end{aligned} \tag{2.17}$$

[4]Der Name hat historische Gründe, auf die wir hier nicht weiter eingehen werden.

Dabei haben wir unsere Notation auf den Fall verallgemeinert, daß die mit k bezeichneten Quantenzahlen sowohl diskret, wie auch kontinuierlich sein können (siehe die QM I Vorlesung). Da k im allgemeinen für mehrere Quantenzahlen steht (also keine reelle Zahl ist), müssen wir genauer spezifizieren, was wir mit $k_1 < k_2$ meinen. Dazu legen wir wieder eine (beliebige) feste Reihenfolge der Einteilchenquantenzahlen k fest. $k_1 < k_2$ heißt dann, daß k_1 in dieser Reihenfolge links von k_2 steht.

Wir definieren in einem nächsten Schritt Operatoren $c_k^\dagger$ die vom Raum $\mathcal{H}_a^{(N)}$ zum Raum $\mathcal{H}_a^{(N+1)}$ führen

$$\begin{aligned} |k\rangle &= c_k^\dagger\, |0\rangle \\ |k, k_1\rangle_a &= c_k^\dagger\, |k_1\rangle \\ |k, k_1, k_2\rangle_a &= c_k^\dagger\, |k_1, k_2\rangle_a \\ \ldots &= \ldots \\ \ldots &= \ldots \\ |k, k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a &= c_k^\dagger\, |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a \\ \ldots &= \ldots \end{aligned} \tag{2.18}$$

und angewandt auf einen total antisymmetrischen Zustand einen ebensolchen ergeben. Der Erzeugungsoperator $c_k^\dagger$ erzeugt somit einen antisymmetrischen $N+1$-Teilchenzustand der durch die einfach besetzten Einteilchenzustände mit Quantenzahlen $k_1, k_2, \ldots, k_N$ und den besetzten Einteilchenzustand mit k charakterisiert ist. Die Existenz von $c_k^\dagger$ werden wir konstruktiv beweisen:

$$\begin{aligned} c_k^\dagger &= c_k^\dagger \mathbb{1}_{\mathcal{F}} \\ &= c_k^\dagger \Bigg[|0\rangle\langle 0| + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1} |k_1\rangle\langle k_1| + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1<k_2} |k_1, k_2\rangle_a\, {}_a\langle k_1, k_2| + \ldots \\ &\quad + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1<k_2<\ldots<k_N} |k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a\, {}_a\langle k_1, k_2, \ldots, k_N| + \ldots \Bigg] \\ &= |k\rangle\langle 0| + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1} |k, k_1\rangle\langle k_1| + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1<k_2} |k, k_1, k_2\rangle_a\, {}_a\langle k_1, k_2| + \ldots \\ &\quad + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1<k_2<\ldots<k_N} |k, k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a\, {}_a\langle k_1, k_2, \ldots, k_N| + \ldots\ . \end{aligned}$$

Aus der Antisymmetrie der Zustände folgt

$$\begin{aligned}
c^\dagger_{k'} c^\dagger_k \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a &= \left|k', k, k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a \\
&= -\left|k, k', k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a \\
&= -c^\dagger_k c^\dagger_{k'} \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a
\end{aligned}$$

und damit, da $\left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a$ beliebig ist,

$$\left\{c^\dagger_k, c^\dagger_{k'}\right\} = c^\dagger_k c^\dagger_{k'} + c^\dagger_{k'} c^\dagger_k = 0 \;, \tag{2.19}$$

d.h. der Antikommutator $\{\ldots,\ldots\}$ zweier "Erzeuger" verschwindet. Speziell gilt $\left(c^\dagger_k\right)^2 = 0$, was das Pauliprinzip zum Ausdruck bringt.

Aus der expliziten Konstruktion von $c^\dagger_k$ sieht man, daß der zu $c^\dagger_k$ adjungierte Operator $c_k = \left(c^\dagger_k\right)^\dagger$, von $\mathcal{H}_a^{(N)}$ nach $\mathcal{H}_a^{(N-1)}$ führt. Also "vernichtet" c_k ein Teilchen und heißt Vernichtungsoperator. Wir wollen nun berechnen, wie c_k auf einen Zustand $\left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a$ wirkt. Dazu nehmen wir o.B.d.A. an, daß $k_1 < k_2 < \ldots < k_N$ gemäß der oben beschriebenen Ordnung gilt:

$$\begin{aligned}
c_k \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a &= \sum_{N'=0}^{\infty} \;\; \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k'_1 < k'_2 < \ldots < k'_{N'}} \left|k'_1, k'_2, \ldots, k'_{N'}\right\rangle_a \\
&\qquad \times {}_a\left\langle k'_1, k'_2, \ldots, k'_{N'}\right| c_k \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a \\
= \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k'_1 < k'_2 < \ldots < k'_{N-1}} & {}_a\left\langle k_1, k_2, \ldots, k_N \left| c^\dagger_k \right| k'_1, k'_2, \ldots, k'_{N-1}\right\rangle_a^* \left|k'_1, k'_2, \ldots, k'_{N-1}\right\rangle_a \\
= \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k'_1 < k'_2 < \ldots < k'_{N-1}} & {}_a\left\langle k_1, k_2, \ldots, k_N \mid k, k'_1, k'_2, \ldots, k'_{N-1}\right\rangle_a^* \left|k'_1, k'_2, \ldots, k'_{N-1}\right\rangle_a \;.
\end{aligned}$$

Damit das auftretende Skalarprodukt nicht verschwindet, müssen im rechten und linken Zustand dieselben Einteilchenzustände vorkommen. Deshalb muß k mit einem der k_i übereinstimmen und die k'_j mit den anderen k_i. Da sowohl die k'_i wie auch die k_i der "Größe" nach sortiert sind, stellt sich nur noch das Problem, wo sich k relativ zu den k_i einordnet. Gilt $k < k'_1$, so müssen wir keine Vertauschung vornehmen um k an die "richtige Stelle" zu bringen. Gilt $k'_1 < k < k'_2$, so müssen wir eine Vertauschung vornehmen, was ein Minuszeichen produziert. Gilt $k'_2 < k < k'_3$, so ergeben sich zwei Minuszeichen. Diese Systematik läßt sich beliebig fortführen. Wir erhalten somit

$$\begin{aligned}
c_k \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a &= \delta(k, k_1) \left|k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a - \delta(k, k_2) \left|k_1, k_3, \ldots, k_N\right\rangle_a \\
&\quad + \delta(k, k_3) \left|k_1, k_2, k_4 \ldots, k_N\right\rangle_a \mp \ldots \;.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Dabei bezeichnet $\delta(k, k_i)$ je nach der in k auftretenden Quantenzahl ein Kronecker-δ oder eine δ-Funktion. Mit Hilfe dieser Relation können wir den Antikommutator zwischen c_k und $c^\dagger_{k'}$ berechnen. Dazu betrachten wir

$$\begin{aligned} c_k c^\dagger_{k'} \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a &= c_k \left|k', k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a \\ &= \delta(k, k') \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a - \delta(k, k_1) \left|k', k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a \\ &\quad +\delta(k, k_2) \left|k', k_1, k_3, \ldots, k_N\right\rangle_a \mp \ldots \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} c^\dagger_{k'} c_k \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a &= c^\dagger_{k'} \left[\delta(k, k_1) \left|k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a - \delta(k, k_2) \left|k_1, k_3, \ldots, k_N\right\rangle_a \right. \\ &\quad \left. +\delta(k, k_3) \left|k_1, k_2, k_4 \ldots, k_N\right\rangle_a \mp \ldots\right] \\ &= \delta(k, k_1) \left|k', k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a - \delta(k, k_2) \left|k', k_1, k_3, \ldots, k_N\right\rangle_a \\ &\quad +\delta(k, k_3) \left|k', k_1, k_2, k_4 \ldots, k_N\right\rangle_a \mp \ldots . \end{aligned}$$

Summieren dieser beiden Gleichungen liefert

$$\left(c_k c^\dagger_{k'} + c^\dagger_{k'} c_k\right) \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a = \delta(k, k') \left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a$$

und damit die Antivertauschungsrelation

$$\left\{c_k, c^\dagger_{k'}\right\} = c_k c^\dagger_{k'} + c^\dagger_{k'} c_k = \delta(k, k') \tag{2.21}$$

Zusammen mit Glg. (2.19) und der sich aus dieser Gleichung ergebenden Beziehung $\{c_k, c_{k'}\} = 0$ sind somit alle Antikommutatorrelationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bestimmt.

Die Basiszustände $\left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a$ lassen sich durch wiederholtes Anwenden der Erzeugungsoperatoren aus dem Vakuumzustand generieren

$$\left|k_1, k_2, \ldots, k_N\right\rangle_a = c^\dagger_{k_1} c^\dagger_{k_2} \ldots c^\dagger_{k_N} \left|0\right\rangle = \left(\prod_{i=1}^{N} c^\dagger_{k_i}\right) \left|0\right\rangle \ . \tag{2.22}$$

Auf der rechten Seite dieser Gleichung wird die Frage beantwortet, ob ein Zustand besetzt ist. Die für ununterscheidbare Teilchen unphysikalische Frage welches Elektron in einem spezifischen Zustand ist tritt jedoch nicht auf.

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren haben wir bezüglich einer festen Basis $\{|k\rangle\}$ des Einteilchenproblems definiert. Wir hätten natürlich auch von jeder anderen Basis $\{|\varphi\rangle\}$ mit

$$|\varphi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \ |k\rangle \langle k \mid \varphi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \ a_{k,\varphi} \, |k\rangle \tag{2.23}$$

starten können. Um zu zeigen, wie man von den $c_k^{(\dagger)}$ zu den zu $\{|\varphi\rangle\}$ gehörigen $c_\varphi^{(\dagger)}$ übergeht, betrachten wir zunächst einen speziellen Fall, nämlich

$$c_\varphi^\dagger |0\rangle = |\varphi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_k \; |k\rangle \langle k \,|\, \varphi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_k \; \langle k \,|\, \varphi\rangle \, c_k^\dagger |0\rangle \; .$$

Es ist daher plausibel anzunehmen, daß

$$c_\varphi^\dagger = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_k \; \langle k \,|\, \varphi\rangle \, c_k^\dagger \quad , \quad c_\varphi = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_k \; \langle \varphi \,|\, k\rangle \, c_k \; . \tag{2.24}$$

Um diese Relationen zu beweisen, betrachten wir das Matrixelement

$$\begin{aligned}
&{}_a\!\left\langle \varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_{N-1} \left| \left(c_\varphi - \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_k \; \langle \varphi \,|\, k\rangle \, c_k \right) \right| k_1, k_2, \ldots, k_N \right\rangle_a \\
&= {}_a\langle \varphi, \varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_{N-1} \,|\, k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a \\
&- [\langle \varphi \,|\, k_1\rangle \;{}_a\langle \varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_{N-1} \,|\, k_2, k_3, \ldots, k_N\rangle_a \\
&- \langle \varphi \,|\, k_2\rangle \;{}_a\langle \varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_{N-1} \,|\, k_1, k_3, \ldots, k_N\rangle_a \\
&\pm \ldots] \; .
\end{aligned}$$

Das Skalarprodukt ${}_a\langle \varphi, \varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_{N-1} \,|\, k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle_a$ kann durch eine Determinante ausgedrückt werden (siehe Glg. (2.10)). Entwickelt man diese nach der ersten Spalte, so ergibt sich exakt der Ausdruck in [...], so daß das Matrixelement verschwindet. Damit sind die Relationen Glg. (2.24) bewiesen.

Sehr oft treten die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bezüglich der Einteilchenbasis aus Orts- und Spineigenzuständen $\{|\boldsymbol{x}, \sigma\rangle\}$ auf. Diese bezeichnet man für den Fall von Kontinuumsmodellen (wir werden später auch Modelle betrachten, die so vereinfacht sind, daß die Fermionen auf diskreten "Gitterplätzen" lokalisiert sind) auch als Feldoperatoren und schreibt $\psi_\sigma^{(\dagger)}(\boldsymbol{x})$. Für sie gelten die Antivertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}
\left\{\psi_\sigma(\boldsymbol{x}), \psi_{\sigma'}^\dagger(\boldsymbol{x}')\right\} &= \delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \\
\{\psi_\sigma(\boldsymbol{x}), \psi_{\sigma'}(\boldsymbol{x}')\} &= 0 \\
\left\{\psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x}), \psi_{\sigma'}^\dagger(\boldsymbol{x}')\right\} &= 0 \; .
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Wir wollen nun Observable des Systems von N identischen Fermionen (definiert auf $\mathcal{H}_a^{(N)}$) auf den Fockraum erweitern und durch die Erzeugungs- und

Vernichtungsoperatoren ausdrücken. Dazu ist es wichtig festzustellen, daß jede solche Observable O (definiert auf $\mathcal{H}_a^{(N)}$) aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen symmetrisch unter Vertauschung eines beliebigen Paares von Teilchennummern ist. Damit folgt $[O, \mathcal{A}] = 0$. Somit ergibt sich für jeden beliebigen Zustand $|\phi\rangle$ aus $\mathcal{H}_a^{(N)}$

$$\begin{aligned} O\,|\phi\rangle &= \frac{1}{N!} \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1,k_2,\ldots,k_N} O\,|k_1,k_2,\ldots,k_N\rangle_a\ {}_a\langle k_1,k_2,\ldots,k_N|\,\phi\rangle \\ &= \frac{\sqrt{N!}}{N!} \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1,k_2,\ldots,k_N} O\mathcal{A}\,|k_1,k_2,\ldots,k_N\rangle\ {}_a\langle k_1,k_2,\ldots,k_N|\,\phi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k_1,k_2,\ldots,k_N} \mathcal{A}O\,|k_1,k_2,\ldots,k_N\rangle\ {}_a\langle k_1,k_2,\ldots,k_N|\,\phi\rangle\ , \end{aligned} \tag{2.26}$$

so daß es reicht, die Wirkung von O auf den Produktzustand $|k_1, k_2, \ldots, k_N\rangle$ zu kennen.

Beginnen wir die Diskussion mit dem Fall, daß O ein Einteilchenoperator $O = \sum_i o(i)$ ist, wobei $o(i)$ nur auf die "Koordinaten" des i-ten Teilchens wirkt. Es gilt dann

$$o(i)\,|k\rangle_{(i)} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k'} |k'\rangle_{(i)}\,\langle k'|\,o\,|k\rangle\ ,$$

mit $o = o(1)$. Letzteres gilt, da alle $o(i)$ identische Form haben. Zusätzlich haben wir im Matrixelement $\langle k'|\,o\,|k\rangle$ an den Zuständen den Teilchenindes i weggelassen, da er keine Rolle mehr spielt. Wenden wir das gerade gelernte auf den Produktzustand an, so ergibt sich

$$\begin{aligned} O\,|k_1,k_2,\ldots,k_N\rangle &= \sum_{i=1}^{N} o(i)\,|k_1,k_2,\ldots,k_N\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{N} \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k} \langle k|\,o\,|k_i\rangle\,|k_1,k_2,\ldots,k_{i-1},k,k_{i+1},\ldots k_N\rangle\ . \end{aligned}$$

Eingesetzt in Glg. (2.26) folgt

$$
\begin{aligned}
O\,|\phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k_1,k_2,\ldots,k_N} \mathcal{A}O\,|k_1,k_2,\ldots,k_N\rangle\ {}_a\langle k_1,k_2,\ldots,k_N|\ \phi\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k_1,\ldots,k_N} \sum_{i=1}^{N} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k} \langle k|\,o\,|k_i\rangle\,\mathcal{A}\,|k_1,\ldots,k_{i-1},k,k_{i+1},\ldots k_N\rangle\ {}_a\langle k_1,\ldots,k_N|\ \phi\rangle \\
&= \frac{1}{N!} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k_1,\ldots,k_N} \sum_{i=1}^{N} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k} \langle k|\,o\,|k_i\rangle\,|k_1,\ldots,k_{i-1},k,k_{i+1},\ldots k_N\rangle_a\ {}_a\langle k_1,\ldots,k_N|\ \phi\rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k,k_i} \langle k|\,o\,|k_i\rangle\,\frac{1}{(N-1)!} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k_1,\ldots,k_{i-1},k_{i+1},\ldots,k_N} (-1)^i c_k^\dagger\,|k_1,\ldots,k_{i-1},k_{i+1},\ldots k_N\rangle_a \\
&\qquad \times\ {}_a\langle k_1,\ldots,k_{i-1},k_{i+1},\ldots,k_N|\,(-1)^i c_{k_i}\,|\phi\rangle
\end{aligned}
$$

woraus sich unter Ausnutzen der Vollständigkeitsrelation in $\mathcal{H}_a^{(N-1)}$ für jedes feste $i = 1, 2, \ldots, N$

$$
O\,|\phi\rangle \;=\; \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k,k'} \langle k|\,o\,|k'\rangle\,c_k^\dagger c_{k'}\,|\phi\rangle
$$

also

$$
O = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{k,k'} \langle k|\,o\,|k'\rangle\,c_k^\dagger c_{k'} \tag{2.27}
$$

für die Wirkung von O auf dem Fockraum $\mathcal{F}$ ergibt.

Betrachten wir dazu einige wichtige Beispiele:

a) Kinetische Energie (Kontinuum, periodische Randbedingungen):
Es gilt auf $\mathcal{H}_a^{(N)}$

$$
T = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m}
$$

und damit auf $\mathcal{F}$

$$
T = \sum_{\sigma} \sum_{p} \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} c_{p,\sigma}^\dagger c_{p,\sigma}
$$

da $\langle \boldsymbol{p}', \sigma'|\,\hat{\boldsymbol{p}}\,|\boldsymbol{p}'', \sigma''\rangle = \delta_{\sigma',\sigma''}\ \boldsymbol{p}'\ \delta_{\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p}''}$, wenn $|\boldsymbol{p}, \sigma\rangle$ die Einteilchenzustände in der Impuls-Spin-Darstellung bezeichnet.

b) Teilchendichte:
Aus

$$\rho(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{x}}_i)$$

auf $\mathcal{H}_a^{(N)}$ ergibt sich

$$\rho(\boldsymbol{x}) = \sum_{\sigma} \psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x})\psi_\sigma(\boldsymbol{x})$$

auf $\mathcal{F}$, da $\langle \boldsymbol{x}', \sigma' |\, \delta(\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{x}}) \,| \boldsymbol{x}'', \sigma'' \rangle = \delta_{\sigma',\sigma''}\delta(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'')\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')$ in der Orts-Spin-Darstellung.

c) Einteilchenanteil des Hamiltonian $H_0 = \sum_i h(i)$:
Für diesen gilt auf $\mathcal{H}_a^{(N)}$

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m} + u(\hat{\boldsymbol{x}}_i) \right) .$$

Nutzen wir aus, daß $\langle \boldsymbol{x}', \sigma' |\, \hat{\boldsymbol{p}} \,| \boldsymbol{x}'', \sigma'' \rangle = -i\hbar\delta_{\sigma',\sigma''}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{x}'}\delta(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'')$, so folgt auf $\mathcal{F}$

$$H_0 = \sum_{\sigma} \int d\boldsymbol{x}\; \psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + u(\boldsymbol{x}) \right) \psi_\sigma(\boldsymbol{x}) \, . \tag{2.28}$$

Eleganter schreibt man H_0 in der Basis $\{|k\rangle\}$ von Eigenzuständen zu h (die k seien diskret) als

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k = \sum_k \varepsilon_k n_k \, ,$$

mit dem Besetzungszahloperator $n_k = c_k^\dagger c_k$. Gemäß der Definition der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gilt $n_k \,|k_1, \ldots, k_N\rangle_a = |k_1, \ldots, k_N\rangle_a$ falls der Einteilchenzustand mit Quantenzahl k (einfach) besetzt ist und $n_k \,|k_1, \ldots, k_N\rangle_a = 0$ sonst, was den Namen des Operators rechtfertigt.

Betrachten wir in einem nächsten Schritt Paarwechselwirkungen der Form

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} V(i, j)$$

auf $\mathcal{H}_a^{(N)}$. Ein wichtiges Beispiel im Falle von Teilchen mit Ladung Q ist die Coulombwechselwirkung

$$V_{\text{coul}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} \frac{Q^2}{|\hat{\boldsymbol{x}}_i - \hat{\boldsymbol{x}}_j|} \; .$$

In einer Übungsaufgabe werden wir zeigen, daß

$$V = \frac{1}{2} \sum_{k_1,k_2,k_3,k_4} v_{k_1,k_2,k_3,k_4} c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger c_{k_4} c_{k_3}$$

mit $v_{k_1,k_2,k_3,k_4} = \langle k_1, k_2 |\, V(1,2)\, | k_3, k_4 \rangle$ auf $\mathcal{F}$ gilt. In der Orts-Spin-Darstellung ergibt sich

$$V_{\text{coul}} = \frac{Q^2}{2} \sum_{\sigma_1,\sigma_2} \int d\boldsymbol{x}_1 \int d\boldsymbol{x}_2 \, \frac{1}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|} \psi_{\sigma_1}^\dagger(\boldsymbol{x}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\boldsymbol{x}_2) \psi_{\sigma_2}(\boldsymbol{x}_2) \psi_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1) \; .$$

Geschrieben in der Basis von Eigenzuständen $\{|k\rangle\}$ zu h (die k seien diskret) ergibt sich $H = H_0 + V$ zu

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \sum_{k_1,k_2,k_3,k_4} v_{k_1,k_2,k_3,k_4} c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger c_{k_4} c_{k_3} \; .$$

Nachdem wir den Fall der Fermionen ausführlich diskutiert haben, wollen wir nun die wichtigsten Resultate der zweiten Quantisierung für Bosonen zusammenstellen, wobei wir speziell auf die Unterschiede zwischen der Konstruktion für Fermionen und Bosonen eingehen werden. Analog zum Fockraum definieren wir den Raum

$$\mathcal{B} = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}_s^{(2)} \oplus \mathcal{H}_s^{(3)} \oplus \ldots \oplus \mathcal{H}_s^{(N)} \oplus \ldots \; .$$

Das Skalarprodukt auf den $\mathcal{H}_s^{(N)}$ läßt sich wie für Fermionen auf $\mathcal{B}$ erweitern. Verwenden wir Glg. (2.14), so ergibt sich für die Vollständigkeitsrelation auf $\mathcal{B}$ (geschrieben in total symmetrischen Besetzungszahlzuständen)

$$\sum_{n_0=0}^{\infty} \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_m=0}^{\infty} \ldots |n_0, n_1, \ldots, n_m, \ldots\rangle \langle n_0, n_1, \ldots, n_m, \ldots| = \mathbb{1}_{\mathcal{B}} \; .$$

Die Nebenbedingung $\sum_r n_r = N$ aus Glg. (2.14) entfällt auf $\mathcal{B}$. Die Zustände $|n_0, n_1, \ldots, n_j, \ldots\rangle$ mit Teilchenzahl $N = \sum_r n_r$ können gemäß

$$\begin{aligned} |n_0, n_1, \ldots, n_m, \ldots\rangle \;\; &= \;\; \left(\frac{1}{N!\, n_0!\, n_1! \ldots n_m! \ldots} \right)^{1/2} \\ &\quad \times \sum_\alpha \mathcal{P}_\alpha | \underbrace{k_0, \ldots, k_0}_{n_0\text{-mal}}, \underbrace{k_1, \ldots, k_1}_{n_1\text{-mal}}, \ldots, \underbrace{k_m, \ldots, k_m}_{n_m\text{-mal}}, \ldots \rangle \end{aligned}$$

geschrieben werden. Dabei bezeichnet k_0 die erste "Quantenzahl", k_1 die zweite, usw. in der von uns vorgegebenen Ordnung. Wegen des komplizierten Normierungsfaktors der Besetzungszahlzustände müssen solche Faktoren auch bei der Definition von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren berücksichtigt werden — was sie bereits von den Auf- und Absteigeoperatoren des harmonischen Oszillators kennen. Im Gegensatz zu unser bisherigen Notation unterscheiden wir im Folgenden nicht mehr zwischen der Quantenzahl k und der Position dieser Quantenzahl bezüglich unserer festen Ordnung, d.h. wir identifizieren k mit der Position (also von nun an $k = 0, 1, 2, \ldots$). Wir betrachten einen Operator b_k, der die Besetzungszahl des k-ten Niveaus um eins erniedrigt

$$b_k \left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle = c(n_k) \left| n_0, n_1, \ldots, n_k - 1, \ldots \right\rangle \ .$$

Wir wählen die Normierungskonstante $c(n_k)$ so, daß der Operator $\hat{n}_k = b_k^\dagger b_k$ bei Anwenden auf $\left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle$ die Besetzungszahl liefert, d.h.

$$\hat{n}_k \left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle = n_k \left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle \ .$$

Damit ergibt sich

$$\left| c(n_k) \right|^2 = \left\langle n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right| b_k^\dagger b_k \left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle = n_k \ ,$$

also $c(n_k) = \sqrt{n_k}$. Ist das k-te Niveau in $\left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle$ unbesetzt, gilt also $n_k = 0$, so folgt automatisch $b_k \left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle = 0$ (siehe harmonischer Oszillator). Unter Ausnutzen der Vollständigkeitsrelation auf $\mathcal{B}$ zeigt man damit leicht, daß für den zu b_k adjungierten Operator

$$b_k^\dagger \left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle = \sqrt{n_k + 1} \left| n_0, n_1, \ldots, n_k + 1, \ldots \right\rangle$$

gilt (siehe harmonischer Oszillator). Die total symmterischen Besetzungszahlzustände lassen sich gemäß

$$\left| n_0, n_1, \ldots, n_k, \ldots \right\rangle = \left(\frac{1}{n_0!\, n_1! \ldots n_m! \ldots} \right)^{1/2} \prod_{k=1}^{\infty} \left(b_k^\dagger \right)^{n_k} \left| 0 \right\rangle$$

aus dem Vakuumzustand erzeugen. Für die Kommutatorrelationen erhält man wie im Fall des harmonischen Oszillators

$$\begin{aligned} \left[b_k, b_{k'}^\dagger \right] &= \delta(k, k') \\ \left[b_k, b_{k'} \right] &= 0 \\ \left[b_k^\dagger, b_{k'}^\dagger \right] &= 0 \ . \end{aligned}$$

Für eine Basiswechsel der zugrundeliegenden Einteilchenbasis gelten dieselben Regeln wie für Fermionen. Gleiches gilt für das Erweitern von Operatoren auf $\mathcal{B}$ und Ausdrücken durch b und $b^\dagger$ (siehe Übungen).[5]

[5]Bei der Herleitung muß man wieder Faktoren n_k berücksichtigen, die sich am Ende aber wegheben.

3 Formale Eigenschaften Greenscher Funktionen und allgemeine Zusammenhänge

Nachdem in Kapitel 1 erläutert wurde, welche Rolle Greensche Funktionen in der Vielteilchentheorie spielen, stellt sich natürlich die Frage, ob und wie man diese Wundergrößen nun eigentlich ausrechnen kann. Zunächst garantiert einem die Definition einer Größe ja noch nicht automatisch deren Berechenbarkeit, ja nicht einmal ihre Existenz. Außerdem ist die Berechnung einer beliebigen Greenschen Funktion für ein vorgegebenes System mit Hamiltonoperator H dasselbe wie die Diagonalisierung des Hamiltonoperators. Der wesentliche Punkt ist, daß die Greensche Funktion eines Operatorpaares A, B nur bestimmte, durch die Eigenschaften der Operatoren festgelegte Teile des Spektrums von H „mißt“, z.B. Einteilchenanregungen mit einem bestimmten Impuls. Diese Vereinfachung ermöglicht es in der Tat vielfach, Greensche Funktionen auszurechnen, bzw. zumindest physikalisch und mathematisch wohlbegründete Näherungen aufzustellen. Bevor wir uns mit der störungstheoretischen Berechnung von Greenschen Funktionen beschäftigen, sollen einige wichtige, immer wieder gebrauchte formale Eigenschaften Greenscher Funktionen behandelt werden. Außerdem wollen wir ein paar Beispiele für Greensche Funktionen bringen. Ab diesem Kapitel werden wir Einheiten verwenden, in denen $\hbar$ nicht explizit vorkommt, d.h. Frequenz, reziproke Zeit und Energie haben dieselbe Dimension.

3.1 Bewegungsgleichungen

Wir betrachten ein System, dessen Zeitabhängigkeit und statistischer Operator durch eine nicht näher spezifizierten zeitunabhängigen Hamiltonoperator H gegeben sei. Für zwei beliebige in dem System definierte Operatoren A, B ist die retardierte Greensche Funktion definiert durch

$$G_{AB}(t) = \langle\langle A, B \rangle\rangle_t := -i\Theta(t) \left\langle [A(t), B(0)]_{\pm} \right\rangle , \tag{3.1}$$

wobei der Antikommutator zu nehmen ist, wenn es sich bei A, B um Fermion-Erzeugungs- oder Vernichtungsoperatoren handelt, der Kommutator in allen anderen Fällen (diese Definition wird sich später als zweckmäßig erweisen). $\langle \ldots \rangle$ bedeutet einen thermischen Erwartungswert gebildet mit H. Die Zeitabhängigkeit der Operatoren ist gegeben durch

$$A(t) = \mathrm{e}^{iHt} A \, \mathrm{e}^{-iHt} \tag{3.2}$$

Ab hier lassen wir die Faktoren $\hbar$ weg, um Schreibarbeit zu sparen, und da es keine einheitliche Definition gibt. In wichtigen Fällen fügen wir sie im Endergebnis wieder ein. Im Allgmeinen erhält man die richtige physikalische Antwortfunktion, wenn man die Energien E durch $E/\hbar$ ersetzt, und das Ergebnis durch $\hbar$ dividiert.

Bildet man die Zeitableitung der Greenschen Funktion, dann erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_t &= -i\Theta(t)\langle[\dot{A}(t), B(0)]_\pm\rangle - i\delta(t)\langle[A(t), B(0)]_\pm\rangle \\ &= \langle\!\langle \dot{A}, B\rangle\!\rangle_t - i\delta(t)\langle[A(t), B(0)]_\pm\rangle \end{aligned} \tag{3.3}$$

Wenden wir hierauf die Laplace-Transformation an:

$$G_{AB}(z) = \langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_z = \int_0^\infty dt \mathrm{e}^{izt} \langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_t \quad \Im\mathrm{m} z > 0\,, \tag{3.4}$$

so erhalten wir mit einer partiellen Integration[6]

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dt \mathrm{e}^{izt} \frac{d}{dt}\langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_t &= -\langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_{t=0^+} - iz \int_0^\infty dt \mathrm{e}^{izt} \langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_t \\ &= -iz\langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_z + i\langle[A, B]_\pm\rangle \end{aligned} \tag{3.5}$$

und daraus schließlich[7]:

$$z\langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_z + \langle\!\langle \mathcal{L}A, B\rangle\!\rangle_z = \langle[A, B]_\pm\rangle \tag{3.6}$$

mit $\mathcal{L}A := [H, A]$ ("Liouville-Operator").

Aus der berechneten Laplace-Transformierten erhält man die zeitabhängige Greensche Funktion durch die Laplace-Rücktransformation:

$$G_{AB}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty+i\delta}^{+\infty+i\delta} dz \mathrm{e}^{-izt} G_{AB}(z) \tag{3.7}$$

---

[6] Wegen der Stufenfunktion in der Definition (3.1) ist die untere Grenze als $\lim_{\delta \searrow 0}$ zu lesen; daher trägt auch die δ-Funktion auf der rechten Seite nicht bei!

[7] Aufgrund von $\langle[A(t), B]_\pm\rangle = \langle[A, B(-t)]_\pm\rangle$ kann man die Zeitentwicklung auch auf B anwenden. Die Bewegungsgleichung lautet dann $z\langle\!\langle A, B\rangle\!\rangle_z - \langle\!\langle A, \mathcal{L}B\rangle\!\rangle_z = \langle[A, B]_\pm\rangle$.

oder

$$G_{AB}(t) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathrm{e}^{-i(\omega+i\delta)t} G_{AB}(\omega + i\delta) \,. \tag{3.8}$$

Die Bewegungsgleichung für die Greensche Funktion $\langle\langle A, B\rangle\rangle_z$ ist eine exakte Beziehung und hat – wie in solchen Fällen üblich – den Schönheitsfehler, daß sie bei der Berechnung meist nicht weiterhilft, da sie im Allgemeinen auf neue kompliziertere Greensche Funktion führt. In einigen im folgenden zu besprechenden Spezialfällen von nicht wechselwirkenden Teilchen lassen sich diese Bewegungsgleichungen direkt auswerten. In anderen Fällen lassen sich durch Faktorisierung Näherungslösungen aufstellen. In den meisten Fällen sind jedoch die im nächsten Kapitel zu besprechenden störungstheoretischen Verfahren praktischer.

Ein einfaches Beispiele: Freie Elektronen

Hier lautet der Hamiltonoperator:

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}} \, c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{3.9}$$

Da der statistische Operator im großkanonischen Ensemble mit dem Operator $K = H - \mu N$ gebildet wird, ist es auch zweckmäßig, die Zeitabhängigkeit der Fermioperatoren mit K zu definieren, d.h.

$$c_{\boldsymbol{k}\sigma}(t) = \mathrm{e}^{iKt} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \mathrm{e}^{-iKt} \tag{3.10}$$

mit

$$K = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) \, c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \,. \tag{3.11}$$

Wir wollen die Einteilchen-Greensche Funktion berechnen:

$$G(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}', z) = \langle\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma}, c^\dagger_{\boldsymbol{k}'\sigma'} \rangle\rangle_z \tag{3.12}$$

Dazu brauchen wir den Antikommutator:

$$[c_{\boldsymbol{k}\sigma}, c^\dagger_{\boldsymbol{k}'\sigma'}]_+ = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \, \delta_{\sigma,\sigma'} \tag{3.13}$$

und den Kommutator

$$\mathcal{L} c_{\boldsymbol{k}\sigma} = [K, c_{\boldsymbol{k}\sigma}]_- = -(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) \, c_{\boldsymbol{k}\sigma} \,. \tag{3.14}$$

Für die Bewegungsgleichung erhalten wir damit:

$$z\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma}, c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_z - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma}, c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_z = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{3.15}$$

und daraus das Ergebnis:

$$\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma}, c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_z = \frac{\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}}{z - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)}\,. \tag{3.16}$$

Zur Berechnung der Laplace-Rücktransformation

$$\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma}, c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_t = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathrm{e}^{-i(\omega+i\delta)t}\frac{\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}}{\omega + i\delta - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)} \tag{3.17}$$

können wir das Integral durch einen Kreisbogen im Unendlichen schließen und dann den Residuensatz anwenden. Damit der Kreisbogen keinen Beitrag liefert, muß man für $t < 0$ in der oberen Halbebene schließen, für $t > 0$ in der unteren Halbebene (Abb. 3.1). Das Ergebnis ist

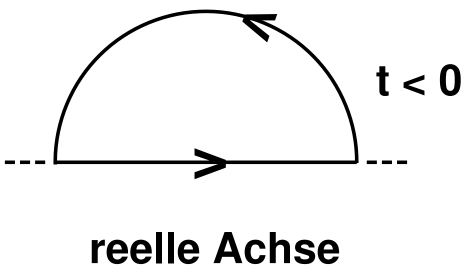


Abbildung 3.1: *Integrationsweg zur Berechnung der retardierten Greenschen Funktion.*

$$\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma}, c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_t = -i\Theta(t)\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}\mathrm{e}^{-i(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu)t}\,. \tag{3.18}$$

Dieses Ergebnis hätte man auch direkt im Zeitraum mit

$$c_{\boldsymbol{k}\sigma}(t) = \mathrm{e}^{iKt}c_{\boldsymbol{k}\sigma}\mathrm{e}^{-iKt} = c_{\boldsymbol{k}\sigma}\mathrm{e}^{-i(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu)t} \tag{3.19}$$

erhalten.

Bemerkung: Für ein wechselwirkendes Elektronensystem gilt exakt:

$$c_{\boldsymbol{k}\sigma}(t) = \mathrm{e}^{iKt}c_{\boldsymbol{k}\sigma}\mathrm{e}^{-iKt} = \mathrm{e}^{i\mu t}\mathrm{e}^{iHt}c_{\boldsymbol{k}\sigma}\mathrm{e}^{-iHt} \tag{3.20}$$

solange der Teilchenzahloperator N mit H vertauscht. Das heißt, der Gebrauch des großkanonischen Operators verursacht einfach eine Energieverschiebung um μ im Einteilchen-Anregungsspektrum der Greenschen Funktion auch für ein wechselwirkendes Elektronensystem.

3.2 Spektraldarstellung und Dissipations-Fluktuations-Theorem

Im Folgenden sollen einige grundlegende Eigenschaften von Greenschen Funktionen diskutiert werden: zunächst die sogenannte Spektraldarstellung, nach der sich die Laplacetransformierte der Greenschen Funktion als analytische Funktion in jeweils einer Halbebene darstellt, dann das Dissipations-Fluktuations-Theorem, das eine Zusammenhang zwischen Antwortfunktion und Korrelationsfunktion herstellt, und schließlich die Kramers-Kronig-Relationen, die sich ebenfalls aus den analytischen Eigenschaften der Greenschen Funktionen ergeben und einen Zusammenhang zwischen Real- und Imaginärteil darstellen[8].

a) Spektraldarstellung

Wir starten von der Definition der retardierten Greenschen Funktion

$$G_{AB}(t) = -i\Theta(t)\langle[A(t), B]_\epsilon\rangle \tag{3.21}$$

mit $\epsilon = +1$ falls A *und* B fermionische Erzeuger bzw. Vernichter sind, $\epsilon = -1$ sonst. Wir definieren zwei Korrelationsfunktionen

$$C^>_{AB}(t) = \langle A(t)B\rangle \tag{3.22}$$

$$C^<_{AB}(t) = \langle BA(t)\rangle \tag{3.23}$$

und ihre Fourier-Transformierten:

$$C^{>,<}_{AB}(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\, \mathrm{e}^{i\omega t}\, C^{>,<}_{AB}(t)\,. \tag{3.24}$$

Damit läßt sich die Greensche Funktion schreiben als

$$G_{AB}(t) = -i\Theta(t)(C^>_{AB}(t) + \epsilon C^<_{AB}(t))\,. \tag{3.25}$$

[8]Eine ausführlichere Diskussion dieser Themen findet sich z.B. in Referenz [23].

und für ihre Laplace-Transformierte erhält man:

$$G_{AB}(z) = \int_0^\infty dt\, \mathrm{e}^{izt}\, G_{AB}(t) \tag{3.26}$$

$$= -i \int_0^\infty dt\, \mathrm{e}^{izt} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathrm{e}^{-i\omega t} (C^{>}_{AB}(\omega) + \epsilon C^{<}_{AB}(\omega))\,. \tag{3.27}$$

Nach Ausführung der Zeit-Integration erhält man:

$$G_{AB}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\rho_{AB}(\omega)}{z - \omega} \tag{3.28}$$

mit

$$\rho_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\pi} (C^{>}_{AB}(\omega) + \epsilon C^{<}_{AB}(\omega))\,. \tag{3.29}$$

So etwas nennt man eine Spektraldarstellung und die Größe $\rho_{AB}(\omega)$ heißt Spektralfunktion. Aus dieser Form ergibt sich eine Darstellung der Greenschen Funktion als analytische Funktion in der oberen ($\Im\mathrm{m} z > 0$), bzw. der unteren ($\Im\mathrm{m} z < 0$) komplexen Halbebene. Die Spektralfunktion ergibt sich hierbei als Sprungfunktion der Greenschen Funktion an der reellen Achse:

$$\rho_{AB}(\omega) = -\frac{1}{2\pi i} (G_{AB}(\omega + i\delta) - G_{AB}(\omega - i\delta)) = -\frac{1}{\pi} G''_{AB}(\omega)\,. \tag{3.30}$$

Unter bestimmten Voraussetzungen, die wir demnächst diskutieren werden, ist die Sprungfunktion $G''_{AB}(\omega)$ eine reelle Funktion.

b) Dissipations-Fluktuations-Theorem

Nun zeigen wir folgenden wichtigen Zusammenhang zwischen der Korrelationsfunktion und der Spektralfunktion der Greenschen Funktion:

$$\langle A(t) B \rangle = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi}\, \mathrm{e}^{-i\omega t}\, \frac{G''_{AB}(\omega)}{1 + \epsilon\, \mathrm{e}^{-\beta\omega}}\,. \tag{3.31}$$

Beweis: Wir zeigen zunächst, daß gilt:

$$C^{<}_{AB}(\omega) = \mathrm{e}^{-\beta\omega}\, C^{>}_{AB}(\omega)\,. \tag{3.32}$$

Dazu verwenden wir eine spektrale Zerlegung der zeitlichen Entwicklung des Heisenberg-Operators nach einem vollständigen Funktionensystem von H:

$$\begin{aligned} C^{>}_{AB}(t) &= \langle \mathrm{e}^{iHt} A \mathrm{e}^{-iHt} B \rangle \\ &= \sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} \mathrm{e}^{i(E_n - E_m)t} \, . \end{aligned} \tag{3.33}$$

Für die Fourier-Transformierte erhalten wir dann:

$$C^{>}_{AB}(\omega) = \sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} 2\pi\delta(\omega + E_n - E_m) \tag{3.34}$$

für die andere Funktion entsprechend:

$$C^{<}_{AB}(\omega) = \sum_{nm} p_m B_{mn} A_{nm} 2\pi\delta(\omega + E_n - E_m) \, . \tag{3.35}$$

Setzt man für das Verhältnis der Boltzmann-Faktoren ein:

$$p_m = \mathrm{e}^{-\beta(E_m - E_n)} p_n \tag{3.36}$$

dann erhält man unter Verwendung der δ-Funktion die Behauptung.

Aus der Spektraldarstellung erhält man für die Spektralfunktion $G''_{AB}(\omega)$ der Greenschen Funktion (Lehmann-Darstellung):

$$G''_{AB}(\omega) = -\pi \sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} \delta(\omega + E_n - E_m)(1 + \epsilon \mathrm{e}^{-\beta\omega}) \quad . \tag{3.37}$$

Daraus folgen sofort zwei nützliche Relationen:

1. $G''_{AB}(-\omega) = \epsilon G''_{BA}(\omega)$, bzw. $G_{AB}(-z) = -\epsilon G_{BA}(z)$. Dies zeigt man, indem man die Summationsindizes in der Spektralfunktion umbenennt.

2. Für $A = B^\dagger$ ist $G''_{AB}(\omega)$ ist eine reelle Funktion und gleich dem Imaginärteil $\Im\mathrm{m} G_{AB}(\omega + i\delta)$ der Greenschen Funktion. Insbesondere folgt daraus für den wichtigen Spezialfall $B = A$ hermitesch: $G''_{AA}(-\omega) = -G''_{AA}(\omega)$ reell und ungerade.

Aus der Rücktransformation der Funktion $C^{>}_{AB}(\omega)$ erhält man die wichtige Beziehung zwischen Korrelationsfunktion und Spektralfunktion:

$$\langle A(t) B \rangle = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \mathrm{e}^{-i\omega t} \frac{G''_{AB}(\omega)}{1 + \epsilon \mathrm{e}^{-\beta\omega}} \tag{3.38}$$

Ist die Greensche Funktion eine Antwort-Funktion mit $B = A^\dagger$, $\chi_{AA^\dagger} = -G_{AA^\dagger}$, dann gilt für $t = 0$:

$$\langle AA^\dagger \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{AA^\dagger}(\omega)}{1 + \epsilon \mathrm{e}^{-\beta\omega}} . \tag{3.39}$$

Dies ist das sogenannte Dissipations-Fluktuations-Theorem, das die thermischen Fluktuationen einer Variablen A mit der Spektralfunktion $\chi''(\omega)$ verbindet, die etwas mit der Energieabsorption durch eine äußere Störung zu tun hat.

c) Kramers-Kronig-Relationen:

Die Kramers-Kronig-Relationen stellen einen Zusammenhang zwischen Realteil und Imaginärteil der Greenschen Funktion her. Etwas allgemeiner gilt: Definiert man eine Funktion $G'(\omega)$ durch

$$G'(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G''(\omega')}{\omega - \omega'} \tag{3.40}$$

dann gilt umgekehrt:

$$G''(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G'(\omega')}{\omega - \omega'} \quad ; \tag{3.41}$$

hierbei ist $P\int$ das Hauptwertintegral.

Der Beweis geht folgendermaßen: Zunächst ist nach der Spektralzerlegung

$$\begin{aligned} G(\omega + i\delta) &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G''(\omega')}{\omega + i\delta - \omega'} \\ &= -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G''(\omega')}{\omega - \omega'} + iG''(\omega) \\ &= G'(\omega) + iG''(\omega) . \end{aligned} \tag{3.42}$$

Andererseits läßt sich $G(z)$ für $\Im\mathrm{m} z > 0$ auch folgendermaßen als Cauchy-Integral darstellen:

$$G(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} dz' \frac{G(z')}{z' - z} , \tag{3.43}$$

wobei $\mathcal{C}$ einen Weg entlang der reellen Achse beschreibt, der durch eine Halbkreis in der oberen Halbebene geschlossen wird und natürlich z umschließt (ähnlich wie in Abb. 3.1). Verschiebt man den Halbkreis ins Unendliche, dann gibt er keinen

Beitrag zum Integral, da die Greensche Funktion sich für $|z| \to \infty$ mindestens wie z^{-1} verhält (das kann man aus der Bewegungsgleichung herleiten). Dann erhält man:

$$G(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G(\omega' + i\delta)}{\omega' - z} \tag{3.44}$$

Verwendet man wiederum

$$\frac{1}{\omega' - \omega - i\delta} = P \frac{1}{\omega' - \omega} + i\pi\delta(\omega' - \omega) \tag{3.45}$$

dann findet man

$$G(\omega + i\delta) = -\frac{1}{2\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{G(\omega' + i\delta)}{\omega - \omega'} + \frac{1}{2} G(\omega + i\delta) \tag{3.46}$$

woraus mit $G(\omega + i\delta) = G'(\omega) + iG''(\omega)$, auf der linken und rechten Seite eingesetzt, die Behauptung folgt.

d) <u>Energieabsorption</u>

Hier wollen wir noch kurz den Zusammenhang zwischen dem Imaginärteil der Suszeptibilität und der durch eine äußeren Störung verursachten Energieabsorption erläutern.

Wir betrachten ein System beschrieben durch den Hamilton-Operator H, angetrieben durch ein äußeres Feld über den Kopplungsterm $W_t = -Bf(t)$, wobei B eine Observable des Systems sei.

Die aus dem äußeren Feld aufgenommene Leistung ist

$$P = \frac{d}{dt} \langle \tilde{H}_t \rangle \tag{3.47}$$

mit $\tilde{H}_t = H + W_t$. Wir müssen nun die Zeitableitung des thermischen Erwartungswertes eines Operators bilden, der selbst von der Zeit abhängt. Hierfür gilt allgemein:

$$\frac{d}{dt} \langle A_t \rangle = i \langle [H, A_t] \rangle + \left\langle \frac{\partial A_t}{\partial t} \right\rangle , \tag{3.48}$$

in diesem Fall:

$$\frac{d}{dt} \langle \tilde{H}_t \rangle = i \left\langle [\tilde{H}_t, \tilde{H}_t] \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \tilde{H}_t}{\partial t} \right\rangle = -\langle B \rangle_t \frac{df}{dt} = P\,. \tag{3.49}$$

Hierbei wurde die Berechnung der Leistung auf die Berechnung des Erwartungswertes der Observablen (in Gegenwart der Störung) zurückgeführt, an die die äußere Störung ankoppelt.

Zur Berechnung können wir solange die Störung "schwach" ist, die Lineare Antworttheorie verwenden:

$$\langle B \rangle_t = \langle B \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \, \chi_{BB}(t - t') \, f(t') \tag{3.50}$$

damit

$$P(t) = -\frac{df(t)}{dt} \left(\langle B \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \, \chi_{BB}(t - t') \, f(t') \right) \tag{3.51}$$

Uns interessiert der zeitliche Mittelwert der Leistung für eine Störung durch ein Wechselfeld mit

$$f(t) = \frac{1}{2} f \mathrm{e}^{\delta t} (\mathrm{e}^{-i\omega t} + \mathrm{e}^{i\omega t}) \; . \tag{3.52}$$

Der zeitlich gemittelte Beitrag des ersten Terms $\langle B \rangle df/dt$ in Glg. (3.51) verschwindet. Wir benötigen daher nur $\delta \langle B \rangle_t$ welches durch

$$\delta \langle B \rangle_t = \frac{f}{2} (\mathrm{e}^{-i\omega t} \chi_{BB}(\omega + i\delta) + \mathrm{e}^{i\omega t} \chi_{BB}(-\omega + i\delta)) \tag{3.53}$$

gegeben ist. Zusätzlich gilt

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{2} f (-i\omega \mathrm{e}^{-i\omega t} + i\omega \mathrm{e}^{i\omega t}) \; . \tag{3.54}$$

Für den zeitlichen Mittelwert erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \overline{P} &= -\frac{f^2}{4} \left[i\omega \chi_{BB}(\omega + i\delta) - i\omega \chi_{BB}(-\omega + i\delta) \right] \\ &= -\frac{f^2}{4} \left[i\omega (\chi'_{BB}(\omega) + i\chi''_{BB}(\omega)) - i\omega (\chi'_{BB}(-\omega) + i\chi''_{BB}(-\omega)) \right] \; . \end{aligned} \tag{3.55}$$

Unter Ausnützung der Symmetrierelationen für Antwort-Funktionen hermitescher Variabler erhalten wir dann für die mittlere absorbierte Leistung bei der Frequenz ω

$$\overline{P} = \frac{f^2}{2} \omega \chi''_{BB}(\omega) \tag{3.56}$$

oder

$$\overline{P} = \omega \chi''_{BB}(\omega) \overline{f^2(t)} \, . \tag{3.57}$$

3.3 Thermodynamische Greensche Funktion

Neben der bisher diskutierten retardierten Greenschen Funktion erweist es sich als günstig, eine weitere Definition einer Greenschen Funktion einzuführen: die thermodynamische Greensche Funktion. Diese Funktion erlaubt eine besonders einfache störungstheoretische Berechnung mit Hilfe von Feynman-Graphen. Auch wenn diese Greensche Funktion keine direkte physikalische Interpretation erlaubt, läßt sich daraus jedoch leicht die physikalische retardierte Greensche Funktion berechnen.

Wir definieren:

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = -\langle \mathcal{T} A[\tau] B \rangle = \begin{cases} -\langle A[\tau] B \rangle & \text{für } \tau > 0 \\ \mp \langle B A[\tau] \rangle & \text{für } \tau \leq 0 \end{cases} \tag{3.58}$$

mit einem Heisenberg-Operator für quasi-imaginäre Zeiten

$$A[\tau] = \mathrm{e}^{\tau H} A \mathrm{e}^{-\tau H} \,. \tag{3.59}$$

Diese Greensche Funktion wird im Intervall $-\beta \leq \tau < \beta$ definiert. Das obere Vorzeichen gilt für Bose-Operatoren und für Reponse-Funktionen, das untere Vorzeichen mit Vorzeichenwechsel des Zeitordnungsoperators $\mathcal{T}$ gilt nur für Fermi-Operatoren. Der Vorteil dieser Greensche Funktion liegt darin, daß die Zeitvariable τ ähnlich wie die reziproke Temperatur β im statistischen Operator $\mathrm{e}^{-\beta H}$, der in der Definition des thermischen Erwartungswertes steckt, behandelt wird.

Wegen

$$\langle A[\tau + \beta] B \rangle = \langle B A[\tau] \rangle \tag{3.60}$$

gilt für $-\beta \leq \tau < 0$:

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau + \beta) = \pm \mathcal{G}_{AB}(\tau) \,. \tag{3.61}$$

Dies beweist man leicht durch zyklische Permutation der Operatoren unter der Spur:

$$\langle A[\tau+\beta] B \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\beta H} \mathrm{e}^{(\tau+\beta)H} A \mathrm{e}^{-(\beta+\tau)H} B) = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\beta H} B \mathrm{e}^{\tau H} A \mathrm{e}^{-\tau H}) \,. \tag{3.62}$$

Zu dieser im Intervall $-\beta \leq \tau < \beta$ definierten periodischen Funktion führt man die Fourier-Transformation ein:

$$\mathcal{G}_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau \mathrm{e}^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}_{AB}(\tau) \tag{3.63}$$

mit den Matsubara-Frequenzen $\omega_n = n\pi/\beta$. Wegen der Symmetrie der Greenschen Funktion (3.61) zwischen positiven und negativen Werten für β kann man auch schreiben:

$$\mathcal{G}_{AB}(i\omega_n) = \int\limits_0^\beta d\tau \mathrm{e}^{i\omega_n\tau}\mathcal{G}_{AB}(\tau) \tag{3.64}$$

mit $\omega_n = 2n\pi/\beta$ für Greensche Funktionen ohne Vorzeichen-Wechsel in $\mathcal{T}$ (Antwort-Funktionen und Bose-Operatoren) und $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ bei Vorzeichenwechsel (Fermi-Operatoren).

Die Umkehrung lautet dann:

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \mathrm{e}^{-i\omega_n\tau}\,\mathcal{G}_{AB}(i\omega_n)\,. \tag{3.65}$$

Die Verbindung zu der früher definierten retardierten Greenschen Funktion $G_{AB}(z)$ wird durch folgende Beziehung geliefert:

$$G_{AB}(z = i\omega_n) = \mathcal{G}_{AB}(i\omega_n)\,, \tag{3.66}$$

d.h. die Werte der retardierten Greenschen Funktion im Frequenzraum für Frequenzen auf der imaginären Achse bei $z = i\omega_n$ sind identisch mit den Fourier-Komponenten der thermodynamischen Greenschen Funktion. Das bedeutet, die retardierte Greensche Funktion für Frequenzen auf der reellen Achse ergibt sich aus der analytischen Fortsetzung der thermodynamischen Greenschen Funktion. Diese analytische Fortsetzung stellt kein Problem dar, solange die thermodynamische Greensche Funktion durch analytische Ausdrücke gegeben ist (wir werden Beispiele kennenlernen). Falls die Werte nur numerisch bekannt sind, z.B. durch numerische Integration oder durch Quanten-Monte-Carlo berechnet, dann stellt die analytische Fortsetzung ein schwieriges numerisches Problem dar.

Der Beweis der Beziehung (3.66) folgt aus der Identität der Spektralfunktion für die beiden Funktionen. Durch Einsetzen von Eigenzuständen zu H erhält man:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{AB}(i\omega_s) &= -\int\limits_0^\beta d\tau \mathrm{e}^{i\omega_s\tau}\sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} \mathrm{e}^{\tau(E_n-E_m)} \\ &= -\sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} \frac{\pm\mathrm{e}^{\beta(E_n-E_m)} - 1}{i\omega_s + E_n - E_m}\,. \end{aligned} \tag{3.67}$$

Hierbei wurde die Beziehung $e^{i\omega_s\beta} = \pm 1$ verwendet.

Das Ergebnis läßt sich auch schreiben als

$$\mathcal{G}_{AB}(i\omega_s) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\rho_{AB}(\omega')}{i\omega_s - \omega'} \tag{3.68}$$

mit

$$\rho_{AB}(\omega) = \sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} (1 \mp e^{-\beta\omega}) \delta(\omega + E_n - E_m) \,. \tag{3.69}$$

Dies ist die gleiche Spektralfunktion, wie wir sie für die retardierte Greensche Funktion gefunden haben. Insbesondere gilt der Zusammenhang mit der Sprungfunktion:

$$\rho_{AB}(\omega) = -\frac{1}{\pi} G''_{AB}(\omega) \,. \tag{3.70}$$

Im Folgenden werden wir im Frequenzraum keinen Notations-Unterschied zwischen der thermodynamischen Greenschen Funktion und der retardierten Greenschen Funktion mehr machen, d.h. wir schreiben:

$$\mathcal{G}_{AB}(i\omega_n) = G_{AB}(i\omega_n) \,. \tag{3.71}$$

Im Zeitraum notieren wir die thermodynamische Greensche Funktion als

$$\mathcal{G}_{AB}(\tau) = G_{AB}(\tau) \tag{3.72}$$

und deuten durch den griechischen Buchstaben für die Variable τ die thermodynamische Greensche Funktion an.

<u>Beispiel</u>: Freie Elektronen

$$K = H - \mu N = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu) c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} \tag{3.73}$$

$$G(k\sigma, \tau) = -\langle c_{k\sigma}(\tau) c^\dagger_{k\sigma} \rangle, \quad \tau > 0 \,. \tag{3.74}$$

Mit

$$c_{k\sigma}(\tau) = e^{-(\epsilon_k - \mu)\tau} c_{k\sigma} \tag{3.75}$$

findet man wegen $\exp(i\omega_n\beta) = -1$ für ungerade Matsubara-Frequenzen für die Fourier-Transformierte:

$$G(k\sigma, i\omega_n) = \frac{e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}{i\omega_n - \epsilon_k + \mu} \langle c_{k\sigma} c^\dagger_{k\sigma} \rangle \,. \tag{3.76}$$

Andererseits kennen wir von früher das Ergebnis für die Laplace-Transformierte der retardierten Greenschen Funktion:

$$G(k\sigma, z = i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k + \mu} \,. \tag{3.77}$$

Daraus ergibt sich durch Vergleich:

$$\langle c_{k\sigma} c^\dagger_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} \,. \tag{3.78}$$

Natürlich kann man den Erwartungswert für freie Elektronen auch direkt berechnen. Einen nützlichen Trick dazu werden wir beim Wickschen Theorem kennenlernen.

3.4 Poissonsche Summenformel

Wir werden im nächsten Kapitel eine Störungstheorie für die thermodynamische Greensche Funktion entwicklen. Bei deren expliziter Auswertung müssen wir oft Summen über Matsubara-Frequenzen der Form $\frac{1}{\beta}\sum_n F(i\omega_n)$ ausrechnen. Solche Summen lassen sich immer auf Integrale zurückführen. Der Trick besteht darin, eine meromorphe Funktion $g(z)$ zu finden, die auf der imaginären Achse bei den Matsubara-Frequenzen $z = i\omega_n$ einfache Pole mit einem festen Residuum $-1/\beta$ besitzt. Dann gilt:

$$\frac{1}{\beta}\sum_n F(i\omega_n) = -\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\mathcal{C}} dz\, F(z)\, g(z) \,, \tag{3.79}$$

wobei die Kontur $\mathcal{C}$ alle Pole der Funktion $g(z)$ umkreist. Im Falle von ungeraden Matsubara-Frequenzen $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$, den wir im Folgenden allein diskutieren wollen, ist die Kontur in Abb. 3.2 gezeigt. Um daraus ein berechenbares Integral zu machen, muß die Kontur noch geeignet deformiert werden, wie in den folgenden Beispielen gezeigt wird.

Die Residuen erzeugende Funktion $g(z)$ ist im wesentlichen die Fermi-Funktion. Wir führen ein:

$$\begin{aligned} g_1(z) &= \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta z} + 1} = f(z) \,, && (3.80) \\ g_2(z) &= -\frac{1}{\mathrm{e}^{-\beta z} + 1} = f(z) - 1 \,, && (3.81) \\ g_3(z) &= -\frac{1}{2}\tanh\frac{\beta z}{2} = f(z) - \frac{1}{2} \,. && (3.82) \end{aligned}$$

Die Wahl richtet sich nach dem asymptotischen Verhalten der Funktion $F(z)$ für große z.

Beispiele:

1. Berechne $\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle$ für freie Elektronen. Aus

$$G(\boldsymbol{k}\sigma,\tau) = -\langle \mathcal{T} c_{\boldsymbol{k}\sigma}[\tau] c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle = \langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}[\tau]\rangle, \quad \tau < 0 \tag{3.83}$$

folgt

$$\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle = G(\boldsymbol{k}\sigma,-\delta), \quad \delta \to +0\,. \tag{3.84}$$

Andererseits ist

$$G(\boldsymbol{k}\sigma,-\delta) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \mathrm{e}^{i\omega_n\delta} G(\boldsymbol{k}\sigma,i\omega_n) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \frac{\mathrm{e}^{i\omega_n\delta}}{i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \mu}\,. \tag{3.85}$$

Mittels der Poissonschen Summenformel erhalten wir daraus

$$\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle = -\frac{1}{2\pi i}\int_{\mathcal{C}} dz\,\frac{\mathrm{e}^{\delta z}}{z - \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \mu}\,g(z)\,. \tag{3.86}$$

Die zu summierende Funktion $F(z)$ hat einen Pol auf der reellen Achse. Deformieren wir die Kontur in der in Abb. 3.2 angegebenen Weise, dann läßt sich das Integral leicht berechnen, wenn der Kreis im Unendlichen keinen Beitrag liefert. Dies ist der Fall, wenn man für die Funktion $g(z) = g_1(z) = f(z)$ wählt. Dann verschwindet der Integrand auf dem rechten Halbkreis hinreichend stark durch die Fermi-Funktion; auf dem linken Halbkreis durch die Exponentialfunktion $\exp(\delta z)$. Als Ergebnis erhalten wir nach dem Residuensatz:

$$\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle = f(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)\,. \tag{3.87}$$

Man beachte, daß wir bei umgekehrtem Vorzeichen von δ als Residuen erzeugende Funktion die Funktion $g_2(z) = f(z) - 1$ brauchen. Dies ist z.B. der Fall, wenn wir auf ähnliche Weise $\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle$ berechnen wollen (Übungsaufgabe). Falls der Konvergenzfaktor ganz fehlt, erhalten wir dagegen das aus der Funktionentheorie bekannte Ergebnis:

$$\frac{1}{\beta}\sum_n \frac{1}{i\omega_n - a} = -\frac{1}{2\pi i}\int_{\mathcal{C}} \frac{1}{z-a}\,g_3(z) = -\frac{1}{2}\tanh\frac{\beta a}{2}\,. \tag{3.88}$$

Hier heben sich die Beiträge der Kreise im Unendlichen gegenseitig auf.

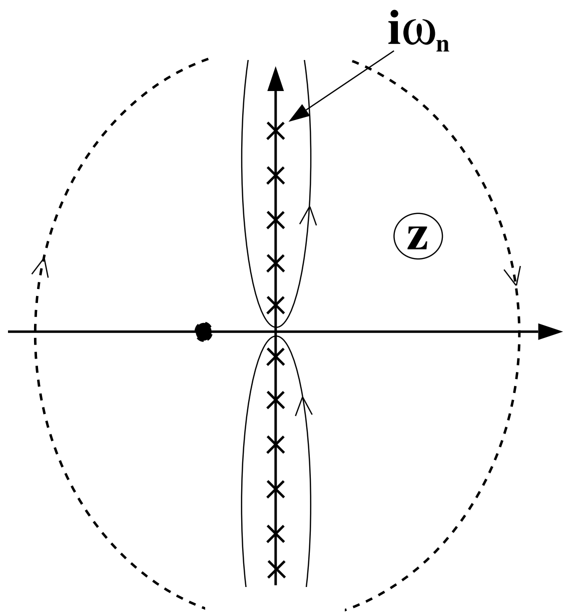


Abbildung 3.2: *Integrationswege für die Poissonsche Summenformel.*

2. Das Ergebnis der Berechnung der thermischen Besetzungszahl für Elektronen im k-Raum lässt sich auch leicht auf wechselwirkende Elektronensysteme verallgemeinern.

$$\begin{aligned}\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle &= \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} G(\boldsymbol{k}\sigma, i\omega_n)\,\mathrm{e}^{i\omega_n\delta} \\ &= -\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f(\omega)\,\mathrm{e}^{\delta\omega}\,[G(\boldsymbol{k}\sigma,\omega+i\delta') - G(\boldsymbol{k}\sigma,\omega-i\delta')] \\ &= -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, f(\omega)\, G''(\boldsymbol{k}\sigma,\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, f(\omega)\,\rho_\sigma(\boldsymbol{k},\omega)\,. \end{aligned} \tag{3.89}$$

Hier haben wir die Kontur zu einer Integration oberhalb und unterhalb der reellen Achse deformiert (siehe Abb. 3.3). Dabei haben wir verwendet, daß die Greensche Funktion eine analytische Funktion in jeweils einer Halbebene ist. Das Ergebnis läßt sich ganz allgemein durch ein Integral über die Sprungfunktion $G''(\boldsymbol{k}\sigma,\omega)$ ausdrücken. Diese Spektralfunktion hat für wechselwirkende Elektro-

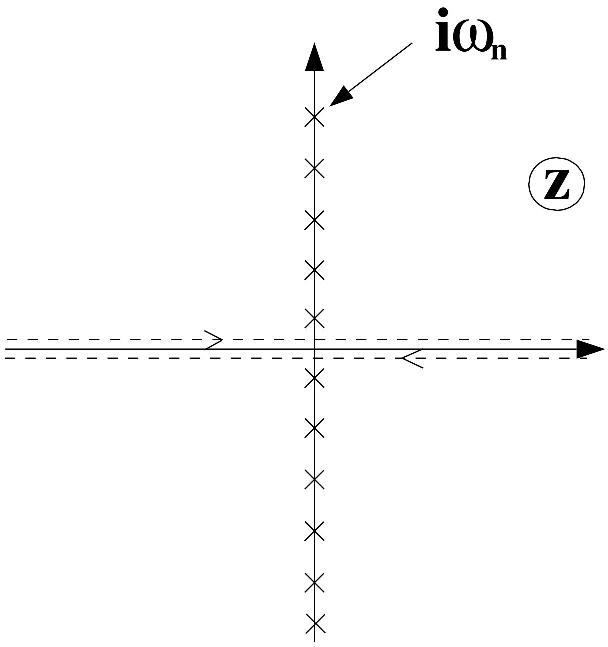


Abbildung 3.3: *Umwandlung der Frequenzsumme in ein Spektralintegral.*

nen anstelle einer δ-Funktion bei $\omega = \epsilon_k - \mu$ eine Energie-Verbreiterung, die entsprechend durch die Fermifunktion gewichtet wird.

3. Beispiel:

$$F(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - a_1}\frac{1}{i\omega_n - a_2}\,. \tag{3.90}$$

Ergebnis:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} F(i\omega_n) = \frac{f(a_1) - f(a_2)}{a_1 - a_2}\,. \tag{3.91}$$

Hier braucht man sich über die Konvergenz im Unendlichen keine Gedanken zu machen, da die Funktion $F(z)$ wie $1/z^2$ hinreichend stark abfällt. Es ist deshalb auch egal, welche der Funktionen $g_i(z)$, die sich ja nur um eine Konstante unterscheiden, man verwendet.

4 Störungstheorie und Feynman-Graphen

Im folgenden Kapitel soll die Störungstheorie für thermodynamische Greensche Funktionen dargestellt werden. Die thermodynamische Greensche Funktion hat gegenüber der retardierten Greenschen Funktion den Vorteil, daß sich für sie auch eine Störungstheorie für endliche Temperatur entwickeln läßt. Wir könnten zwar eine Störungstheorie für die retardierte Greensche Funktion bei $T = 0$ behandeln, es ist jedoch eleganter, direkt die Störungstheorie auch für $T > 0$ zu entwickeln. Ferner wirkt eine endliche inverse Temperatur $\beta < \infty$ regularisierend, so daß wir in dem Formalismus bei endlicher Temperatur Divergenzen der Störungstheorie vermeiden können.

Wir werden uns auf den Fall von Elektronen mit einer Zweiteilchen-Wechselwirkung konzentrieren. Hierbei wird exemplarisch die Theorie der Feynman-Graphen entwickelt. Verunreinigungsstreuung und Elektron-Phonon-Wechselwirkung lassen sich ähnlich behandeln.

4.1 Störungstheorie für thermodynamische Greensche Funktionen

Wir wollen die thermodynamische Greensche Funktion

$$G_{AB}(\tau) = -\langle \mathcal{T} A[\tau] B \rangle \tag{4.1}$$

mit

$$A[\tau] = \mathrm{e}^{\tau K} A \mathrm{e}^{-\tau K} \tag{4.2}$$

und die großkanonische Zustandssumme

$$Z = \mathrm{Tr}(\exp(-\beta K) \tag{4.3}$$

störungstheoretisch berechnen. Dazu teilen wir den Hamilton-Operator auf in

$$K = K_0 + H_s = H_0 - \mu N + H_s \,. \tag{4.4}$$

Wir nehmen an, daß wir das System mit K_0 lösen und H_s als Störung ansehen können. Typischerweise beschreibt H_s die Wechselwirkung der Teilchen in dem System. Beide Teile des Hamilton-Operators seien zeitunabhängig.

Wir gehen in das Wechselwirkungsbild

$$A[\tau]_0 = \mathrm{e}^{\tau K_0} A \mathrm{e}^{-\tau K_0} \tag{4.5}$$

über. Mit der Definition

$$S[\tau,\tau'] = \mathrm{e}^{\tau K_0}\mathrm{e}^{-(\tau-\tau')K}\mathrm{e}^{-\tau' K_0} \tag{4.6}$$

ergibt sich

$$A[\tau] = S[0,\tau]A[\tau]_0 S[\tau,0]\;. \tag{4.7}$$

Für den Operator S gelten die folgenden wichtigen Relationen, die man mit Hilfe der Definition leicht nachrechnen kann:

(a) $S[\tau,\tau] = \mathbb{1}$,

(b) S ist nicht unitär (Imaginärzeit!), aber $S^{-1}[\tau,0] = S[0,\tau]$,

(c) $S[\tau_1,\tau_2]\,S[\tau_2,\tau_3] = S[\tau_1,\tau_3]$.

Durch Anwenden der Produktregel erhält man für $S[\tau,\tau']$ die Differentialgleichung (vgl. (1.17))

$$\frac{\partial}{\partial\tau}S[\tau,\tau'] = -H_s[\tau]_0 S[\tau,\tau']\;. \tag{4.8}$$

Die Lösung ergibt sich mit Hilfe eines Potenzreihenansatzes zu (vgl. (1.19))

$$\begin{aligned}
S[\tau,\tau'] &= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau_1} d\tau_2 \ldots \int_{\tau'}^{\tau_{n-1}} d\tau_n H_s[\tau_1]_0 \ldots H_s[\tau_n]_0 && (4.9)\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_2 \ldots \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_n \mathcal{T}\left(H_s[\tau_1]_0 \ldots H_s[\tau_n]_0\right) && (4.10)\\
&= \mathcal{T}\exp\left\{-\int_{\tau'}^{\tau} d\tau'' H_s[\tau'']_0\right\}, && (4.11)
\end{aligned}$$

wobei die vorletzte Zeile gerade die letzte Zeile definiert. Anders gesagt: Die letzte Zeile ist eine Kurzschreibweise für die vorletzte Zeile. Damit läßt sich die großkanonische Zustandssumme schreiben als

$$\begin{aligned}
Z &= \mathrm{Tr}\,(\mathrm{e}^{-\beta K}) = \mathrm{Tr}\,\{\mathrm{e}^{-\beta K_0}S[\beta,0]\}\\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{1}{n!}\int_0^{\beta} d\tau_1 \ldots \int_0^{\beta} d\tau_n \mathrm{Tr}\,\{\mathrm{e}^{-\beta K_0}\mathcal{T} H_s[\tau_1]_0 H_s[\tau_2]_0 \ldots H_s[\tau_n]_0\}\\
&= Z_0 \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{1}{n!}\int_0^{\beta} d\tau_1 \ldots \int_0^{\beta} d\tau_n \langle \mathcal{T} H_s[\tau_1]_0 H_s[\tau_2]_0 \ldots H_s[\tau_n]_0\rangle_0\,, && (4.12)
\end{aligned}$$

dabei ist $Z_0 = \mathrm{Tr}\{\exp(-\beta K_0)\}$ die Zustandssumme für das nicht-wechselwirkende System. Diese stammt aus der Erweiterung beim Übergang von der Spur zum thermischen Erwartungswert $\langle \ldots \rangle_0$ gebildet mit K_0.

In ähnlicher Weise erhält man für die Greensche Funktion die Entwicklung:

$$
\begin{aligned}
G_{AB}(\tau) &= -\frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta K_0} S[\beta,\tau] A[\tau]_0 S[\tau,0] B\} \qquad (4.13)\\
&= -\frac{Z_0}{Z}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \frac{1}{n!}\int\limits_0^{\beta} d\tau_1 \ldots \int\limits_0^{\beta} d\tau_n \langle \mathcal{T} H_s[\tau_1]_0 H_s[\tau_2]_0 \ldots H_s[\tau_n]_0 A[\tau]_0 B\rangle_0 \,.
\end{aligned}
$$

Dabei haben wir ausgenutzt, daß sich $A[\tau]_0$ an die vorletzte Position bringen läßt (Beweis: siehe Vorlesung).

Ganz allgemein läßt sich damit die störungstheoretische Entwicklung der Greenschen Funktion als Quotient schreiben

$$
G_{AB}(\tau) = -\frac{\text{Zähler}}{\text{Nenner}} \qquad (4.14)
$$

mit

$$
\text{Zähler} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \frac{1}{n!}\int_0^{\beta} d\tau_1 \ldots \int_0^{\beta} d\tau_n \langle \mathcal{T} H_s[\tau_1]_0 H_s[\tau_2]_0 \ldots H_s[\tau_n]_0 A[\tau]_0 B\rangle_0 \,, \qquad (4.15)
$$

$$
\text{Nenner} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \frac{1}{n!}\int_0^{\beta} d\tau_1 \ldots \int_0^{\beta} d\tau_n \langle \mathcal{T} H_s[\tau_1]_0 H_s[\tau_2]_0 \ldots H_s[\tau_n]_0 \rangle_0 \,. \qquad (4.16)
$$

4.2 Störungstheorie für eine Zweiteilchen-Wechselwirkung

Im Folgenden soll die allgemeine Störungstheorie auf die Berechnung der Greenschen Funktion für ein System mit Zweiteilchen-Wechselwirkung angewendet werden, d.h. der Hamiltonoperator des Systems setzt sich zusammen aus $H = H_0 + H_s$, wobei H_0 der Hamiltonoperator ohne Wechselwirkung bilinear in den Fermionen-Operatoren ist, und H_s die Zweiteilchen-Wechselwirkung beschreibt.

Im allgemeinen hat H_0 die Form (vgl. (2.28))

$$
H_0 = \sum_{\sigma}\int d^3x\, \psi^{\dagger}_{\sigma}(\boldsymbol{x}) H_0(\boldsymbol{x}) \psi_{\sigma}(\boldsymbol{x}), \quad \text{mit} \quad H_0(\boldsymbol{x}) = -\frac{\nabla^2}{2m} + U(\boldsymbol{x})\,. \qquad (4.17)
$$

Die Wechselwirkung von zwei Teilchen über ein Potential $V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2)$ lautet in zweiter Quantisierung:

$$
H_s = \frac{1}{2}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\int d^3x_1 \int d^3x_2\, \psi^{\dagger}_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1)\psi^{\dagger}_{\sigma_2}(\boldsymbol{x}_2) V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)\psi_{\sigma_2}(\boldsymbol{x}_2)\psi_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1)\,. \qquad (4.18)
$$

Dabei erzeugt $\psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x})$ ein Elektron mit Spin σ am Ort $\boldsymbol{x}$. Der Vorteil dieser Schreibweise ist, daß sie unabhängig von einem eventuell später verwendeten Basissystem ist, nach dem die Fermionen-Operatoren entwickelt werden.

In der Störungstheorie brauchen wir wiederholt den Operator $H_s[\tau]$. Deshalb lohnt es sich, folgende Kurzschreibweise einzuführen:

$$H_s[\tau] = \frac{1}{2}\int d1 \int d2\, \psi^\dagger(1)\psi^\dagger(2)\mathcal{V}(1,2;\tau)\psi(2)\psi(1)\,, \tag{4.19}$$

bei dem der Index 1 Orts-, Zeit-, und Spinvariable zusammenfaßt:

$$\psi(1) = \psi_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1,\tau_1)\,, \tag{4.20}$$
$$\mathcal{V}(1,2;\tau) = V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)\,\delta(\tau_1-\tau)\,\delta(\tau_2-\tau)\,, \tag{4.21}$$
$$\int d1 = \sum_{\sigma_1}\int_0^\beta d\tau_1 \int d^3x_1\,. \tag{4.22}$$

Die δ-Funktion in der Wechselwirkung erzwingt, daß die Operatoren alle die gleiche Zeitvariable τ trotz der zusätzlichen $\tau_{1,2}$-Integrationen haben.

Wir wollen die Greensche Funktion

$$G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1\tau_1,\boldsymbol{x}_2\sigma_2\tau_2) = -\langle \mathcal{T}\psi_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1,\tau_1)\psi_{\sigma_2}^\dagger(\boldsymbol{x}_2,\tau_2)\rangle \tag{4.23}$$

oder kürzer

$$G(1,2) = -\langle \mathcal{T}\psi(1)\psi^\dagger(2)\rangle \tag{4.24}$$

berechnen, wobei hier die Zeitabhängigkeit der Operatoren mit dem vollen Hamiltonoperator des Systems zu bilden ist.

Nach der im letzten Kapitel entwickelten Störungstheorie läßt sich die Greensche Funktion schreiben als

$$G(1,2) = -\frac{\text{Zähler}}{\text{Nenner}} \tag{4.25}$$

mit

$$\text{Zähler} = \text{Zähler}^{(0)} + \text{Zähler}^{(1)} + \ldots \tag{4.26}$$

$$\text{Nenner} = \text{Nenner}^{(0)} + \text{Nenner}^{(1)} + \ldots \tag{4.27}$$

$$
\begin{aligned}
\text{Zähler}^{(0)} &= \langle \mathcal{T}\psi(1)_0\psi^\dagger(2)_0\rangle_0 \\
\text{Zähler}^{(1)} &= \frac{(-1)}{1!}\int\limits_0^\beta d\tau \frac{1}{2}\int d3 \int d4\, \mathcal{V}(3,4;\tau) \\
&\quad \langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)_0\psi^\dagger(4)_0\psi(4)_0\psi(3)_0\psi(1)_0\psi^\dagger(2)_0\rangle_0 \qquad (4.28)\\
\text{Nenner}^{(0)} &= 1 \\
\text{Nenner}^{(1)} &= \frac{(-1)}{1!}\int\limits_0^\beta d\tau \frac{1}{2}\int d3 \int d4\, \mathcal{V}(3,4;\tau) \\
&\quad \langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)_0\psi^\dagger(4)_0\psi(4)_0\psi(3)_0\rangle_0\,, \qquad (4.29)
\end{aligned}
$$

wobei hier die Zeitabhängigkeit und der thermische Erwartungswert nur mit H_0 gebildet werden.

Hier stellt sich die Frage, wie die komplizierten Erwartungswerte über viele Operatoren ausgerechnet werden können. Dabei hilft das Wicksche Theorem:

<u>Wicksches Theorem:</u> Sei K_0 bilinear in Fermi-Operatoren $c_i, c_i^\dagger$ oder Bose-Operatoren $b_i, b_i^\dagger$. Sei α_i eine beliebige Linear-Kombination von Fermi- oder von Bose-Operatoren, sei ferner

$$
\alpha_i[\tau]_0 = \mathrm{e}^{\tau K_0}\alpha_i \mathrm{e}^{-\tau K_0}\,. \qquad (4.30)
$$

Dann gilt folgende Zerlegung in Greensche Funktionen von je zwei Operatoren:

$$
\begin{aligned}
\langle \mathcal{T}\alpha_1[\tau_1]_0\alpha_2[\tau_2]_0\ldots\alpha_n[\tau_n]_0\rangle_0 &= \sum_{\text{Perm.}}(-1)^P\langle \mathcal{T}\alpha_{n1}[\tau_{n1}]_0\alpha_{n2}[\tau_{n2}]_0\rangle_0 \\
&\quad \times \langle \mathcal{T}\alpha_{n3}[\tau_{n3}]_0\alpha_{n4}[\tau_{n4}]_0\rangle_0\ldots\,. \qquad (4.31)
\end{aligned}
$$

Die Summe erstreckt sich über alle möglichen Zweier-Kombinationen mit allen möglichen Permutationen der Operatoren. P ist die Zahl der Permutationen von Fermi-Operatoren, die notwendig ist, um aus der ursprünglichen Reihenfolge der Indizes $(1, 2, \ldots n)$ die Reihenfolge $(n_1, n_2, \ldots)$ herzustellen.

Ein Beispiel: Sei $H_0 = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i$, dann ist

$$
\begin{aligned}
\langle \mathcal{T}c_1^\dagger[\tau_1]_0 c_2^\dagger[\tau_2]_0 c_3[\tau_3]_0 c_4[\tau_4]_0\rangle_0 &= \langle \mathcal{T}c_1^\dagger[\tau_1]_0 c_2^\dagger[\tau_2]_0\rangle_0\langle \mathcal{T}c_3[\tau_3]_0 c_4[\tau_4]_0\rangle_0 \\
&\quad -\langle \mathcal{T}c_1^\dagger[\tau_1]_0 c_3[\tau_3]_0\rangle_0\langle \mathcal{T}c_2^\dagger[\tau_2]_0 c_4[\tau_4]_0\rangle_0 \\
&\quad +\langle \mathcal{T}c_1^\dagger[\tau_1]_0 c_4[\tau_4]_0\rangle_0\langle \mathcal{T}c_2^\dagger[\tau_2]_0 c_3[\tau_3]_0\rangle_0\,, \qquad (4.32)
\end{aligned}
$$

wobei hier die Erwartungswerte mit zwei Erzeugern oder zwei Vernichtern verschwinden.

Im Folgenden soll nur die Beweis-Idee für das Wicksche Theorem skizziert werden. Der vollständige Beweis wurde in der Vorlesung vorgeführt und ist z.B. in Kapitel 24 (S. 237-241) von Referenz [10] zu finden. Wir betrachten den Fall von Fermionen und eines diagonalen Hamiltonoperators $H_0 = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i$. Außerdem lassen wir die Zeitabhängigkeit weg, d.h. wir setzen alle Zeiten $\tau_i = 0$. Mit dem statistischen Operator $\rho = \exp(-\beta H_0)/Z_0$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4\} &= \mathrm{Tr}\,\{\rho [c_1^\dagger, c_2^\dagger]_+ c_3 c_4\} - \mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger c_1^\dagger c_3 c_4\} \\ &= \mathrm{Tr}\,\{\rho [c_1^\dagger, c_2^\dagger]_+ c_3 c_4\} - \mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger [c_1^\dagger, c_3]_+ c_4\} \\ &\quad + \mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger c_3 [c_1^\dagger, c_4]_+\} - \mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger c_3 c_4 c_1^\dagger\}\,. \end{aligned} \tag{4.33}$$

Ferner erhält man durch zyklische Permutation unter der Spur:

$$\mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger c_3 c_4 c_1^\dagger\} = \mathrm{Tr}\,\{c_1^\dagger \rho c_2^\dagger c_3 c_4\}\,. \tag{4.34}$$

Nun gilt (unter Verwendung der Diagonalform des Hamiltonoperators):

$$c_1^\dagger \rho = \frac{1}{Z_0} c_1^\dagger \mathrm{e}^{-\beta H_0} = \rho \mathrm{e}^{+\beta H_0} c_1^\dagger \mathrm{e}^{-\beta H_0} = \rho \mathrm{e}^{\beta \epsilon_1} c_1^\dagger\,. \tag{4.35}$$

Damit läßt sich der letzte Term von (4.33) mit dem Ausgangsterm zusammenfassen, und wir erhalten:

$$\begin{aligned} (1 + \mathrm{e}^{\beta\epsilon_1})\mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4\} &= [c_1^\dagger, c_2^\dagger]_+ \mathrm{Tr}\,\{\rho c_3 c_4\} \\ &\quad - [c_1^\dagger, c_3]_+ \mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger c_4\} + [c_1^\dagger, c_4]_+ \mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger c_3\}\,. \end{aligned} \tag{4.36}$$

Da die Anti-Kommutatoren komplexe Zahlen sind, können wir diese aus den thermischen Erwartungswerten herausziehen.

Ferner gilt:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_3\} &= \mathrm{Tr}\,\{\rho [c_1^\dagger, c_3]_+\} - \mathrm{Tr}\,\{\rho c_3 c_1^\dagger\} \\ &= [c_1^\dagger, c_3]_+ - \mathrm{e}^{\beta\epsilon_1} \mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_3\} \end{aligned} \tag{4.37}$$

oder

$$(1 + \mathrm{e}^{\beta\epsilon_1})\mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_3\} = [c_1^\dagger, c_3]_+\,. \tag{4.38}$$

Damit können wir die Antikommutatoren durch Einteilchen-Greensche Funktionen ausdrücken. Der Faktor $(1 + \mathrm{e}^{\beta\epsilon_1})$ kürzt sich heraus, und wir erhalten:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4\} &= \mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_2^\dagger\}\mathrm{Tr}\,\{\rho c_3 c_4\} \\ &\quad -\mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_3\}\mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger c_4\} + \mathrm{Tr}\,\{\rho c_1^\dagger c_4\}\mathrm{Tr}\,\{\rho c_2^\dagger c_3\}\,. \end{aligned} \tag{4.39}$$

Damit ist das Wicksche Theorem für diesen Spezialfall bewiesen. Der Beweis läßt sich einfach auf jede beliebige gerade Zahl von Einteilchen-Operatoren ausdehnen. Offenbar verschwindet der Ausdruck für eine ungerade Zahl von Operatoren.

Die Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit der Operatoren stellt kein Problem dar, da für diese einfache Form des Hamilton-Operators die Zeitabhängigkeit durch Faktoren mit zeitabhängigen Exponentialfunktionen gegeben ist (siehe (3.75)).

Die Zeitordnung der Operatoren berücksichtigt man einfach, indem man in dem Ausgangsterm die Operatoren entsprechend ihrer aktuellen Zeitordnung anordnet. Diese Ordnung wird, wie man sieht, auch bei der Faktorisierung in den Produkten aus je zwei Operatoren beibehalten.

Falls der Hamilton-Operator nicht Diagonalform besitzt, kann man ihn durch eine lineare Transformation in den Einteilchen-Operatoren diagonalisieren. Die einzelnen Schritte lassen sich dann wie oben durchführen. Da sich die Faktoren mit den Einteilchen-Energien wieder herauskürzen, läßt sich das Ergebnis wieder durch Produkte von Greenschen Funktionen ausdrücken.

Mit Hilfe des Wickschen Theorems können wir nun den Erwartungswert (4.28) über 6 Fermionen-Operatoren in Zweier-Kombinationen zerlegen (wir lassen im Folgenden den Index 0 an den Zeitentwicklungen weg):

$$\begin{aligned} &\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)\psi^\dagger(4)\psi(4)\,\psi(3)\,\psi(1)\psi^\dagger(2)\rangle_0 \\ &\qquad = -\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)\psi(4)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(4)\psi(3)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi(1)\psi^\dagger(2)\rangle_0 \\ &\qquad\quad +\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)\psi(4)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(4)\psi(1)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi(3)\psi^\dagger(2)\rangle_0 \\ &\qquad\quad +\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)\psi(3)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(4)\psi(4)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi(1)\psi^\dagger(2)\rangle_0 \\ &\qquad\quad -\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)\psi(3)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(4)\psi(1)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi(4)\psi^\dagger(2)\rangle_0 \\ &\qquad\quad -\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)\psi(1)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(4)\psi(4)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi(3)\psi^\dagger(2)\rangle_0 \\ &\qquad\quad +\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(3)\psi(1)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi^\dagger(4)\psi(3)\rangle_0\langle \mathcal{T}\psi(4)\psi^\dagger(2)\rangle_0 \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
= \; & G_0(4,3)G_0(3,4)G_0(1,2) \\
& -G_0(4,3)G_0(1,4)G_0(3,2) \\
& -G_0(3,3)G_0(4,4)G_0(1,2) \\
& +G_0(3,3)G_0(1,4)G_0(4,2) \\
& +G_0(1,3)G_0(4,4)G_0(3,2) \\
& -G_0(1,3)G_0(3,4)G_0(4,2)\,. \qquad (4.40)
\end{aligned}
$$

Diese Terme lassen sich in übersichtlicher und eindeutiger Weise durch Graphen, sogenannte Feynman-Diagramme, darstellen[9]. Multipliziert man die sechs Terme noch mit der entsprechenden Wechselwirkung $\mathcal{V}(3,4)$, dann erhält man die in Abb. 4.1 dargestellten Graphen. Eine durchgezogene Linie mit Pfeil bedeutet eine Greensche Funktion G_0, die gestrichelte Linie die Wechselwirkung $\mathcal{V}$.

In Abb. 4.1 gibt es offenbar verbundene und unverbundene Graphen. Die unverbundenen Graphen lassen sich (nach Ausführung der Integration über die internen Variablen $(3,4)$) als Produkt einer Einteilchen-Greenschen Funktion mit den äußeren Variablen $(1,2)$ und einem Rest darstellen. Dieser Rest erscheint in gleicher Weise in der Entwicklung der Zustandssumme und kürzt sich gerade gegen den Nenner der Greenschen Funktion. Dies ist auch in höheren Ordnungen so. Das bedeutet, wir brauchen bei der störungstheoretischen Entwicklung im Folgenden nur noch den Zähler zu betrachten. Der Beweis dieses “Linked-Cluster” Theorems wurde in der Vorlesung vorgeführt und ist z.B. in Kapitel 9 (S. 95 und 96) von Referenz [10], Kapitel 8.3 von Referenz [1] oder Kapitel 3.2 von Referenz [31] zu finden. Die Greensche Funktion $G(1,2)$ beschreibt in gewissem Sinne die Propagation eines Teilchens von 2 nach 1. Bei der Berechnung dieser Propagation müssen wir andere Teilchen nur insoweit berücksichtigen, wie sie explizit mit dem Teilchen wechselwirken. Dies ist eine besondere Eigenschaft dieser Störungstheorie für Fermionen- und Bosonensysteme. Somit gilt das Linked-Cluster Theorem in dieser Form z.B. nicht für Spinsysteme.

Wenden wir uns also den verbundenen Graphen zu: Bei dem obigen Beispiel tritt jeder Graph zweimal mit vertauschten internen Variablen auf. Da über die internen Variablen integriert wird, liefern sie den gleichen Beitrag. Dieser Faktor 2 kompensiert gerade den Faktor $1/2$ in der Wechselwirkung. Dies bleibt auch

[9]Neben vielen Lehrbüchern findet sich eine ausführliche Darstellung von Feynman-Diagrammen in dem Buch [25].

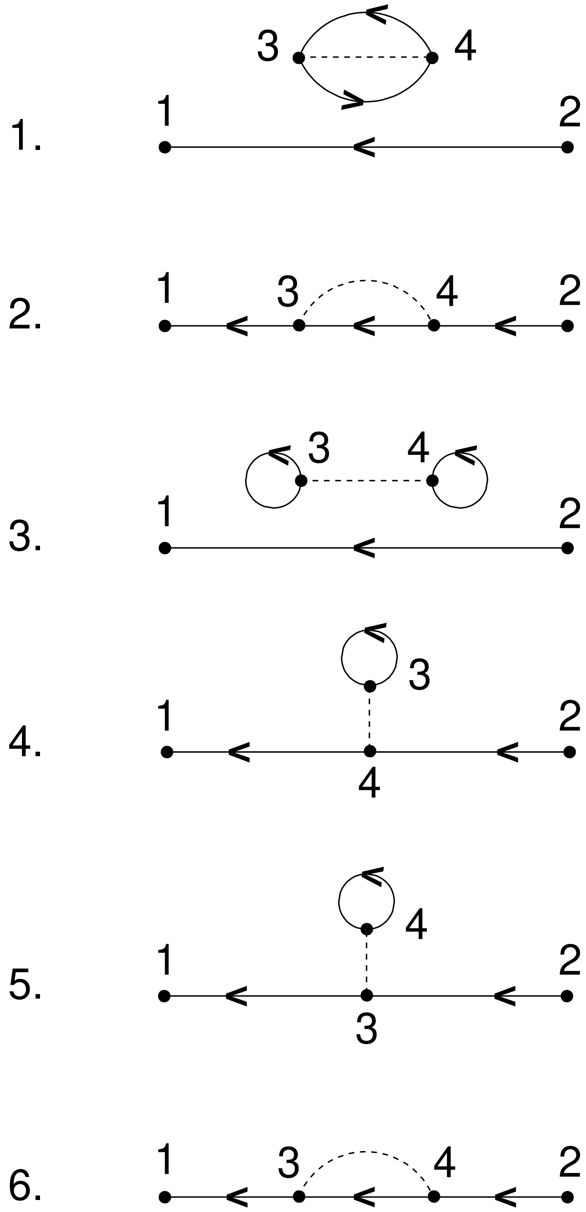


Abbildung 4.1: *Feynman-Graphen bei einer Zweiteilchen-Wechselwirkung.*

in höheren Ordnungen richtig, so daß wir zu den folgenden Feynmanschen Graphenregeln für die störungstheoretische Entwicklung der Einteilchen-Greenschen Funktion gelangen:

Feynman-Regeln im Orts-Zeit-Raum:

1. Zeichne alle topologisch verschiedenen verbundenen Graphen.
2. Summiere, integriere über alle internen Variablen (Ort, Zeit, Spin).
3. Multipliziere den analytischen Ausdruck jedes Graphen mit einem Faktor $(-1)^n(-1)^F$. Dabei ist n die Ordnung in $\mathcal{V}$, F die Zahl der geschlossenen Fermionen-Schleifen.
4. Bei Greenschen Funktionen mit gleichen Zeiten ist $\langle \psi^\dagger_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1,\tau)\psi_{\sigma_2}(\boldsymbol{x}_2,\tau)\rangle_0 = G_0(\boldsymbol{x}_2,\sigma_2,\tau-0;\boldsymbol{x}_1,\sigma_1,\tau)$ einzusetzen.

Die gleichen Zeitargumente stammen aus der Wechselwirkung $H_s[\tau]$, in der vier Operatoren mit gleichen Zeitargumenten auftreten. In Abb. 4.2 sind alle Graphen bis zur zweiten Ordnung in der Wechselwirkung $\mathcal{V}$ aufgelistet (es ist sicher eine gute Übung, sich anhand der Feynman-Regeln davon zu überzeugen, daß in der 2. Ordnung genau die 10 angegebenen Diagramme auftauchen). In der zweiten Ordnung haben wir die Pfeile von rechts nach links an den Greenschen Funktionen G_0 weggelassen; unter Berücksichtigung dieser Pfeile sind insbesondere das zweite und dritte Diagramm der 2. Ordnung inäquivalent. Graphen mit einer geschlossenen Fermionenschleife mit $F=1$ sind z.B. der erste Graph 1. Ordnung und der letzte Graph 2. Ordnung. $F=2$ gilt z.B. für den ersten Graphen zweiter Ordnung.

4.3 Dyson-Gleichung und irreduzible Selbstenergie

Die störungstheoretische Entwicklung der Greenschen Funktion läßt sich noch ein Stück vereinfachen, wenn man beachtet, daß sich Graphen höherer Ordnung zum Teil aus Graphen niedrigerer Ordnung zusammensetzen, und wenn man iterierte Graphen geeignet zusammenfaßt.

a) Summation iterierter Graphen:

Wie man schon in Abb. 4.2 erkennen kann, erhält man einen Teil der Graphen höherer Ordnung dadurch, daß sich an einen Graphen erster Ordnung eine

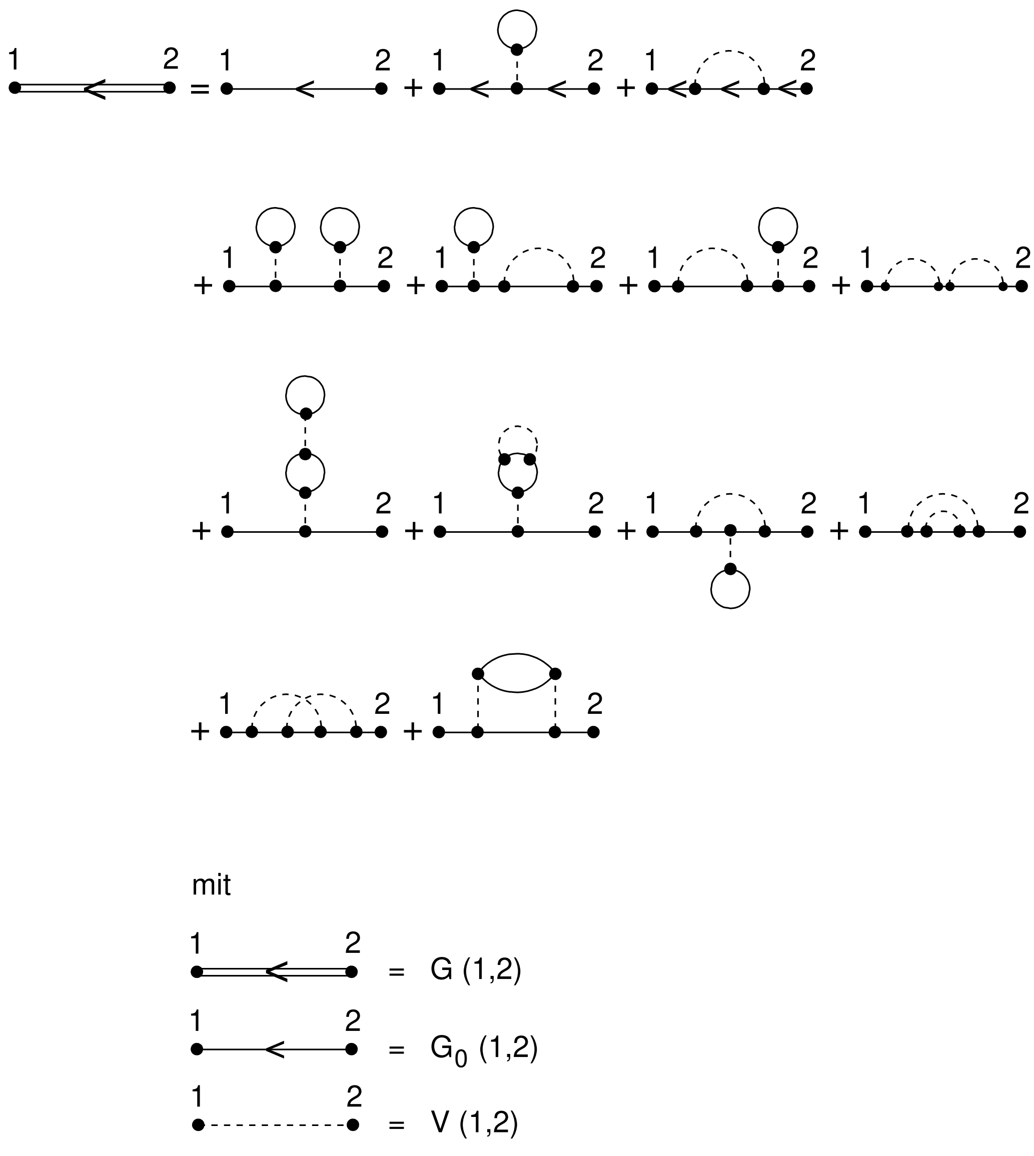


Abbildung 4.2: *Feynman-Graphen bis zur zweiten Ordnung in der Wechselwirkung.*

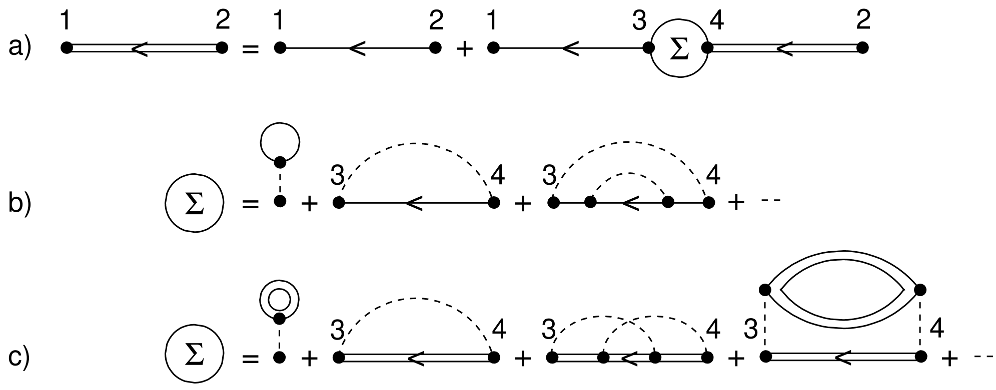


Abbildung 4.3: *a) Dyson-Gleichung, b) irreduzible Selbstenergie-Beiträge, c) Renormierung der Selbstenergie-Beiträge.*

vollständige Graphenentwicklung der Greenschen Funktion anschließt. Dies läßt sich verallgemeinern und führt uns zum Begriff der irreduziblen Selbstenergie. Selbstenergie nennen wir den Teil eines Graphen, der übrig bleibt, wenn man die beiden Greenschen Funktionen, die mit den äußeren Variablen verbunden sind, wegläßt. Irreduzibel ist ein Selbstenergie-Graph, wenn er nicht in zwei Teile zerfällt, wenn man eine interne Greensche Funktion zerschneidet (reduzibel sind alle Graphen der zweiten Reihe von Abb. 4.2). Eine vollständige Graphen-Entwicklung der Greenschen Funktion erhält man offenbar, wenn man, wie in Abb. 4.3a,b dargestellt, nur die irreduziblen Graphen in der Selbstenergie Σ berücksichtigt, dafür aber eine der beiden mit einer äußeren Variablen verbundenen nackten Greenschen Funktion durch eine volle Greensche Funktion ersetzt. Das Ergebnis läßt sich in Form einer Integral-Gleichung, der Dyson-Gleichung für die Greensche Funktion schreiben:

$$G(1,2) = G_0(1,2) + \int d3 \int d4\, G_0(1,3)\, \Sigma(3,4)\, G(4,2)\,. \tag{4.41}$$

Man überzeugt sich leicht, daß durch iterative Lösung von (4.41) die Graphen-Entwicklung von Abb. 4.2 vollständig generiert wird.

b) Selbstkonsistente Berechnung der Selbstenergie:

Man kann noch einen Schritt weitergehen. Bei der Berechnung der irreduziblen Selbstenergie treten unter der Wechselwirkung wieder Reihen-Entwicklungen von Greenschen Funktionen auf, die man durch eine volle Greensche Funktion ausdrücken kann. Zur Berechnung aller expliziten Graphen zweiter Ordnung muß man deshalb nur die vier in Abb. 4.3c gezeigten Graphen auszurechnen. Die irreduzible Selbstenergie ist ein Funktional der renormierten Greenschem Funktion. Zusammen mit der Dyson-Gleichung erhält man damit eine nichtlineare Integralgleichung zur Berechnung der renormierten Greenschen Funktion. Im Folgenden werden wir uns der Lösung dieser Integralgleichung zuwenden.

c) Dyson-Gleichung im Frequenzraum:

Eine Vereinfachung ergibt sich sofort, wenn man berücksichtigt, daß die Greensche Funktion $G(1,2)$ im thermodynamischen Gleichgewicht nur von der Zeitdifferenz $\tau_1 - \tau_2$ abhängt (dies zeigt man leicht durch zyklische Permutation unter der Spur). Das gleiche gilt für die Selbstenergie. Da die Integralgleichung in der Zeitvariablen eine Faltung darstellt, läßt sich diese durch Fourier-Transformation vereinfachen.

Wir schreiben:

$$G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1\tau_1;\boldsymbol{x}_2\sigma_2\tau_2) = G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1\tau_1-\tau_2;\boldsymbol{x}_2\sigma_2,0) \equiv G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1,\boldsymbol{x}_2\sigma_2,\tau_1-\tau_2) \tag{4.42}$$

und transformieren

$$G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1,\boldsymbol{x}_2\sigma_2,i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, \mathrm{e}^{i\omega_n\tau} G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1,\boldsymbol{x}_2\sigma_2,\tau) \tag{4.43}$$

$$G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1,\boldsymbol{x}_2\sigma_2,\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \mathrm{e}^{-i\omega_n\tau}\, G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1,\boldsymbol{x}_2\sigma_2,i\omega_n)\,. \tag{4.44}$$

Die Integrale in der Dyson-Gleichung sind von der Form

$$f(\tau) = \int_0^\beta d\tau_1\, g_1(\tau-\tau_1)\, g_2(\tau_1)\,. \tag{4.45}$$

Durch Fourier-Transformation erhält man

$$\begin{aligned} f(i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau\, \mathrm{e}^{i\omega_n\tau} \int_0^\beta d\tau_1\, \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_1} g_1(i\omega_1)\, \mathrm{e}^{-i\omega_1\,(\tau-\tau_1)} \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_2} g_2(i\omega_2)\, \mathrm{e}^{-i\omega_2\,\tau_1} \\ &= g_1(i\omega_n)\, g_2(i\omega_n)\,, \end{aligned} \tag{4.46}$$

dabei wurde

$$\int_0^\beta d\tau\, \mathrm{e}^{i\,\omega\,\tau} = \begin{cases} \beta, & \omega = 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{4.47}$$

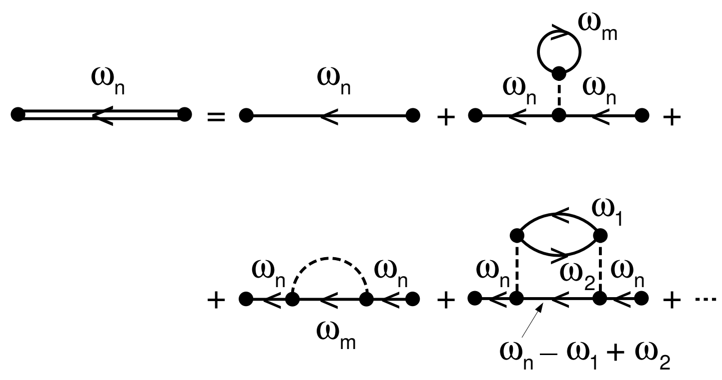


Abbildung 4.4: *Feynman-Graphen im Frequenzraum.*

verwendet. Damit schreibt sich die Dyson-Gleichung:

$$G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1, \boldsymbol{x}_2\sigma_2, i\omega_n) = G_0(\boldsymbol{x}_1\sigma_1, \boldsymbol{x}_2\sigma_2, i\omega_n) \tag{4.48}$$
$$+ \sum_{\sigma_3\sigma_4} \int d^3x_3 d^3x_4\, G_0(\boldsymbol{x}_1\sigma_1, \boldsymbol{x}_3\sigma_3, i\omega_n)\, \Sigma(\boldsymbol{x}_3\sigma_3, \boldsymbol{x}_4\sigma_4, i\omega_n)\, G(\boldsymbol{x}_4\sigma_4, \boldsymbol{x}_2\sigma_2, i\omega_n)\,.$$

Die Feynman-Graphen lassen sich auch im Frequenzraum darstellen und entsprechende Regeln formulieren. Anstelle der Integration über interne Zeitvariable tritt nun eine Summation über interne Matsubara-Frequenzen, wobei an jedem Vertex die Summe der ein- und auslaufenden Frequenzen der Greenschen Funktionen und Wechselwirkungslinien erhalten ist. Beispiele sind in Abb. 4.4 gezeigt.

In unserem Fall ist die Wechselwirkung instantan, d.h. die Fourier-Transformierte der Wechselwirkung hängt nicht von der Frequenz ab, auch wenn die Wechselwirkungslinie formal eine Frequenzvariable trägt. Dies ist anders z.B. bei der Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Berechnet man hier die Renormierung der elektronischen Greenschen Funktion, dann erhält man ähnliche Graphen. Die Wechselwirkungslinien sind hierbei durch Phonon-Propagatoren ersetzt, die von der Frequenz abhängen und im Zeitraum eine retardierte Wechselwirkung darstellen.

d) Selbstenergie als effektives Potential

Die irreduzible Selbstenergie läßt sich in gewissem Sinne als effektives (nichtlokales, retardiertes) Potential auffassen. Dies sieht man, wenn man von der Bewegungsgleichung der Greenschen Funktion ausgeht.

Zunächst genügt die Greensche Funktion $G_0(1,2)$ der Bewegungsgleichung

$$\left\{-\frac{d}{d\tau_1} - H_0(\boldsymbol{x}_1) + \mu\right\} G_0(1,2) = \delta(1,2) = \delta(\tau_1 - \tau_2)\,\delta(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)\,\delta_{\sigma_1\sigma_2}\,. \quad (4.49)$$

Durch Differenzieren der Integralgleichung (4.41) nach τ_1 erhält man

$$\left\{-\frac{d}{d\tau_1} - H_0(\boldsymbol{x}_1) + \mu\right\} G(1,2) - \int d4\,\Sigma(1,4)\,G(4,2) = \delta(1,2)\,. \quad (4.50)$$

Nach Fourier-Transformation in den Frequenzraum folgt daraus

$$\begin{aligned}&(i\omega_n - H_0(\boldsymbol{x}_1) + \mu)\,G(\boldsymbol{x}_1\sigma_1, \boldsymbol{x}_2\sigma_2, i\omega_n) \\ &\quad - \sum_{\sigma'} \int d^3x'\,\Sigma(\boldsymbol{x}_1\sigma_1, \boldsymbol{x}'\sigma', i\omega_n)\,G(\boldsymbol{x}'\sigma', \boldsymbol{x}_2\sigma_2, i\omega_n) = \delta(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)\,\delta_{\sigma_1\sigma_2}\,.\end{aligned} \quad (4.51)$$

Wenn die Selbstenergie in (4.50) instantan, d.h. proportional zu $\delta(\tau_1 - \tau_4)$ ist, bzw. in (4.51) nicht von der Frequenz ω_n abhängt, dann kann man die Selbstenergie als ein im allgemeinen nichtlokales Potential ansehen. Eine frequenzabhängige Selbstenergie beschreibt eine zeitlich verzögerte Wechselwirkung.

Man kann noch einen Schritt weitergehen, indem man die Greensche Funktion nach einem vollständigen Orthogonalsystem entwickelt. Schreiben wir

$$\psi(x) = \sum_j c_j \phi_j(x) \quad (4.52)$$

(zur Vereinfachung der Notation denken wir uns den Spin in der Koordinate x und dem Zustandsindex j integriert), dann erhalten wir

$$G(x, x'; i\omega_n) = \sum_{lm} \phi_l(x)\,\phi_m^*(x')\,G(l, m; i\omega_n) \quad (4.53)$$

mit $G(l, m; i\omega_n) = \langle\!\langle c_l; c_m^\dagger \rangle\!\rangle_{i\omega_n}$.

Setzt man diesen Ansatz in die Dyson-Gleichung (4.51) ein und verwendet die Orthogonalität der Basis-Funktionen, so findet man

$$\sum_j \langle l | i\omega_n - H_0 - \Sigma + \mu | j \rangle\,G(j, m; i\omega_n) = \delta_{l,m}\,. \quad (4.54)$$

Dabei ist

$$\langle l|\Sigma|j\rangle = \int dx \int dx'\,\phi_l^*(x)\,\Sigma(x, x'; i\omega_n)\,\phi_j(x') \quad (4.55)$$

das Matrixelement des Selbstenergie-Operators. In der im nächsten Abschnitt diskutierten Hartree-Fock-Näherung verwendet man Eigenfunktionen zu $H_0+\Sigma$, d.h.

$$(H_0 + \Sigma)|j\rangle = E_j|j\rangle \,. \tag{4.56}$$

Dann ist die Greensche Funktion diagonal:

$$G(l, m; i\omega_n) = \frac{\delta_{l,m}}{i\omega_n - E_l + \mu} \,. \tag{4.57}$$

e) Dyson-Gleichung für translationsinvariante Systeme

Eine nochmalige Vereinfachung tritt für translationsinvariante Systeme auf, wenn die Greensche Funktion nur von der räumlichen Differenz $\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$ abhängt. Wenn, wie in vielen Fällen, überdies der Spin erhalten ist, dann schreiben wir

$$G(\boldsymbol{x}_1\sigma, \boldsymbol{x}_2\sigma, i\omega_n) \equiv G(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2, \sigma, i\omega_n) \tag{4.58}$$

und führen eine räumliche Fourier-Transformation ein:

$$G(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) = \int d^3x \, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \, G(\boldsymbol{x}, \sigma, i\omega_n) \,. \tag{4.59}$$

Dann erhalten wir für die Dyson-Gleichung

$$G(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) = G_0(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) + G_0(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n)\,\Sigma(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n)\,G(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) \tag{4.60}$$

oder

$$G^{-1}(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) = G_0^{-1}(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) - \Sigma(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) \,. \tag{4.61}$$

Hier ist die Integralgleichung zu einer algebraischen Gleichung geworden. Man beachte, daß in den Feynman-Diagrammen nun über interne Impulse $\boldsymbol{k}$ integriert werden muß in ähnlicher Weise wie die Summation über interne Matsubara-Frequenzen in Abb. 4.4. An den Vertizes gilt Impulserhaltung, d.h. die Summen der ein- und auslaufenden Impulse sind gleich.

Im einfachsten Fall, z.B. in der Hartree-Fock-Näherung, die im nächsten Abschnitt diskutiert werden soll, ist die Selbstenergie eine frequenzunabhängige Konstante $\Sigma(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) = a_{\boldsymbol{k}}$. Dann erhalten wir

$$G^{-1}(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) = i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \mu - a_{\boldsymbol{k}} \,. \tag{4.62}$$

Nun kann man die Selbstenergie als Energieverschiebung durch die Wechselwirkung interpretieren: man erhält eine neue Quasiteilchenenergie $E_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} + a_{\boldsymbol{k}}$.

Falls die Selbstenergie auch einen Imaginärteil enthält, im einfachsten Fall (bei Verunreinigungsstreuung):

$$\Sigma(\boldsymbol{k}, \sigma, i\omega_n) = a_{\boldsymbol{k}} + i\,\gamma\,\mathrm{sign}(\omega_n) \tag{4.63}$$

erhält man nach analytischer Fortsetzung in der oberen Halbebene:

$$G(\boldsymbol{k}, \sigma, z) = z - E_{\boldsymbol{k}} + \mu + i\gamma \tag{4.64}$$

und für die Spektralfunktion

$$G''(\boldsymbol{k}, \sigma, \omega) = -\frac{\gamma}{(\omega - E_{\boldsymbol{k}} + \mu)^2 + \gamma^2}\,. \tag{4.65}$$

γ kann demnach als Energie-Verbreiterung des Quasiteilchen-Zustandes aufgefaßt werden, bzw. nach Rücktransformation in den Zeitraum:

$$G(\boldsymbol{k}, \sigma, t) = -i\,\Theta(t)\,\mathrm{e}^{-iE_{\boldsymbol{k}}t-\gamma t} \tag{4.66}$$

als reziproke Lebensdauer.

4.4 Hartree-Fock-Näherung

Im Folgenden soll eine wichtige Näherung für die Selbstenergie, bei der wir uns auf die selbstkonsistente Berechnung der ersten beiden Graphen in Abb. 4.3c beschränken, diskutiert werden.

Nach den Graphenregeln erhalten wir für die Selbstenergie im Orts-Zeit-Raum in Hartee-Fock-(HF-)Näherung:

$$\begin{aligned} \Sigma_{HF}(1,2) \quad = \quad & \delta(\tau_1 - \tau_2)\,\delta(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)\,\delta_{\sigma_1\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \int d^3x_3\, V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_3) \langle \psi^\dagger_{\sigma_3}(\boldsymbol{x}_3) \psi_{\sigma_3}(\boldsymbol{x}_3) \rangle \\ & -\delta(\tau_1 - \tau_2)\,\delta_{\sigma_1\sigma_2}\, V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) \langle \psi^\dagger_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1) \psi_{\sigma_2}(\boldsymbol{x}_2) \rangle\,. \end{aligned} \tag{4.67}$$

Der erste Term (Hartree-Term) beschreibt die Wechselwirkung des Teilchens, dessen Propagation durch die Einteilchen-Greensche Funktion verfolgt wird, mit der Ladungsdichte der übrigen Elektronen. Der zweite Term (Fock-Term) ist die sogenannte Austauschwechselwirkung. Da die Selbstenergie in dieser Näherung instantan ist, kann sie als effektives Potential aufgefaßt werden (siehe die Diskussion in Kapitel 4.3).

Im Frequenzraum erhält man entsprechend:

$$\begin{aligned}\Sigma_{HF}(\boldsymbol{x}_1\sigma_1, \boldsymbol{x}_2\sigma_2, i\omega_n) &= \delta(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)\delta_{\sigma_1\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \int d^3x_3 V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_3) \left\langle \psi^\dagger_{\sigma_3}(\boldsymbol{x}_3)\psi_{\sigma_3}(\boldsymbol{x}_3)\right\rangle \\ &\quad -\delta_{\sigma_1\sigma_2} V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) \left\langle \psi^\dagger_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{\sigma_2}(\boldsymbol{x}_2)\right\rangle , \qquad (4.68)\end{aligned}$$

wobei der thermische Erwartungswert auch als

$$\left\langle \psi^\dagger_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{\sigma_2}(\boldsymbol{x}_2)\right\rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} G(\boldsymbol{x}_2\sigma_2, \boldsymbol{x}_1\sigma_1, i\omega_m)\, \mathrm{e}^{i\omega_m\delta} \qquad (4.69)$$

mit $\delta \to +0$ geschrieben werden kann. Die Selbstenergie hängt selbst nicht von der Frequenz ω_n ab.

Im Folgenden wollen wir wieder die Bewegung von Elektronen in einem Potential $U(\boldsymbol{x})$ mit einer Zwei-Teilchen-Wechselwirkung $V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2)$ betrachten. Dann genügt die Greensche Funktion der Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}\left\{ i\omega_n - \left[-\frac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m} + U(\boldsymbol{x}) \right] \right\} G(\boldsymbol{x}\sigma, \boldsymbol{x}'\sigma, i\omega_n) - \int d^3x''\, \Sigma_{HF}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'')\, G(\boldsymbol{x}''\sigma, \boldsymbol{x}'\sigma, i\omega_n) \\ = \delta(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)\,. \qquad (4.70)\end{aligned}$$

Hier haben wir schon verwendet, daß die Greensche Funktion in HF-Näherung diagonal im Spin ist.

a) Entwicklung nach vollständigem Orthogonalsystem

Eine besonders durchsichtige Form ergibt sich, wenn wir die Greensche Funktion nach einem vollständigen Orhogonalsystem entwickeln: Wir setzen:

$$\psi_\sigma(\boldsymbol{x}) = \sum_j c_{j\sigma}\phi_{j\sigma}(\boldsymbol{x})\,. \qquad (4.71)$$

Wählen wir die Basisfunktionen als Eigenfunktionen der folgenden Integro-Differentialgleichung:

$$\left\{ -\frac{\boldsymbol{\nabla}^2}{2m} + U(\boldsymbol{x}) \right\} \phi_{j\sigma}(\boldsymbol{x}) + \int d^3x'\, \Sigma_{HF}(\boldsymbol{x}\sigma, \boldsymbol{x}'\sigma)\, \phi_{j\sigma}(\boldsymbol{x}') = E_j\, \phi_{j\sigma}(\boldsymbol{x})\,, \qquad (4.72)$$

dann wird die Greensche Funktion diagonal:

$$G(\boldsymbol{x}\sigma, \boldsymbol{x}'\sigma; i\omega_n) = \sum_j \frac{\phi_{j\sigma}(\boldsymbol{x})\phi^*_{j\sigma}(\boldsymbol{x}')}{i\omega_n - E_j + \mu}\,. \qquad (4.73)$$

Für die Selbstenergie erhält man dann:

$$\begin{aligned}\Sigma_{HF}(\boldsymbol{x}\sigma, \boldsymbol{x}'\sigma) &= \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \int d^3x''\, V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'') \sum_{l\sigma''} |\phi_{l\sigma''}(\boldsymbol{x}'')|^2 f_l \\ &\quad - V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \sum_l \phi_{l\sigma}(\boldsymbol{x}) \phi^*_{l\sigma}(\boldsymbol{x}') f_l \,. \end{aligned} \tag{4.74}$$

Diese Summen erstrecken sich über alle besetzten Zustände nach Maßgabe der Fermi-Besetzungszahl $f_j = f(E_j - \mu) = 1/(\exp(\beta(E_j - \mu)) + 1)$. Diese Fermi-Besetzungszahlen erhält man formal aus der Greenschen Funktion (siehe Glg. (3.87)) durch

$$f_j = \langle c^\dagger_{j\sigma} c_{j\sigma} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{\mathrm{e}^{i\omega_n \delta}}{i\omega_n - E_j + \mu} \,. \tag{4.75}$$

Die Selbstenergie enthält zwei Terme: der erste beschreibt eine Wechselwirkung des Elektrons im Zustand j mit der Ladungsdichte aller anderen Elektronen (Hartree-Term), der zweite Term beschreibt die Austausch-Wechselwirkung (Fock-Term).

d) Spezialfall: Translationsinvariantes Elektronensystem

Hier sind die Wellenfunktionen unabhängig von der Stärke und Form der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung ebene Wellen

$$\phi_{j\sigma}(\boldsymbol{x}) = \phi_{\boldsymbol{k}\sigma}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{Vol}}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \,. \tag{4.76}$$

Für die Selbstenergie erhält man in Hartree-Fock-Näherung:

$$\Sigma_{HF}(\boldsymbol{k}, \sigma) = \frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}'} \sum_{\sigma'} f_{\boldsymbol{k}'} \, \left(V(\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}) - \delta_{\sigma\sigma'} \, V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \right) \tag{4.77}$$

Hier ist

$$V(\boldsymbol{k}) = \int d^3x \, V(\boldsymbol{x}) \, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{k^2} \tag{4.78}$$

die Fourier-Transformierte des Coulomb-Potentials.

Als Ergebnis für die Greensche Funktion erhalten wir damit

$$G^{-1}(\boldsymbol{k}\sigma; i\omega_n) = i\omega_n - E_{\boldsymbol{k}} + \mu \tag{4.79}$$

mit $E_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \Sigma_{HF}(\boldsymbol{k})$.

Der erste Term der Selbstenergie, der die Wechselwirkung eines Elektrons mit der (negativen) Ladungsdichte der anderen Elektronen beschreibt, ist divergent.

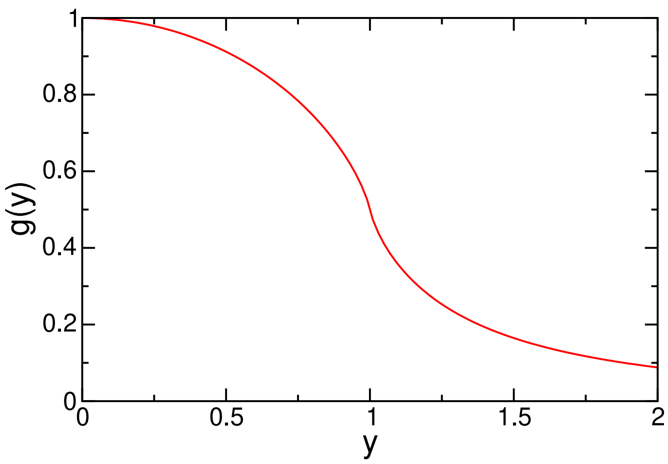


Abbildung 4.5: *Lindhard-Funktion.*

Das liegt an der langen Reichweite der Coulomb-Wechselwirkung. In einem elektrisch neutralen Metall wird dieser Term gerade durch die Wechselwirkung des Elektrons mit dem positiven Ionenhintergrund kompensiert und braucht deshalb im folgenden nicht weiter berücksichtigt werden.

Der zweite Term läßt sich für ein homogenes Elektronengas mit $\epsilon_k = k^2/(2m)$ bei $T = 0$ leicht analytisch berechnen (siehe z.B. Kapitel 5.1.3 von Referenz [21]). Die Fermi-Besetzungszahlen hängen zwar formal von den erst noch zu berechnenden renormierten Quasiteilchen-Energien E_k ab, die Besetzung im k-Raum ist aber eindeutig durch den Radius der Fermi-Kugel k_F vorgegeben, der durch die Gesamtzahl der besetzten Zustände und damit durch die Zahl der Elektronen vorgegeben ist und durch die Wechselwirkung nicht verändert wird. D.h. $f_k = 1, k < k_F, f_k = 0, k > k_F$. Wir erhalten:

$$\frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{k'} V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') f_{k'} = \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} f_{k'} \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'|^2} = \frac{e^2 k_F}{2\pi^2 \epsilon_0} g(k/k_F) \tag{4.80}$$

mit

$$g(y) = \frac{1}{2} + \frac{1 - y^2}{4y} \ln \left| \frac{1+y}{1-y} \right| . \tag{4.81}$$

Die Funktion $g(y)$, die uns später noch häufiger als Lindhard-Funktion begegnen wird, ist in Abb. 4.5 dargestellt. Sie ist bei $y = 1$ regulär, hat dort aber eine Singularität in der Ableitung.

Die daraus resultierende Quasiteilchen-Energie E_k hat an der Fermikante eine Singularität in der Ableitung $\partial E_k / \partial k = \infty$, was einem Verschwinden der effektiven Masse entspricht. So etwas wird experimentell in Metallen nicht beobachtet, und dieser Effekt ist ein Artefakt der Hartree-Fock-Näherung. Verursacht wird dieser Effekt durch die Divergenz der nicht-abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung. Durch die im nächsten Kapitel zu diskutierende Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung durch Teilchen-Lochanregungen, wie sie in Abb. 4.4 dargestellt sind, wird diese Divergenz beseitigt.

Die weiteren Graphen von Abb. 4.3c führen auch zu einem Imaginärteil der Selbstenergie und damit zu einer endlichen Lebensdauer der Quasiteilchen. Eine ausführlichere Diskussion weiterer Beiträge zur elektronischen Selbstenergie ist z.B. in Kapitel 5.1 des Buches [21] zu finden.

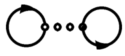
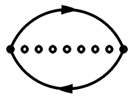
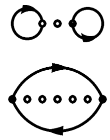
Für allgemeine Potentiale V bzw. $T > 0$ kann die HF-Selbstkonsistenz-Gleichung (4.77) durch Iteration gelöst werden: Man wählt z.B. $\Sigma_{HF(0)} = 0$ und berechnet dann iterativ aus $\Sigma_{HF(m)}$ mit Hilfe der rechten Seite von (4.77) ein neues $\Sigma_{HF(m+1)}$. Im Regelfall erhält man Konvergenz nach einigen Iterationen. Dabei gilt es zu beachten, daß das chemische Potential μ eigentlich erst am Ende so gewählt werden sollte, daß eine gegebene Teilchendichte eingestellt wird. Eine numerische Auswertung erfordert jedoch eine feste Wahl von μ. Das chemische Potential ist bei der Iteration dann so nachzuführen, daß die Teilchendichte auf dem vorgegebenen Wert festgehalten wird. Eine Vereinfachung tritt allerdings für ein vollständig rotations-symmetrisches Problem auf, denn hier kann sich der Fermi-Impuls $\boldsymbol{k}_F$ nicht verschieben. In diesem Fall kann man die Verschiebung des chemischen Potentials zu $\Delta\mu = \Sigma(\boldsymbol{k}_F)$ ablesen.

4.5 Das thermodynamische Potential

In diesem Unterkapitel wollen wir einen Ausdruck für das thermodynamische Potential vorstellen, der als Luttinger-Ward-Funktional bekannt ist [19]. Wie wir im Abschnitt 4.2 bereits angesprochen haben, besteht einer der wesentliche Züge der Feynmanschen Störungstheorie darin, daß bei der Berechnung Greenscher Funktionen

$$G_{AB}(\tau) = -\frac{\langle \mathcal{T} S[\beta, 0]\, A(\tau)\, B\rangle_0}{\langle S[\beta, 0]\rangle_0}$$

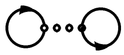
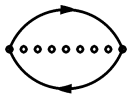
die in der diagrammatischen Entwicklung auftretenden unverbundenen Beiträge (siehe z.B. 3. Diagramm in Abb. 4.1) im Zähler genau die Größe $\langle S[\beta, 0]\rangle_0$ kürzen („Linked-Cluster Theorem“, vgl. die Diskussion am Ende von Abschnitt 4.2). Andererseits ist $\langle S[\beta, 0]\rangle_0 = Z/Z_0$, so daß man das Verhältnis der Zustandssummen vom System mit und ohne Wechselwirkung diagrammatisch schreiben kann als

$\langle S(\beta,0)\rangle_0 = \mathrm{e}^{-\beta(F-F_0)} = 1 +$  $+$  $+$  $+ \ldots$ (4.82)

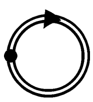
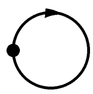
Wie man in Gleichung (4.82) sieht, können in dieser Entwicklung selbst auch noch unverbundene Graphen auftreten. Zusammen mit den kombinatorischen Vorfaktoren, die bei der Störungsentwicklung auftreten, kann man diese Struktur mit Hilfe des sog. „Kumulantensatzes“ in die Form

$$\mathrm{e}^{-\beta(F-F_0)} = \exp\left\{\sum_{i=1}^{\infty} \Gamma_i\right\} \tag{4.83}$$

bringen; die Größen Γ_i stehen hierbei für alle *topologisch verschiedenen*, zusammenhängenden Graphen der Ordnung i. Die Störungsentwicklung für die freie Energie lautet dann entsprechend

$-\beta(F-F_0) = \Big[$  $+$  $+ \ldots \Big]_{\text{verb.}}$. (4.84)

Bei der Berechnung der Selbstenergie in Abschnitt 4.2 konnten wir nun so verfahren, daß man Wechselwirkungsprozesse, die auf einer durchgehenden Elektronenlinie sitzen, als Selbstenergieeinschübe auffassen kann und die entsprechende nackte Elektronen-Greensche Funktion durch die voll renormierte ersetzt. Würde man dasselbe Verfahren naiv auf die Aufsummation der Graphen in (4.84) anwenden, dann landet man bei dem Ergebnis

$-\beta(F-F_0) \overset{?}{=}$  $-$  (4.85)

$$= -\frac{1}{\beta}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma,i\omega_n}\left\{G_{\boldsymbol{k}\sigma}(i\omega_n) - G^{(0)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(i\omega_n)\right\}\mathrm{e}^{i\omega_n\delta}$$
$$= \sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\left(\langle n_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle - \langle n_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle_0\right) = \langle N\rangle - \langle N\rangle_0 \quad .$$

Damit wäre

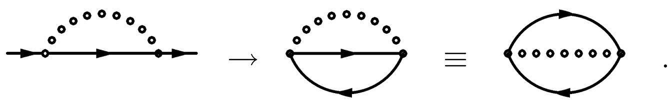
$$F - F_0 = k_{\mathrm{B}}T\left(\langle N\rangle - \langle N\rangle_0\right)$$

und insbesondere

$$\Delta F(T = 0) \equiv 0 \ .$$

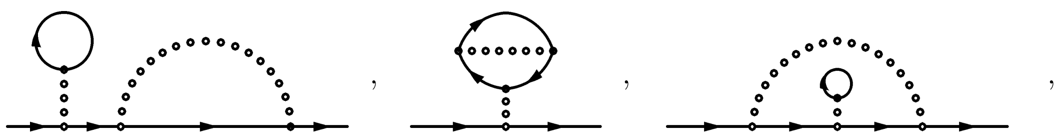
Das ist natürlich Unsinn.

Was ist hier schiefgegangen? Die Antwort ist, daß wegen des Fehlens externer Linien eine sinnvolle Unterscheidung zwischen „Skeletten“ und „Selbstenergieeinschüben“ überhaupt nicht möglich ist. Allerdings kann man umgekehrt die Störungsreihe der Selbstenergie dazu benützen, um sich (formal) einen Ausdruck für das thermodynamische Potential zu beschaffen. Um das einzusehen, machen wir uns zunächst einmal klar, daß man aus jedem diagrammatischen Beitrag zur Einteilchen-Greenschen Funktion einen diagrammatischen Beitrag zur freien Energie konstruieren kann, indem man nämlich die externen Linien miteinander verknüpft, etwa



(4.86)

Allerdings würde man bei dieser naiven Vorschrift zuviel des Guten tun. Betrachten wir nämlich die Diagramme Greenscher Funktionen (keine Skelettgraphen)



so stellen alle drei sicherlich *verschiedene* zulässige Beiträge zur Störungsreihe der Einteilchen-Greenschen Funktion dar. Verbindet man jedoch die äußeren Linien, so erhält man jedesmal ein topologisch äquivalentes Diagramm, d.h. alle drei Graphen ergeben dasselbe verbundene Diagramm.

Um dennoch Kontakt mit der Skelettgraphenentwicklung machen zu können, muß man sich eines Tricks bedienen. Wir multiplizieren zunächst formal den Wechselwirkungsanteil des Hamiltonians H_W mit λ^N, wobei N die Anzahl der Fermionenvertizes in H_W ist ($N = 1$ für Einteilchenstreuung oder Elektron-Phonon-Kopplung, $N = 2$ für Coulombwechselwirkung, ...).

Betrachten wir nun $Z_\lambda = \mathrm{Tr} e^{-\beta H_\lambda}$, so ist

$$\frac{d \ln Z_\lambda}{d\lambda} = \left\langle \frac{d}{d\lambda} \mathrm{e}^{-\beta H_\lambda} \right\rangle_\lambda \quad .$$

Verwenden wir jetzt das bei der Berechnung der statischen Suszeptibilität in Abschnitt 1.2 eingeführte Verfahren zur Ableitung der Exponentialfunktion, so findet man mit $d\lambda^N/d\lambda = N/\lambda \cdot \lambda^N$

$$\Delta\Omega = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} N \langle H_W^\lambda[\tau] \rangle_\lambda = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} N \langle H_W^\lambda \rangle_\lambda \quad . \tag{4.87}$$

Typischerweise wird der Wechselwirkungsterm die Form

$$H_W = \sum_{k_1,\ldots,k_N} \sum_{k'_1,\ldots,k'_N} U_{k_1\ldots k_N}^{k'_1\ldots k'_N} c_{k_1}^\dagger \cdots c_{k_N}^\dagger c_{k'_N} \cdots c_{k'_1}$$

haben, wobei der Index $k_i = (\boldsymbol{k}_i, \sigma_i)$ Impuls und Spin zusammenfaßt. Betrachten wir den nun Ausdruck

$$\sum_k \langle c_k^\dagger [c_k, H_W] \rangle = N \langle H_W \rangle \quad .$$

Die rechte Seite ergibt sich, da bei der Bildung des Kommutators sukzessive jeweils einer der Erzeuger durch $c_k^\dagger$ ersetzt wird (wegen des Pauli-Prinzips kann immer nur genau einer die Quantenzahlen k haben). Andererseits ist

$$\sum_k \langle c_k^\dagger [c_k, H_W] \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{k, i\omega_n} \langle\langle [c_k, H_W], c_k^\dagger \rangle\rangle_{i\omega_n} \mathrm{e}^{i\omega_n \delta}$$

und mit der Bewegungsgleichung (3.6)

$$z \langle\langle c_k, c_k^\dagger \rangle\rangle_z = 1 + \epsilon_k \langle\langle c_k, c_k^\dagger \rangle\rangle_z + \langle\langle [c_k, H_W], c_k^\dagger \rangle\rangle_z \quad ,$$

so daß man schließlich mit der Definition $\langle\langle [c_k, H_W], c_k^\dagger \rangle\rangle_z = \Sigma_k(z) \langle\langle c_k, c_k^\dagger \rangle\rangle_z$

$$\Delta\Omega = \frac{1}{\beta} \sum_{k, i\omega_n} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \, G_k(i\omega_n; \lambda) \, \Sigma_k(i\omega_n; \lambda) \, \mathrm{e}^{i\omega_n \delta} \tag{4.88}$$

oder

$$\lambda \frac{d\Delta\Omega}{d\lambda} = \frac{1}{\beta} \sum_{k, i\omega_n} G_k(i\omega_n; \lambda) \, \Sigma_k(i\omega_n; \lambda) \, \mathrm{e}^{i\omega_n \delta} \tag{4.89}$$

erhält. Man beachte, daß in Gleichung (4.89) jeweils die volle Einteilchen-Greensche Funktion und -selbstenergie auftreten.

Die Beziehung (4.89) ist nun allerdings für eine weitere Auswertung ungeeignet. Weiter kommt man, wenn man sich eine Hilfsfunktion

$$\Phi = \sum_{l=1}^{\infty} \Phi_l$$

definiert, mit

$$\lambda \frac{d\Phi_l}{d\lambda}\bigg|_{\text{expl.}} = \frac{1}{\beta} \sum_{k,i\omega_n} G_k(i\omega_n;\lambda)\, \Sigma_k^{(l)}(i\omega_n;\lambda)\, \mathrm{e}^{i\omega_n\delta} \quad ,$$

wobei $\Sigma_k^{(l)}(i\omega_n;\lambda)$ die Skelettgraphenbeiträge in Ordnung l in H_W zur Einteilchenselbstenergie bezeichnet und $d/(d\lambda)|_{\text{expl.}}$ die Ableitung nach den *expliziten* λ's aufgrund der Vertizes in den Skelettgraphen bedeutet, aber nicht nach der impliziten λ-Abhängigkeit der vollen Propagatoren. Da $\Sigma_k(z;\lambda=0)=0$ und nur die explizit auftretenden Faktoren λ in den Skelettgraphen zu berücksichtigen sind, d.h. $\Sigma_k^{(l)}(z;\lambda) \propto \lambda^{Nl}$, kann man integrieren mit dem Ergebnis

$$\Phi_l = \frac{1}{\beta}\frac{1}{Nl} \sum_{k,i\omega_n} G_k(i\omega_n;\lambda)\, \Sigma_k^{(l)}(i\omega_n;\lambda)\, \mathrm{e}^{i\omega_n\delta} \quad . \tag{4.90}$$

Die Hilfsfunktion Φ erhält man also, indem man die Skelettgraphen in Ordnung l in H_W nimmt, die externen Vertizes mit einem vollen Einteilchenpropagator schließt, und, um die Multiplizität der so entstandenen verbundenen Diagramme richtig zu erhalten, mit einem Symmetriefaktor $1/(Nl)$ multipliziert.

Nun gilt zwar offensichtlich

$$\lambda \frac{d\Phi}{d\lambda}\bigg|_{\text{expl.}} = \lambda \frac{d\Delta\Omega}{d\lambda} \quad ,$$

aber sicherlich ist $\Phi \neq \Delta\Omega$. Nehmen wir statt dessen aber die Funktion

$$\Phi' = \Phi - \frac{1}{\beta} \sum_{k,i\omega_n} \left\{ \ln\left[\frac{G_k^{(0)}(i\omega_n)}{G_k(i\omega_n;\lambda)}\right] + \frac{G_k(i\omega_n;\lambda)}{G_k^{(0)}(i\omega_n)} - 1 \right\} \mathrm{e}^{i\omega_n\delta} \quad , \tag{4.91}$$

so folgt, da die Ableitung nach der expliziten λ-Abhängigkeit im letzten Term verschwindet und

$$\frac{d}{d\lambda}\bigg|_{\text{impl.}} = \sum_{k,i\omega_n} \frac{\partial G_k(i\omega_n;\lambda)}{\partial\lambda} \frac{\partial}{\partial G_k(i\omega_n;\lambda)} \quad ,$$

mit

$$\frac{\partial \Phi'}{\partial G_k(i\omega_n;\lambda)} = \frac{\partial \Phi}{\partial G_k(i\omega_n;\lambda)} - \frac{1}{\beta}\left\{-G_k^{-1}(i\omega_n;\lambda) + G_k^{(0)^{-1}}(i\omega_n)\right\}$$
$$= \frac{\partial \Phi}{\partial G_k(i\omega_n;\lambda)} - \frac{1}{\beta}\Sigma_k(i\omega_n;\lambda)$$

und

$$\frac{\partial \Phi}{\partial G_k(i\omega_n;\lambda)} = \frac{1}{\beta}\Sigma_k(i\omega_n;\lambda)$$

sofort

$$\left.\frac{d\Phi'}{d\lambda}\right|_{\text{impl.}} = 0 \quad .$$

Damit kann man $\Delta\Omega = \Phi'$ identifizieren und $\lambda = 1$ setzen.

Bei der vorangegangenen Ableitung ist uns nebenbei ein recht wichtiger und interessanter Sachverhalt zugekommen. Es ist nämlich

$$\frac{\partial \Delta\Omega}{\partial G_k(i\omega_n)} = \frac{\partial \Phi'}{\partial G_k(i\omega_n)} = 0 \quad .$$

Damit kann man folgendes Variationsprinzip für die freie Energie formulieren:

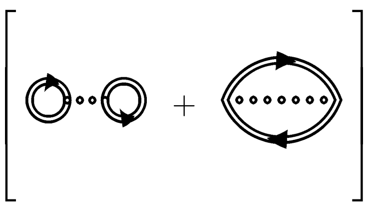
> Die Freie Energie, aufgefaßt als Funktional des Einteilchenpropagators, ist extremal für den exakten Propagator.

Ist zudem noch die Größe Φ als Funktional von $G_k(z)$ bekannt, so kann man sich die zugehörige Selbstenergie beschaffen aus

$$\beta\frac{\delta\Phi}{\delta G_k(z)} = \Sigma_k(z) \quad . \tag{4.92}$$

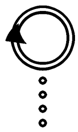
Es ist klar, daß die wirkliche Berechnung von Φ mittels (4.90) die Kenntnis der exakten Greenschen Funktion sowie der kompletten Skelettgraphenentwicklung der Selbstenergie voraussetzt, was natürlich unmöglich ist. Andererseits kann man das abgeleitete Variationsprinzip zusammen mit Gleichung (4.92) dazu benutzen, um innerhalb einer Klasse von Näherungen für $\Sigma_k(z)$ die optimale zu identifizieren, d.h. diejenige, für welche die freie Energie extremal wird.

Als Beispiel für dieses Vorgehen wollen wir uns eine optimale Näherung bestimmen, die exakt in erster Ordnung in z.B. der Coulombwechselwirkung ist. Das Funktional Φ ergibt sich dann zu

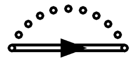
$\Phi^{(1)} = \frac{1}{2\beta}$  ,  $= \left[G_k^{(0)}(z)^{-1} - \Sigma_k(z)\right]^{-1}$.

Für die zugehörige Selbstenergie erhält man dann mit (4.92)

$$\Sigma_k^{(1)}(z) = \beta \frac{\delta \Phi^{(1)}}{\partial G_k(z)} =$$



$$+$$



,

d.h. die bekannte selbstkonsistente Hartree-Fock-Näherung.

Die Konstruktion einer Näherung mittels eines generierenden Funktionales Φ bewirkt zudem, daß Greensche Funktionen höherer Ordnung durch Funktionalableitung nach zugehörigen äußeren Feldern generiert werden können. Damit läßt sich z.B. beweisen, daß sogenannte Ward-Identititäten [34,37] (siehe Abschnitt 5.8) erfüllt werden [5]. Für solcherart konstruierte Näherungen kann man nun noch zeigen, daß sie gewisse Summenregeln erfüllen, z.B.

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(-\frac{1}{\pi}\right) \Im\mathrm{m} G_k(\omega + i\delta)\, f(\omega) = \langle n_k \rangle$$

etc. Obwohl diese Aussage auf den ersten Blick trivial erscheint, ist es für eine beliebige Näherung nicht a priori klar, daß das Integral auf der linken Seite in der Tat die zu dieser Näherung gehörige Besetzungszahl ergibt. Aus diesem Grunde werden Näherungen, die sich aus einem generierenden Funktional erzeugen lassen, auch als erhaltende Näherungen bezeichnet. Man beachte allerdings, daß die Aussage nur soweit geht, daß das Integral auf der linken Seite physikalisch Sinn macht, nicht jedoch, daß die so berechnete Besetzungszahl irgend etwas mit dem exakten Wert zu tun hat!

5 Elektronengas

In diesem Kapitel werden wir zuerst das phänomenologische Konzept einer Fermi-Flüssigkeit skizzieren, das eine Beziehung zwischen einem wechselwirkenden und einem wechselwirkungsfreien Elektronengas herstellt. Dann werden wir die Dichteanregungen eines Elektronengases diskutieren, wobei wir zuerst den wechselwirkungsfreien und anschließend den wechselwirkenden Fall betrachten. Als technisches Werkzeug verwenden wir hierbei die dynamische Suszeptibilität. Damit können wir einerseits die dielektrischen Eigenschaften des Festkörpers beschreiben, andererseits werden wir sehen, daß im Fall des wechselwirkenden Elektronengases neue kollektive Anregungen der Elektronendichte auftreten, die sogenannten Plasmonen bzw. Plasma-Schwingungen. Nach einem technischen Exkurs zu den auf Erhaltungssätzen basierenden Ward-Identitäten schließt dieses Kapitel mit Bemerkungen zu einer mikroskopischen Sichtweise der Fermi-Flüssigkeit.

5.1 Landau-Fermi-Flüssigkeit

Wir wollen zunächst kurz das Konzept einer Fermi-Flüssigkeit kennenlernen. Die Darstellung wird weitgehend dem Kapitel 6 des Buches [31] sowie dem Kapitel 7.5 des Skripts [7] folgen (man beachte auch Kapitel II.2 des Skripts [35], sowie Kapitel 6.1 und 6.2 des Buchs [28]).

Bis in die 50er-Jahre waren freie Fermionen die einzigen gut verstandenen Fermi-Systeme. Andererseits wurde ^{3}He intensiv untersucht, das ein ideales Fermi-System darstellt, bei dem allerdings deutliche Abweichungen vom wechselwirkungsfreien Fall beobachtet werden. Auf diesem Hintergrund entwickelte Landau seine phänomenologische Theorie normaler Fermi-Flüssigkeiten [16] (eine gute Zusammenfassung der frühen Entwicklungen findet man u.a. auch in [2]). Der Grundgedanke ist, daß sich schwach (oder ggfs. auch stark) wechselwirkende Elektronen bei niedrigen Energien in vieler Hinsicht wie ein wechselwirkungsfreies Fermi-Gas verhalten.

Genauer basiert Landaus Theorie normaler Fermi-Flüssigkeiten auf folgenden Annahmen:

1. Es besteht eine eins-zu-eins Beziehung zwischen den Niederenergie-Anregungen des wechselwirkenden Systems und den Anregungen des Systems ohne Wechselwirkung. Speziell können die Anregungen in beiden Systemen

mit den gleichen Quantenzahlen charakterisiert werden; für ein translationsinvariantes System verwendet man Impuls $\boldsymbol{k}$ und Spin σ.

2. Die Niederenergie-Anregungen sind „Quasiteilchen“, die durch Angabe ihrer Besetzungszahlen $n_{\boldsymbol{k},\sigma}$ spezifiziert werden können. Insbesondere hängt die Energie lediglich von den Besetzungszahlen der Quasiteilchen-Zustände ab, d.h. $E = E[n_{\boldsymbol{k},\sigma}]$.

3. Für niedrige Temperaturen T und schwache externe Störungen sind die Änderungen in den Besetzungszahlen so klein, daß kubische Beiträge zur Energie vernachlässigkeit werden können. (Diese Annahme erlaubt es uns insbesondere, mit linearer Antwort-Theorie zu arbeiten).

4. In Feldern, die sich räumlich und zeitlich langsam verändern, kann man eine lokale instantane Energie angeben, die nur von den lokalen instantanen Besetzungszahlen abhängt.

Die 2. Annahme erlaubt es uns zunächst, die Energie als

$$E = E\left[\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}\right] \tag{5.1}$$

zu schreiben, wobei $\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}$ die Abweichung der Besetzungszahlen von denjenigen im Grundzustand beschreibt. Aufgrund der 3. Annahme können wir die Energie nun wie folgt entwickeln:

$$E = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}}\, \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma'} f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma')\, \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}\, \delta n_{\boldsymbol{k}',\sigma'}\,. \tag{5.2}$$

Hierbei tritt eine neue phänomenologische Funktion f auf, die die Wechselwirkungen beschreibt. Für ein homogenes isotropes System hängt f nur von der Kombination $\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$ ab.

Die Quasiteilchen-Energie $\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k},\sigma}$ ist die Energie, die benötigt wird, um die Anzahl der Quasiteilchen mit den Quantenzahlen $\boldsymbol{k}$ und σ um eins zu erhöhen. Interpretiert man $\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}$ als Dichte, so folgt aus (5.2)

$$\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k},\sigma} = \frac{\partial E}{\partial\left(\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}\right)} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{k}',\sigma'} f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma')\, \delta n_{\boldsymbol{k}',\sigma'}\,. \tag{5.3}$$

Im Gleichgewicht und bei $T=0$ ist $\delta n_{\boldsymbol{k}',\sigma'} = 0$ und somit

$$\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k},\sigma} = \epsilon_{\boldsymbol{k}}\,. \tag{5.4}$$

Legt man den Energie-Nullpunkt relativ zum chemischen Potential fest, ist die *Fermi-Fläche* im k-Raum definiert durch

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}} = 0\,. \tag{5.5}$$

Für ein isotropes System ist $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_k$ mit $k = |\boldsymbol{k}|$, so daß man einen Fermi-Impuls k_F definieren kann durch

$$\epsilon_{k_F} = 0\,. \tag{5.6}$$

Macht man nun die Annahme, daß die Wechselwirkung die Anregungs-Energien nicht umsortiert, so gilt

$$\begin{aligned} \epsilon_k > 0 \qquad & \text{für } k > k_F, \\ \epsilon_k < 0 \qquad & \text{für } k < k_F. \end{aligned} \tag{5.7}$$

Aufgrund der 1. Annahme ist nun die Anzahl der Zustände mit $k < k_F$ gleich der mittleren Teilchendichte n, d.h.

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3k\, \Theta\left(k_F - k\right) = \frac{k_F^3}{3\pi^2}\,, \tag{5.8}$$

wobei der Faktor 2 die beiden möglichen Spin-Einstellungen berücksichtigt.

Die Niederenergie-Anregungen sind ferner genau diejenigen mit k in der Nähe von k_F. Somit entwickeln wir

$$\epsilon_k = \frac{k_F}{m^*}\left(k - k_F\right)\,. \tag{5.9}$$

In dieser Entwicklung tritt ein Parameter m^* auf, der „effektive Masse" genannt wird.

Als nächstes machen wir eine Hartree-artige Näherung: Die Besetzungszahlen $\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}$ unterliegen zwar thermischen und quantenmechanischen Fluktuationen. Für niedrige Temperaturen ist jedoch $|\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma} - \langle \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}\rangle| \ll |\langle \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}\rangle|$, so daß wir das Funktional (5.2) nach Fluktuationen entwickeln können. Aufgrund der 3. Annahme können wir wie zuvor kubische Terme vernachlässigen und erhalten

$$\begin{aligned} E &= \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}}\, \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma'} f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma')\, \langle \delta n_{\boldsymbol{k}',\sigma'}\rangle\, \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma} \\ &\qquad\qquad - \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma'} f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma')\, \langle \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}\rangle\, \langle \delta n_{\boldsymbol{k}',\sigma'}\rangle \\ &= \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \left(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + U_{\boldsymbol{k},\sigma}\right)\, \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} U_{\boldsymbol{k},\sigma}\, \langle \delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}\rangle \end{aligned} \tag{5.10}$$

mit einem sogenannten Molekularfeld

$$U_{\boldsymbol{k},\sigma} = \sum_{\boldsymbol{k}',\sigma'} f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma')\,\langle \delta n_{\boldsymbol{k}',\sigma'}\rangle\,. \tag{5.11}$$

Aufgrund von (5.10) können die Quasiteilchen als Elektronen mit Energie $\epsilon_{\boldsymbol{k}} + U_{\boldsymbol{k},\sigma}$ interpretiert werden. Somit gilt für die Besetzungszahlen bei einer endlichen Temperatur $T > 0$

$$\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\left(\epsilon_k + U_{\boldsymbol{k},\sigma}\right)} + 1} - \Theta\left(k_F - k\right)\,. \tag{5.12}$$

Es folgt zunächst, daß $U_{\boldsymbol{k},\sigma}$ unabhängig von der Richtung $\boldsymbol{k}/|\boldsymbol{k}|$ und dem Spin σ ist und somit konstant ist. Andererseits gilt aufgrund von Teilchenzahl-Erhaltung $\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\langle\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}\rangle = 0$. Also ist nach (5.11) $U_{\boldsymbol{k},\sigma} = 0$ und für die Verteilungsfunktion (5.12) gilt

$$\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon_k} + 1} - \Theta\left(k_F - k\right)\,. \tag{5.13}$$

Dies zeigt, daß die freie Energie einer normalen Fermi-Flüssigkeit die gleiche Form besitzt wie ein Gas freier Elektronen!

Spezifische Wärme:

Wir führen zunächst die Zustandsdichte an der Fermi-Oberfläche ein:

$$N(0) = \frac{4\pi\,k^2}{(2\pi)^3}\,\frac{dk}{dE}\bigg|_{k=k_F} = \frac{m^*\,k_F}{2\pi^2}\,, \tag{5.14}$$

wobei wir dE/dk nach (5.9) eingesetzt haben. Damit gilt für die spezifische Wärme

$$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{d}{dT}\,\frac{2}{(2\pi)^3}\int d^3k\,\epsilon_k\,f(\epsilon_k) = 2\,N(0)\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\,\epsilon\,\frac{d}{dT}\,\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon}+1}\,, \tag{5.15}$$

wobei wir die Spin-Entartung mit einem Faktor 2 berücksichtigt haben. Mit

$$\frac{d}{dT}\,\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon}+1} = \frac{-\epsilon\,\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon}\,\frac{d}{dT}\,\beta}{\left(\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon}+1\right)^2} = \frac{\frac{1}{T}\,\beta\,\epsilon}{\left(\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon}+1\right)\,\left(\mathrm{e}^{-\beta\,\epsilon}+1\right)} \tag{5.16}$$

können wir (5.15) auswerten:

$$\begin{aligned} C_V &= 2\,N(0)\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\,\frac{k_B\,\left(\beta\,\epsilon\right)^2}{\left(\mathrm{e}^{\beta\,\epsilon}+1\right)\,\left(\mathrm{e}^{-\beta\,\epsilon}+1\right)} \\ &= 2\,N(0)\,k_B^2\,T\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\,\frac{x^2}{\left(\mathrm{e}^{x}+1\right)\,\left(\mathrm{e}^{-x}+1\right)} = \gamma\,T\,. \end{aligned} \tag{5.17}$$

Hier haben wir unter dem Integral $x = \beta\,\epsilon$ substituiert. Das lineare Verhalten der spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen ist ein Charakteristikum einer Fermi-Flüssigkeit. Setzt man den Wert des Integral zu $\pi^2/3$ ein, so liest man den Koeffizienten γ aus (5.17) ab zu

$$\gamma = \frac{2}{3}\,\pi^2\,N(0)\,k_B^2\,, \tag{5.18}$$

wobei daran erinnert sei, daß die effektive Masse m^* in $N(0)$ auftritt (siehe (5.14)).

Effektive Masse:

Für ein translationsinvariantes System ist die effektive Masse m^* kein von der phänomenologischen Funktion f unabhängiger Parameter. Um die Beziehung genauer anzugeben, ist es zunächst nützlich, Isotropie, Translations-Invarianz und $SU(2)$-Symmetrie zu verwenden, um die Funktion f nach Legendre-Polynomen P_l zu entwickeln:

$$2\,N(0)\,f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\sigma,\sigma') = \sum_l \left(F_l + Z_l\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\sigma}'\right)\,P_l(\cos\theta)\,, \tag{5.19}$$

wobei $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}' = k\,k'\,\cos\theta$ ist.

Nun betrachtet man ein mit Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ bewegtes Gesamtsystem. Einerseits ist der Gesamtimpuls gegeben durch $\boldsymbol{P} = N\,m\,\boldsymbol{v}$, wobei die Gesamtmasse des Systems gegeben ist durch die Anzahl der Fermionen N multipliziert mit deren *freier* Masse m. Andererseits antwortet das System auf die Bewegung mit einer Änderung der Besetzungszahlen $\delta n_{\boldsymbol{k},\sigma}$. Die beiden Sichtweisen hängen über eine Galilei-Transformation zusammen. Wir geben hier nur das Ergebnis an (Herleitungen sind z.B. in Kapitel 7.5 des Skripts [7], Kapitel II.2.1 des Skripts [35] sowie in Kapitel 6.1(b) des Buches [31] zu finden):

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{1}{3}\,F_1\,. \tag{5.20}$$

Magnetische Suszeptibilität:

Wir wollen kurz eine weitere Größe diskutieren, nämlich die magnetische Suszeptibilität χ. Dazu müssen wir zunächst die Energie (5.2) um einen magnetischen Beitrag ergänzen. Verwenden wir eine zweit-quantisierte Schreibweise, so ergibt sich ein Beitrag

$$H_M = \frac{1}{2}\int d^3x\,\psi_\sigma^\dagger\,(\boldsymbol{x})\;g\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\,(\boldsymbol{x})\;\psi_\sigma\,(\boldsymbol{x}) \tag{5.21}$$

zum Hamilton-Operator. Die magnetische Suszeptibilität χ beschreibt nun die Antwort der Magnetisierung auf ein konstantes äußeres Magnetfeld $\boldsymbol{B}$. Wir verzichten wiederum auf die Herleitung[10] und geben lediglich das Ergebnis an:

$$\frac{\chi}{\chi_0} = \frac{1+\frac{1}{3}\,F_1}{1+\frac{1}{4}\,Z_0} = \frac{m^*}{m\,\left(1+\frac{1}{4}\,Z_0\right)}\,, \tag{5.22}$$

wobei χ_0 die magnetische Suszeptibilität freier Fermionen mit Masse m ist.

Insgesamt beobachtet man folgende wesentliche Eigenschaft von Landaus Theorie der Fermi-Flüssigkeiten: Die funktionalen Abhängigkeiten thermodynamischer Größen sind genau wie bei freien Elektronen, allerdings mit „renormierten" Konstanten (effektive Masse etc.). Andererseits äußert sich die Wechselwirkung darin, daß die verschiedenen Konstanten voneinander unabhängig sind. So wäre die magnetische Suszeptibilität freier Fermionen mit einer effektiven Masse m^* gegeben durch $\chi/\chi_0 = m^*/m$; in einer Fermi-Flüssigkeit erlaubt das Auftreten des Wecheslwirkungs-Parameters Z_0 in (5.22) Abweichungen von dieser Beziehung.

Da eine Fermi-Flüssigkeit sich qualitativ wie ein freies Fermi-System verhält, ist es in jedem Fall nützlich, ein wechselwirkungsfreies Elektronengas zu verstehen.

5.2 Dichte-Suszeptibilität als Antwortfunktion

Im folgenden werden wir den aus Kapitel 1.1 bekannten allgemeinen Zusammenhang zwischen Antwortfunktion und dynamischer Suszeptibilität auf Störungen der Dichte eines Elektronengases anwenden. Konkret interessieren wir uns für die Dichteänderung $\delta\langle n(\boldsymbol{x}\rangle_t$ aufgrund einer äußeren zeit- und ortsabhängigen Störung $V_s(\boldsymbol{x},t)$, die an die Elektronendichte angreift:

$$H_{s,t} = -\int d^3x'\,V_s(\boldsymbol{x}',t)\,n(\boldsymbol{x}')\,. \tag{5.23}$$

Dann ist

$$\delta\langle n(\boldsymbol{x})\rangle_t = \int d^3x' \int_{-\infty}^{+\infty} dt'\,\chi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t-t')\,V_s(\boldsymbol{x}',t') \tag{5.24}$$

mit der dynamischen Dichte-Suszeptibilität

$$\chi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t) = i\Theta(t)\,\langle[n(\boldsymbol{x},t),n(\boldsymbol{x}',0)]\rangle\,. \tag{5.25}$$

[10]An dieser Stelle geht schließlich die 4. Annahme ein. Rechnungen findet man z.B. in Kapitel 6.1(d,e) des Buches [31] und Kapitel II.2.2 des Skripts [35].

Wir definieren die räumliche Fourier-Transformierte als

$$n(\boldsymbol{q}) = \int d^3x\, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} n(\boldsymbol{x}) \tag{5.26}$$

$$n(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{q}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\, n(\boldsymbol{q}) \tag{5.27}$$

und entsprechend

$$V_s(\boldsymbol{q},t) = \int d^3x\, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\, V_s(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{5.28}$$

Dann erhalten wir

$$H_{s,t} = -\frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{q}'} n^\dagger(\boldsymbol{q}')\, V_s(\boldsymbol{q}',t) \tag{5.29}$$

und

$$\delta\langle n(\boldsymbol{q})\rangle_t = \sum_{\boldsymbol{q}'} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \chi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}',t-t')\, V_s(\boldsymbol{q}',t') \tag{5.30}$$

mit

$$\chi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}',t) = i\Theta(t)\, \frac{1}{\mathrm{Vol}}\, \langle [n(\boldsymbol{q},t), n^\dagger(\boldsymbol{q}')]\rangle\,. \tag{5.31}$$

Für translationsinvariante Systeme hängt die Suszeptibilität nur von der Differenz $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'$ ab, entsprechend ist die Suszeptibilität im Wellenvektor-Raum diagonal:

$$\chi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}',t) = \delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'}\, \chi(\boldsymbol{q},t)\,, \tag{5.32}$$

d.h.

$$\delta\langle n(\boldsymbol{q})\rangle_t = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi(\boldsymbol{q},t-t')\, V_s(\boldsymbol{q},t') \tag{5.33}$$

mit

$$\chi(\boldsymbol{q},t) = i\Theta(t)\, \frac{1}{\mathrm{Vol}}\, \langle [n(\boldsymbol{q},t), n^\dagger(\boldsymbol{q})]\rangle\,. \tag{5.34}$$

Diese Größe ist die Fourier-Transformierte der Suszeptibilität bezüglich $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'$:

$$\chi(\boldsymbol{q},t) = \int d^3x\, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\, \chi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)\,. \tag{5.35}$$

Für ein gitterperiodisches System ist die Suszeptibilität diagonal in $\boldsymbol{q}$ bis auf reziproke Gittervektoren ($\boldsymbol{q}' = \boldsymbol{q} + \boldsymbol{Q}$). Die Summe in (5.30) erstreckt sich dann nur noch über reziproke Gittervektoren.

Im Folgenden brauchen wir häufig die Laplace-Transformierte

$$\chi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}',z) = \int\limits_0^{\infty} dt\, \mathrm{e}^{izt}\, \chi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}',t) = -\frac{1}{\mathrm{Vol}} \langle\!\langle n(\boldsymbol{q}); n^\dagger(\boldsymbol{q}')\rangle\!\rangle_z\,. \tag{5.36}$$

5.3 Dynamische Suszeptibilität für freies Elektronengas

Wir wollen zunächst die dynamische Suszeptibilität für ein freies Elektronengas ohne Coulombwechselwirkung, die sogenannte Lindhard-Funktion berechnen. Wir werden dieses wichtige Resultat auf zwei Weisen herleiten: einmal mit Hilfe der Bewegungsgleichung und dann mit der Technik Greenscher Funktionen. Die zweite Methode ist zweckmäßig und notwendig, wenn man systematisch die Wechselwirkung berücksichtigen will.

a) Bewegungsgleichung

Durch Feldoperatoren ausgedrückt schreibt sich die Elektronendichte

$$n(\boldsymbol{x}) = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\psi_{\sigma}(\boldsymbol{x})\,. \tag{5.37}$$

Setzen wir dafür eine Zerlegung nach ebenen Wellen ein

$$\psi_{\sigma}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{Vol}}}\sum_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\sigma}\,\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,, \tag{5.38}$$

dann lautet die Dichte

$$\begin{aligned} n(\boldsymbol{x}) &= \frac{1}{\mathrm{Vol}}\sum_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2\sigma} c_{\boldsymbol{k}_1\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}_2\sigma}\,\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{x}}\,\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{x}} && (5.39)\\ n(\boldsymbol{q}) &= \int d^3x\,\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\,n(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma} = n^{\dagger}(-\boldsymbol{q})\,. && (5.40)\end{aligned}$$

Für die dynamische Suszeptibilität erhalten wir dann

$$\chi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}',z) = -\frac{1}{\mathrm{Vol}}\langle\langle n(\boldsymbol{q}); n^{\dagger}(\boldsymbol{q}')\rangle\rangle_z = -\frac{1}{\mathrm{Vol}}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\sigma\sigma'}\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}; c_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}'\sigma'}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_z\,. \tag{5.41}$$

Wir wenden die Bewegungsgleichung (3.6) auf jeden einzelnen Term der Summe an (nur dann erhält man ein einfach auswertbares Ergebnis):

$$\begin{aligned} z\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}; c_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}'\sigma'}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_z &+ \langle\langle \mathcal{L}c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}; c_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}'\sigma'}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_z\\ &= \langle[c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}, c_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}'\sigma'}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}'\sigma'}]\rangle\,. \end{aligned} \tag{5.42}$$

Dabei ist $\mathcal{L}$ der Kommutator mit dem Hamilton-Operator der freien Leitungselektronen, $H = \sum\limits_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}\sigma}$ (vgl. Kapitel 3.1).

Führt man die Kommutatoren aus, dann erhält man

$$\begin{aligned}\mathcal{L}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma} &= (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}})c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma} && (5.43)\\ [c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}, c^\dagger_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}'\sigma'}c_{\boldsymbol{k}'\sigma'}] &= \delta_{\sigma\sigma'}\,\delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}'}\,c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}'\sigma} - \delta_{\sigma\sigma'}\,\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\,c^\dagger_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}'\sigma}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}\,. && (5.44)\end{aligned}$$

Mit $\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}'\sigma}\rangle = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\,f_{\boldsymbol{k}}$, $f_{\boldsymbol{k}} = (\exp(\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) + 1)^{-1}$ erhält man

$$(z + \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}})\langle\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}'\sigma'}c_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle\rangle_z = \delta_{\sigma\sigma'}\,\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\,(f_{\boldsymbol{k}} - f_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}) \qquad (5.45)$$

und daraus durch Summation die dynamische Suszeptibilität:

$$\chi_0(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{q}', z) = \delta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'}\,\frac{2}{\mathrm{Vol}}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{f_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - f_{\boldsymbol{k}}}{z + \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}\,. \qquad (5.46)$$

Der Faktor 2 stammt aus der Spinsumme. Die Diagonalität der dynamischen Suszeptibilität folgt hier aus der Diagonalität der Erwartungswerte $\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}'\sigma}\rangle$.

b) Mit thermodynamischen Greenschen Funktionen

Wir definieren eine Zweiteilchen-Greensche Funktion

$$\begin{aligned}G_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \tau) &= -\langle\mathcal{T}n(\boldsymbol{x}, \tau)n(\boldsymbol{x}', 0)\rangle\\ &= -\sum_{\sigma\sigma'}\langle\mathcal{T}\psi^\dagger_\sigma(\boldsymbol{x}, \tau)\psi_\sigma(\boldsymbol{x}, \tau)\psi^\dagger_{\sigma'}(\boldsymbol{x}', 0)\psi_{\sigma'}(\boldsymbol{x}', 0)\rangle\,. && (5.47)\end{aligned}$$

Für ein System ohne Wechselwirkung können wir diesen Ausdruck mit Hilfe des Wickschen Theorems exakt auswerten:

$$\begin{aligned}G_2(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \tau) &= -\sum_{\sigma\sigma'}\langle\mathcal{T}\psi^\dagger_\sigma(\boldsymbol{x}, \tau)\psi_{\sigma'}(\boldsymbol{x}', 0)\rangle\langle\mathcal{T}\psi_\sigma(\boldsymbol{x}, \tau)\psi^\dagger_{\sigma'}(\boldsymbol{x}', 0)\rangle\\ &\quad -\langle n(\boldsymbol{x}, \tau)\rangle\langle n(\boldsymbol{x}', 0)\rangle\\ &= 2\,G_0(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}, -\tau)\,G_0(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}', \tau) - \langle n(\boldsymbol{x})\rangle\langle n(\boldsymbol{x}')\rangle\,. && (5.48)\end{aligned}$$

Der erste Term ist der so genannte Polarisations-Propagator (der Faktor 2 stammt wieder aus der Spinsumme)

$$\Pi_0(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}', \tau) = 2\,G_0(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}, -\tau)\,G_0(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}', \tau)\,, \qquad (5.49)$$

dargestellt in Abb. 5.1 als Propagation von einem Teilchen-Loch-Paar von $(\boldsymbol{x}', 0)$ nach $(\boldsymbol{x}, \tau)$. Der zweite Term tritt auf bei der Zerlegung der thermodynamischen Greenschen Funktion, spielt aber keine Rolle in der entsprechenden Antwortfunktion. Man überzeugt sich leicht, daß der Polarisationspropagator gerade die

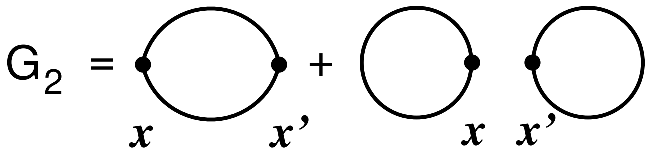


Abbildung 5.1: *Zweiteilchen-Propagator für freie Elektronen.*

Korrelationsfunktion der Dichteschwankungen $\delta n(\boldsymbol{x}) = n(\boldsymbol{x}) - \langle n(\boldsymbol{x})\rangle$ beschreibt. Nur diese Größe spielt eine Rolle im Kommutator der Antwortfunktion.

Wir gehen über zur Fourier-Transformierten:

$$\Pi_0(\boldsymbol{q}, i\omega_s) = \int d^3x\, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} \int_0^\beta d\tau\, \mathrm{e}^{i\omega_s\tau}\, \Pi_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', \tau)\,. \tag{5.50}$$

Dabei ist wegen des Kommutators in der Antwortfunktion $\omega_s = 2s\pi/\beta$ eine gerade Matsubara-Frequenz. Setzen wir die Fourier-Zerlegung der Greenschen Funktionen ein (mit ungeraden Matsubara-Frequenzen)

$$G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', \tau) = \frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \mathrm{e}^{-i\omega_n\tau}\, G_0(\boldsymbol{k}, i\omega_n)\,, \tag{5.51}$$

dann erhalten wir:

$$\Pi_0(\boldsymbol{q}, i\omega_s) = \frac{2}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G_0(\boldsymbol{k}, i\omega_n)\, G_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}, i\omega_n + i\omega_s)\,. \tag{5.52}$$

Die Frequenzsumme können wir mit der Poissonschen Summenformel ausführen (siehe Kapitel 3.4, insbesondere (3.90) und (3.91)):

$$\begin{aligned}
\Pi_0(\boldsymbol{q}, i\omega_s) &= \frac{2}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \mu}\, \frac{1}{i\omega_n + i\omega_s - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + \mu} \\
&= \frac{2}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) - f(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - \mu - i\omega_s)}{(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) - (\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - \mu - i\omega_s)} \\
&= \frac{2}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{f_{\boldsymbol{k}} - f_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}{i\omega_s + \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}} = -\chi_0(\boldsymbol{q}, i\omega_s)\,,
\end{aligned} \tag{5.53}$$

wobei $\exp(i\omega_s\beta) = 1$ verwendet wurde. Nach analytischer Fortsetzung der Frequenz $i\omega_s \to z = \omega + i\delta$ erhalten wir das gleiche Resultat (5.46) wie zuvor. Man beachte, daß die analytische Fortsetzung erst dann ausgeführt wird, nachdem vorher $\exp(i\omega_s\beta) = 1$ gesetzt wurde. Die Diagonalität in $\boldsymbol{q}$ ergibt sich hier daraus, daß die Einteilchen-Greenschen Funktionen nur von $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'$ abhängen.

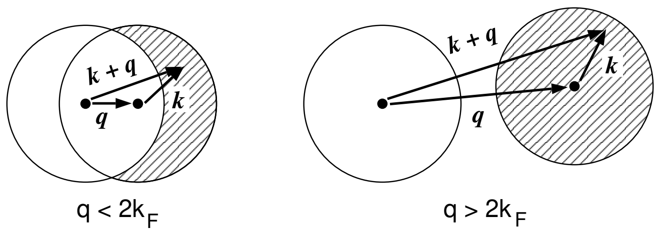


Abbildung 5.2: *Mögliche Teilchen-Loch-Anregungszustände.*

Bevor wir die Wechselwirkung einbauen, wollen wir kurz das Ergebnis für die dynamische Suszeptibilität des freien Elektronengases diskutieren.

Imaginärteil der dynamischen Suszeptibilität bei $T = 0$:

$$\chi_0''(\boldsymbol{q},\omega) = \Im\mathrm{m}\chi_0(\boldsymbol{q},\omega+i\delta) = -2\pi\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}(f_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - f_{\boldsymbol{k}})\,\delta(\omega+\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}})\,. \quad (5.54)$$

Die Spektralfunktion enthält Beiträge von den wirklichen Anregungen des Systems (im Gegensatz zum Realteil der Suszeptibilität, zu dem auch virtuelle Anregungen beitragen). Anregungen sind möglich, wenn die Energie ω der äußeren Störung der Anregungsenergie $\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}}$ eines Teilchen-Loch-Paares entspricht. Ferner muß der Ausgangszustand besetzt und der Endzustand unbesetzt sein. Die möglichen Anregungszustände sind in Abb. 5.2 für die beiden Fälle $q < 2k_F$ und $q > 2k_F$ dargestellt.

Für die Anregungsenergie eines Teilchen-Loch-Paares erhalten wir mit der quadratischen Einteilchen-Dispersion $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{k}^2/(2\,m)$

$$\omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}} = \frac{(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})^2 - \boldsymbol{k}^2}{2\,m} = \frac{2\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q} + \boldsymbol{q}^2}{2\,m}\,. \quad (5.55)$$

Bei einem besetzten Anfangszustand $\boldsymbol{k}$ und für einen gegebenen Vektor $\boldsymbol{q}$ erhält man die höchste Anregungsenergie, wenn $\boldsymbol{k}$ parallel zu $\boldsymbol{q}$ ist und auf der Fermikante liegt:

$$\omega_{\max} = \frac{q\,k_F}{m} + \frac{q^2}{2\,m}\,. \quad (5.56)$$

Die Minimalenergie ist dagegen:

$$\omega_{\min} = \begin{cases} 0 & \text{für } q < 2\,k_F \\ -\frac{q\,k_F}{m} + \frac{q^2}{2\,m} & \text{für } q > 2\,k_F. \end{cases} \quad (5.57)$$

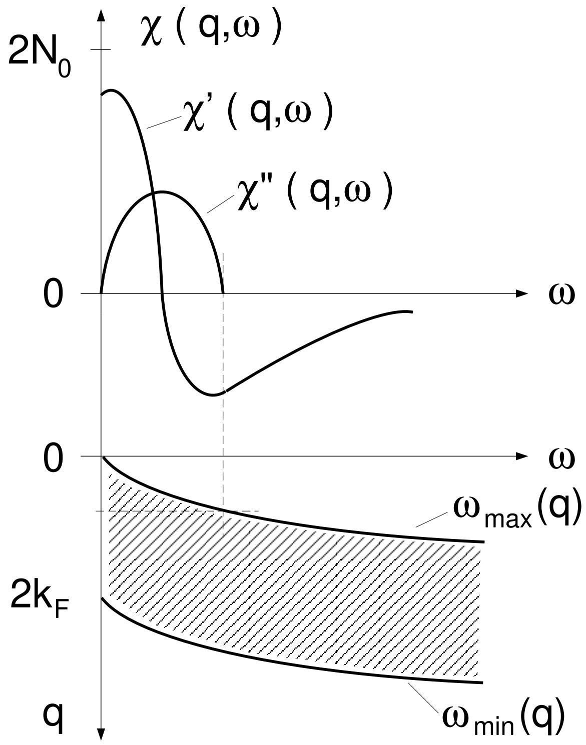


Abbildung 5.3: *Dynamische Suszeptibilität für ein freies Elektronengas.*

Grundsätzlich ist $\chi''(\boldsymbol{q},\omega) \neq 0$ nur wenn $\omega_{\min} < \omega < \omega_{\max}$. Dieser Bereich ist im unteren Teil von Abb. 5.3 schraffiert dargestellt.

Ein weiterer leicht zu diskutierender Grenzfall ist die

Statische Suszeptiblität bei T=0:

Für den Realteil der Suszeptibilität erhält man

$$\chi_0'(\boldsymbol{q},\omega) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^2} \frac{f_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - f_{\boldsymbol{k}}}{\omega + \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}} \,. \tag{5.58}$$

Hier tragen auch virtuelle Prozesse mit $\omega \neq \omega_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}$ bei.

Bei $T = 0$ und $\omega = 0$ läßt sich das Integral leicht ausrechnen (analytische Resultate für $\omega \neq 0$ findet man z.B. in Kapitel 3.5 (S. 144) des Buches [30]), und man erhält

$$\chi_0'(\boldsymbol{q},0) = 2\,N(\mu)\,g\left(\frac{q}{2k_F}\right) \tag{5.59}$$

mit der Zustandsdichte an der Fermikante

$$N(\mu) = \frac{m\,k_F}{2\pi^2} \tag{5.60}$$

und der Lindhard-Funktion (4.81) (siehe Abb. 4.5). Bei $x = 0$ hat sie den Wert 1, bei $x = 1$ einen scharfen Abfall mit unendlicher Steigung. Dieser Punkt entspricht dem Wert $q = 2k_F$.
Nebenrechnung zu (5.59):

$$\begin{aligned}
-2\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{f_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-f_{\boldsymbol{k}}}{\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}}} &= 4\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{f_{\boldsymbol{k}}}{\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}}} = 4\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{f_{\boldsymbol{k}}}{q^2/(2m)+\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}/m} \\
&= \frac{4}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F} dk\,k^2 \int_{-1}^{+1} dx \frac{1}{q^2/(2m)+xqk/m} \\
&= \frac{4}{(2\pi)^2}\frac{m}{q}\int_0^{k_F} dk\,k \int_{-1}^{+1} dx \frac{1}{q/(2k)+x} \\
&= \frac{4}{(2\pi)^2}\frac{m}{q}\int_0^{k_F} dk\,k \ln\left|\frac{1+q/2k}{1-q/2k}\right| \\
&= \frac{4}{(2\pi)^2}\frac{m}{q}\left(\frac{1}{2}\left(k_F^2-\frac{q^2}{4}\right)\ln\left|\frac{k_F+q/2}{k_F-q/2}\right| + \frac{k_F\,q}{2}\right) \\
&= 2\frac{mk_F}{2\pi^2}\left(\frac{1}{2}+\frac{1-x^2}{4x}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right) \qquad (5.61)
\end{aligned}$$

mit $x = q/2k_F$.

Den Wert der Suszeptibilität bei $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{0}$ berechnet man auch leicht bei endlichen Temperaturen aus

$$\chi(\boldsymbol{0},0) = 2\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}}}\right) = 2\int_0^{\infty} d\epsilon\, N(\epsilon)\left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right). \qquad (5.62)$$

Bei $T = 0$ wird die Ableitung der Fermifunktion zur δ-Funktion, und man erhält

$$\chi(\boldsymbol{0},0) = 2\,N(\mu)\,. \qquad (5.63)$$

Dieser Wert beschreibt die Änderung der Teilchendichte auf eine Verschiebung des chemischen Potentials, $\Delta n = 2N(\mu)\Delta\mu$. Man beachte die Reihenfolge der Limites: erst $\omega \to 0$ dann $\boldsymbol{q} \to \boldsymbol{0}$, d.h.

$$\lim_{\boldsymbol{q}\to\boldsymbol{0}}\lim_{\omega\to 0}\chi(\boldsymbol{q},\omega) = 2N(\mu)\,. \qquad (5.64)$$

Setzt man dagegen $\boldsymbol{q} = \mathbf{0}$ bei endlichem ω, dann ist die Antwort 0:

$$\lim_{\omega \to 0} \lim_{\boldsymbol{q} \to 0} \chi(\boldsymbol{q}, \omega) = 0 \,. \tag{5.65}$$

Auf eine zeitliche Änderung eines räumlich homogenen Potentials kann die Dichte wegen der Erhaltung der Teilchenzahl nicht reagieren, im Unterschied zu der Reaktion auf ein räumlich variables Potential mit $\boldsymbol{q} \neq \mathbf{0}$, wo ein Ausgleich zwischen Gebieten mit höherem Potential zu Gebieten mit niedrigerem Potential möglich ist. Ist dagegen $\omega = 0$ exakt (oder setzt man $i\omega_s = 0$ vor der analytischen Fortsetzung auf die reelle Achse), dann beschreibt $\chi(\boldsymbol{q}, 0)$ die isotherme Suszeptibilität. Hier kann sich die Teilchendichte ändern, da der Ausgleich über den Kontakt mit einem Teilchen-Reservoir erfolgt. Diese Aussagen, die auf Erhaltungssätzen beruhen, behalten ihre Gültigkeit auch bei Verunreinigungsstreuung und Zweiteilchen-Wechselwirkung (beachte aber den Sonderfall der langreichweitigen Coulombwechselwirkung im nächsten Abschnitt).

Antwort auf eine punktförmige Störung:

Exakt berechenbar ist auch die Antwort auf eine punktförmige Störung. Setzen wir

$$V(\boldsymbol{x}) = v\,\delta(\boldsymbol{x}) \,, \quad V(\boldsymbol{q}) = v \,, \tag{5.66}$$

dann finden wir für die induzierte Dichteänderung (eine Strategie zur Berechnung der dabei auftretenden Integrale findet man z.B. in Kapitel 14 (S. 178-179) von Referenz [10]):

$$\delta\langle n(\boldsymbol{x})\rangle = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \chi_0'(\boldsymbol{q}, 0)\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\, v = avF(2k_F x) \tag{5.67}$$

mit

$$F(y) = \frac{\sin y - y\cos y}{y^4}, \quad a = \frac{mk_F^4}{2\pi^3} \,. \tag{5.68}$$

Bemerkenswert sind die räumlichen Ladungsoszillationen (sognenannte Friedel-Oszillationen), die durch den scharfen Abbruch der Lindhard-Funktion bei $q = 2k_F$ verursacht werden. Sie treten in ähnlicher Form auch in einem geladenen Elektronensystem mit Coulombwechselwirkung auf. In der vorliegenden Form beschreiben sie die Antwort der Spindichte auf die Wechselwirkung mit einem lokalen Moment. Die Spinsuszeptibilität wird ebenfalls durch die Lindhard-Funktion beschrieben und hier spielt die Coulombwechselwirkung keine entscheidende Rolle. Setzen wir

$$H_s = -j\, \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{s}(\mathbf{0}) \tag{5.69}$$

für die Austauschwechselwirkung j der Spindichte $\boldsymbol{s}(\boldsymbol{x})$ der Leitungselektronen ($s_z(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(n_\uparrow(\boldsymbol{x}) - n_\downarrow(\boldsymbol{x}))$ mit einem lokalen Moment $\boldsymbol{S}$ am Ort $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$, dann erhalten wir für die Antwort der Spindichte

$$\delta\langle \boldsymbol{s}(\boldsymbol{x})\rangle = a\, j\, \boldsymbol{S}\, F(2k_F x)\,. \tag{5.70}$$

Daraus läßt sich die effektive Wechselwirkungsenergie von zwei lokalen Momenten $\boldsymbol{S}_1$, $\boldsymbol{S}_2$ an den Orten $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$ berechnen: Für die Wechselwirkungs-Energie des Momentes $\boldsymbol{S}_2$ mit der Leitungselektronen-Spindichte am Ort $\boldsymbol{x}_2$ gilt:

$$E = -j\, \boldsymbol{S}_2 \cdot \boldsymbol{s}(\boldsymbol{x}_2)\,. \tag{5.71}$$

Setzen wir für $\boldsymbol{s}(\boldsymbol{x}_2)$ die durch das Moment am Ort $\boldsymbol{x}_1$ induzierte Spindichte ein, dann finden wir

$$E = -J(r)\, \boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2\,. \tag{5.72}$$

Hierbei ist $J(r) = j^2\, a\, F(2k_F r)$ die so genannte Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY)-Wechselwirkung [14,32,38], die oszillierend vom Abstand $r = |\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1|$ der beiden Momente abhängt. Damit läßt sich (teilweise) erklären, warum metallische Legierungen mit magnetischen Ionen je nach Abstand der lokalen Momente mal ferromagnetisch und mal antiferromagnetisch ordnen.

5.4 Dynamische Suszeptibilität für Elektronengas mit Coulombwechselwirkung

Im letzten Kapitel hatten wir gesehen, wie man die dynamische Suszeptibilität eines freien Elektronengases durch eine Zweiteilchen-Greensche Funktion ausdrückt. Die Berücksichtigung der Coulombwechselwirkung als Störung erfolgt hier nach den gleichen Regeln wie für die Einteilchen-Greensche Funktion: Wir konstruieren alle topologisch verschiedenen zusammenhängende Graphen, für jede Wechselwirkungslinie gibt es einen Faktor (-1), ebenso für jede zusätzliche Fermionen-Schleife (der nackte Polarisations-Propagator ist eine solche Schleife). Über alle internen Variablen ist zu summieren (integrieren), dabei gilt an jedem Vertex Impuls- und Frequenz-Erhaltung. Zur Berechnung der dynamischen Suszeptibilität mit dem Wellenvektor $\boldsymbol{q}$ und der Frequenz $i\omega_s$ werden die entsprechen Werte bei den äußeren Vertizes zu- bzw. abgeführt. Die dynamische Suszeptibilität für Frequenzen auf der reellen Achse erhält man durch eine entsprechende analytische Fortsetzung $i\omega_s \to z = \omega + i\delta$ des Endresultats.

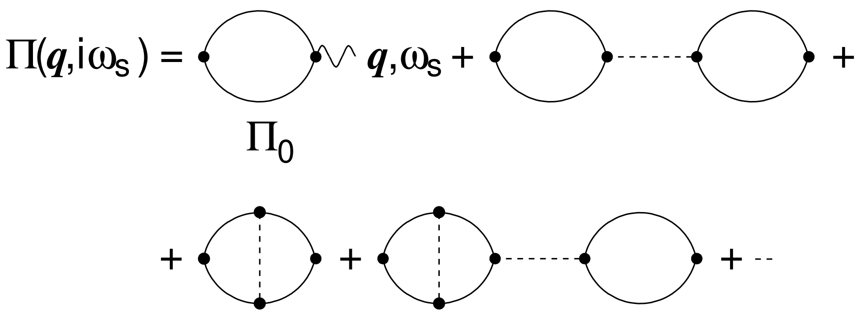


Abbildung 5.4: *Graphen für den Polarisations-Propagator.*

Eine repräsentative Auswahl von Graphen für den Polarisation-Propagator sind in Abb. 5.4 gezeigt. Graphen, die lediglich zu einer Renormierung der Einteilchen-Greenschen Funktion führen, sind nicht extra aufgeführt, d.h. die durchgezogene Linie entspricht einer renormierten Greenschen Funktion.

Die Graphen zerfallen in zwei Kategorien: reduzible Graphen, die in zwei Teile zerfallen, wenn man eine Coulomb-Linie durchschneidet, und den Rest. Die reduziblen Graphen kann man mit Hilfe einer Dyson-Gleichung (im Sinne einer geometrischen Reihe in der Coulombwechselwirkung) aufsummieren. Im Impuls- und Frequenz-Raum erhält man:

$$\Pi(\boldsymbol{q}, i\omega_s) = \frac{\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, i\omega_s)}{1 - V(\boldsymbol{q})\,\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, i\omega_s)} \tag{5.73}$$

bzw. nach analytischer Fortsetzung:

$$\Pi(\boldsymbol{q}, z) = \frac{\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z)}{1 - V(\boldsymbol{q})\,\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z)}\,. \tag{5.74}$$

Dabei ist $\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, i\omega_s)$ die Summe aller irreduziblen Polarisations-Propagatoren. Eine Auswahl davon ist in Abb. 5.5 gezeigt. Soweit ist dieses Ergebnis exakt.

Eine Näherung, die unter dem Namen Random Phase Approximation (RPA) bekannt ist, erhält man, wenn man $\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z)$ durch den nackten Polarisations-Propagator $\Pi_0(\boldsymbol{q}, z)$ ersetzt. Das bedeutet insbesondere, daß man Austausch- und Korrelationseffekte in der Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt. Wechselwirkungseffekte durch die Coulombwechselwirkung werden insoweit berücksichtigt, wie sie durch elektrische Felder ausdrückbar sind. In dem Sinne ist die RPA eine Molekularfeld-Näherung. Der Name Random Phase Approximation

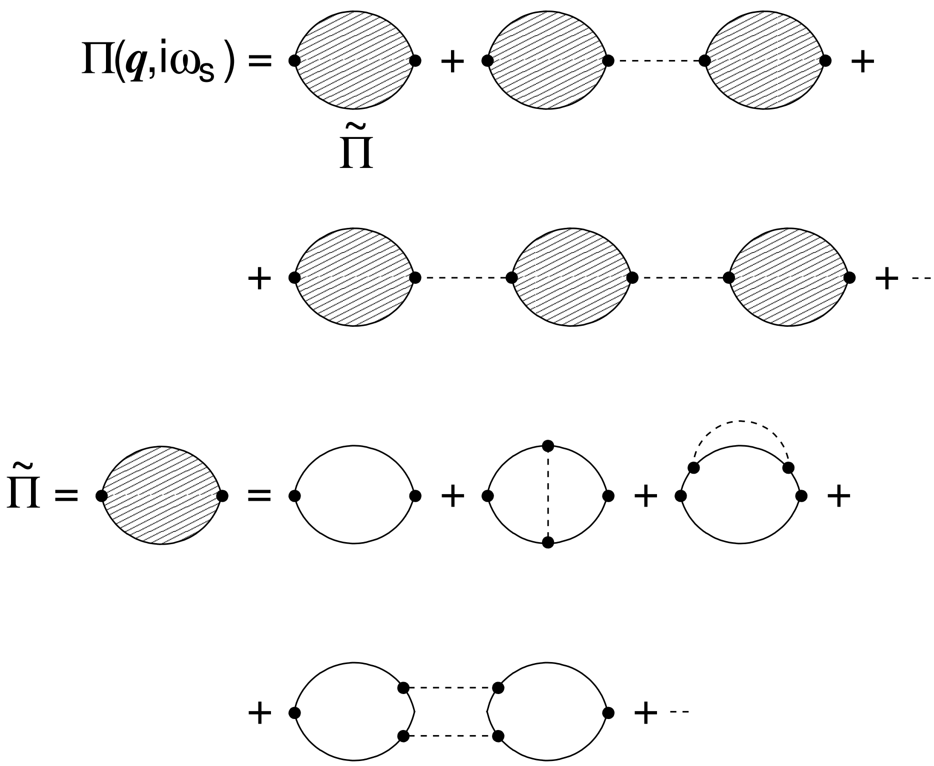


Abbildung 5.5: *Dyson-Gleichung (oben) und irreduzible Polarisations-Graphen (unten).*

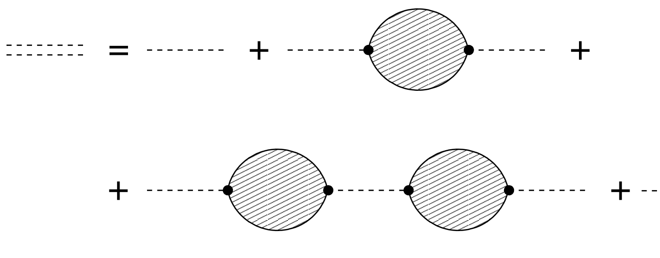


Abbildung 5.6: *Effektives Potential.*

hat historische Gründe und stammt aus einer Näherung, die man bei der Faktorisierung der Bewegungsgleichung für die Elektronendichte macht (siehe z.B. Kapitel 12 des Buches [20]).

In vielen Fällen ist es sinnvoll, mittels der Reihe Abb. 5.6 eine renormierte frequenzabhängige Wechselwirkung einzuführen. Hierfür erhält man:

$$V_{\text{eff}}(\boldsymbol{q}, z) = \frac{V(\boldsymbol{q})}{1 - V(\boldsymbol{q})\,\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z)}\,. \tag{5.75}$$

Damit läßt sich eine (longitudinale) Dielektrizitätsfunktion für das Elektronengas definieren:

$$V_{\text{eff}}(\boldsymbol{q}, z) = \frac{V(\boldsymbol{q})}{\epsilon(\boldsymbol{q}, z)} \tag{5.76}$$

mit

$$\epsilon(\boldsymbol{q}, z) = 1 - V(\boldsymbol{q})\, \tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z)\,. \tag{5.77}$$

In RPA erhält man dann:

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\boldsymbol{q}, z) = 1 - V(\boldsymbol{q})\, \Pi_0(\boldsymbol{q}, z) = 1 + V(\boldsymbol{q})\, \chi_0(\boldsymbol{q}, z)\,. \tag{5.78}$$

Die gleiche Funktion dient auch zur Abschirmung einer äußeren Potential-Störung: Für $V_S(\boldsymbol{x}, t) = V_S(\boldsymbol{q}, z) \exp(i\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{x} - izt)$ gilt

$$\delta\langle n(\boldsymbol{x})\rangle_t = -\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z) \frac{V_S(\boldsymbol{x}, t)}{\epsilon(\boldsymbol{q}, z)}\,. \tag{5.79}$$

Zu zeigen bleibt, daß diese Dielektrizitätsfunktion auch Dielektrizitätskonstante im Sinne der Elektrodynamik ist. Bei dem folgenden Beweis lassen wir zur schreibtechnischen Vereinfachung die Zeitabhängigkeit weg (für die longitudinale Dielektrizitätskonstante ist das keine Einschränkung, für die transversale Dielektrizitätskonstante braucht man dagegen die Zeitabhängigkeit):

Wir definieren (longitudinale) Felder durch

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{D}(\boldsymbol{x}) &= \rho_{\text{ex}}(\boldsymbol{x}) & (5.80)\\ \epsilon_0 \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) &= \rho_{\text{ex}}(\boldsymbol{x}) + \rho_{\text{in}}(\boldsymbol{x})\,, & (5.81) \end{aligned}$$

wobei ρ_{in} die durch die äußere Ladungsdichte ρ_{ex} im Elektronengas induzierte Ladungsdichte ist.

Für die Fourier-transformierten Felder

$$\begin{aligned} \boldsymbol{D}(\boldsymbol{q}) &= \int d^3x\, \boldsymbol{D}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} = \epsilon_0 \epsilon(\boldsymbol{q}) \boldsymbol{E}(\boldsymbol{q}) & (5.82)\\ \boldsymbol{D}(\boldsymbol{x}) &= \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\boldsymbol{q}} \boldsymbol{D}(\boldsymbol{q})\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} & (5.83) \end{aligned}$$

definieren wir eine Dielektrizitätskonstante im Sinne der Elektrodynamik durch

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{q}) = \epsilon_0 \epsilon(\boldsymbol{q}) \boldsymbol{E}(\boldsymbol{q})\,. \tag{5.84}$$

Daraus folgt:

$$i\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{D}(\boldsymbol{q}) = \rho_{\text{ex}}(\boldsymbol{q}) = \epsilon_0 \epsilon_L(\boldsymbol{q})\, i\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{q}) = \epsilon_L(\boldsymbol{q})(\rho_{\text{ex}}(\boldsymbol{q}) + \rho_{\text{in}}(\boldsymbol{q}))\,. \tag{5.85}$$

Hier bleibt nur der longitudinale Anteil. Damit erhalten wir die im Sinne der Elektrodynamik exakte Relation für die longitudinale Dielektrizitätskonstante:

$$\frac{1}{\epsilon_L(\boldsymbol{q})} = 1 + \frac{\rho_{\mathrm{in}}(\boldsymbol{q})}{\rho_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q})}\,. \tag{5.86}$$

Diesen Quotienten berechnen wir nun mit Hilfe der Linearen Antworttheorie.

Die Wechselwirkung der Ladungsdichte $\rho(\boldsymbol{x}) = -e\,n(\boldsymbol{x})$ des Elektronengases mit einem externen elektrischen Störpotential hat die Form

$$H_S = \int d^3x\,\rho(\boldsymbol{x})\,\Phi_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}) = -\int d^3x\,n(\boldsymbol{x})\,V_S(\boldsymbol{x})\,, \tag{5.87}$$

d.h. das Störpotential im Sinne des letzten Kapitels ist $V_S(\boldsymbol{x}) = e\,\Phi_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x})$. Für die induzierte Ladungsdichte erhalten wir dann nach der Linearen Antworttheorie

$$\rho_{\mathrm{in}}(\boldsymbol{q}) = -e^2\,\chi_{nn}(\boldsymbol{q})\,\Phi_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q})\,. \tag{5.88}$$

Das elektrische Störpotential hängt über die Poisson-Gleichung mit der externen Ladungsdichte zusammen:

$$\Delta\Phi_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{\epsilon_0}\rho_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x}), \quad q^2\Phi_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\epsilon_0}\rho_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q}) \tag{5.89}$$

oder

$$\Phi_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\epsilon_0 q^2}\rho_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q})\,. \tag{5.90}$$

Daraus folgt für die induzierte Ladungsdichte nach Linearer Antworttheorie:

$$\frac{\rho_{\mathrm{in}}(\boldsymbol{q})}{\rho_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{q})} = -\frac{e^2}{\epsilon_0 q^2}\chi_{nn}(\boldsymbol{q}) = -V(\boldsymbol{q})\,\chi_{nn}(\boldsymbol{q})\,, \tag{5.91}$$

wobei wir $e^2/(\epsilon_0 q^2)$ mit Hilfe von (4.78) durch die Coulomb-Wechselwirkung ausgedrückt haben. Ein Vergleich mit (5.86) ergibt für die longitudinale Dielektrizitätskonstante

$$\frac{1}{\epsilon_L(\boldsymbol{q})} = 1 - V(\boldsymbol{q})\,\chi_{nn}(\boldsymbol{q}) = 1 + V(\boldsymbol{q})\,\Pi(\boldsymbol{q})\,. \tag{5.92}$$

Mit der exakten Relation für die Darstellung des Polarisationspropagators durch den irreduziblen Anteil aus der Störungstheorie

$$\Pi(\boldsymbol{q}) = \frac{\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q})}{1 - V(\boldsymbol{q})\,\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q})} \tag{5.93}$$

erhalten wir

$$\epsilon_L(\boldsymbol{q}) = 1 - V(\boldsymbol{q})\,\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}) \tag{5.94}$$

und daraus das RPA-Ergebnis, wenn wir $\tilde{\Pi}$ durch den nackten Propagator für ein freies Elektronengas ersetzen.

5.5 Statische Dielektrizitätskonstante

Für die Dielektrizitätskonstante bei $\omega = 0$ gilt in RPA:

$$\epsilon(\boldsymbol{q}, 0) = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \chi_0(\boldsymbol{q}, 0) \,. \tag{5.95}$$

Mit (5.63) erhält man für kleine q

$$\epsilon(\boldsymbol{q}, 0) \simeq 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \tag{5.96}$$

mit dem Thomas-Fermi-Wellenvektor

$$q_{TF}^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0} 2N(\epsilon_F) \,.$$

Wir wollen damit die Abschirmung des Potentials einer Störstelle mit Punktladung Ze untersuchen:

$$\phi_{\text{ex}}(\boldsymbol{x}) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad \phi_{\text{ex}}(\boldsymbol{q}) = \frac{Ze}{\epsilon_0 q^2}. \tag{5.97}$$

Die Langreichweitigkeit des Coulomb-Potentials führt hier zur Singularität bei $q = 0$. Für das effektive Potential findet man

$$\phi_{\text{eff}}(\boldsymbol{q}) = \frac{\phi_{\text{ex}}(\boldsymbol{q})}{\epsilon(\boldsymbol{q}, 0)} = \frac{Ze}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2 + q_{TF}^2}. \tag{5.98}$$

Die Singularität ist verschwunden! Im Ortsraum erhält man

$$\phi_{\text{eff}}(\boldsymbol{x}) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathrm{e}^{-r q_{TF}}}{r}. \tag{5.99}$$

Dieses Potential hat nur eine kurze Reichweite. Dieses effektive Potential wird durch die Punktladung zusammen mit der induzierten Ladungsdichte der Metallelektronen aufgebaut. Tatsächlich findet man

$$\int d^3x \, \rho_{\text{in}}(\boldsymbol{x}) = -Ze \,, \tag{5.100}$$

d.h. die induzierte Ladungsdichte schirmt die Punktladung der Störstelle vollständig ab.

Bei der Berechnung der q-Abhängigkeit der Dielektrizitätskonstante wurde nur die Entwicklung für kleine q verwendet. Eine genauere Rechnung mit der q-abhängigen Suszeptibilität (5.59) ergibt für große Abstände für die induzierte Dichte (siehe z.B. Kapitel 14, S. 179 von Referenz [10])

$$\delta\langle n(r)\rangle \simeq -\frac{2Z\xi}{\pi(4+\xi)^2}\frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \tag{5.101}$$

mit $\xi = q_{TF}^2/(2k_F^2)$. Diese sogenannten Friedel-Oszillationen sind wieder eine Konsequenz der scharfen Kante der Suszeptibilität (Lindhard-Funktion) bei $q = 2k_F$. Diese Oszillationen beobachtet man z.B. bei der Quadrupol-Resonanz in Kupfer. Inzwischen kann man sie auch mit dem Raster-Tunnelmikroskop in der Umgebung von Störstellen an Metalloberflächen sehen.

Literatur zur dynamischen Suszeptibilität: Kapitel 5.5.1 und 5.5.2 von [21], Kapitel 3 von [30], Kapitel 6.4 und 6.5 von [9], Kapitel 5.1 von [31], Kapitel 14 und 15 von [10].

5.6 Kollektive Anregung im Elektronengas

Mit einem zeitabhängigen Störpotential der Form

$$V(\boldsymbol{x},t) = v\,\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-i\omega t}$$

erhält man eine induzierte Dichteschwankung im Elektronengas

$$\delta\langle n(\boldsymbol{x})\rangle_t = \chi(\boldsymbol{q},\omega+i\delta)\,V(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{5.102}$$

In RPA ist

$$\chi(\boldsymbol{q},z) = \frac{\chi_0(\boldsymbol{q},z)}{1+V(\boldsymbol{q})\,\chi_0(\boldsymbol{q},z)}\,. \tag{5.103}$$

Im Allgemeinen erhält man das Anregungs-Spektrum durch den Imaginärteil der entsprechenden Antwortfunktion. Im Fall der Dichteanregungen des Elektronengases ohne Coulomb-Wechelwirkung sind das die durch den Polarisations-Propagator $\chi_0(\boldsymbol{q},z)$ beschriebenen Teilchen-Loch-Anregungen. Im Falle des wechselwirkenden Elektronengases erhält man neue kollektive Anregungen durch Nullstellen des Nenners, d.h. den Nullstellen der Dielektrizitätskonstante. In RPA:

$$\epsilon(\boldsymbol{q},\omega+i\delta) = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2}\,\chi_0(\boldsymbol{q},\omega+i\delta) = 0\,.$$

Wie man der Frequenzabhängigkeit von $\chi_0'(\boldsymbol{q},\omega)$ und $\chi_0''(\boldsymbol{q},\omega)$ bei kleinen $q < q_{TF}$ entnimmt (siehe Abb. 5.3, oben), hat $\epsilon'(\boldsymbol{q},\omega)$ zwei Nullstellen, aber nur bei der Nullstelle mit der höheren Frequenz ist ebenfalls $\epsilon''(\boldsymbol{q},\omega) = 0$. Bei dieser Frequenz erhält man eine ungedämpfte kollektive Anregung des Elektronengases, die sogenannte Plasma-Schwingung.

Zur Berechnung der Plasma-Frequenz entwickelt man $\chi_0'(\boldsymbol{q},\omega)$ für große Frequenzen nach Potenzen von qv_F/ω mit $v_F = \hbar k_F/m$. Für $q < q_{TF}$ und $T = 0$ erhält man in führender Ordnung:

$$\chi_0'(\boldsymbol{q},\omega) \simeq -\frac{q^2}{m\omega^2}\frac{k_F^3}{3\pi^2} = -\frac{q^2}{m\omega^2}n \tag{5.104}$$

mit der Elektronendichte $n = N/\mathrm{Vol}$. Damit erhält man für die Dielektrizitätskonstante in RPA:

$$\epsilon(\boldsymbol{q},\omega) = 1 - \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2}\frac{q^2}{m\omega^2}n = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \tag{5.105}$$

und damit für die Plasma-Frequenz

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}\,. \tag{5.106}$$

Für die Dichte-Oszillation findet man damit:

$$\delta\langle n(\boldsymbol{x})\rangle_t = -\frac{q^2 n}{m}\frac{1}{(\omega + i\delta)^2 - \omega_p^2}\,V_{\mathrm{ex}}(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{5.107}$$

In nächster Ordnung in qv_F/ω erhält man:

$$\chi_0(\boldsymbol{q},\omega) = -\frac{q^2 n}{m\omega^2}\left(1 + \frac{3}{5}\left(\frac{v_F q}{\omega}\right)^2 + \dots\right) \tag{5.108}$$

und damit für die Dispersion der Plasma-Frequenz

$$\omega_p^2(\boldsymbol{q}) = \omega_p^2\left(1 + \frac{9}{10}\left(\frac{q}{q_{TF}}\right)^2\right)\,. \tag{5.109}$$

Für kleine q sind die Plasma-Schwingungen ungedämpfte Eigenschwingungen des Systems. Im Gegensatz zu den Teilchen-Loch-Anregungen überlebt diese kollektive Anregung auch im Grenzfall $\boldsymbol{q} \to \boldsymbol{0}$. Für größere Werte von q ist die Plasma-Frequenz energetisch entartet mit Teilchen-Loch-Angregungen. In der hier betrachteten Näherung sind die Plasma-Schwingungen ungedämpft; bei einer genaueren Betrachtung erhält man jedoch die aufgrund einer Ankopplung an das Teilchen-Loch-Kontinuum erwartete Dämpfung.

Die Plasma-Schwingung kann man auch durch eine klassische Betrachtung der Schwingung eines homogenen Elektronengases gegenüber dem positiven Ionen-Hintergrund verstehen. Die rücktreibende Kraft ist hierbei das durch die Ladungen an den Rändern aufgebaute elektrische Feld. Bei $\boldsymbol{q} \neq \mathbf{0}$ entsteht die rücktreibende Kraft durch die Ladungsdichte-Schwankungen des Elektronengases selbst. Den Wert der Plasma-Frequenz erhält man bei dieser Betrachtung als Eigenfrequenz der Schwingungen der Elektronen-Dichte. Insbesondere kann das Auftreten solcher kollektiven Anregungen auch im Rahmen einer Fermi-Flüssigkeit beschrieben werden, da für ihre Zustandekommen eine Wechselwirkung in der Elektronen-Dichte ausschlaggebend ist.

5.7 Inelastische Streuung von schnellen Elektronen an Metallen

Nach der Streutheorie erhält man für die Streuung von Elektronen an Dichteschwankungen des Elektronengases in Metallen den Ausdruck:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\hbar\omega} = \frac{k'}{k}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 V^2(q)\, S(\boldsymbol{q},\omega) \tag{5.110}$$

mit dem dynamischen Strukturfaktor

$$S(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \langle n(\boldsymbol{q},t)n(-\boldsymbol{q},0)\rangle\, \mathrm{e}^{i\omega t} \tag{5.111}$$

und dem Coulomb-Potential $V(\boldsymbol{q}) = e^2/\epsilon_0 q^2$.

Mit Hilfe des Dissipations-Fluktuations-Theorems (3.31) läßt sich die Korrelationsfunktion der Elektronendichte durch den Imaginärteil der Dichtesuszeptibilität ausdrücken:

$$S(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{\mathrm{Vol}}{\pi}\frac{\chi''(\boldsymbol{q},\omega)}{1-\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega}}\,. \tag{5.112}$$

Dabei ist

$$\chi''(\boldsymbol{q},\omega) = \Im\mathrm{m}\chi(\boldsymbol{q},\omega+i\delta), \quad \chi(\boldsymbol{q},z) = -\frac{1}{\mathrm{Vol}}\langle\langle n(\boldsymbol{q}); n(-\boldsymbol{q})\rangle\rangle_z\,.$$

Verwendet man den (exakten) Zusammenhang mit der longitudinalen Dielektrizitätskonstante des Elektronengases

$$\frac{1}{\epsilon(\boldsymbol{q},z)} = 1 - V(\boldsymbol{q})\,\chi(\boldsymbol{q},z), \tag{5.113}$$

dann erhält man

$$\chi''(\boldsymbol{q},\omega) = -\frac{1}{V(\boldsymbol{q})}\Im\mathrm{m}\frac{1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega+i\delta)}\,, \tag{5.114}$$

d.h. Resonanzen im Streuquerschnitt erhält man bei den Nullstellen der longitudinalen Dielektrizitätskonstante, das sind die Plasma-Schwingungen.

Verwenden wir die Entwicklung in der Nähe der Plasma-Resonanz

$$\epsilon(\boldsymbol{q},\omega+i\delta) \simeq 1 - \frac{\omega_p^2(\boldsymbol{q})}{(\omega+i\delta)^2}\,, \tag{5.115}$$

dann finden wir die Pol-Näherung:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega+i\delta)} &\simeq \frac{\omega_p^2(\boldsymbol{q})}{(\omega+i\delta)^2-\omega_p^2(\boldsymbol{q})} \\
&= \frac{\omega_p(\boldsymbol{q})}{2}\left(\frac{1}{\omega+i\delta-\omega_p(\boldsymbol{q})} - \frac{1}{\omega+i\delta+\omega_p(\boldsymbol{q})}\right) \qquad (5.116)\\
\Im\mathrm{m}\frac{1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega+i\delta)} &= -\frac{\pi}{2}\omega_p(\boldsymbol{q})\left(\delta(\omega-\omega_p(\boldsymbol{q})) - \delta(\omega+\omega_p(\boldsymbol{q}))\right)\,. \qquad (5.117)
\end{aligned}$$

Wegen $\hbar\omega_p(\boldsymbol{q}) \gg k_BT$ und damit $\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega_p} \ll 1$ sind nur Prozesse mit Energieverlust möglich und man erhält

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\hbar\omega} = \mathrm{Vol}\,\frac{k'}{k}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 V(q)\,\frac{\hbar\omega_p(\boldsymbol{q})}{2}\,\delta(\hbar\omega-\hbar\omega_p(\boldsymbol{q}))\,. \tag{5.118}$$

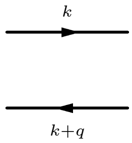
Energieverlust-Spektren für die Streuung schneller Elektronen (20 kV) an dünnen Metallfolien findet man z.B. in [24] (beachte insbesondere Fig. 10 der Referenz). Durch das Coulomb-Potential als Vorfaktor ist die Streuung vorwärts gerichtet und es werden Plasmonen mit $\boldsymbol{q} \simeq \boldsymbol{0}$ bevorzugt angeregt. Durch die hohe Energie werden mehrfach Plasmonen angeregt, dementsprechend findet man Peaks im inelastischen Streuquerschnitt bei Energieverlusten von $\hbar\omega = n\omega_p$.

5.8 Ward-Identitäten

Bei der Berechnung der dynamischen Suszeptibilität mußten wir ganz generell einen sogenannten Teilchen-Loch-Propagator

$$G_2(\boldsymbol{x}_1,\tau_1,\boldsymbol{x}_2,\tau_2,\boldsymbol{x}_3,\tau_3,\boldsymbol{x}_4,\tau_4) = -\langle\mathcal{T}\psi_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1,\tau_1)\psi^\dagger_{\sigma_2}(\boldsymbol{x}_2,\tau_2)\psi_{\sigma_3}(\boldsymbol{x}_3,\tau_3)\psi^\dagger_{\sigma_4}(\boldsymbol{x}_4,\tau_4)\rangle \tag{5.119}$$

berechnen. Im nichtwechselwirkenden System ergibt sich im Impuls-Frequenz-Raum für diese Größe aufgrund des Wickschen Theorems

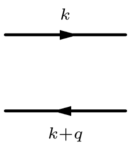
$$G_2^{(0)} =$$ 

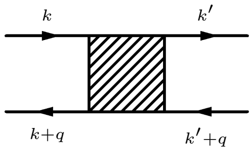
$$= G(k)\,G(k+q) \tag{5.120}$$

wobei $k = (\boldsymbol{k}, i\omega_n)$ und $q = (\boldsymbol{q}, i\nu)$ sind. Die Suszeptibilität erhält man dann aus dem Teilchen-Loch-Propagator, indem man $\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_2$, $\tau_1 = \tau_2$ und $\boldsymbol{x}_3 = \boldsymbol{x}_4$, $\tau_3 = \tau_3$ setzt, bzw. im Endergebnis über die internen Impulse und Frequenzen summiert, d.h. im obigen Fall ist

$$\Pi^{(0)}(i\nu) = \frac{1}{N\beta} \sum_{\boldsymbol{k}, i\omega_n} G_{\boldsymbol{k},\sigma}(i\omega_n) G_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}(i\omega_n + i\nu) \quad .$$

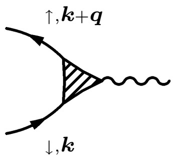
Mit Wechselwirkung wird man allgemein auf die als Bethe-Salpeter-Gleichung bekannte Struktur

$$G_2 =$$ 

$$\delta_{k,k'} \; +$$ 

$$+ \ldots \tag{5.121}$$

geführt, wobei der schattierte Kasten die irreduzible Zweiteilchenselbstenergie darstellen soll. Wie schon im Einteilchenfall ist die Berechnung dieser Größe eine harte Nuß, insbesondere weil sie von insgesamt drei unabhängigen Impulsen und Frequenzen abhängt. Auch ist die Zahl der möglichen Diagrammtypen um ein vielfaches größer als im Fall der Einteilchenselbstenergie. Allerdings werden wir in den wenigsten Fällen die volle Information aus der Zweiteilchenselbstenergie benötigen; bei der Berechnung der Suszeptibilitäten zum Beispiel wird, nach Aufsummation der Bethe-Salpeter-Gleichung (5.121) nur die über k und k' summierte Funktion benötigt. Summiert man das Endergebnis für G_2 z.B. nur über k' und kürzt die freien Propagatoren auf der linken Seite, so erhält man die generelle Struktur



$$= \frac{1}{G(k)G(k+q)} \sum_{k'} \alpha_{k'} G_2(k, k+q, k', k'+q) \equiv \Gamma(k, k+q) \tag{5.122}$$

mit einer Vertexfunktion (schattiertes Dreieck) $\Gamma(k, k+q)$. Man beachte, daß diese Vertexfunktion *nicht* identisch mit der Zweiteilchenselbstenergie ist, sondern erst nach der Aufsummation der vollen Bethe-Salpeter-Gleichung und Kontraktion der beiden rechten äußeren Beine mit einer vom Problem abhängigen Funktion $\alpha_{\boldsymbol{k}}$ entsteht!

Wir wollen nun, zunächst einmal für G_2 und daraus für Γ, einen exakten Zusammenhang mit Einteilchen-Greenschen Funktionen herleiten. Solche Zusammenhänge werden allgemein als Ward-Takahashi-Identitäten [34,37] bezeichnet und basieren auf Erhaltungssätzen. Im Falle der ursprünglichen Ward-Takahashi-Identität war das die Eichinvarianz der QED und als Konsequenz ergibt sich, daß die Renormierung der elektrischen Ladung nur durch den Photonenpropagator passiert.

Generell läßt sich eine (kontinuierliche) Symmetrie über das Noethertheorem mit einem Erhaltungssatz der Form

$$\dot{d}(\boldsymbol{q}, t) - i\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{j}_d(\boldsymbol{q}, t) = 0 \tag{5.123}$$

in Verbindung bringen. Im Falle der Eichsymmetrie wäre $d(\boldsymbol{q}, t)$ die Teilchendichte $n(\boldsymbol{q}, t)$ und $\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{q}, t)$ die übliche Teilchenstromdichte. Der Einfachheit halber lassen wir in der weiteren Diskussion den Spin weg. Weiterhin nehmen wir an, daß man

$$d(\boldsymbol{q}, t) = \sum_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}}\, c^\dagger_{\boldsymbol{k}}(t) c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}(t)$$

und

$$\boldsymbol{j}_d(\boldsymbol{q}, t) = \sum_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}}\, c^\dagger_{\boldsymbol{k}}(t) c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}(t)$$

schreiben kann. Betrachten wir nun die Kombination

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_\tau \left\{ c_{\boldsymbol{k}_1}(\tau_1) c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}(\tau_2) \frac{\partial d(\boldsymbol{q}, \tau)}{\partial \tau} \right\} \quad = \quad & \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{T}_\tau \left\{ c_{\boldsymbol{k}_1}(\tau_1) c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}(\tau_2) d(\boldsymbol{q}, \tau) \right\} \\
& + \delta(\tau - \tau_1) \mathcal{T}_\tau \left\{ [d(\boldsymbol{q}, \tau), c_{\boldsymbol{k}_1}(\tau_1)] c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}(\tau_2) \right\} \\
& + \delta(\tau - \tau_2) \mathcal{T}_\tau \left\{ c_{\boldsymbol{k}_1}(\tau_1) [d(\boldsymbol{q}, \tau), c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}(\tau_2)] \right\} \ ,
\end{aligned}$$

so gilt mit dem Erhaltungssatz (5.123), $\partial_t \to i\partial_\tau$, thermischer Mittelung und unter Berücksichtigung von $[d(\boldsymbol{q}), c_{\boldsymbol{k}_1}] = -\alpha_{\boldsymbol{k}_1} c_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q}}$ bzw. $[d(\boldsymbol{q}), c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2}] = \alpha_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q}}$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \left(\alpha_{\boldsymbol{k}} \frac{\partial}{\partial \tau} - \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}} \right) G_2(\boldsymbol{k}_1, \tau_1, \boldsymbol{k}_2, \tau_2, \boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}, \tau_3, \boldsymbol{k}, \tau_4) = \\
& \qquad \alpha_{\boldsymbol{k}_1} \delta(\tau - \tau_1) G(\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{q}, \boldsymbol{k}_2; \tau - \tau_2) - \alpha_{\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{q}} \delta(\tau - \tau_2)\, G(\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{q}; \tau - \tau_1) \,.
\end{aligned}$$

Das Minuszeichen auf der linken Seite stammt daher, daß bei den aus $d(\boldsymbol{q})$ bzw. $\boldsymbol{j}_d(\boldsymbol{q})$ stammenden Operatoren die Reihenfolge zu vertauschen ist, um die Kombination gemäß Gleichung (5.119) zu erhalten. Aufgrund der räumlichen Translationsinvarianz erhält man auf beiden Seiten einen Faktor $\delta(\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2 + \boldsymbol{q})$, d.h. auf beiden Seiten kann man $\boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{q}$ setzen. Schließlich findet sich nach zeitlicher Fouriertransformation

$$-\frac{1}{N\beta}\sum_{k'}\left(i\nu\alpha_{\boldsymbol{k}'} - \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}'}\right)G_2(k-q,k,k'+q,k') = \alpha_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}G(k) - \alpha_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}G(k-q) \quad . \tag{5.124}$$

Dieses Ergebnis ist die Ward-Identität für den vollen Zweiteilchenpropagator. Die Ward-Identität für die Vertexfunktionen erhält man unter Beachtung von

$$\boldsymbol{\Lambda}(k-q,k) = \frac{1}{G(k)G(k-q)}\frac{1}{N\beta}\sum_{k'}\boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}'}G_2(k-q,k,k'+q,k')$$

und

$$\Gamma(k-q,k) = \frac{1}{G(k)G(k-q)}\frac{1}{N\beta}\sum_{k'}\alpha_{\boldsymbol{k}'}G_2(k-q,k,k'+q,k')$$

zu

$$i\nu\Gamma(k-q,k) - \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\Lambda}(k-q,k) = \frac{\alpha_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}{G(k)} - \frac{\alpha_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}}{G(k-q)} \quad . \tag{5.125}$$

Man beachte, daß die skalare und vektorielle Vertexfunktion nicht einzeln, sondern als Linearkombination auftauchen. Daher kann Gleichung (5.125) nicht zur Berechnung von Γ und $\boldsymbol{\Lambda}$ benutzt werden.

Als Beispiel zur Anwendung von Ward-Identitäten wollen wir den Fall $\alpha_{\boldsymbol{k}} = 1$ und $\boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ betrachten, d.h. d ist die übliche Teilchendichte und $\boldsymbol{j}$ der zugehörige Strom. Aussagen über die Vertexfunktionen kann man nun in gewissen Limites erhalten.

1. Statischer Grenzfall $i\nu = 0$:
   Hier reduziert sich Gleichung (5.125) auf

   $$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},i\omega_n;\boldsymbol{k},i\omega_n) = 1/G_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}(i\omega_n) - 1/G_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n) \quad ,$$

   und mit

   $$1/G_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \Sigma_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n)$$

   erhält man im Limes $\boldsymbol{q}\to\boldsymbol{0}$

   $$\begin{aligned}\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{k},i\omega_n;\boldsymbol{k},i\omega_n) &= \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + \Sigma_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n)\right)\\ &= \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} + \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\Sigma_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n) \quad .\end{aligned}$$

2. Langwelliger Grenzfall $\boldsymbol{q} \to \boldsymbol{0}$:
Für diesen Fall erhält man aus (5.125)

$$\begin{aligned} i\nu\Gamma(\boldsymbol{k}, i\omega_n - i\nu; \boldsymbol{k}, i\omega_n) &= 1/G_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n) - 1/G_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n - i\nu) \\ &= i\nu - (\Sigma_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n) - \Sigma_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n - i\nu)) \quad . \end{aligned}$$

Im Grenzfall $\nu \to 0$ und nach analytischer Fortsetzung[11] erhält man damit

$$\Gamma(\boldsymbol{k}, \omega + i\delta; \boldsymbol{k}, \omega + i\delta) = 1 - \frac{\partial \Sigma_{\boldsymbol{k}}(\omega + i\delta)}{\partial \omega} \quad .$$

Für $\boldsymbol{k} \approx \boldsymbol{k}_F$ und $\omega \approx 0$ heißt das für eine Fermi-Flüssigkeit[12]

$$\Gamma(\boldsymbol{k}_F, i\delta; \boldsymbol{k}_F, i\delta) \approx \frac{m^*}{m_e} \, ,$$

d.h. die reine Dichte-Antwort wird durch die effektive Masse der Quasiteilchen bestimmt.

5.9 Mikroskopische Sicht einer Landau-Fermi-Flüssigkeit

Zum Abschluß dieses Kapitels sollen einige Aspekte einer mikroskopischen Sicht der Fermi-Flüssigkeit erwähnt werden.

Störungstheorie erlaubt es, die Aussagen von Kapitel 5.1 aus einem mikroskopischen Bild wechselwirkender Elektronen herzuleiten. Eine wesentliche Voraussetzung für die perturbative Sichtweise ist selbstverständlich, daß die Störungsreihe konvergiert. Im Rahmen der Störungstheorie ergibt sich eine natürliche eins-zu-eins Beziehung zwischen den Zuständen des freien und wechselwirkenden Fermi-Gases, d.h. der 1. Grundannahme. Insbesondere lassen sich die Quasiteilchen als mit perturbativen Korrekturen versehene Elektronen auffassen. Für eine Formalisierung dieser Sichtweise mit Hilfe von Störungstheorie beliebiger Ordnung sei auf die Literatur verwiesen, insbesondere Kapitel 6.2 von [31] und [19]. In der folgenden Diskussion werden wir uns hingegen auf die niedrigsten Ordnungen der Störungstheorie beschränken. Die Darstellung wird dabei im wesentlichen den Kapiteln II.3.2 und II.3.3 des Skripts [35] folgen (eine ähnliche Diskussion findet man auch in Kapitel 5.3 des Buches [28]).

[11] Vorsicht: Erst $\nu \to 0$, dann $i\omega_n \to \omega + i\delta$.

[12] Wie wir im nächsten Unterkapitel sehen werden (Glg. (5.139)), gilt dies genaugenommen nur bis auf einen Faktor $1 + \frac{m}{k_F} \frac{\partial}{\partial k} \Sigma_{\boldsymbol{k}_F}(0)$. Für Metalle kann dieser Faktor jedoch normalerweise vernachlässigt werden.

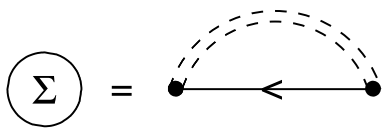


Abbildung 5.7: *Näherung der Selbstenergie zur Beschreibung der Quasiteilchen-Lebensdauer.*

Ausgangspunkt für die Betrachtungen ist die Darstellung (4.61) für die Greensche Funktion, d.h.

$$G(\boldsymbol{k}, z) = \frac{1}{z - \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \Sigma(\boldsymbol{k}, z) + \mu} \tag{5.126}$$

mit der irreduziblen Selbstenergie $\Sigma(\boldsymbol{k}, z)$. Die *Fermi-Fläche* ist dadurch definiert, daß die Anregungen auf ihr Energie Null besitzen:

$$\omega = 0 = \epsilon_{\boldsymbol{k}_F} - \mu + \Re\mathrm{e}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)\,. \tag{5.127}$$

Es ist nun günstig, den Energie-Nullpunkt so zu wählen, daß $\epsilon_{\boldsymbol{k}_F} = 0$ ist. Aufgrund der Definition der Fermi-Fläche ist diese Annahme äquivalent zu $\mu = \Re\mathrm{e}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)$. $|\epsilon_{\boldsymbol{k}}|$ ist dann ein Maß für den Abstand von der Fermi-Fläche.

Quasiteilchen-Lebensdauer:

Im Rahmen einer mikroskopischen Theorie ist zunächst zu zeigen, daß überhaupt stabile Quasiteilchen als Niederenergie-Anregungen existieren. Definieren wir die Quasiteilchen über die Pole der Greenschen Funktion (5.126), so ist deren inverse Lebensdauer gegeben durch $-\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k}, \omega)$. Eine wesentliche Voraussetzung für die Gültigkeit des Fermi-Flüssigkeit-Bildes ist nun die Beziehung

$$-\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k}, \omega) \propto \epsilon_{\boldsymbol{k}}^2\,. \tag{5.128}$$

Dies stellt sicher, daß die Quasiteilchen tatsächlich in der Nähe der Fermi-Fläche stabil sind.

Die Beziehung (5.128) kann auf verschiedene Weisen begründet werden. Eine Möglichkeit ist die Analyse des in Abb. 5.7 skizzierten Fock-Diagramms, wobei man anstelle des nackten Potentials V das in (5.76) definierte effektive Potential $V_{\text{eff}} = V/\epsilon$ einsetzt. Aufgrund der Kapitel 5.3 und 5.4 wissen wir, daß V_{eff} für kleine Energien einen Imaginärteil besitzt und somit zur Dämpfung der Quasiteilchen führt. Ferner enthält diese Näherung insbesondere das letzte Diagramm aus Abb. 4.2 der Beiträge zweiter Ordnung zu der Greenschen Funktion. Dieses

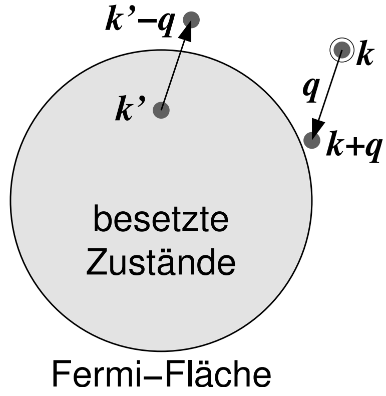


Abbildung 5.8: *Streuprozeß, der zur Lebensdauer eines Quasiteilchens mit Impuls* $\boldsymbol{k}$ *beiträgt.*

Diagramm liefert den führenden Beitrag der Kopplung eines freien Elektrons an das Teilchen-Loch-Kontinuum und somit den wichtigsten Beitrag zur Dämpfung. Explizite Berechnung des in Abb. 5.7 angegebenen Diagramms (vgl. z.B. Kapitel 5.2 von [31]) bestätigt (5.128). Der wesentliche Punkt ist hierbei, daß der Phasenraum für einen Streuprozeß immer kleiner wird, je näher sich das Teilchen an der Fermi-Fläche befindet (vgl. auch Kapitel 5.3 von [28]).

Deutlicher wird die Rolle des Phasenraum-Volumens vielleicht in einem anderen Zugang. Wendet man Fermis goldene Regel auf die Streuung eines besetzten Zustandes $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ außerhalb der Fermi-Fläche bei gleichzeitiger Erzeugung eines Teilchen-Loch-Paares an (siehe Abb. 5.8), so erhält man folgenden Beitrag zu der Lebensdauer:

$$\begin{aligned} -\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k},\omega) \propto \sum_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q}} |V(\boldsymbol{q})|^2 f(\epsilon_{\boldsymbol{k}'})\,(1-f(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}))\,(1-f(\epsilon_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}})) \\ \times\delta\left(\omega-(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}+\epsilon_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}'})\right)\,. \end{aligned} \tag{5.129}$$

Nun sind $-\epsilon_{\boldsymbol{k}'}$, $\epsilon_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}}$ und $\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}$ allesamt positive Größen, deren Summe ω ergeben soll. Zu der Summe in (5.129) tragen daher nur solche Zustände bei, für die $-\omega \leq \epsilon_{\boldsymbol{k}'} \leq 0$, $0 \leq \epsilon_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}} \leq \omega$ und $0 \leq \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} \leq \omega$ gilt. Offensichtlich tragen immer weniger Terme bei, je kleiner ω wird. Eine explizite Abschätzung der Summe (5.129) (siehe z.B. Kapitel II.3.2 von [35]) ergibt tatsächlich $-\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k},\omega) \propto \omega^2$. Setzt man in dieses Ergebnis $\omega = \epsilon_{\boldsymbol{k}}$ ein, findet man (5.128) bestätigt.

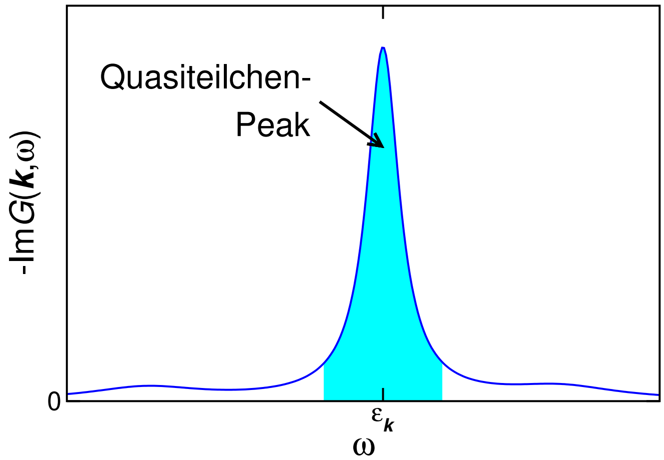


Abbildung 5.9: *Illustration des Gewichts Z_{k_F} des Quasiteilchen-Pols.*

Quasiteilchen-Gewicht:

Wir entwickeln zunächst die Selbstenergie in erster Ordnung in ω und $\boldsymbol{k}$ um die Fermi-Oberfläche:

$$\Sigma(\boldsymbol{k},\omega)-\mu=\underbrace{\Sigma(\boldsymbol{k}_F,0)-\mu}_{=0}+\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\Sigma(\boldsymbol{k}_F,0)\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_F)+\partial_\omega\Sigma(\boldsymbol{k}_F,0)\,\omega+\ldots \tag{5.130}$$

Man beachte, daß in dieser linearen Näherung keine Beiträge zur Lebensdauer der Quasiteilchen auftreten, da der führende Beitrag zur Lebensdauer von der Ordnung ω^2 ist.

Einsetzen von (5.130) in die Greensche Funktion (5.126) führt auf

$$\begin{aligned} G(\boldsymbol{k},\omega) &\approx \frac{1}{\omega\,(1-\partial_\omega\Sigma(\boldsymbol{k}_F,0))-\epsilon_{\boldsymbol{k}}-(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_F)\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\Sigma(\boldsymbol{k}_F,0)-i\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k},\omega)} \\ &= \frac{Z_{k_F}}{\omega-Z_{k_F}\,(\epsilon_{\boldsymbol{k}}+(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_F)\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\Sigma(\boldsymbol{k}_F,0))-i\,Z_{k_F}\,\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k},\omega)}\,, \end{aligned} \tag{5.131}$$

wobei wir

$$Z_{k_F}=\frac{1}{1-\partial_\omega\Sigma(\boldsymbol{k}_F,0)} \tag{5.132}$$

gesetzt haben. Man erkennt an (5.131), daß Z_{k_F} als Residuum des Quasiteilchen-Pols in der Greenschen Funktion auftritt. Daher wird Z_{k_F} auch „Quasiteilchen-Gewicht“ genannt.

Zur Verdeutlichung der Bedeutung des Quasiteilchen-Gewichts betrachten wir die in Abb. 5.9 skizzierte spektrale Dichte $-\Im\mathrm{m}G(\boldsymbol{k},\omega)/\pi$ (siehe (3.30)). Zunächst

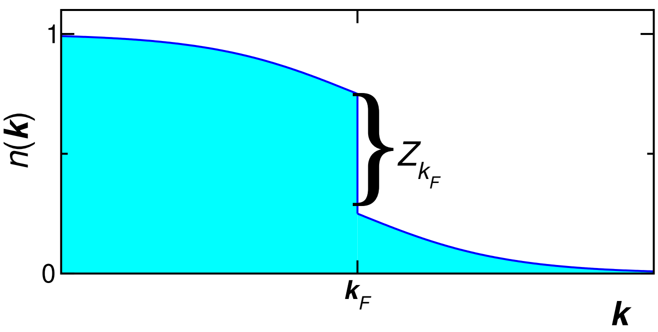


Abbildung 5.10: *Impulsverteilung für eine Fermi-Flüssigkeit. Man beachte den Sprung der Höhe Z_{k_F} bei $\boldsymbol{k}_F$.*

folgt mit Hilfe der Spektraldarstellung aus Kapitel 3.2, daß die spektrale Dichte positiv ist, d.h. $-\Im\mathrm{m}G(\boldsymbol{k},\omega) \geq 0$. Ferner kann man eine Summenregel für die spektrale Dichte herleiten:

$$-\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\,\Im\mathrm{m}G(\boldsymbol{k},\omega) = \langle[c_{\boldsymbol{k}}, c^\dagger_{\boldsymbol{k}}]_+\rangle = 1\,. \tag{5.133}$$

Für ein wechselwirkendes System tritt im Regelfall wie in Abb. 5.9 skizziert ein inkohärenter Anteil in der spektralen Dichte auf. Aufgrund der Summenregel (5.133) geht das zu Lasten des Quasiteilchen-Pols, dessen Gewicht somit um einen Faktor $Z_{k_F} < 1$ reduziert sein muß.

Impulsverteilung:

Eine weitere wichtige Größe ist die Impulsverteilung

$$\begin{aligned} n(\boldsymbol{k}) &= \langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}}\rangle = \lim_{\tau\to 0^-} G(\boldsymbol{k},\tau) \\ &\overset{(3.89)}{=} -\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, f(\omega)\,\Im\mathrm{m}G(\boldsymbol{k},\omega) \overset{T=0}{=} -\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{0} d\omega\,\Im\mathrm{m}G(\boldsymbol{k},\omega)\,. \end{aligned} \tag{5.134}$$

Aufgrund von (5.128) und (5.131) wissen wir, daß $-\Im\mathrm{m}G(\boldsymbol{k},\omega)/\pi$ im Grenzfall $\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}_F$ in $Z_{k_F}\,\delta(\omega)$ übergeht. Setzt man dies in (5.134) ein, so erhält man einen Sprung in $n(\boldsymbol{k})$ an der Fermi-Fläche. Genauer ist für $k < k_F$ der Quasiteilchen-Pol im Integrationsbereich von (5.134), für $k > k_F$ liegt er außerhalb. Man erhält somit

$$\lim_{\boldsymbol{k}\nearrow\boldsymbol{k}_F} n(\boldsymbol{k}) - \lim_{\boldsymbol{k}\searrow\boldsymbol{k}_F} n(\boldsymbol{k}) = Z_{k_F}\,, \tag{5.135}$$

d.h. die Höhe des Sprungs ist genau durch das Quasiteilchen-Gewicht Z_{k_F} gegeben! Dies ist in Abb. 5.10 skizziert. Zwar ist aufgrund der Wechselwirkung die Impulsverteilung $n(\boldsymbol{k})$ keine Fermi-Verteilung mehr (d.h. bei $T = 0$ eine Stufenfunktion $n(\boldsymbol{k}) = \Theta(-\epsilon_{\boldsymbol{k}})$), dennoch überlebt ein Sprung an der Fermi-Oberfläche als Charakteristikum einer Fermi-Flüssigkeit.

Effektive Masse:

Wir betrachten nun eine quadratische Dispersion $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{k}^2/(2\,m) + C$ und entwickeln diese um $\boldsymbol{k}_F$

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{m}\,(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_F) \cdot \boldsymbol{k}_F\,. \tag{5.136}$$

Ferner schreiben wir (5.131) in der Form

$$G(\boldsymbol{k}, \omega) = \frac{Z_{k_F}}{\omega - \tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} - i\,Z_{k_F}\,\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k}, \omega)}\,. \tag{5.137}$$

Hieraus lesen wir die Energie des Quasiteilchen-Pols ab:

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} &= Z_{k_F}\,(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_F) \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)) \\ &\approx Z_{k_F}\left(1 + \frac{m}{k_F}\frac{\partial}{\partial k}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)\right)\frac{\boldsymbol{k}_F \cdot (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_F)}{m} \\ &= \frac{\boldsymbol{k}_F \cdot (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_F)}{m^*}\,, \end{aligned} \tag{5.138}$$

wobei wir in der zweiten Zeile nur den Anteil $\|\boldsymbol{k}_F$ des Gradienten der Selbstenergie Σ behalten haben.

Durch Vergleich der beiden Seiten von (5.138) folgt schließlich für die effektive Masse

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{Z_{k_F}\left(1 + \frac{m}{k_F}\frac{\partial}{\partial k}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)\right)} \overset{(5.132)}{=} \frac{1 - \partial_\omega\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)}{1 + \frac{m}{k_F}\frac{\partial}{\partial k}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)}\,. \tag{5.139}$$

Ohne daß wir darauf näher eingehen wollen, sei erwähnt, daß die komplette phänomenologische Funktion f in (5.2) im Rahmen einer Störungstheorie aus einer mikroskopischen Theorie hergeleitet werden kann [17] (für eine Zusammenfassung siehe z.B. Kapitel 6.3 von [28]).

Luttinger-Theorem [18]:

Schließlich soll eine Aussage über die Fermi-Fläche erwähnt werden, die als Luttinger-Theorem bekannt ist. Zunächst betrachten wir die ungestörte Fermi-

Fläche, d.h. die Fermi-Fläche eines freien Fermi-Systems. Mit der eingangs getroffenen Wahl des Energie-Nullpunkts ($\mu_0 = 0$) gilt für ihr Volumen

$$V_{\mathrm{FS}}^0 = \int d^3k\, \Theta(-\epsilon_{\boldsymbol{k}})\,. \tag{5.140}$$

Ferner gilt für die Anzahl der Elektronen (pro Spin-Projektion) in einem endlichen Volumen

$$N = \sum_{\boldsymbol{k}} \Theta(-\epsilon_{\boldsymbol{k}}) = \frac{\mathrm{Vol}}{(2\pi)^3} \int d^3k\, \Theta(-\epsilon_{\boldsymbol{k}}) = \frac{\mathrm{Vol}}{(2\pi)^3}\, V_{\mathrm{FS}}^0\,. \tag{5.141}$$

Wenden wir uns nun dem System mit Wechselwirkung zu. Über den Sprung in der Impulsverteilung $n(\boldsymbol{k})$ kann auch in dem gestörten System eine Fermi-Fläche definiert werden. Mit (5.127) gilt für das Volumen der gestörten Fermi-Fläche

$$V_{\mathrm{FS}} = \int d^3k\, \Theta(\mu - \epsilon_{\boldsymbol{k}_F} - \Re\mathrm{e}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0))\,. \tag{5.142}$$

Im gestörten Fall berechnet man die Teilchenanzahl nun im großkanonischen Ensemble über $N = \partial\Phi/\partial\mu$, wobei Φ das thermodynamische Potential aus Kapitel 4.5 ist. Der entscheidende Schritt in Luttingers Argumentation [18] ist, daß er unter Verwendung von Ergebnissen aus [19] folgende Darstellung für die so definierte Teilchenanzahl herleiten konnte:

$$\begin{aligned} N &= \sum_{\boldsymbol{k}} \Theta(\mu - \epsilon_{\boldsymbol{k}_F} - \Re\mathrm{e}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)) \\ &= \frac{\mathrm{Vol}}{(2\pi)^3} \int d^3k\, \Theta(\mu - \epsilon_{\boldsymbol{k}_F} - \Re\mathrm{e}\Sigma(\boldsymbol{k}_F, 0)) = \frac{\mathrm{Vol}}{(2\pi)^3}\, V_{\mathrm{FS}}\,. \end{aligned} \tag{5.143}$$

Durch Vergleich von (5.141) und (5.143) liest man ab, daß die Volumina der Fermi-Flächen mit und ohne Wechselwirkung gleich sind:

$$V_{\mathrm{FS}} = V_{\mathrm{FS}}^0\,. \tag{5.144}$$

Dies ist die Kern-Aussage des Luttinger-Theorems. Für eine kugelsymmetrische Situation folgt insbesondere, daß die Wechselwirkung die Fermi-Fläche nicht verändern kann. Die Aussage (5.144) ist insofern nicht-trivial, als sie die Definition der Fermi-Fläche über den Sprung in der Impuls-Verteilung $n(\boldsymbol{k})$ und eine großkanonische Definition der Elektronen-Anzahl über das thermodynamische Potential verwendet. Als wesentliche Annahme geht ein, daß das wechselwirkende System eine Fermi-Flüssigkeit ist, die über Störungstheorie mit dem wechselwirkungsfreien System verbunden ist. Insbesondere gilt das Luttinger-Theorem nur für Fermi-Flüssigkeiten.

6 Phononen

6.1 Phonon-Greensche Funktionen

Sei $u_\alpha(l\kappa) = X_\alpha(l\kappa) - R_\alpha(l\kappa)$ die Auslenkung eines Gitterbausteins κ in der Zelle l in Richtung α aus der Ruhelage $\boldsymbol{R}_\alpha(l\kappa)$, dann können wir eine Auslenkungs-Greensche Funktion

$$G_{\alpha\alpha'}(l\kappa, l'\kappa', t) = -i\Theta(t) \left\langle [u_\alpha(l\kappa, t), u_{\alpha'}(l'\kappa', 0)]_- \right\rangle \tag{6.1}$$

definieren, welche die lineare Antwort der Auslenkung $u_\alpha(l\kappa)$ auf eine Störung, die an $u_{\alpha'}(l'\kappa')$ angreift, beschreibt. Diese Definition ist unabhängig von der Natur des Systems (harmonisch oder anharmonisch, mit oder ohne Elektron-Phonon-Wechselwirkungen usw.). Die Auslenkungen spielen hier eine ähnliche darstellungsunabhängige Rolle wie die Feldoperatoren $\psi(\boldsymbol{x})$ bei den Elektronen. Von Phononen im engeren Sinne spricht man, wenn man die Auslenkungsbewegung durch eine Überlagerung von harmonischen Gitterschwingungen beschreiben kann. Die entsprechenden Greenschen Funktionen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die Gitterschwingungen sind die Phonon-Greenschen Funktionen. Letztere bilden die Bausteine einer störungstheoretischen Entwicklung in Feynman-Graphen.

Zunächst wollen wir die wichtigsten Formeln für die Zerlegung von Gitterschwingungen nach Normalkoordinaten (rein klassisch) und dann ihre Darstellung durch Phonon-Operatoren zusammenstellen.

Wir starten von einem Hamilton-Operator für Gitterschwingungen

$$H = \sum_{\alpha l\kappa} \frac{p_\alpha^2(l\kappa)}{2M_\kappa} + V(\ldots u_\alpha(l\kappa) \ldots) \tag{6.2}$$

den wir nach Auslenkungen entwickeln

$$H = H_0 + \text{Rest} \tag{6.3}$$

$$H_0 = \sum_{\alpha l\kappa} \frac{p_\alpha^2(l\kappa)}{2M_\kappa} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha' ll'\kappa\kappa'} \Phi_{\alpha\alpha'}(l\kappa, l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) u_{\alpha'}(l'\kappa') \tag{6.4}$$

dabei sind

$$\Phi_{\alpha\alpha'}(l\kappa, l'\kappa') = \frac{\partial^2 V}{\partial u_\alpha(l\kappa) \partial u_{\alpha'}(l'\kappa')} \tag{6.5}$$

die zweiten Ableitungen der potentiellen Energie nach den Auslenkungen (die ersten Ableitungen verwinden im Gleichgewicht). Der Rest enthält anharmonische Beiträge und die eventuelle Ankopplung an Elektronen.

Durch Einführung von Normalkoordinaten läßt sich H_0 auf Diagonalform bringen. Für ein Gitter mit Translationssymmetrie gilt:

$$H_0 = \frac{1}{2}\sum_{\lambda}(P^*(\boldsymbol{q}\lambda)P(\boldsymbol{q}\lambda) + \omega_{q\lambda}^2 Q^*(\boldsymbol{q}\lambda)Q(\boldsymbol{q}\lambda)) \tag{6.6}$$

$$u_\alpha(l\kappa) = \sqrt{\frac{1}{NM_\kappa}}\sum_{q\lambda} e_\alpha(\kappa|\boldsymbol{q}\lambda)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}(l\kappa)}Q(\boldsymbol{q}\lambda) \tag{6.7}$$

$$p_\alpha(l\kappa) = \sqrt{\frac{M_\kappa}{N}}\sum_{q\lambda} e_\alpha^*(\kappa|\boldsymbol{q}\lambda)\,\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}(l\kappa)}P(\boldsymbol{q}\lambda)\,. \tag{6.8}$$

Dabei ist $Q(\boldsymbol{q}\lambda)$ die Normalkoordinate für eine Gitterschwingung mit Wellenvektor $\boldsymbol{q}$ und Polarisationsrichtung λ, $P(\boldsymbol{q}\lambda) = \dot{Q}^*(\boldsymbol{q}\lambda)$ der entsprechende kanonische Impuls, N die Zahl der Elementarzellen im Periodizitätvolumen. Die Eigenvektoren $\boldsymbol{e}(\kappa|\boldsymbol{q}\lambda)$ und Eigenfrequenzen $\omega_{q\lambda}$ erhält man durch Diagonalisieren der dynamischen Matrix

$$\sum_{\alpha'\kappa'}\Phi_{\alpha\alpha'}(\boldsymbol{q},\kappa\kappa')e_{\alpha'}(\kappa'|\boldsymbol{q}\lambda) = \omega_{q\lambda}^2 e_\alpha(\kappa|\boldsymbol{q}\lambda) \tag{6.9}$$

mit

$$\Phi_{\alpha\alpha'}(\boldsymbol{q},\kappa\kappa') = \sum_{l'}\frac{1}{\sqrt{M_\kappa M_{\kappa'}}}\Phi_{\alpha\alpha'}(l\kappa,l'\kappa')\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{R}(l\kappa)-\boldsymbol{R}(l'\kappa'))}\,. \tag{6.10}$$

Es gelten die Konventionen

$$Q(-\boldsymbol{q}\lambda) = Q^*(\boldsymbol{q}\lambda) \tag{6.11}$$

$$e_\alpha(\kappa|-\boldsymbol{q}\lambda) = e_\alpha^*(\kappa|\boldsymbol{q}\lambda) \tag{6.12}$$

und die Orthogonalitätsrelationen

$$\sum_{\kappa\alpha} e_\alpha^*(\kappa|\boldsymbol{q}\lambda)e_\alpha(\kappa|\boldsymbol{q}\lambda') = \delta_{\lambda\lambda'} \tag{6.13}$$

$$\sum_{\lambda} e_\alpha^*(\kappa|\boldsymbol{q}\lambda)e_{\alpha'}(\kappa'|\boldsymbol{q}\lambda) = \delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\kappa\kappa'}\,. \tag{6.14}$$

Im nächsten Schritt ersetzen wir $u_\alpha(l\kappa)$, $p_\alpha(l\kappa)$ durch quantenmechanische Operatoren mit den Vertauschungsrelationen

$$[u_\alpha(l\kappa),p_{\alpha'}(l'\kappa')]_- = i\hbar\delta_{ll'}\delta_{\kappa\kappa'}\delta_{\alpha\alpha'} \tag{6.15}$$

woraus für die Normalkoordinaten folgt:

$$[P(\boldsymbol{q}\lambda), P(\boldsymbol{q}'\lambda')]_- = i\hbar\delta_{qq'}\,\delta_{\lambda\lambda'}\,. \tag{6.16}$$

Schließlich führen wir Phonon-Operatoren ein durch:

$$Q(\boldsymbol{q}\lambda) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{q\lambda}}}(b_{q\lambda} + b^\dagger_{-q\lambda}) \tag{6.17}$$

$$P(\boldsymbol{q}\lambda) = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{q\lambda}}{2}}(b^\dagger_{q\lambda} - b_{-q\lambda}) \tag{6.18}$$

mit den Vertauschungs-Relationen:

$$[b_{q\lambda}, b^\dagger_{q'\lambda'}]_- = \delta_{qq'}\delta_{\lambda\lambda'}\,. \tag{6.19}$$

Dann erhält man für den Hamilton-Operator:

$$H_0 = \sum_{q\lambda} \hbar\omega_{q\lambda}\left(b^\dagger_{q\lambda}b_{q\lambda} + \frac{1}{2}\right)\,. \tag{6.20}$$

Im Folgenden haben wir es nur mit Korrelationsfunktionen der Auslenkungen zu tun, in denen die Phonon-Operatoren immer in der Kombination $\varphi_{q\lambda} = b_{q\lambda} + b^\dagger_{-q\lambda}$ auftreten. Daher definieren wir die Phonon-Greensche Funktion als

$$D_{\lambda\lambda'}(\boldsymbol{q}, t) = -i\Theta(t)\,\langle[\varphi_{q\lambda}(t), \varphi^\dagger_{q\lambda'}]_-\rangle\,. \tag{6.21}$$

Für den Hamiltonoperator H_0 in harmonischer Näherung läßt sich die Phonon-Greensche Funktion leicht berechnen mit Hilfe von

$$b_{q\lambda}(t) = \mathrm{e}^{-i\omega_{q\lambda}t}\,b_{q\lambda}\,. \tag{6.22}$$

Dann erhält man:

$$D_{\lambda\lambda'}(\boldsymbol{q}, t) = -i\Theta(t)\,\left(\mathrm{e}^{-i\omega_{q\lambda}t} - \mathrm{e}^{+i\omega_{q\lambda}t}\right)\,\delta_{\lambda\lambda'} \tag{6.23}$$

und für die Laplace-Transformierte:

$$D_{\lambda\lambda'}(\boldsymbol{q}, z) = \delta_{\lambda\lambda'}\left(\frac{1}{z - \omega_{q\lambda}} - \frac{1}{z + \omega_{q\lambda}}\right) = \delta_{\lambda\lambda'}\,\frac{2\omega_{q\lambda}}{z^2 - \omega^2_{q\lambda}} \tag{6.24}$$

mit Polen bei den Frequenzen zur Erzeugung und Vernichtung von Phononen. In harmonischer Näherung sind die Phonon-Greensche Funktionen immer diagonal in den Polarisationsrichtungen. In Anwesenheit von anharmonischen Wechselwirkungen ist das nicht notwendigerweise der Fall.

6.2 Inelastische Neutronenstreuung an Gitterschwingungen

In Kapitel 1.3 hatten wir einen allgemeinen Ausdruck für den inelastischen Streuquerschnitt hergeleitet:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\hbar\omega} = \frac{k'}{k}\frac{a^2}{\hbar}S(\boldsymbol{Q},\omega) \tag{6.25}$$

mit dem dynamischen Strukturfaktor

$$S(\boldsymbol{Q},\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt \mathrm{e}^{i\omega t}\langle n(\boldsymbol{Q},t)n^\dagger(\boldsymbol{Q},0)\rangle \tag{6.26}$$

ausgedrückt als Dichte-Korrelationsfunktion. Dabei ist $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$ der Streuvektor der Neutronen, der auch außerhalb der ersten Brillouin-Zone liegen kann, a die Streulänge, ein Maß für die Stärke der Wechselwirkung mit den Atomkernen.

Für einatomige Gitter, auf die wir uns hier beschränken wollen, ist

$$\langle n(\boldsymbol{Q},t)n^\dagger(\boldsymbol{Q},0)\rangle = \sum_{jl}\langle \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{X}_j(t)}\mathrm{e}^{+i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{X}_l(0)}\rangle \tag{6.27}$$

wobei $\boldsymbol{X}_l(t)$ der Heisenberg-Operator für die momentane Position des Gitteratoms ist

$$\boldsymbol{X}_l(t) = \boldsymbol{R}_l + \boldsymbol{u}_l(t), \tag{6.28}$$

ausgedrückt durch Ruhelage und Auslenkung.

Entwickeln wir die Korrelationsfunktion nach den Auslenkungen (wir werden das später besser machen), dann finden wir

$$\begin{aligned} &\langle \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{X}_j(t)}\mathrm{e}^{+i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{X}_l(0)}\rangle = \mathrm{e}^{i\boldsymbol{Q}\cdot(\boldsymbol{R}_l-\boldsymbol{R}_j)}\langle \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t)}\mathrm{e}^{+i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0)}\rangle \\ \simeq\ & \mathrm{e}^{i\boldsymbol{Q}\cdot(\boldsymbol{R}_l-\boldsymbol{R}_j)}(1 - \frac{1}{2}\langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j)^2\rangle - \frac{1}{2}\langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l)^2\rangle + \langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t))(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0))\rangle \end{aligned} \tag{6.29}$$

Die linearen Terme in den Auslenkungen tragen nicht bei.

Die Summe über den ersten Term, die 0-Phononen-Prozesse, ergeben die Bragg-Peaks:

$$\sum_{jl}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{Q}\cdot(\boldsymbol{R}_l-\boldsymbol{R}_j)} = N^2\Delta(\boldsymbol{Q}) \tag{6.30}$$

mit

$$\Delta(\boldsymbol{Q}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{G}_n \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{6.31}$$

dabei ist $\boldsymbol{G}_n$ ein reziproker Gittervektor.

Die statischen Terme lassen wir vorläufig weg. Die Auslenkungs-Korrelationsfunktion drücken wir durch Phononen aus:

$$\begin{aligned}\langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t))(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0))\rangle \;&= \tfrac{1}{NM}\sum_{q\lambda}\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda)\,\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{e}^*(\boldsymbol{q}\lambda)\,\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{R}_l-\boldsymbol{R}_j)}\\ &\times\tfrac{\hbar}{2\omega_{q\lambda}}(\mathrm{e}^{-i\omega_{q\lambda}t}(n_{q\lambda}+1)+\mathrm{e}^{+i\omega_{q\lambda}t}n_{q\lambda})\end{aligned} \tag{6.32}$$

mit der Bose-Funktion

$$n_{q\lambda} = 1/(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{q\lambda}}-1)\,. \tag{6.33}$$

Nach Ausführung der Zeit-Integration erhalten wir für den Strukturfaktor

$$\begin{aligned}S_0(\boldsymbol{Q},\omega) \;&= N^2\Delta(\boldsymbol{Q})\delta(\omega)+\tfrac{N}{M}\sum_{q\lambda}\Delta(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{q})\boldsymbol{Q}\boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda)\boldsymbol{Q}\boldsymbol{e}^*(\boldsymbol{q}\lambda)\\ &\times\tfrac{\hbar}{2\omega_{q\lambda}}(\delta(\omega-\omega_{q\lambda})(n_{q\lambda}+1)+\delta(\omega+\omega_{q\lambda})n_{q\lambda})\,.\end{aligned} \tag{6.34}$$

Der Beitrag mit positiver Frequenz $\delta(\omega-\omega_{q\lambda})$, dem entspricht Energieverlust bei der Streuung, existiert auch bei tiefen Temperaturen (Stokes-Prozeß), dagegen verschwindet der Beitrag bei negativen Frequenzen (Anti-Stokes-Prozeß) bei tiefen Temperaturen.

Durch den Faktor $\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{e}$ sollten longitudinale Phononen bevorzugt angeregt werden. Das ist nicht so, wenn man mittels eines reziproken Gittervektors $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{q}+\boldsymbol{G}_n$ aus der ersten Brillouinzone hinausgeht. Davon wird bei der inelastischen Neutronenstreuung viel Gebrauch gemacht.

Bei der Entwicklung nach kleinen Auslenkungen waren wir nicht ganz konsequent: da die linearen Terme in der Auslenkung verschwinden, haben wir Terme zweiter Ordnung in der Korrelationsfunktion berücksichtigt, aber nicht die statischen Terme zweiter Ordnung mitgenommen. Wie man sieht, führen diese zu einer Verminderung der Intensität der Bragg-Peaks. Die systematische Mitnahme dieser Korrekturen führt zu

$$S(\boldsymbol{Q},\omega) = \mathrm{e}^{-2W}S_0(\boldsymbol{Q},\omega)\,. \tag{6.35}$$

Dabei ist e^{-2W} der Debye-Wallerfaktor mit

$$W(\boldsymbol{Q}) = \frac{1}{2}\langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l)^2\rangle\,. \tag{6.36}$$

Beweis:

Verwende:

a) $\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B = \mathrm{e}^{A+B}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}[A,B]}$, falls $[A,B]\in\mathbb{C}$, und

b) $\langle \mathrm{e}^{A}\rangle = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\langle A^2\rangle}$, falls A linear und H bilinear in Bose-Operatoren.

Der Beweis von a) ergibt sich aus einem Vergleich der Reihenentwicklung, der Beweis von b) folgt aus dem Wickschen Theorem (siehe unten).

Setze nun

$$A = -i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t), \quad B = i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0) \tag{6.37}$$

und betrachte die Korrelationsfunktion $\langle \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t)}\,\mathrm{e}^{+i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0)}\rangle$. In harmonischer Näherung sind die Voraussetzungen von a) und b) erfüllt.

Mit a) erhält man

$$\langle \mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\rangle = \langle \mathrm{e}^{A+B}\rangle \mathrm{e}^{\frac{1}{2}[A,B]} = \langle \mathrm{e}^{A+B}\rangle \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\langle AB-BA\rangle} \tag{6.38}$$

Mit b) folgt daraus:

$$\langle \mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\rangle = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}(\langle A^2\rangle + \langle B^2\rangle) + \langle AB\rangle} \tag{6.39}$$

In unserem konkreten Fall ergibt sich daraus:

$$\begin{aligned}\langle \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t)}\,\mathrm{e}^{+i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0)}\rangle &= \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t))^2\rangle}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0))^2\rangle}\mathrm{e}^{\langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t))(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0))\rangle}\\ &= \mathrm{e}^{-2W}\,\mathrm{e}^{\langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t))(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0))\rangle}\,.\end{aligned}$$

Entwickelt man nun nach der Korrelationsfunktion, dann erhält man

$$\langle \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}_j(t)}\mathrm{e}^{+i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0)}\rangle = \mathrm{e}^{-2W}(1 + \langle(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_j(t))(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{u}_l(0))\rangle)\,, \tag{6.40}$$

oder

$$S(\boldsymbol{Q},\omega) = \mathrm{e}^{-2W} S_0(\boldsymbol{Q},\omega)\,. \tag{6.41}$$

6.3 Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Metallen

In diesem Kapitel leiten wir einen Ausdruck für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung her. Wir betrachten dabei insbesondere einatomige Metalle.

Wir starten von einem Hamilton-Operator in Schrödinger-Ortsdarstellung, der die Bewegung der Elektronen im Potential der positiven Ionen und andererseits auch die Wechselwirkung der Ionen untereinander enthält:

$$\begin{aligned} H = &\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{il} U(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{X}_l) + \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\sum_{i,j\neq i}\frac{1}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|}\\ &+ \sum_l \frac{P_l^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{l,m\neq l} V_{\mathrm{ion}}(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}_m)\,. \end{aligned} \tag{6.42}$$

Hier bezeichnen $\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{p}_i$ Ortskoordinaten und Impulse der Elektronen, $\boldsymbol{X}_l, \boldsymbol{P}_l$ die entsprechenden Koordinaten der Ionen. Die Ion-Ion-Wechselwirkung V enthält neben kurzreichweitigen Kräften zwischen den Ionenrümpfen auch die langreichweitige Wechselwirkung durch die Coulombkräfte. Im Gleichgewicht wird diese unendlich große Wechselwirkungsenergie ebenso wie die Wechselwirkungsenergie der Elektronen durch die Wechselwirkung U zwischen Elektronen und Ionen zum größten Teil kompensiert. Durch die Bedingung

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}_l} \left\{ \int d^3x n(\boldsymbol{x}) U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}_l) + \sum_{l,m \neq l} V_{\text{ion}}(\boldsymbol{X}_l - \boldsymbol{X}_m) \right\} \Bigg|_{\boldsymbol{X}_l = \boldsymbol{R}_l} = 0 \tag{6.43}$$

erhält man im Allgemeinen stabile Gleichgewichtslagen $\boldsymbol{R}_l$ für die Ionen.

Das bedeutet aber nicht, daß damit die langreichweitigen Kräfte abgeschirmt sind. Vielmehr gibt es für die Ionen ebenso wie für die Elektronen longitudinale Plasmaschwingungen, d.h. der Hamilton-Operator für die Ionen,

$$H_p = \sum_{q\lambda} \Omega_{q\lambda} (b^\dagger_{q\lambda} b_{q\lambda} + \frac{1}{2}), \tag{6.44}$$

den man durch Entwicklung von

$$H_{\text{ion}} = \sum_l \frac{P_l^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{m,l \neq m} V_{\text{ion}}(\boldsymbol{X}_l - \boldsymbol{X}_m) + \int d^3x U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}_l) n(\boldsymbol{x}) \tag{6.45}$$

bis zur zweiten Ordnung in den Auslenkungen $\boldsymbol{u}_l = \boldsymbol{X}_l - \boldsymbol{R}_l$ erhält, hat einen longitudinalen Zweig, dessen Frequenz für $\boldsymbol{q} \to 0$ nicht verschwindet, vielmehr von der Größenordnung

$$\Omega_p^2 = \frac{e^2 Z^2 N}{\epsilon_0 M \text{Vol}} \,. \tag{6.46}$$

Diese ionische Plasmaschwingung tritt in Wirklichkeit in Metallen nicht auf. Sie wird durch die Mitbewegung der Elektronen abgeschirmt. Im Rahmen dieser Formulierung ist sie eine Folge der künstlichen Aufteilung des Hamilton-Operators. (Bei einer Entwicklung der Gesamtenergie des gekoppelten Systems nach Ionen-Auslenkungen tritt sie nicht auf). Wir werden aber sehen, daß auch im Rahmen dieses Formalismus die Plasmaschwingung zu ein akustischen Zweig renormiert wird.

Als Elektron-Phonon-Wechselwirkung definieren wir

$$\sum_{i,l} U(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{X}_l) - U(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{R}_l) \tag{6.47}$$

bzw. dessen Entwicklung nach Ionen-Auslenkungen:

$$H_{ep} = \sum_{il\alpha} \frac{\partial U(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{X}_l)}{\partial u_{l\alpha}} u_{l\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{il\alpha\beta} \frac{\partial^2 U(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{X}_l)}{\partial u_{l\alpha} \partial u_{l\beta}} u_{l\alpha} u_{l\beta} \,. \tag{6.48}$$

Im Folgenden wird uns nur der erste Term interessieren, den man auch als Ableitung nach den Elektron-Koordinaten schreiben kann:

$$H_{ep} = -\sum_{il} \boldsymbol{\nabla}_i U(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{R}_l) \cdot \boldsymbol{u}_l \,. \tag{6.49}$$

Der zweite Term multipliziert mit der elektronischen Gleichgewichtsdichte ist schon in H_p enthalten. Ansonsten ist dieser Term z.B. von Bedeutung bei der thermischen Renormierung der elektronischen Bandstruktur. In zweiter Quantisierung erhalten wir daraus:

$$H_{ep} = -\sum_{l\sigma} \int d^3x \, \Psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{\nabla} U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_l) \cdot \boldsymbol{u}_l \Psi_\sigma(\boldsymbol{x}) \tag{6.50}$$

Zur weiteren Analyse zerlegen wir die elektronischen Feldoperatoren nach Bloch-Funktionen

$$\Psi_\sigma(\boldsymbol{x}) = \sum_{nk} \varphi_{nk}(\boldsymbol{x}) c_{nk\sigma} \tag{6.51}$$

und die ionischen Auslenkungen nach Phononen-Operatoren:

$$\boldsymbol{u}_l = \sum_{\boldsymbol{q}\lambda} \sqrt{\frac{1}{2NM\Omega_{q\lambda}}} \boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda) \, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l} \, A_{\boldsymbol{q}\lambda} \tag{6.52}$$

mit $A_{\boldsymbol{q}\lambda} = b_{\boldsymbol{q}\lambda} + b^\dagger_{-\boldsymbol{q}\lambda}$. Dabei beziehen sich die Frequenzen und Operatoren auf die "nackten" durch H_p definierten Phononen.

Setzt man diese Ausdrücke in H_{ep} ein, dann erhält man:

$$\begin{aligned} H_{ep} = \; & - \sum_{\sigma l} \sum_{\boldsymbol{q}\lambda} \int d^3x \sum_{n'k'} \sum_{nk} \varphi^*_{n'k'}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{\nabla} U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_l) \varphi_{nk}(\boldsymbol{x}) \\ & \times \sqrt{\frac{1}{2NM\Omega_{q\lambda}}} \, \boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda) \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l} A_{q\lambda} c^\dagger_{n'k'\sigma} c_{nk\sigma} \,. \end{aligned} \tag{6.53}$$

Das elektronische Matrixelement kann man noch weiter auswerten:

$$\begin{aligned} & \int d^3x \, \varphi^*_{n'k'}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{\nabla} U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_l) \varphi_{nk}(\boldsymbol{x}) \\ & = \frac{1}{\mathrm{Vol}} \int d^3x \, u^*_{n'k'}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{\nabla} U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_l) u_{nk}(\boldsymbol{x}) \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x} + i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \\ & = \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}_l} \frac{1}{\mathrm{Vol}} \int d^3x \, u^*_{n'k'}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{\nabla} U(\boldsymbol{x}) u_{nk}(\boldsymbol{x}) \, \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}} \end{aligned} \tag{6.54}$$

mit den gitterperiodischen Funktionen $u_{nk}(\boldsymbol{x})$.

Die Ausführung der Gittersumme ergibt:

$$\sum_l \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l}\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}_l} = N\Delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k})\,. \tag{6.55}$$

Damit erhält man schließlich

$$H_{ep} = \sum_{kk'\sigma q\lambda} M(n'k', nk, q\lambda)\Delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k})A_{q\lambda}c^\dagger_{n'k'\sigma}c_{nk\sigma} \tag{6.56}$$

mit dem Matrixelement

$$\begin{aligned} M(n'k', nk, q\lambda) &= -\frac{N}{\mathrm{Vol}}\int d^3x\, u^*_{n'k'}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\nabla}U(\boldsymbol{x})u_{nk}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-i\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}} \\ &\quad\cdot\boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda)\frac{1}{\sqrt{2NM\Omega_{q\lambda}}}\,. \end{aligned} \tag{6.57}$$

Hier sieht man, daß die Elektron-Phonon-Wechselwirkung bis auf Umklapp-Prozesse den Impuls erhält, d.h. der Impuls $\boldsymbol{q}$ wird von dem Phonon auf das Elektronsystem übertragen.

Beschränkt man sich auf ebene Wellen und vernachlässigt Umklapp-Prozesse, dann vereinfacht sich das Matrixelement noch weiter. Mit $u_{nk}(\boldsymbol{x}) = 1$ erhält man:

$$\int d^3x\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\nabla}U(\boldsymbol{x}) = -\int d^3x\boldsymbol{\nabla}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}U(\boldsymbol{x}) = i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})U(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}) \tag{6.58}$$

mit der Fouriertransformierten $U(\boldsymbol{q})$ des Potentials und damit

$$H_{ep} = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{Vol}}}\sum_{kq\lambda} g^0_{k+q,k}(\boldsymbol{q}\lambda)A_{q\lambda}c^\dagger_{k+q\sigma}c_{k\sigma} \tag{6.59}$$

mit

$$g^0_{k+q,k}(\boldsymbol{q}\lambda) = g^0(\boldsymbol{q}\lambda) = -i\boldsymbol{q}\boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda)U(\boldsymbol{q})\frac{N}{\mathrm{Vol}}\frac{1}{\sqrt{2\rho\Omega_{q\lambda}}} \tag{6.60}$$

und der Massendichte $\rho = MN/\mathrm{Vol}$.

Eine Abschätzung der Stärke der Elektron-Phonon-Wechselwirkung für longitudinale Phononen erhalten wir, wenn wir für U die Coulomb-Wechselwirkung und für $\Omega_{q\lambda}$ die ionische Plasmafrequenz einsetzen:

$$g^0(\boldsymbol{q}\lambda) = -iq\frac{e^2Z}{\epsilon_0 q^2}\frac{1}{\sqrt{2\rho\Omega_p}}\frac{N}{\mathrm{Vol}}\,. \tag{6.61}$$

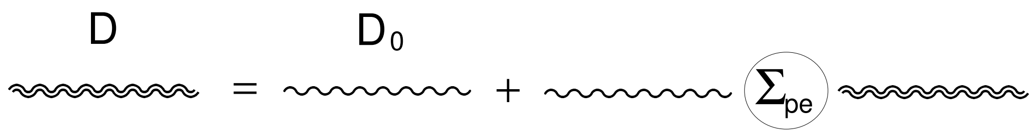


Abbildung 6.1: *Dyson-Gleichung für die Phonon-Greensche Funktion.*

Damit ist $g^0 \sim 1/q$ singulär bei $q \to 0$. Das ist auch richtig für die Kopplung an LO-Phononen in Halbleitern. In Metallen wird diese Kopplung abgeschirmt, wie wir im nächsten Kapitel sehen werden. Eine nützliche Relation, die wir noch brauchen werden, ist

$$\frac{2|g^0(q\lambda)|^2}{\Omega_p} = \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \,. \tag{6.62}$$

6.4 Phononen in Metallen

In diesem Kapitel wollen wir zeigen, wie die "nackten" longitudinalen Phononen durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung zu einem akustischen Zweig renormiert werden.

Wir definieren eine Phonon-Greensche Funktion durch

$$D(\boldsymbol{q}\lambda, z) = \langle\langle A_{q\lambda}; A^\dagger_{q\lambda} \rangle\rangle \tag{6.63}$$

mit $A_{q\lambda} = b_{q\lambda} + b^\dagger_{-q\lambda}$. Mit dem Hamiltonoperator für die "nackten" Phononen

$$H = \sum_{q\lambda} \Omega_{q\lambda} (b^\dagger_{q\lambda} b_{q\lambda} + \frac{1}{2}) \tag{6.64}$$

erhalten wir

$$D^0(\boldsymbol{q}\lambda, z) = \frac{2\Omega_{q\lambda}}{z^2 - \Omega^2_{q\lambda}} \,. \tag{6.65}$$

Mittels der Elektron-Phonon-Wechselwirkung erhalten wir eine störungstheoretische Entwicklung für die renormierte Phonon-Greensche Funktion. Durch Teilsummation der reduziblen Graphen läßt sich ähnlich wie bei den Elektronen eine Dyson-Gleichung mit einer irreduziblen Selbstenergie formulieren (siehe Abb. 6.1). Die wichtigsten Graphen sind in Abb. 6.2 aufgeführt. Im wesentlichen besteht die Phonon-Selbstenergie aus der elektronischen Polarisation, die von der Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen abhängt

$$\Sigma_{pe}(\boldsymbol{q}, z) = |g^0(\boldsymbol{q})|^2 \Pi(\boldsymbol{q}, z) = |g^0(\boldsymbol{q})|^2 \frac{\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z)}{\epsilon(\boldsymbol{q}, z)} \tag{6.66}$$

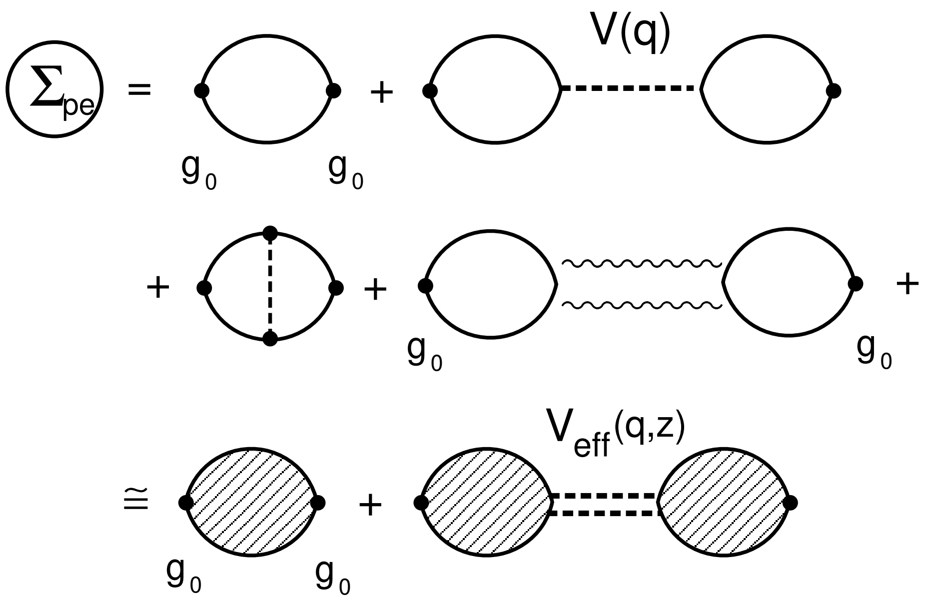


Abbildung 6.2: *Wichtigste Graphen für die Phonon-Selbstenergie.*

mit $\epsilon(\boldsymbol{q}, z) = 1 - V(\boldsymbol{q})\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z)$. Als Näherung wird meist die RPA verwendet, d.h. $\tilde{\Pi}(\boldsymbol{q}, z)$ wird durch die einfache Polarisationsblase $\Pi_0(\boldsymbol{q}, z)$ ersetzt.

Die Dyson-Gleichung

$$D(\boldsymbol{q}\lambda, z) = D_0(\boldsymbol{q}\lambda, z) + D_0(\boldsymbol{q}\lambda, z)\Sigma_{pe}(\boldsymbol{q}\lambda, z)D(\boldsymbol{q}\lambda, z) \tag{6.67}$$

läßt sich leicht auflösen:

$$D^{-1}(\boldsymbol{q}\lambda, z) = \frac{1}{2\Omega_{q\lambda}}\big(z^2 - \Omega_{q\lambda}^2 - 2\Omega_{q\lambda}\Sigma_{pe}(\boldsymbol{q}\lambda)\big)\,. \tag{6.68}$$

Da die typischen elektronischen Anregungen meist weit oberhalb der Phonon-Frequenzen liegen, definieren wir eine renormierte Phonon-Frequenz $\omega_{q\lambda}$ durch

$$\omega_{q\lambda}^2 = \Omega_{q\lambda}^2 + 2\Omega_{q\lambda}\Sigma_{pe}(\boldsymbol{q}, 0) = \Omega_{q\lambda}^2 + 2\Omega_{q\lambda}|g^0(\boldsymbol{q}\lambda)|^2\Pi(\boldsymbol{q}, 0) \tag{6.69}$$

dann lautet die Phonon-Greensche Funktion

$$D^{-1}(\boldsymbol{q}\lambda, z) = \frac{1}{2\Omega_{q\lambda}}(z^2 - \omega_{q\lambda}^2 + 2\Omega_{q\lambda}|g^0(\boldsymbol{q}\lambda)|^2(\Pi(\boldsymbol{q}, z) - \Pi(\boldsymbol{q}, 0))\,. \tag{6.70}$$

Der letzte Term trägt im wesentlichen zur Phonon-Dämpfung bei.

Zunächst wollen wir zeigen, daß tatsächlich die renormierte Frequenz sich wie $\omega_{q\lambda} \simeq qv$ für kleine Wellenvektoren q verhält.

Für den longitudinalen Zweig gilt:

$$\Omega_{qL}^2 = \Omega_p^2 + \mathcal{O}(q^2) \tag{6.71}$$

$$\begin{aligned}\omega_{q\lambda}^2 &= \Omega_{q\lambda}^2 \left(1 + \frac{2|g^0(\boldsymbol{q}L)|^2}{\Omega_{q\lambda}} \frac{\Pi_0(\boldsymbol{q},0)}{\epsilon_{RPA}(\boldsymbol{q},0)}\right) + \mathcal{O}(q^2) \\ &= \Omega_p^2 \left(1 + V(\boldsymbol{q}) \frac{\Pi_0(\boldsymbol{q},0)}{1 - V(\boldsymbol{q})\Pi_0(\boldsymbol{q},0)}\right) + \mathcal{O}(q^2)\end{aligned} \tag{6.72}$$

d.h.

$$\omega_{qL}^2 = \frac{\Omega_p^2}{\epsilon_{RPA}(\boldsymbol{q},0)} + \mathcal{O}(q^2)\,. \tag{6.73}$$

Für die elektronische Suszeptibilität gilt für kleine q:

$$\epsilon_{RPA} = 1 + V(q)\chi_0(\boldsymbol{q},0) \simeq 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \tag{6.74}$$

mit dem Thomas-Fermi-Wellenvektor $q_{TF}^2 = 2N(0)e^2/\epsilon_0$. Damit erhalten wir

$$\omega_{qL}^2 = \Omega_p^2 q^2/(q_{TF}^2 + \mathcal{O}(q^2)) \tag{6.75}$$

d.h. $\omega_{qL} \sim q$.

Die ganze Renormiererei hätten wir uns sparen können, wenn wir bei der Definition der dynamischen Matrix die statische Abschirmung durch die Elektronen von vornherein berücksichtigt und als elektronischen Teil der dynamischen Matrix definiert hätten:

$$\begin{aligned}\Phi^{\mathrm{el}}_{\alpha,\alpha'}(ll') &= \delta_{ll'} \int d^3x\, n(\boldsymbol{x}) \frac{\partial^2 U(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_l)}{\partial u_{l\alpha} u_{l\alpha'}} \\ &+ \int\int d^3x\, d^3x'\, \frac{\partial U(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_l)}{\partial u_{l\alpha}} \chi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',0) \frac{\partial U(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_l)}{\partial u_{l'\alpha'}}\,.\end{aligned} \tag{6.76}$$

Der erste Term beschreibt die rücktreibende Kraft auf die Ionenauslenkung im Potential der ungestörten Elektronendichte, der zweite Term beschreibt den Response der elektronischen Dichte auf die Gitterauslenkung, der dann letztlich zur Abschirmung der ionischen Coulombkräfte führt. Dabei ist $\chi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',0)$ die volle statische Suszeptibilität, welche die Coulomb-Wechselwirkung mit enthält (entspricht der oben verwendeten vollen Polarisation $\Pi(\boldsymbol{q},0)$).

Denken wir uns also die renormierten Phonon-Frequenzen durch Diagonalisierung dieser dynamischen Matrix berechnet, dann können wir überall die "nackten" Phononenfrequenzen durch die renormierten realistischen Phononfrequenzen ersetzen. Für den Phonon-Propagator erhalten wir dann:

$$D(\boldsymbol{q}\lambda, z) = \frac{2\omega_{q\lambda}}{(z^2 - \omega_{q\lambda}^2 - 2\omega_{q\lambda}|g(\boldsymbol{q}\lambda)|^2(\Pi(\boldsymbol{q},z) - \Pi(\boldsymbol{q},0))} \tag{6.77}$$

mit

$$g(\boldsymbol{q}\lambda) = -i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda)\,U(\boldsymbol{q})\,\frac{N}{\mathrm{Vol}}\,\frac{1}{\sqrt{2\rho\omega_{q\lambda}}}\,. \tag{6.78}$$

In einer vollständigen Theorie ist dann noch die k-Abhängigkeit der Matrixelemente zu berücksichtigen.

Aus der Frequenzabhängigkeit der Selbstenergie können wir die Linienbreite der Phononen berechnen, und zwar aus dem Imaginärteil der Selbstenergie. Damit erhalten wir für die Linienbreite

$$\gamma(q,\omega) = -\Im\mathrm{m}|g(q)|^2\Pi(\boldsymbol{q},\omega+i\delta)\,. \tag{6.79}$$

Schreiben wir

$$\Pi(\boldsymbol{q},z) = \frac{\Pi_0(\boldsymbol{q},z)}{1-V(\boldsymbol{q})\,\Pi_0(\boldsymbol{q},z)} \tag{6.80}$$

dann folgt für den Imaginärteil

$$\Pi''(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{\Pi_0''(\boldsymbol{q},\omega)}{(1-V(\boldsymbol{q})\Pi'(\boldsymbol{q},\omega))^2+(\Pi_0''(\boldsymbol{q},\omega))^2} \simeq \frac{\Pi_0''(\boldsymbol{q},\omega)}{\epsilon^2(\boldsymbol{q},0)}\,. \tag{6.81}$$

Damit schreibt sich die Linienbreite

$$\gamma(\boldsymbol{q},\omega) = |\bar{g}(q)|^2\chi_0''(\boldsymbol{q},\omega) \tag{6.82}$$

mit der abgeschirmten Elektron-Phonon-Wechselwirkung

$$\bar{g}(\boldsymbol{q}) = g(\boldsymbol{q})/\epsilon(\boldsymbol{q},0)\,, \tag{6.83}$$

die sich wie $\bar{g}(\boldsymbol{q}) \sim \sqrt{q}$ in Metallen verhält.

Für den Imaginärteil der elektronischen Suszeptibilität (Lindhard-Funktion)

$$\chi_0''(\boldsymbol{q},\omega) = 2\pi\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}(f_k-f_{k+q})\delta(\omega+\epsilon_k-\epsilon_{k+q}) \tag{6.84}$$

erhält man für tiefe Temperaturen und $\omega \ll qv_F$:

$$\chi_0''(\boldsymbol{q},\omega) = \pi N(0)\omega/(qv_F)\,. \tag{6.85}$$

Damit folgt für die Linienbreite von longitudinalen akustischen Phononen:

$$\gamma(\boldsymbol{q},\omega) \sim \omega \tag{6.86}$$

Dieses Ergebnis wird für einfache Metalle recht gut bestätigt (siehe Abb. 6.3).

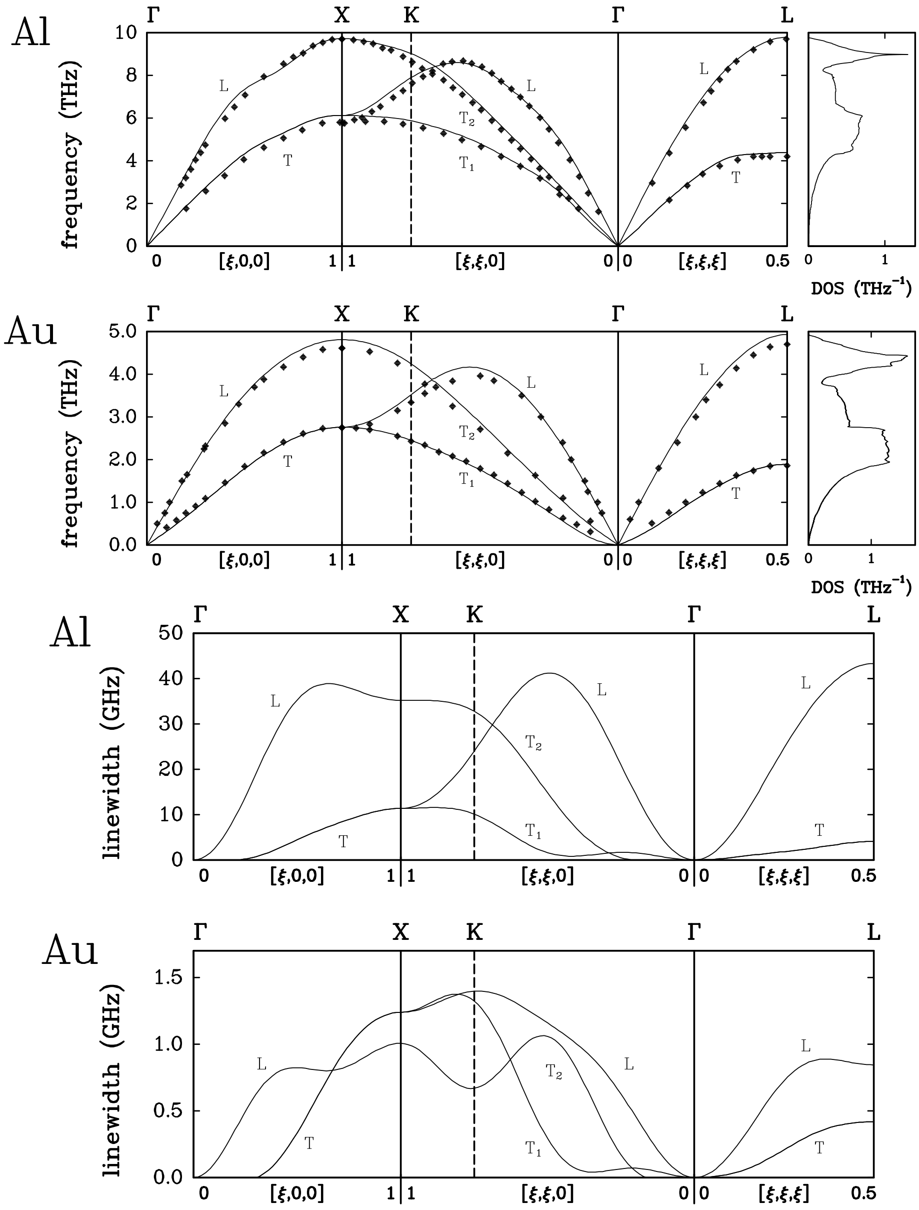
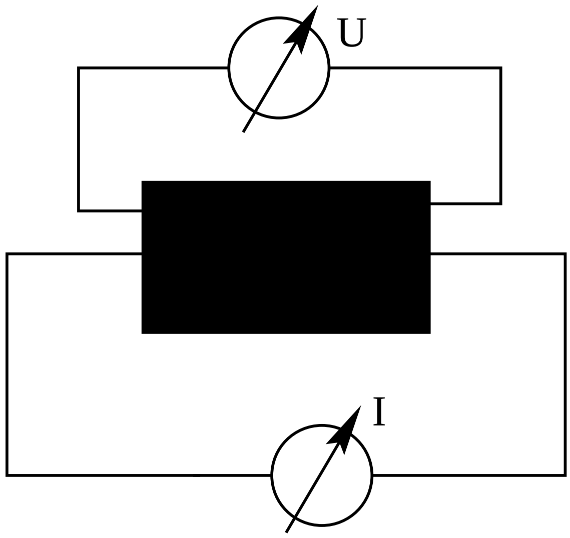


Abbildung 6.3: *Phononendispersion und gerechnete Linienbreiten von Al und Au [4].*

7 Störstellenleitfähigkeit

7.1 Mikroskopische Definition der Leitfähigkeit

Wir betrachten im Folgenden einen Festkörper, dem wir von außen eine Stromdichte $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}, t)$ aufprägen, und fragen uns, welche Spannung über der Probe an-



liegt. Der durch die Probe fließende Strom wird in unserem Festkörper gemäß den Maxwell'schen Gleichungen Felder und Ströme etc. induzieren, welche nach uns hier nicht weiter interessierenden Einschwingvorgängen dann schließlich im System ein totales elektrisches Feld $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t)$ erzeugen.

Sind die erzeugten Felder nicht zu stark, so ist es vernünftig, von einem linearen Zusammenhang

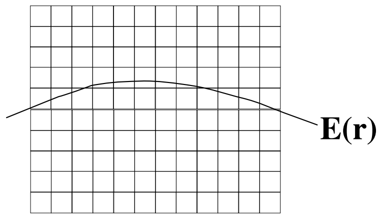
$$J_\alpha(\boldsymbol{r}, t) = \int d^3r' \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t - t') E_\beta(\boldsymbol{r}', t') \tag{7.1}$$

auszugehen. Man beachte, daß aufgrund der atomistischen Struktur des Festkörpers i.A. $\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t - t') \neq \sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'; t - t')$, d.h. der Versuch, Glg. (7.1) per Fouriertransformation zu lösen führt auf

$$J_\alpha(\boldsymbol{q}, \omega; \boldsymbol{G}) = \sum_{\boldsymbol{G}'} \sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q}, \omega; \boldsymbol{G}, \boldsymbol{G}') E_\beta(\boldsymbol{q}, \omega; \boldsymbol{G}') \ .$$

Dabei ist $\boldsymbol{q}$ in der ersten Brillouin-Zone und $\boldsymbol{G},\ \boldsymbol{G}' \in$ R.G. Es ist offensichtlich, daß man hier ein ziemlich unhandliches Matrixproblem vorliegen hat[13].

Der Ausweg aus dem Dilemma kommt auf natürliche Weise daher, daß man meistens nur an gemessen an atomaren Skalen räumlich langsam variierenden Feldern interessiert ist. Der beobachtete Strom wird dann ein Mittelwert über



einen viele Elementarzellen enthaltenden Teilbereich des Festkörpers sein. Somit spielt die detaillierte mikroskopische Struktur keine Rolle mehr, d.h. das System erscheint als näherungsweise homogen (aber nicht notwendigerweise isotrop!).

Keine Probleme hingegen bereitet die zeitliche Homogenität, d.h. wir können uns von vorherein auf harmonische Zeitabhängigkeiten beschränken:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-i\omega t}\,, \qquad \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-i\omega t}\,.$$

Weiterhin nehmen wir an, daß unser System im Gleichgewicht durch einen Hamiltonian H beschrieben werde, welcher alle Arten von Wechselwirkungen enthalten kann (Coulomb, Störstellenstreueung, etc.). Die Ankopplung des im System herrschenden Feldes $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ beschreiben wir durch[14]

$$H' = -\int d^3r\,\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\,, \qquad \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{i\omega}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) \tag{7.2}$$

in einer Eichung[15], für die das skalare Potential $\Phi(\boldsymbol{r},t)=0$. Die Größe $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ stellt dabei den quantenmechanischen Stromoperator[16]

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = -\frac{e}{2m}\sum_i \left(\boldsymbol{p}_i\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) + \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\,\boldsymbol{p}_i\right) \tag{7.3}$$

ohne äußere Felder dar[17] und die Summe erstreckt sich über alle Teilchen im System. Der *gemessene* Strom $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)$ ergibt sich nun aus dem Mittelwert der

[13] Details einer mikroskopischen dielektrischen Theorie des Festkörpers finden sich z.B. in dem Buch [13].

[14] Wir setzen $c=1$.

[15] Natürlich ist das Ergebnis von der speziellen Eichung unabhängig.

[16] e ist der Betrag der elektrischen Ladung, d.h. Elektronen haben die Ladung $-e$.

[17] Diese Aufteilung ist im Sinne der zu entwickelnden linearen Antwortnäherung gerechtfertigt.

Geschwindigkeit der Teilchen im System in Anwesenheit der äußeren Felder, $\boldsymbol{v}_i = (\boldsymbol{p}_i + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i, t))/m$:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}, t) &= -\frac{e}{2}\sum_i \langle \boldsymbol{v}_i \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) + \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{v}_i \rangle \\
&= -\frac{e}{2m}\sum_i \langle \boldsymbol{p}_i \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) + \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{p}_i \rangle - \frac{e^2}{mc}\sum_i \langle \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i, t)\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\rangle \\
&= \langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)\rangle - \frac{e^2}{m}\sum_i \langle \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i, t)\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\rangle \, .
\end{aligned} \tag{7.4}$$

Unter der zuvor getroffenen Annahme räumlich langsam variierender Felder können wir

$$\langle \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i, t)\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\rangle \approx \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\langle \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\rangle$$

setzen und

$$\sum_i \langle \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\rangle = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} f_{\boldsymbol{k}} = n_e$$

ausnutzen. Damit erhalten wir schließlich für den makroskopisch beobachteten Strom die Beziehung

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}, t) = \langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)\rangle - \frac{e^2 n_e}{m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \quad . \tag{7.5}$$

Den ersten Term $\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)\rangle$ berechnen wir nun in linearer Näherung. Ohne äußere Felder sei das System stromfrei, d.h. mit der Kuboformel aus Kapitel 1 erhalten wir ($\hbar = 1$)

$$\begin{aligned}
\langle j_\alpha(\boldsymbol{r}, t)\rangle &= -i\int_{-\infty}^{t} dt' \langle [j_\alpha(\boldsymbol{r}, t), H'(t')]\rangle \\
&= i\int_{-\infty}^{t} dt' \int d^3r' \, [j_\alpha(\boldsymbol{r}, t), j_\beta(\boldsymbol{r}', t')]\rangle A_\beta(\boldsymbol{r}', t') \quad .
\end{aligned}$$

Im langwelligen Limes werden im eingeschwungenen Zustand Feld und Strom mit derselben Wellenlänge räumlich variieren, d.h.

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \approx \boldsymbol{A}\, \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{q} - \omega t)}, \; \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) \approx \boldsymbol{j}\, \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{q} - \omega t)} \quad .$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
j_\alpha &= i\int dt' \Theta(t - t') e^{i\omega(t - t')} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \int d^3r' \langle [j_\alpha(\boldsymbol{r}, t), j_\beta(\boldsymbol{r}', t')]\rangle A_\beta \\
&= i\int dt' \Theta(t - t') e^{i\omega(t - t')} \langle [j_\alpha(\boldsymbol{q}, t), j_\beta(-\boldsymbol{q}, t')]\rangle A_\beta \quad .
\end{aligned}$$

Diese Beziehung zwischen Strom und Vektorpotential $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ ist noch allgemein gültig. Um den zur Bestimmung der Leitfähigkeit eigentlich benötigten Zusammenhang zwischen Strom und Feld zu erhalten, müssen wir nur noch $\boldsymbol{A}$ gemäß Glg. (7.2) ersetzen, was auf

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega) &= \frac{i}{\omega}\left[\Pi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega)+\frac{n_e e^2}{m}\delta_{\alpha\beta}\right]\\ \Pi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega) &= -i\int dt'\Theta(t-t')e^{i\omega(t-t')}\langle[j_\alpha(\boldsymbol{q},t),j_\beta(-\boldsymbol{q},t')]\rangle\end{aligned} \tag{7.6}$$

führt. Im Folgenden werden wir $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{0}$ annehmen und einfach die Abhängigkeit von $\boldsymbol{q}$ in allen Größen weglassen. Diese Vorgehensweise wird sicherlich solange vernünftig sein, wie keine langwelligen Ladungsdichtefluktuationen im System vorherrschen. Andererseits ist die Durchführung des Limes $\boldsymbol{q}\to\boldsymbol{0}$ notwendig, um den Limes $\omega\to 0$ für die Gleichstromleitfähigkeit ausführen zu können: Würde man umgekehrt für festes $\boldsymbol{q}$ zuerst $\omega\to 0$ gehen lassen, so läge am System ein statisches, räumlich variierendes elektrisches Feld an. Die Elektronen würden einem diesem Potential angemessenen Zustand einnehmen und letztlich würde kein Strom fließen, d.h. $\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},0)=0$. Man beachte, daß hier die Argumentation genau umgekehrt wie bei der magnetischen Suszeptibilität ist.

Ein anderer Aspekt der Glg. (7.5) ist im zweiten Term $-\frac{n_e e^2}{m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ enthalten. Dieser „diamagnetische“ Anteil wird wichtig, wenn z.B. $\Re\mathrm{e}\Pi_{\alpha\alpha}(\omega\to 0)=0$, da er dann auf die London'sche Gleichung $\boldsymbol{j}\propto\boldsymbol{A}$ führt, d.h. wir hätten unendliche Leitfähigkeit. Man kann sich jedoch davon überzeugen, daß für wechselwirkende Systeme im normalleitenden Zustand $\Re\mathrm{e}\Pi_{\alpha\alpha}(\omega)=-\frac{n_e e^2}{m}$ gilt, so daß hier keine Konsistenzprobleme entstehen.

Für die weiteren Überlegungen möchte ich mich zusätzlich auf den Fall $\alpha=\beta$ beschränken, d.h. der Strom fließt in Richtung des angelegten Feldes. Dies entspricht dem gängigen experimentellen Aufbau, transversale Leitfähigkeiten sind i.a. nur in Verbindung mit dem Hall-Effekt von Interesse. Im Folgenden werden daher alle Indizes und Abhängigkeiten außer ω weggelassen.

Eine noch offene Frage ist, ob der erhaltene Ausdruck für $\sigma(\omega)$ auch für $\omega\to 0$, d.h. für die Gleichstromleitfähigkeit, vernünftig ist. Anders ausgedrückt: Existiert

$$\lim_{\omega\to 0}\Re\mathrm{e}\sigma(\omega)=-\lim_{\omega\to 0}\frac{\Im\mathrm{m}\Pi(\omega)}{\omega}$$

überhaupt? Um diese Frage zu klären, schreiben wir

$$\begin{aligned}-\Im\mathrm{m}\Pi(\omega) &= \pi\sum_{nm}\frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}}|\langle n|j|m\rangle|^2\left(1-\mathrm{e}^{-\beta(E_m-E_n)}\right)\delta(\omega+E_n-E_m)\\ &\overset{\delta\text{-Fkt.}}{=} \pi(1-\mathrm{e}^{-\beta\omega})\sum_{nm}\frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}}|\langle n|j|m\rangle|^2\delta(\omega+E_n-E_m)\ .\end{aligned}$$

Im letzten Ausdruck ist nun der Grenzwert einfach durchzuführen, denn

$$\lim_{\omega\to 0}\frac{1-\mathrm{e}^{-\beta\omega}}{\omega}=\beta\ ,$$

also

$$\sigma_0=\lim_{\omega\to 0}\Re\mathrm{e}\sigma(\omega)=\pi\beta\sum_{nm}\frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}}|\langle n|j|m\rangle|^2\delta(E_n-E_m) \tag{7.7}$$

Bleibt zuletzt noch ein Ausdruck für den Stromoperator bei $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{0}$

$$\boldsymbol{j}=\int d^3\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\overset{(7.3)}{=}-\frac{e}{m}\sum_i\boldsymbol{p}_i$$

anzugeben. Da wir im Weiteren das äußere Feld als Störung behandeln werden, ist der Stromoperator für das freie System anzugeben, d.h. $\boldsymbol{p}_i=m\boldsymbol{v}_i$. Es ist nun außerdem bequem, als Basis für die Rechnungen eine geeignete Einteilchenbasis zu wählen. Da wir Störstellenstreuung ebenfalls als Störung hinzunehmen wollen, können wir zudem von einem regulären Gitter ausgehen und Einteilchenoperatoren $c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{(\dagger)}$ sowie zugehörige Entwicklungskoeffizienten $\phi_{\boldsymbol{k}}^{(*)}(\boldsymbol{r})$ einführen. Damit erhält man letztlich

$$\boldsymbol{j}=-e\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}\sigma}\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \tag{7.8}$$

als Ausdruck für den Stromoperator[18]. $\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}$ stellt dabei die Gruppengeschwindigkeit der zur Quantenzahl $\boldsymbol{k}$ gehörenden Bandzustände dar und ist durch $\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}=\boldsymbol{\nabla}\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ mit der Dispersion der Bandzustände verknüpft.

Um die Bedeutung des diamagnetischen Terms in Glg. (7.6) zu verdeutlichen, möchte ich zum Abschluß kurz den Fall nichtwechselwirkender Elektronen diskutieren. Unser System wird dann durch einen Hamiltonian der Form

$$H=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger}c_{\boldsymbol{k}\sigma}$$

[18] Bei mehreren Bändern tritt natürlich noch ein Bandindex hinzu.

beschrieben. Wegen $[H, j_\alpha] = 0$ folgt sofort $\Pi(\omega) = 0$ und die Antwort des Systems wird durch den diamagnetischen Term alleine beschrieben. Dieser entspricht jedoch einer unendlichen Leitfähigkeit, wie für ein translationsinvariantes System nichtwechselwirkender Elektronen zu erwarten.

7.2 Störstellen im Festkörper

7.2.1 Allgemeines

Jeder Festkörper enthält Störstellen – Gitterdefekte, Fremdatome etc. – die statistisch verteilt sind und an denen die Elektronen im System streuen. Die statistische Verteilung sorgt dafür, daß die Gittertranslationsinvarianz gebrochen wird und die Elektronen, deren Impuls andernfalls erhalten wäre, durch Stöße Impuls verlieren können. Störstellen sind daher verantwortlich für einen endliche Restwiderstand für $T = 0$.

Andererseits ist die Zahl der Störstellen meist sehr klein und für die meisten Materialien gut kontrollierbar. Diese kleine Zahl $c_I = N_I/N$ bietet sich daher als ein Parameter für eine Störungsentwicklung an. Vorteilhaft ist zudem, daß die Streuung an Störstellen

(i) oft ein Einteilcheneffekt ist (im Gegensatz zur Coulombwechselwirkung) und

(ii) keine interne Dynamik besitzt (im Gegensatz zur Elektron-Phonon-Streuung).

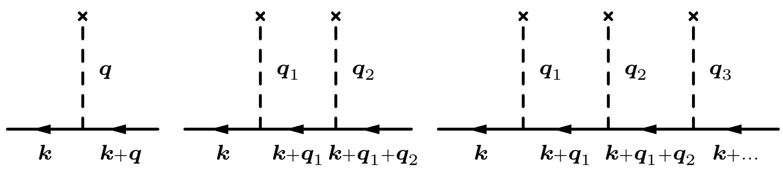
Der statistischen Verteilung der Störstellen trägt man dadurch Rechnung, daß man über deren *räumliche* Position mittelt.

Ist also $\{\boldsymbol{R}_i\}$ eine vorgegebene Verteilung von Störstellen. Die Streuung der Elektronen wird dann beschrieben durch durch einen Term

$$\begin{aligned} H_i &= \sum_i \int d^3r\, V(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_i)\rho(\boldsymbol{r}) & \rho(\boldsymbol{r}) &= \sum_\sigma \Psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_\sigma(\boldsymbol{r}) \\ &= \sum_{\boldsymbol{q}} \rho_I(\boldsymbol{q})V(-\boldsymbol{q})\rho(\boldsymbol{q}) & \rho(\boldsymbol{q}) &= \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}, \quad \rho_I(\boldsymbol{q}) = \sum_i \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_i}\,. \end{aligned}$$

Der Vektor $\boldsymbol{q}$ ist hierbei nicht notwendig aus der ersten Brillouin-Zone!

Bei der Berechnung z.B. der Einteilchen-Greenschen Funktion im Rahmen einer Störungsentwicklung tauchen infolge der Potenzen von H_I Beiträge der Form



auf. Dabei bedeutet jede durchgezogene Linie wie üblich einen Bandelektronenpropagator[19] $G^{(0)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$, während die gestrichelte senkrechte Linie mit dem Kreuz einen Streuprozess $V(-\boldsymbol{q})\,\rho_I(\boldsymbol{q})$ darstellt. Die analytische Auswertung erfolgt gemäß der in Kapitel 4 angegebenen Regeln. Zusätzlich tritt allerdings noch ein Faktor $(-1)^{G-1}$ hinzu, wobei G die Gesamtzahl der Bandpropagatoren im Diagramm ist. Damit liefert z.B. das erste Diagramm einen Beitrag

$$(-1)^{2-1}(-1)^1 G^{(0)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)\rho_I(\boldsymbol{q})V(-\boldsymbol{q})\,G^{(0)}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}(z)$$

und der zweite

$$(-1)^{3-1}(-1)^2 G^{(0)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)\rho_I(\boldsymbol{q})V(-\boldsymbol{q}_1)G^{(0)}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}_1,\sigma}(z)\rho_I(\boldsymbol{q}_2)V(-\boldsymbol{q}_2)G^{(0)}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2\sigma}(z)$$

etc. Man beachte, daß sich die gebrochene Gittertranslationsinvarianz durch verschiedene Impulse in der einlaufenden und auslaufenden Linie manifestiert, d.h. auf dieser Stufe ist

$$G_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}',\sigma}(z) \not\propto \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \quad .$$

Letztlich ist diese volle Störungsentwicklung für feste Positionen der Störstellenatome aber undurchführbar. Eine Vereinfachung ergibt sich, indem man dem statistischen Charakter der Störstellenverteilung dadurch Rechnung trägt, daß man über die Position der Störstellen mittelt. In der Störungsreihe treten nun Produkte

$$\rho_I(\boldsymbol{q}_1)\,\rho_I(\boldsymbol{q}_2)\cdots\rho_I(\boldsymbol{q}_n)$$

auf, die man dann über die Position der $\boldsymbol{R}_i$ zu mitteln hat. Man wird so auf eine Funktion

$$f(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\dots,\boldsymbol{q}_n) = \overline{\rho_I(\boldsymbol{q}_1)\rho_I(\boldsymbol{q}_2)\cdots\rho_I(\boldsymbol{q}_n)}$$

[19] Die (0) bezieht sich auf die Ordnung in der Störstellenstreuung.

geführt, wobei $\overline{\rho_I(\boldsymbol{q}_1)\cdots\rho_I(\boldsymbol{q}_n)}$ die Mittelung über alle Störstellenpositionen beschreibt. Als weitere Vereinfachung wollen wir jetzt noch annehmen, daß die Defekte im Festkörper homogen verteilt sind, also nicht unbedingt auf Gitterplätzen liegen müssen. Damit folgt

$$\overline{\sum_i \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_i}} = N_I \delta_{\boldsymbol{q}=\boldsymbol{0}} \quad .$$

Wie sieht nun unter diesen Voraussetzungen die Funktion $f(\ldots)$ aus? Den Fall $n = 1$ haben wir eben diskutiert. Für $n = 2$ ergibt sich

$$\begin{aligned}\overline{\sum_{ij} \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{R}_i+\boldsymbol{q}_2\cdot\boldsymbol{R}_j)}} &= \overline{\sum_i \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2)\cdot\boldsymbol{R}_i}} + \overline{\sum_{i\neq j} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{R}_i}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}_2\cdot\boldsymbol{R}_j}} \\ &= N_I\delta_{\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2=\boldsymbol{0}} + N_I(N_I-1)\delta_{\boldsymbol{q}_1=\boldsymbol{0}}\delta_{\boldsymbol{q}_2=\boldsymbol{0}} \quad .\end{aligned}$$

Generell findet man [15]

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_n) = \;& N_I\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q}) \\ &+N_I(N_I-1)\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q})\,\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q}) \\ &+N_I(N_I-1)(N_I-2)\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q})\,\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q})\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q}) + \ldots \; .\end{aligned}$$

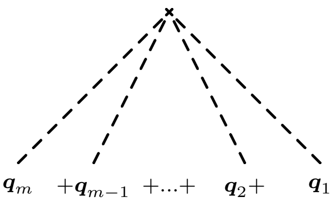
Die verkürzte Schreibweise $\delta(\sum \boldsymbol{q})\delta(\sum \boldsymbol{q})\cdots\delta(\sum \boldsymbol{q})$ bedeutet, daß man die $\boldsymbol{q}_i$ auf alle möglichen Arten auf die δ-Funktionen zu verteilen hat. Abschließend kann man noch ausnutzen, daß – selbst wenn $N_i \ll N$ gilt – immer noch $N_I \gg 1$ angenommen werden kann (10^{23} Teilchen gegenüber 10^{10} Defekten), d.h.

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_n) = \;& N_I\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q}) \\ &+N_I^2\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q})\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q}) \\ &+N_I^3\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q})\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q})\delta(\textstyle\sum \boldsymbol{q}) + \ldots\end{aligned}$$

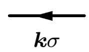
Diese symbolische Schreibweise läßt sich schön mit Hilfe von Diagrammen erfassen. Betrachten wir z.B. den Fall mit drei $\boldsymbol{q}$'s. Das formale Ergebnis lautet

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3) = \;& N_I^3\delta_{\boldsymbol{q}_1=0}\delta_{\boldsymbol{q}_2=0}\delta_{\boldsymbol{q}_3=0} \\ &+N_I^2\left(\delta_{\boldsymbol{q}_1=0}\delta_{\boldsymbol{q}_2+\boldsymbol{q}_3=0} + \delta_{\boldsymbol{q}_2=0}\delta_{\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_3=0} + \delta_{\boldsymbol{q}_3=0}\delta_{\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2=0}\right) + \\ & N_I\delta_{\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2+\boldsymbol{q}_3=0} \quad .\end{aligned}$$

Zur diagrammatischen Auswertung dieses Ausdrucks muß man sich zunächst ein Symbol für den „Streuprozess“ $N_I\delta(\sum \boldsymbol{q})$ definieren. Es macht Sinn, den Prozeß $N_I\delta(\sum \boldsymbol{q})$ durch einen Vertex der Form



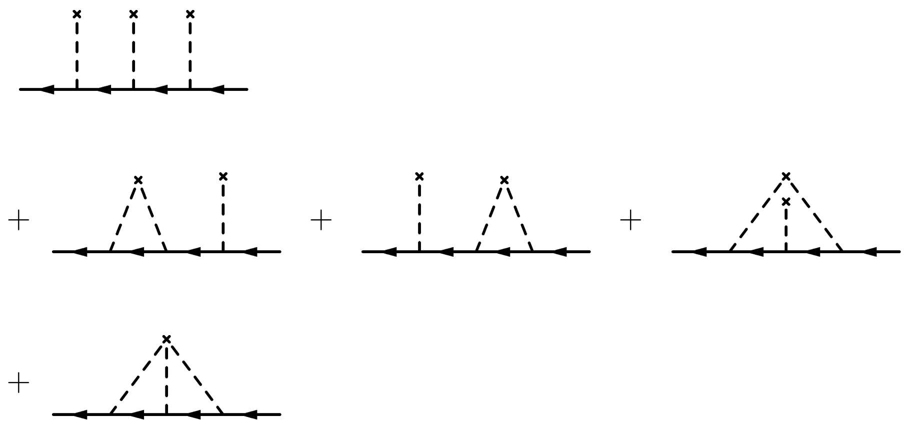
zu repräsentieren. Dabei stellt jede gestrichelte Linie das Streupotential $V(-\boldsymbol{q}_i)$ dar und jedes Kreuz liefert einen Faktor N_I. Mit der üblichen Definition der Greenschen Funktion für die Bandelektronen



$$\hat{=} G_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = \frac{1}{z - \epsilon_{\boldsymbol{k}}}$$

wird $f(\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3)$ also durch folgende Diagramme

$f(\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3) =$

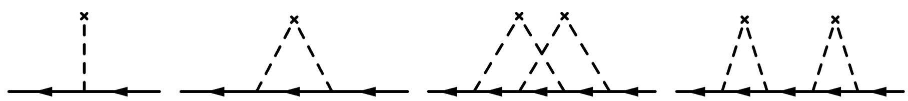


dargestellt. Für alle Linien, die im selben Kreuz enden, gilt Impulserhaltung. Die Mittelung führt also zu einem „Zusammenziehen“ der Streuprozesse, wobei zudem noch eine Art Translationsinvarianz wiederhergestellt wird.

7.2.2 Einteilchenselbstenergie

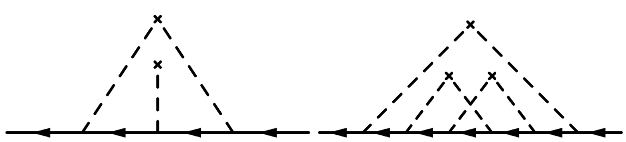
Die Größe $N_I\delta(\sum \boldsymbol{q})$ läßt sich jetzt also interpretieren als Streuprozess eines Teilchens an Störstellen. Der Faktor $\delta(\sum \boldsymbol{q})$ bedeutet dabei, daß der Impuls des Teilchens über den gesamten Streuprozess erhalten bleibt. Diese Impulserhaltung ist natürlich eine Folge der Näherung, über die (statistisch verteilten) Positionen der Störstellen zu mitteln. In einem realen System mit fester Störstellenverteilung ist der Kristallimpuls der Elektronen selbstverständlich keine Erhaltungsgröße mehr. Dennoch ist die hier eingeführte Näherung ausreichend, um die dominierenden Effekte, nämlich Erzeugung einer endlichen mittleren freien Weglänge bzw. einer endlichen Lebensdauer, zu beschreiben.

In der Störungsreihe für die Einteilchen-Greensche Funktion erhält man mit den Definitionen des vorigen Abschnitts Diagramme vom Typ



Während in Diagramm 1 & 2 jeweils nur ein Streuprozess auftritt, repräsentieren die Diagramme 3 & 4 solche mit mehreren. Diese entsprechen z.B. dem Term $N_I^2\delta(\sum \boldsymbol{q})\delta(\sum \boldsymbol{q})$, wobei jeweils zwei Impulse pro δ-Funktion auftreten. Das liefert die Kombinationen $\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{0}$ $\boldsymbol{q}_3 + \boldsymbol{q}_4 = 0$ bzw. $\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_3 = 0$ und $\boldsymbol{q}_2 + \boldsymbol{q}_4 = 0$. Letztere Kombination führt zu Diagramm 3 mit sich kreuzenden Potentiallinien, d.h. wir haben eine Interferenz der beiden Streuereignisse vorliegen. Wie zu Anfang bereits angedeutet, wollen wir davon ausgehen, daß eine – am Gesamtvolumen des Systems gemessen – kleine Störstellenkonzentration vorliegt. Sinnvoll ist in diesem Zusammenhang auch die Annahme, daß die Ausdehnung des Störstellenpotentials sehr viel kleiner ist als der mittlere Abstand der Störstellen. Unter diesen Bedingungen tritt dann ein Prozess vom Typ 3 nur mit vernachlässigbarer Wahrscheinlichkeit auf.

An den vier Diagrammen läßt sich bereits wieder erkennen, daß die Diagramme in zwei Klassen, nämlich reduzible, welche sich durch zerschneiden einer Bandelektronenlinie in zwei Teile zerschneiden lassen (Diagramm 4), und irreduzible (Diagramm 1-3) zerfallen. Außerdem lassen sich selbstverständlich auch solche vom Typ



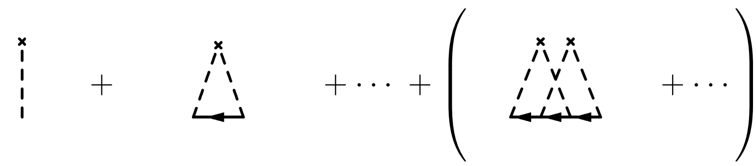
konstruieren, die zu Partitionierungen $\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_3 = \boldsymbol{0}$ und $\boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{0}$ etc. gehören. Offensichtlich lassen sich also zwischen jeweils zwei Impulslinien wieder alle möglichen Diagramme unterbringen, so daß man wie üblich eine Skelettgraphenentwicklung aufbauen kann, d.h. alle Bandlinien werden durch voll renormierte Propagatoren ersetzt, $G^0_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) \rightarrow G_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$, und Diagramme vom obigen Typ weggelassen.

Die reduziblen Diagramme liefern jeweils Produkte ihrer irreduziblen Bestandteile, so daß sich analog zur Coulombwechselwirkung eine Dysongleichung

$$G_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = G^{(0)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) + G^{(0)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)G_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$$

mit einer irreduziblen Selbstenergie

$\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) =$



aufstellen läßt. In höheren Ordnungen treten natürlich auch Interferenzterme (4. Diagramm) auf. Solche Diagramme wollen wir, wie bereits angedeutet, als im Limes $N_I/N \ll 1$ unwichtig weglassen.

Der erste Term der Störungsreihe für die Selbstenergie lautet ausgeschrieben[20]

$$\Sigma^{(1)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = \frac{N_I}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} \delta_{\boldsymbol{q}=\boldsymbol{0}} V(-\boldsymbol{q}) = c_I V(\boldsymbol{0}) \quad .$$

In der niedrigsten Ordnung geht also die Störstellenstreuung einfach über das gemittelte Potential ein, d.h. wir erhalten einfach eine Verschiebung der Energie.

Der Term zweiter Ordung ist schon interessanter:

$$\begin{aligned}
\Sigma^{(2)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = {} & \frac{N_I}{N^2}\sum_{\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_2} \delta_{\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2=\boldsymbol{0}} V(-\boldsymbol{q}_1)\, V(-\boldsymbol{q}_2)\, G_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}_1,\sigma}(z) \\
&= c_I \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} V(-\boldsymbol{q})\, V(\boldsymbol{q})\, G_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}(z) \\
&= c_I \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) V(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}) G_{\boldsymbol{q}\sigma}(z) \quad .
\end{aligned}$$

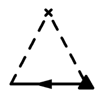
Hier kann und wird bereits ein endlicher Imaginärteil für $\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$ auftreten, d.h. Dämpfung und endliche Lebensdauer für die Einteilchenanregungen im System,

[20] Beachte, daß man für $\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$ in den Vorzeichenregeln $G \rightarrow G - 1$ zu setzen hat.

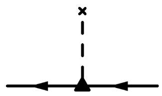
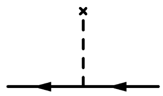
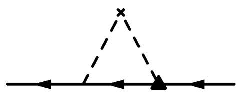
denn mit $\rho_{\boldsymbol{q}}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\Im\mathrm{m}G_{\boldsymbol{q}\sigma}(\omega + i\delta)$ folgt

$$\begin{aligned}\Im\mathrm{m}\Sigma^{(2)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(\omega + i\delta) = & -\pi c_I \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} |V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{q})|^2 \rho_{\boldsymbol{q}}(\omega) \\ \stackrel{V(\boldsymbol{q})\to V}{\approx} & -\pi c_I |V|^2 \mathcal{N}(\omega) \neq 0 \quad .\end{aligned}$$

Bevor man nun anfängt, der Reihe nach alle Terme der obigen Störungsreihe auszurechnen, ist es lohnend, sich die Terme etwas eingehender zu betrachten. Offensichtlich läßt sich die Reihe für $\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$ folgendermaßen abkürzen:

$\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) =$ $+$ 

mit

$\Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z) =$  $=$  $+$ 

Setzt man diese Definition in die verkürzte Schreibweise der Selbstenergiereihe ein, so werden sukzessive alle Diagramme mit nichtkreuzenden Linien generiert. Der analytische Ausdruck für die „Vertexfunktion" lautet

$$\Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z) = V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') + \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{q}) G_{\boldsymbol{q}\sigma}(z) \Gamma_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{k}'}(z) \tag{7.9}$$

und die Selbstenergie

$$\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = c_I V(0) + c_I \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{q}) G_{\boldsymbol{q}\sigma}(z) \Gamma_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{k}}(z) = c_I \Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}}(z) \quad .$$

Somit haben wir eine formal exakte Aufsummation der Selbstenergiebeiträge linear in c_I erhalten!

Man beachte, daß das System $\{\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z), \Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z)\}$ ein nichtlineares Gleichungssystem darstellt, da $\Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z)$ über die Einteilchen-Greensche Funktion selbst wieder von $\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$ abhängt. Die Lösung des Problems vereinfacht sich in zwei Grenzfällen. Zunächst kann man einmal annehmen, daß das Streupotential streng lokal ist, d.h. $V(\boldsymbol{r}) = V_0\delta(\boldsymbol{r})$. In diesem Fall ist $V(\boldsymbol{k}) = V_0$ und (7.9) vereinfacht sich zu

$$\Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z) = V_0 + \frac{V_0}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} G_{\boldsymbol{q}\sigma}(z) \Gamma_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{k}'}(z) \quad .$$

Aus der Struktur dieser Gleichung ist offensichtlich, daß $\Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z)$ gar nicht von $\boldsymbol{k}$ und $\boldsymbol{k}'$ abhängt, d.h.

$$\Gamma(z) = V_0 \left(1 + \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} G_{\boldsymbol{q}\sigma}(z) \Gamma(z) \right)$$

oder

$$\Gamma(z) = \frac{V_0}{1 - V_0 G_\sigma(z)} \ , \quad G_\sigma(z) = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} G_{\boldsymbol{q}\sigma}(z) \quad .$$

Man sieht daß die Annahme einer lokalen Potentialstreuung zusammen mit der eingeführten Mittelung zu einer rein lokalen Einteilchenselbstenergie

$$\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = c_I \Gamma(z) = c_I \frac{V_0}{1 - V_0 G_\sigma(z)}$$

und zu einem lokalen Selbstkonsistenzproblem führt. Diese Näherung für die Behandlung von Störstellenstreuung wird in der Literatur auch unter dem Namen **C**oherent **P**otential **A**pproximation (CPA) häufig benutzt.

Eine zumindest formale Lösung des Problems mit nichtlokaler Streuung läßt sich erreichen, wenn man auf die Selbstkonsistenz bezüglich $\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$ verzichtet, d.h. $G_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) \to G^{(0)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$ setzt und die Dispersion freier Teilchen $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = k^2/(2m) - \mu$ ansetzt. Die Gleichung für das so genäherte $\Gamma^{(0)}_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z)$ lautet dann

$$\Gamma^{(0)}_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z) = V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') + \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{q}) \Gamma^{(0)}_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{k}'}(z)}{z - \epsilon_{\boldsymbol{q}}} \quad .$$

Mit Hilfe der Hilfsfunktion

$$\Pi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}; z) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \Gamma^{(0)}_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{k}}(z)}{z - \epsilon_{\boldsymbol{q}}} \quad .$$

läßt sich die Gleichung für die Vertexfunktion schreiben als

$$\Gamma^{(0)}_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z) = \int d^3r \, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} V(\boldsymbol{r}) \left[\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} + \Pi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}'; z) \right] \quad ,$$

womit der Ausdruck für die Selbstenergie

$$\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = c_I \left[V(0) + \int d^3r \, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} V(r) \Pi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}; z) \right]$$

lautet. Für unsere Hilfsgröße kann man nun folgende Differentialgleichung ableiten:

$$\begin{aligned}\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2-\mu-z\right]\Pi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k};z) &= \int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{\epsilon_{\boldsymbol{q}}-z}{z-\epsilon_{\boldsymbol{q}}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\Gamma^{(0)}_{\boldsymbol{qk}}(z)\\ &= -\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\Gamma^{(0)}_{\boldsymbol{qk}}(z)\\ &= -V(r)\left[\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+\Pi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k};z)\right]\end{aligned}$$

oder

$$\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(r)-\mu-z\right]\Pi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k};z)=-V(r)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\quad.$$

Nehmen wir nun an, wir kennen die Lösungen des Eigenwertproblems

$$\left[-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(r)-\mu\right]\Psi_\lambda=\xi_\lambda\Psi_\lambda\quad.$$

Dann gilt offensichtlich

$$\Pi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k};z)=\int d^3r'\,V(\boldsymbol{r}')\,\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\sum_\lambda\frac{\Psi^*_\lambda(\boldsymbol{r}')\Psi_\lambda(\boldsymbol{r})}{z-\xi_\lambda}\stackrel{!}{=}\sum_\lambda\frac{T^*_{\lambda\boldsymbol{k}}\Psi_\lambda(\boldsymbol{r})}{z-\xi_\lambda}\quad.$$

Im letzten Schritt wurde das durch den „Hamiltomian“ $H=-\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(r)-\mu$ beschrieben System als Streuproblem für die Elektronen mit der Wellenfunktion $\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\propto\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ identifiziert und durch Angabe der Streumatrix

$$T_{\boldsymbol{k}\lambda}=\int d^3r\,\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})V(r)\Psi_\lambda(\boldsymbol{r})$$

gelöst. Für die gesuchte Einteilchenselbstenergie findet man dann

$$\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)=c_I\left[V(0)+\sum_\lambda\frac{|T_{\boldsymbol{k}\lambda}|^2}{z-\xi_\lambda}\right]$$

in linearer Ordung in c_I.

Mit dieser Darstellung der Selbstenergie über die Streumatrix des durch $V(r)$ definierten Streuproblems lassen sich nun eine Reihe interessanter Beziehungen ableiten. Unter anderem kann man damit eine wichtige physikalische Interpretation des Imaginärteils der Selbstenergie motivieren. Es ist nämlich

$$-\Im\mathrm{m}\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(\omega+i\delta)=\pi c_I\sum_\lambda|T_{\boldsymbol{k}\lambda}|^2\delta(\omega-\xi_\lambda)\quad.$$

Setzt man nun noch $\omega = \epsilon_{\boldsymbol{k}}$, so kann man das optische Theorem

$$-\Im\mathrm{m} T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}} = \pi \sum_{\lambda} |T_{\boldsymbol{k}\lambda}|^2 \delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \xi_\lambda)$$

ausnutzen und schreiben

$$-\Im\mathrm{m}\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + i\delta) = -c_I \Im\mathrm{m} T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}} \quad .$$

Andererseits gilt für den totalen Streuquerschnitt des Potential $V(r)$ die Beziehung $\sigma_{\boldsymbol{k}} = -\frac{1}{v_{\boldsymbol{k}}} \Im\mathrm{m} T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}}$, so daß

$$-\Im\mathrm{m}\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + i\delta) = c_I v_{\boldsymbol{k}} \sigma_{\boldsymbol{k}}$$

gilt. Die Größe $c_I v_{\boldsymbol{k}}$ ist nun aber genau die Zahl der Störstellen pro Zeit und Flächeneinheit, die die Elektronen mit Impuls $\boldsymbol{k}$ „sehen“. Multipliziert mit dem Streuquerschnitt stellt die rechte Seite also die inverse Lebensdauer des durch den Impuls $\boldsymbol{k}$ charakterisierten Zustandes unter Einwirkung der Streupotentiale dar, d.h.

$$-\Im\mathrm{m}\Sigma_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + i\delta) = \frac{1}{\tau_{\boldsymbol{k}}} \ , \quad \tau_{\boldsymbol{k}} \sim \frac{1}{c_I} \to \infty \ \ (c_I \to 0) \quad .$$

Wir haben hier also ein sehr schönes Beispiel dafür, daß der Imaginärteil der Einteilchenselbstenergie direkt mit der Lebensdauer der Einteilchenanregungen im System verknüpft ist.

7.2.3 Berechnung der Leitfähigkeit

Unsere Aufgabe besteht nun darin, mit den im vorangegangenen Teil abgeleiteten Techniken die Größe

$$\Pi_{\alpha\alpha}(\omega + i\delta) = -i \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt\, \Theta(t) \mathrm{e}^{-i(\omega+i\delta)t} \langle [j_\alpha(t), j_\alpha(0)] \rangle$$

für das System mit Störstellen zu berechnen. Zweckmäßigerweise arbeiten wir dabei im Matusbararaum, d.h. wir bestimmen zunächst

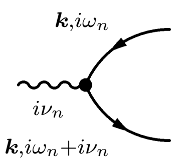
$$\Pi_{\alpha\alpha}(i\nu_n) = -\int\limits_0^{\beta} d\tau\, \mathrm{e}^{-i\nu_n\tau} \langle \mathcal{T}_\tau j_\alpha(\tau) j_\alpha(0) \rangle \ , \quad \nu_n = \frac{2\pi n}{\beta}$$

und führen zum Schluß die analytische Fortsetzung $i\nu_n \to \omega + i\delta$ aus.

Um die folgenden Rechnungen einfach zu halten, nehmen wir jetzt außerdem Isotropie bezüglich der Raumrichtungen an, d.h.

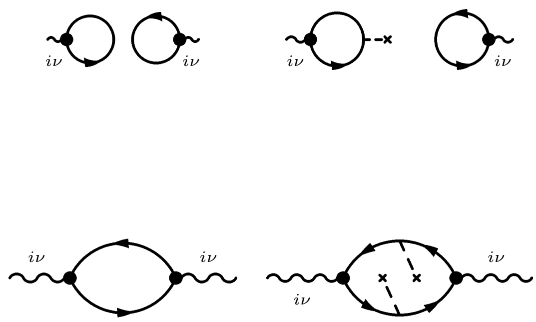
$$\Pi(i\nu_n) = \frac{1}{3}\sum_\alpha \Pi_{\alpha\alpha}(i\nu_n) = -\frac{1}{3}\int\limits_0^\beta d\tau\, \mathrm{e}^{-i\nu_n\tau}\langle \mathcal{T}_\tau \boldsymbol{j}(\tau)\cdot\boldsymbol{j}(0)\rangle \quad .$$

Für die diagrammatische Störungsentwicklung benötigen wir jetzt noch ein Symbol für die Wirkung des Stromoperators. Hierbei legen wir die Darstellung (7.8) zugrunde, d.h. die Korrelationsfunktion $\Pi(z)$ entspricht im wesentlichen der aus Kapitel 5 bekannten Dichte-Dichteresponsefunktion. Entsprechend findet man



$$, \quad i\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$$

Ohne Mittelung über die Positionen der Störstellen hätte man – da es sich bei H_I um einen reinen Einteilchenterm handelt – folgende Typen von Graphen:



(7.10)

Betrachten wir zunächst den ersten Graphen. Seine analytischer Ausdruck ist

$$\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}G^{(0)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(i\omega_n)\mathrm{e}^{i\omega_n\delta}\right)\cdot\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}'}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_m}\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}'}G^{(0)}_{\boldsymbol{k}'\sigma}(i\omega_m)\mathrm{e}^{i\omega_m\delta}\right) \quad .$$

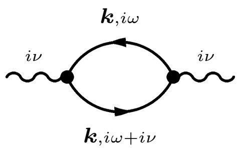
Die Ausdrücke in der Klammer sind nach ausführen der Frequenzsummen

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}\langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}\sigma}\rangle \overset{(7.8)}{=} \langle \boldsymbol{j}\rangle = 0 \quad .$$

Gleiches gilt auch, wie man leicht nachrechnet, für jeden Term im zweiten Graphen sowie auch für alle höheren Ordnungen in der Störstellenstreuung in diesem Typ von Graphen. Physikalischer Hintergrund für das identische Verschwinden dieser Klasse von Graphen ist, daß sie alle proportional zu $\langle \boldsymbol{j} \rangle$ sind und, da ohne äußeres Feld kein Strom fließen soll, verschwinden müssen.

Zur Auswertung bleiben also Graphen vom Typ der Blasen. Hier macht es wieder Sinn, vor der weiteren Rechnung über die Störstellenpositionen zu mitteln. Dabei werden zum einen im oberen und unteren Teil der Blase unabhängig die im vorigen Abschnitt behandelten Selbstenergiegraphen generiert, so daß man in diesem Sinne die freien Greenschen Funktionen durch die renormierten ersetzen kann.

Das einfachste Diagramm ist dann die Blase



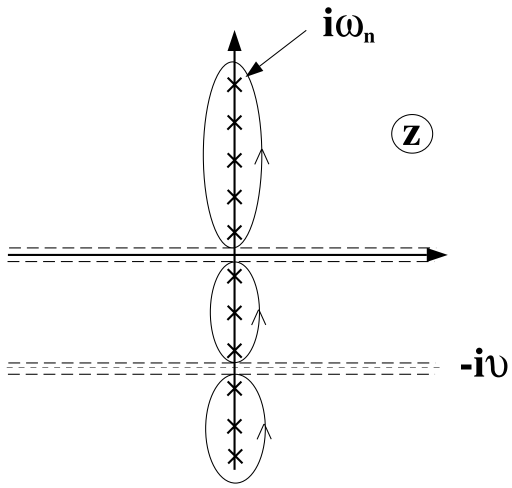
mit dem analytischen Ausdruck[21]

$$\Pi^{(0)}(i\nu) = \frac{2e^2}{3}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}|v_{\boldsymbol{k}}|^2 G_{\boldsymbol{k}\sigma}(i\omega_n + i\nu)G_{\boldsymbol{k}\sigma}(i\omega_n) \quad . \tag{7.11}$$

Die Frequenzsumme in (7.11) überführen wir analog zur Poissonscher Summenformel mittels der in der Abbildung gezeigten Deformation der Integrationscontour in ein Spektralintegral, mit dem Ergebnis

$$\begin{aligned}
\Pi^{(0)}(i\nu) &= -\frac{2e^2}{3}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}|v_{\boldsymbol{k}}|^2 \int_{\mathcal{C}} \frac{dz}{2\pi i} f(z) G_{\boldsymbol{k}\sigma}(z+i\nu)G_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) \quad , \quad f(z) = \frac{1}{1+\mathrm{e}^{\beta z}} \\
&= -\frac{2e^2}{3}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}|v_{\boldsymbol{k}}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi i} f(\epsilon) \Big[G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon+i\nu)G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon+i\delta) \\
&\qquad - G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon+i\nu)G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon-i\delta) \\
&\qquad + G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon-i\nu)G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon+i\delta) \\
&\qquad - G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon-i\nu)G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon-i\delta) \Big] \; .
\end{aligned}$$

[21] Der Faktor 2 stammt von der Spinsumme.



Nach analytischer Fortsetzung $i\nu \to \omega + i\delta$ und Zusammenfassung der komplex konjugierten Partner folgt mit der Definition der Spektralfunktion $A_{\boldsymbol{k}}(\epsilon) = -\frac{1}{\pi}\Im\mathrm{m}G_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta)$ für den Imaginärteil der Blase

$$\Im\mathrm{m}\Pi^{(0)}(\omega+i\delta) = -\frac{2e^2}{3}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}|v_{\boldsymbol{k}}|^2\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\,[f(\epsilon) - f(\epsilon+\omega)]\,A_{\boldsymbol{k}}(\epsilon+\omega)A_{\boldsymbol{k}}(\epsilon) \quad (7.12)$$

und schließlich für die Leitfähigkeit

$$\sigma_0^{(0)} = -\lim_{\omega\to 0}\frac{\Im\mathrm{m}\Pi^{(0)}(\omega+i\delta)}{\omega} = \frac{2\pi e^2}{3}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}|v_{\boldsymbol{k}}|^2\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\left[-\frac{\partial f}{\partial\epsilon}\right]A_{\boldsymbol{k}}(\epsilon)^2 \quad . \quad (7.13)$$

Für tiefe Temperaturen ist $-\frac{\partial f}{\partial\epsilon} \approx \delta(\epsilon)$, so daß mit den Abkürzungen $\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\Im\mathrm{m}\Sigma_{\boldsymbol{k}}(i\delta)$ und $\xi_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \Re\mathrm{e}\Sigma_{\boldsymbol{k}}(i\delta) - \varepsilon_F$

$$\sigma_0^{(0)} = \frac{2\pi e^2}{3}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{|v_{\boldsymbol{k}}|^2\Delta_{\boldsymbol{k}}^2}{\pi^2\left(\xi_{\boldsymbol{k}}^2+\Delta_{\boldsymbol{k}}^2\right)^2} \quad (7.14)$$

folgt. ε_F bezeichnet hierbei die Fermienergie. Wegen $\lim\limits_{c_I\to 0}\Delta_{\boldsymbol{k}} = 0$ ist bei der Interpretation des Integranden Vorsicht angebracht. Unter Beachtung von

$$\int dx\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}^2}{\left(x^2+\Delta_{\boldsymbol{k}}^2\right)^2} = \frac{\pi}{2\Delta_{\boldsymbol{k}}} \quad \Rightarrow \lim_{c_I\to 0}\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}^2}{\left(\xi_{\boldsymbol{k}}^2+\Delta_{\boldsymbol{k}}^2\right)^2} = \frac{\pi}{2\Delta_{\boldsymbol{k}}}\delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon_F)$$

findet sich schließlich

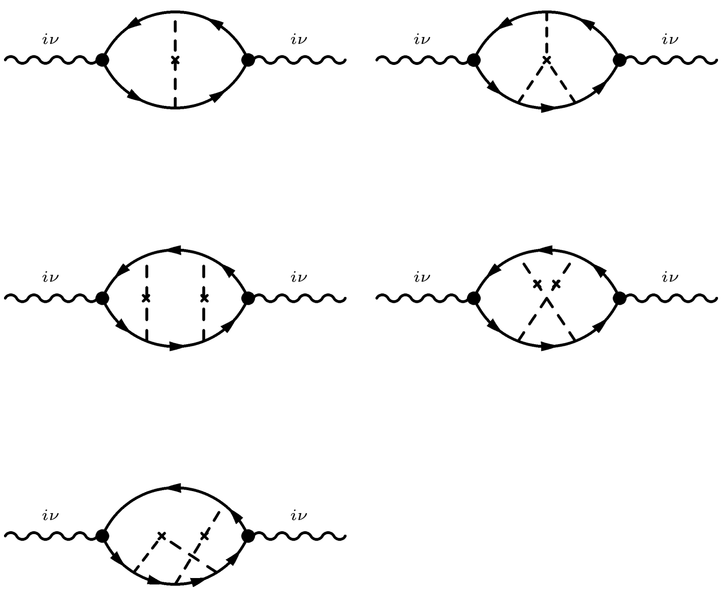
$$\sigma_0^{(0)} = \frac{e^2}{3}|v_{\boldsymbol{k}_F}|^2\tau_{\boldsymbol{k}_F}\mathcal{N}(\varepsilon_F) \quad . \quad (7.15)$$

Im letzten Schritt wurde noch die Beziehung $\Delta_{\boldsymbol{k}} = \tau_{\boldsymbol{k}}^{-1}$ aus dem letzten Kapitel benutzt. Dieses Ergebnis sieht schon recht vertrauenerweckend aus, ist doch $\sigma_0 \sim \tau$, wie bereits aus der Drudetheorie bekannt. Man kann die Analogie nun noch weiter treiben. Für freie Elektronen ist $\mathcal{N}(\varepsilon_F) = 3n_e/(2\varepsilon_F)$. Mit $\varepsilon_F = mv_{\boldsymbol{k}_F}^2/2$ schreibt sich (7.15) endlich als

$$\sigma_0^{(0)} = \frac{n_e e^2}{m}\tau_{\boldsymbol{k}_F} \quad , \tag{7.16}$$

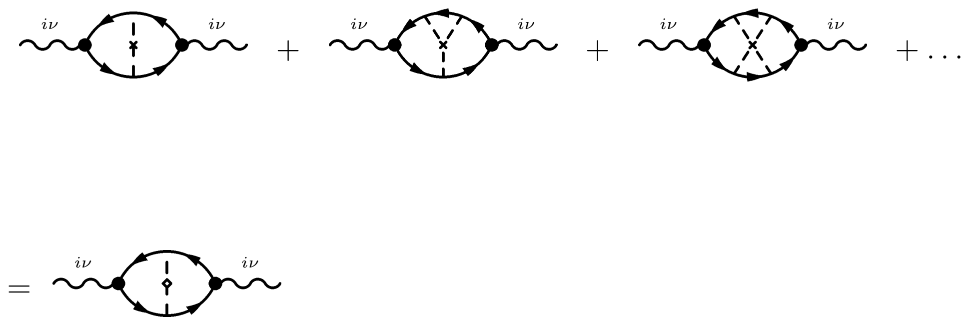
was genau das Ergebnis der Drudetheorie ist. Als Relaxationszeit tritt in dieser Näherung die Lebensdauer der Einteilchenanregungen im System auf. Die Frage ist, inwieweit höhere Ordnungen in der Störungstheorie dieses physikalisch an sich sehr ansprechende Ergebnis ändern können.

Das Ergebnis (7.16) ist wegen des Faktors τ offensichtlich von der Ordnung c_I^{-1}. Zu untersuchen ist also, ob noch weitere Klassen von Diagrammen in derselben Ordnung existieren. Die Mittelung über die Störstellenpositionen erzeugt aus Graphen wie dem vierten in (7.10) Diagramme vom Typ



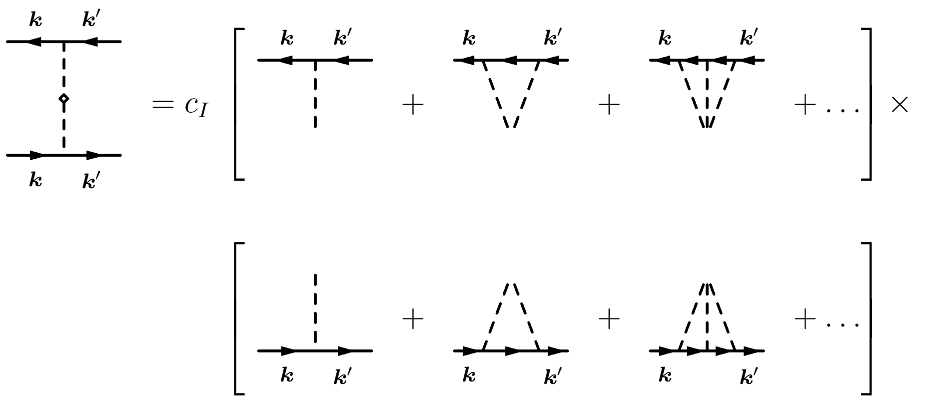
Das letzte Diagramm sieht schon einigermaßen häßlich aus. Allerdings wird es sicherlich nicht in führender Ordnung in c_I beitragen, so daß wir im folgenden Diagramme dieses Typs vernachlässigen wollen.

Die einfachsten Strukturen weisen die beiden obersten Diagramme auf. Betrachten wir also zunächst das folgende System:



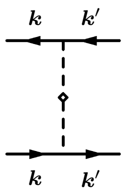
(7.17)

Die an den Stromvertizes vorliegende Impulserhaltung bedeutet zusammen mit der Impulserhaltung über *alle* auftretenden Potentialstreulinien, daß der Impulsübertrag über die Streuungen in der oberen Hälfte eines der Diagramme exakt der umgekehrte sein muß wie in der unteren Hälfte. Die zwischen der ersten und letzten Streulinie liegenden Impulse sind dabei für die obere und untere Hälfte jeweils getrennt frei summierbar. Für die Raute, welche alle diese Streuprozesse symbolisch zusammenfaßt, heißt das, daß die Prozesse in der oberen und unteren Diagrammhälfte unabhängig aufsummiert werden können:



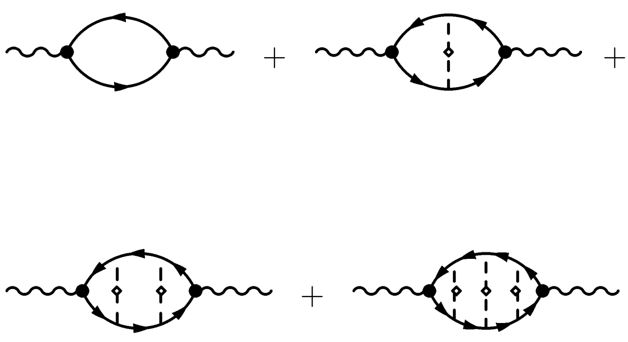
(7.18)

Erinnern wir uns jetzt einmal, wie die Störungsreihe für die Einteilchenselbstenergie im vorigen Abschnitt aussah (s. S. 141): Sie ließ sich durch eine Vertexfunktion $\Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z)$ ausdrücken, die formal dieselbe diagrammatische Struktur hatte, wie die einzelnen Faktoren in (7.18). Wir können daher sofort anschreiben

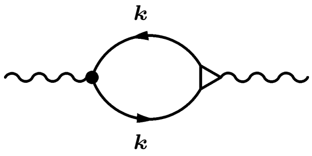


$$= c_I \Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(i\omega_n + i\nu)\Gamma_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}(i\omega_n) := W_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(i\omega_n + i\nu, i\omega_n) \quad . \tag{7.19}$$

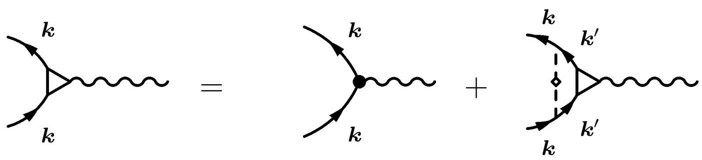
Da $\Gamma_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z)$ selbst keinen weiteren Faktor c_I trägt, ist dieser effektive Streuprozess insgesamt wieder proportional zu c_I. Die Frage ist nun, ob dieser Term und eventuell noch solche höherer Ordnung im Limes $c_I \to 0$ überhaupt eine Rolle spielen. Dazu muß man berücksichtigen, daß in der Größe $\Pi(i\nu)$ auch noch Faktoren $G_{\boldsymbol{k}\sigma}(z)$ auftreten, deren Selbstenergien jede ein explizites c_I aufweisen. Wie wir bei der Berechnung der einfachen Blase gesehen haben, tragen diese am Ende Faktoren c_I^{-1} bei, so daß die endgültige Ordnung der Diagramme von vornherein nicht feststeht. Wie wir gleich sehen werden, sind die soeben diskutierten und Beiträge vom Leitertyp



von derselben Größenordnung c_I^{-1}. Diese „Leitergraphen“ lassen sich aufsummieren zu

$\Pi(i\nu) =$ 

(7.20)



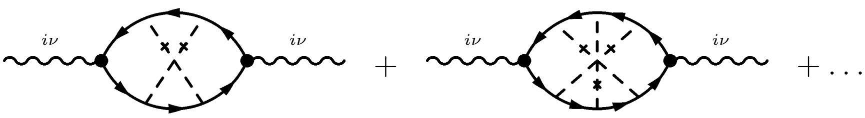
bzw. (Faktor 2 kommt von der Spinsumme)

$$\Pi(i\nu) = \frac{2e^2}{3N\beta} \sum_{\boldsymbol{k}\beta} G_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n + i\nu) G_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n) \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(i\omega_n + i\nu, i\omega_n) \tag{7.21}$$

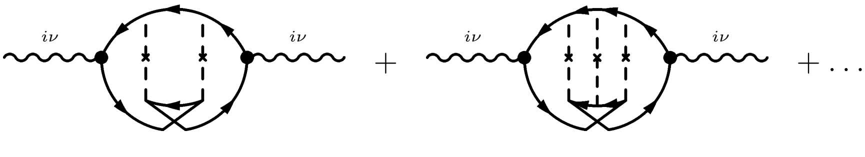
mit der Vertexfunktion

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(z, z') = \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} + \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{q}} W_{\boldsymbol{kq}}(z, z') G_{\boldsymbol{q}}(z) G_{\boldsymbol{q}}(z') \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{q}}(z, z') \quad . \tag{7.22}$$

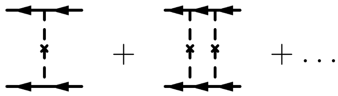
Dieses Gleichungssystem ist schon relativ komplex, beinhaltet aber selbstverständlich nicht alles Beiträge zur Störungsreihe. Neben solchen, die von höherer Ordnung in c_I sind, treten auch noch Prozesse vom Typ



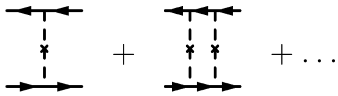
auf (sog. maximal kreuzende Graphen). Im ersten Moment würde man denken, daß sie ebenfalls in höherer Ordnung in c_I sind. Man kann die Diagramme aber auch in der folgenden Weise schreiben:



In diesen Diagrammen hat man dann eine „Teilchen–Teilchen–Leiter“ („Cooperon“)



im Gegensatz zu den „Teilchen–Loch–Leitern“ („Diffusion“)



der bislang aufsummierten Diagramme. Der wesentliche Unterschied bei den Teilchen–Teilchen–Leitern ist, daß über die Potentiallinien nicht $\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$, sondern aufgrund der formal durchgeführten Teilchen–Loch–Transformation (d.h. in den Fourierkomponenten der unteren Bandlinien muß $\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \to \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ gesetzt werden) $\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}'$ auftritt. Dieser Unterschied sorgt nun dafür, daß die Beiträge dieser Diagramme in Dimensionen $d \geq 3$ vernachlässigt werden können, obwohl sie offensichtlich von derselben Größenordnung in c_I sind. Genauer gesagt hat der entsprechende Beitrag einen zusätzlichen Vorfaktor T^{α} mit $\alpha > 0$. Interessant werden sie allerdings in $d \leq 2$ für $T \to 0$: Hier sorgen sie für einen negativen Beitrag zur Leitfähigkeit $\sim \ln(T)$ $(d = 2)$ bzw. $\sim T^{-\alpha}$ mit $\alpha > 0$ $(d = 1)$. Die Leitfähigkeit nimmt also für tiefe Temperaturen ab! Der physikalische Hintergrund dieser Abnahme ist, daß die Teilchen–Teilchen–Leitern eng verknüpft sind mit der Wiederkehrwahrscheinlichkeit eines Elektrons an seinen Ausgangspunkt. Ist diese groß, so entspricht das einer Lokalisierung des Teilchens, d.h. die Leitfähigkeit nimmt ab (das ist der Hintergrund der sog. schwachen Lokalisierung).

Diese qualitative Diskussion soll genügen, um zu zeigen, daß man bei der „Vernachlässigung per Augenmaß“ unter Umständen wesentliche bzw. physikalisch interessante Beiträge weglassen kann. Im Zweifelsfalle muß man eventuell die Rechnung mit einem erweiterten Satz von Diagrammen wiederholen.

Kehren wir nach diesem Exkurs zur Berechnung der Leitfähigkeit in der einfachen Leiternäherung zurück. Zunächst einmal ist zu bemerken, daß die Beziehung (7.22) unter der Annahme einer lokalen Streuung wegen $W_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(z, z') \to c_I \Gamma(z)\Gamma(z')$ (siehe S. 143) und der unterschiedlichen Parität von $\epsilon_{\boldsymbol{q}}$ und $\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{q}}$ in (7.22) alle Beiträge außer dem nackten Vertex verschwinden. In diesem Fall (s-Wellenstreuung) ist also das Ergebnis der nackten Blase (7.15) korrekt bis in $\mathcal{O}(c_I^{-1})$.

Kommen wir nun zu ausgedehnten Streupotentialen. Es ist sinnvoll, zur Abkürzung eine Hilfsgröße

$$P(z,z') = \frac{2e^2}{3N}\sum_{\boldsymbol{k}} G_{\boldsymbol{k}}(z)G_{\boldsymbol{k}}(z')\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(z,z') = P(z',z)$$

einzuführen. Die gesuchte Korrelationsfunktion schreibt sich dann

$$\Pi(i\nu) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} P(i\omega_n + i\nu, i\omega_n) \quad .$$

Die Frequenzsumme wandeln wir in der üblichen Weise in ein Spektralintegral um, wobei die Konturen analog zum Bild auf Seite 148 gewählt werden. Das Ergebnis ist

$$\Pi(i\nu) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon}{2\pi}f(\epsilon)\Bigg[\; P(\epsilon+i\delta,\epsilon+i\nu) - P(\epsilon-i\delta,\epsilon+i\nu) + P(\epsilon-i\nu,\epsilon+i\delta) - P(\epsilon-i\nu,\epsilon-i\delta)\Bigg] \quad .$$

An dieser Stelle kann man jetzt die analytische Fortsetzung $i\nu \to \omega + i\delta$ ausführen und nach einer Transformation der Integrationsgrenzen in den letzten beiden Termen erhält man

$$\Pi(i\nu) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon}{2\pi}\Bigg\{\; f(\epsilon)\left[P(\epsilon+i\delta,\epsilon+\omega+i\delta) - P(\epsilon-i\delta,\epsilon+\omega+i\delta)\right] + f(\epsilon+\omega)\left[P(\epsilon-i\delta,\epsilon+\omega+i\delta) - P(\epsilon-i\delta,\epsilon+\omega-i\delta)\right]\Bigg\} \quad .$$

Aus der Struktur der Gleichung (7.22) kann man ablesen, daß der erste und der vierte Term komplex konjugierte Partner sind, d.h.

$$\begin{aligned} & f(\epsilon)P(\epsilon+i\delta,\epsilon+\omega+i\delta) - f(\epsilon+\omega)P(\epsilon-i\delta,\epsilon+\omega-i\delta) \\ &= \left[f(\epsilon) - f(\epsilon+\omega)\right]\Re\mathrm{e}P(\epsilon+i\delta,\epsilon+\omega+i\delta) + \\ &\quad i\left[f(\epsilon)+f(\epsilon+\omega)\right]\Im\mathrm{m}P(\epsilon+i\delta,\epsilon+\omega+i\delta) \quad . \end{aligned}$$

Damit gilt für den in der Leitfähigkeit benötigten Imaginärteil der Strom-Strom-Korrelationsfunktion

$$\Im\mathrm{m}\Pi(\omega+i\delta) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi}\left[f(\epsilon)-f(\epsilon+\omega)\right]\Bigg\{ \Re\mathrm{e}P(\epsilon+i\delta,\epsilon+\omega+i\delta) + \Im\mathrm{m}\frac{1}{i}P(\epsilon-i\delta,\epsilon+\omega+i\delta)\Bigg\} \quad ,$$

und schließlich

$$\sigma_0 = -\lim_{\omega\to 0}\frac{\Im\mathrm{m}\Pi(\omega+i\delta)}{\omega} = -\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon}{2\pi}\left[-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial\epsilon}\right]\Bigg\{ \Re\mathrm{e}P(\epsilon+i\delta,\epsilon+i\delta) + \Im\mathrm{m}\frac{1}{i}P(\epsilon-i\delta,\epsilon+i\delta)\Bigg\} \quad .$$

Als letztes stellen wir noch fest, daß

$$P(\epsilon-i\delta,\epsilon+i\delta) = P(\epsilon+i\delta,\epsilon-i\delta) = \left(P(\epsilon-i\delta,\epsilon+i\delta)\right)^{*} \in \mathbb{R}$$

so daß

$$\sigma_0 = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon}{2\pi}\left[-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial\epsilon}\right]\left\{P(\epsilon+i\delta,\epsilon-i\delta) - \Re\mathrm{e}P(\epsilon+i\delta,\epsilon+i\delta)\right\} \quad . \tag{7.23}$$

Kümmern wir uns zunächst um den Term $P(\epsilon+i\delta,\epsilon+i\delta)$. Die wichtigen, im Grenzfall c_I dominierenden singulären Beiträge kommen von den Faktoren (zu den Abkürzungen siehe Seite 148)

$$\begin{aligned} G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon+i\delta)^2 &= \frac{1}{\left(\xi_{\boldsymbol{k}}+i\Delta_{\boldsymbol{k}}\right)^{-2}} \\ &= \frac{1}{\xi_{\boldsymbol{k}}^2+\Delta_{\boldsymbol{k}}^2} - 2\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}^2}{\left(\xi_{\boldsymbol{k}}^2+\Delta_{\boldsymbol{k}}^2\right)^2} - 2i\frac{\xi_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}}{\left(\xi_{\boldsymbol{k}}^2+\Delta_{\boldsymbol{k}}^2\right)^2} \,. \end{aligned}$$

Der erste Term führt im Limes $c_I \to 0$ auf $\pi A_{\boldsymbol{k}}(\omega)/\Delta_{\boldsymbol{k}}$, während der zweite und der dritte in Analogie zur Diskussion auf Seite 148 jeweils einen Term $\pi A_{\boldsymbol{k}}(\omega)/(2\Delta_{\boldsymbol{k}})$ beisteuern. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \lim_{c_I\to 0} G_{\boldsymbol{k}\sigma}(\epsilon+i\delta)^2 &= \lim_{c_I\to 0}\left[\frac{\pi}{\Delta_{\boldsymbol{k}}}\delta(\xi_{\boldsymbol{k}}) - \frac{\pi}{\Delta_{\boldsymbol{k}}}\delta(\xi_{\boldsymbol{k}}) - i\frac{\pi}{\Delta_{\boldsymbol{k}}^2}\xi_{\boldsymbol{k}}\delta(\xi_{\boldsymbol{k}})\right] \\ &= -\lim_{c_I\to 0}\left[\frac{\pi}{\Delta_{\boldsymbol{k}}^2}\xi_{\boldsymbol{k}}\delta(\xi_{\boldsymbol{k}})\right] \,. \end{aligned}$$

Der Faktor $\Delta_{\boldsymbol{k}}^{-2}$ im Ergebnis würde bedeuten, daß der Beitrag von der Ordnung c_I^{-2} wäre. Wegen $x\delta(x) = 0$ verschwindet dieser Anteil jedoch und der Gesamtbeitrag von $P(\epsilon + i\delta, \epsilon + i\delta)$ ist höchstens von der Ordnung c_I^0. Da die führende Ordnung – die Blase – jedoch c_I^{-1} war, kann man diesen Term im Limes $c_I \to 0$ vernachlässigen. Eine genauere Analyse der höheren Ordnungen dieses Terms kann man mit Hilfe der *Ward–Identitäten* durchführen, die wir allgemein aus Kapitel 5.8 kennen (für die Anwendung im vorliegenden Zusammenhang siehe z.B. Kapitel 8.1.2 von [21]). Es gilt nämlich

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta, \epsilon + i\delta) = \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} + \nabla_{\boldsymbol{k}}\Sigma_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta) \quad .$$

Der zweite Term ist offensichtlich $\mathcal{O}(c_I)$, so daß für $c_I \to 0$ in der Tat $\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta, \epsilon + i\delta) \approx \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}$, und daher nach der obigen Diskussion der Beitrag von $P(\epsilon + i\delta, \epsilon + i\delta)$ vernachlässigt werden kann. Man beachte, daß für die Kombination $\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta, \epsilon - i\delta)$ keine solche Beziehung existiert!

Als nächstes geht es also um den Term

$$P(\epsilon + i\delta, \epsilon - i\delta) = \frac{2e^2}{3N} \sum_{\boldsymbol{k}} G_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta) G_{\boldsymbol{k}}(\epsilon - i\delta) \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta, \epsilon - i\delta) \quad .$$

Als erstes stellen wir fest, daß das Produkt $G_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta) G_{\boldsymbol{k}}(\epsilon - i\delta) \in \mathbb{R}$, genauer

$$G_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta) G_{\boldsymbol{k}}(\epsilon - i\delta) = \frac{1}{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + \Delta_{\boldsymbol{k}}^2} = \pi \frac{A_{\boldsymbol{k}}(\epsilon)}{\Delta_{\boldsymbol{k}}} \quad .$$

Damit folgt

$$P(\epsilon + i\delta, \epsilon - i\delta) = \frac{2\pi e^2}{3N} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{A_{\boldsymbol{k}}(\epsilon)}{\Delta_{\boldsymbol{k}}} \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(\epsilon + i\delta, \epsilon - i\delta) \quad .$$

In der Vertexfunktion (7.22) taucht nun dieselbe Kombination von Greenschen Funktionen auf. Da außerdem $-\partial f/\partial\epsilon \overset{T\to 0}{=} \delta(\epsilon)$ interessiert hier nur

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}(i\delta, -i\delta) = \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} + \frac{\pi}{N} \sum_{\boldsymbol{q}} W_{\boldsymbol{kq}}(i\delta, -i\delta) \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{q}}(i\delta, -i\delta) \frac{A_{\boldsymbol{q}}(0)}{\Delta_{\boldsymbol{q}}(0)} \quad .$$

Im Folgenden lasse ich der Einfachheit halber die Argumente $i\delta$ weg. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich dadurch, daß im Limes $c_I \to 0$ $A_{\boldsymbol{k}}(0) \approx \delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \varepsilon_F)$ gilt. Dann ist

$$\Gamma_{\boldsymbol{kk}'} = V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') + \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{q}} \frac{V(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{q}) \Gamma_{\boldsymbol{qk}'}}{\varepsilon_F - \epsilon_{\boldsymbol{q}} + i\delta} \equiv T_{\boldsymbol{kk}'} \quad .$$

Der letztere Zusammenhang ist eine einfache Konsequenz der Lippmann–Schwinger Gleichung der Streutheorie und der Definition der Streumatrix $T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$. Für die Vertexfunktion ergibt sich somit

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} + \frac{c_I \pi}{N} \sum_{\boldsymbol{q}} |T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{q}}|^2 \frac{A_{\boldsymbol{q}}(0)}{\Delta_{\boldsymbol{q}}(0)} \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} \quad . \tag{7.24}$$

Die einzige explizite Vektorgröße in (7.24) ist $\boldsymbol{v}$, d.h. es muß zwingend $\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \lambda_{\boldsymbol{k}}$ gelten. Damit läßt sich Gleichung (7.24) in eine Bestimmungsgleichung für den Skalar $\lambda_{\boldsymbol{k}}$ überführen

$$\lambda_{\boldsymbol{k}} = 1 + \frac{c_I \pi}{N} \sum_{\boldsymbol{q}} |T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{q}}|^2 \frac{A_{\boldsymbol{q}}(0)}{\Delta_{\boldsymbol{q}}(0)} \frac{\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{q}}}{v_{\boldsymbol{k}}^2} \lambda_{\boldsymbol{q}} \tag{7.25}$$

und es ergibt sich im Limes $T \to 0$, $c_I \to 0$

$$\sigma_0 \approx P(i\delta, -i\delta) = \frac{e^2}{3N} \sum_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^2 \frac{A_{\boldsymbol{k}}(0)}{\Delta_{\boldsymbol{k}}(0)} \lambda_{\boldsymbol{k}} \quad . \tag{7.26}$$

In Gleichungen (7.25) und (7.26) kann man noch ausnutzen, daß aufgrund der Faktoren $A_{\boldsymbol{k}}(0) \approx \delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \varepsilon_f)$ und $A_{\boldsymbol{q}}(0) \approx \delta(\epsilon_{\boldsymbol{q}} - \varepsilon_f)$ alle vorkommenden Impulse auf der Fermi-Fläche liegen. Für eine annähernd isotrope Fermi-Fläche wird außerdem mit guter Näherung $\lambda_{\boldsymbol{k}_F} \approx \lambda_{k_F} \equiv \lambda_F$ und $\Delta_{\boldsymbol{k}} \approx \Delta_{k_F} \equiv \Delta_F$ sein, d.h.

$$\lambda_F = 1 + \frac{c_I \pi}{\Delta_F N} \sum_{\boldsymbol{q}} |T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{q}}|^2 \delta(\epsilon_{\boldsymbol{q}} - \varepsilon_F) \frac{\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{q}}}{v_{\boldsymbol{k}}^2} \lambda_F \tag{7.27}$$

gelten. Mit der Definition

$$\Delta_T = \frac{c_I \pi}{N} \sum_{\boldsymbol{q}} |T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{q}}|^2 \delta(\epsilon_{\boldsymbol{q}} - \varepsilon_F) \left(1 - \frac{\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{q}}}{v_{\boldsymbol{k}}^2} \right) \tag{7.28}$$

finden wir

$$\lambda_F = 1 + \lambda_F \frac{\Delta_F - \Delta_T}{\Delta_F} \tag{7.29}$$

und mithin

$$\lambda_F = \frac{\Delta_F}{\Delta_T} \quad . \tag{7.30}$$

Man beachte, daß, obwohl die individuellen Beiträge zu den Vertexkorrekturen einen expliziten Vorfaktor c_I tragen, das aufsummierte Endergebnis aufgrund der aus den Bandlinien kommenden Faktoren c_I^{-1} von der Ordnung c_I^0 ist!

Für die Leitfähigkeit erhalten wir schließlich

$$\sigma_0 \approx \frac{e^2}{3}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^2 \frac{\delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \varepsilon_F)}{\Delta_T(\boldsymbol{k})} = \frac{e^2}{3} v_F^2 \tau_T \mathcal{N}(\varepsilon_F) \ , \quad \tau_T = \frac{1}{\Delta_T} \qquad (7.31)$$

$$= \frac{n_e e^2}{m}\tau_T \ \text{ für freie Elektronen.}$$

Dieses Ergebnis ist zu vergleichen mit dem für die einfache Blase (7.15). Man sieht, daß beide identische Form haben, allerdings wurde in (7.31) die Einteilchenlebensdauer durch die Transportrelaxationszeit τ_T ersetzt. Beide sind von der Ordnung c_I^{-1}, so daß für $c_I \to 0$ auch $\sigma_0 = \infty$ herauskommt.

Untersuchen wir die Transportrelaxationszeit etwas genauer. Für annähernd isotrope Fermi-Fläche und $k \approx k' \approx k_F$ ist $\boldsymbol{v_k} \propto \boldsymbol{k}$, d.h. mit $\cos\vartheta = (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}')/k_F^2$ erhält man

$$\Delta_T = \frac{c_I \pi}{N}\sum_{\boldsymbol{k}'} |T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}|^2 \delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \varepsilon_F)\,(1-\cos\vartheta) \quad ,$$

im Gegensatz zu

$$\Delta_F = \frac{c_I \pi}{N}\sum_{\boldsymbol{k}'} |T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}|^2 \delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \varepsilon_F) \quad .$$

Man sieht, daß in Δ_T noch ein Wichtungsfaktor $\cos\vartheta$ auftritt, wobei ϑ der Streuwinkel zwischen einfallenden und auslaufenden Teilchen ist. Offensichtlich werden Streuprozesse mit Vorwärtsstreuung unterdrückt. Dieses Ergebnis ist physikalisch durchaus sinnvoll, da solche Prozesse zum Widerstand $\varrho = 1/\sigma_0 \sim \Delta_T$ nur wenig, solche mit Rückwärtsstreuung aber besonders stark beitragen werden.

8 Mikroskopische Theorie der Supraleitung

In diesem Kapitel sollen die Grundlagen der mikroskopischen Theorie der Supraleitung, der BCS-Theorie (benannt nach ihren Erfindern Bardeen, Cooper und Schrieffer [3], Physik-Nobelpreis 1972), behandelt werden. Zwei spezielle Unterkapitel zur Leitfähigeit und Eliashberg-Theorie führen dabei in die Technik der Greenschen Funktionen für Supraleiter ein.

8.1 Cooper-Instabilität

Bereits 1911 hatte Heike Kamerlingh Onnes (Physik-Nobelpreis 1913) die Supraleitung bei Widerstandsmessungen an Quecksilber entdeckt. Zu einem mikroskopischen Verständnis des Phänomens gelangte man jedoch erst, nachdem Cooper 1956 zeigen konnte [8], daß der Grundzustand eines Elektronengases mit beliebig schwacher attraktiver Wechselwirkung nicht durch eine Fermiverteilung mit scharfer Fermikante beschrieben werden kann. Diese Entdeckung bildet die Grundlage der BCS-Theorie [3], der ersten gültigen mikroskopischen Theorie der Supraleitung.

Diese Cooper-Instabilität kann man am einfachsten mit folgendem künstlichen Modell verstehen: Man betrachtet eine Wechselwirkung, die konstant und attraktiv ist für Elektronenzustände in einem endlichen Energiebereich oberhalb der Fermikante und sonst verschwindet, d.h. man verwendet einen Hamilton-Operator der Form

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}_1 \boldsymbol{k}_2 \boldsymbol{q} \sigma_1 \sigma_2} \langle \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{q}, \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{q} | V | \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2 \rangle c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q}\sigma_1} c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q}\sigma_2} c_{\boldsymbol{k}_2\sigma_2} c_{\boldsymbol{k}_1\sigma_1} \tag{8.1}$$

mit

$$\langle \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{q}, \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{q} | V | \boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{k}_1 \rangle = \begin{cases} v < 0 & \text{für } \epsilon_F < \epsilon_{\boldsymbol{k}_1}, \ldots < \epsilon_F + \hbar\omega_c \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{8.2}$$

Beweis der Cooper-Instabilität: Sei

$$|F\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}\sigma, \epsilon_{\boldsymbol{k}} \le \epsilon_F} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} |0\rangle \,, \tag{8.3}$$

dann gilt

$$H|F\rangle = H_0|F\rangle = E_0|F\rangle, \quad E_0 = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma, \epsilon_{\boldsymbol{k}} \le \epsilon_F} \epsilon_{\boldsymbol{k}} \,. \tag{8.4}$$

Wir fügen nun zwei Elektronen mit entgegengesetztem Impuls und Spin hinzu und definieren:

$$|-\boldsymbol{k}\downarrow,\boldsymbol{k}\uparrow\rangle := c^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow}|F\rangle, \tag{8.5}$$

dann erhält man:

$$H|-\boldsymbol{k}\downarrow,\boldsymbol{k}\uparrow\rangle = (2\epsilon_{\boldsymbol{k}}+E_0)|-\boldsymbol{k}\downarrow,\boldsymbol{k}\uparrow\rangle + v\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}'}|-\boldsymbol{k}'\downarrow,\boldsymbol{k}'\uparrow\rangle \tag{8.6}$$

mit

$$\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k},\epsilon_F<\epsilon_{\boldsymbol{k}}\leq\epsilon_F+\hbar\omega_c} .$$

Durch die Wechselwirkung wird das Paar $|-\boldsymbol{k}\downarrow,\boldsymbol{k}\uparrow\rangle$ in das Paar $|-\boldsymbol{k}'\downarrow,\boldsymbol{k}'\uparrow\rangle$ gestreut. Dieser Zustand ist demnach kein Eigenzustand zu H. Um einen Eigenzustand zu finden, machen wir den Ansatz:

$$|\downarrow,\uparrow\rangle := \sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}} g(\boldsymbol{k})\,|-\boldsymbol{k}\downarrow,\boldsymbol{k}\uparrow\rangle \tag{8.7}$$

mit noch zu bestimmender Funktion $g(\boldsymbol{k})$. Wir suchen eine Lösung von $H|\downarrow,\uparrow\rangle = E|\downarrow,\uparrow\rangle$:

$$\begin{aligned}\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}_1} g(\boldsymbol{k}_1)(2\epsilon_{\boldsymbol{k}_1}+E_0)|-\boldsymbol{k}_1\downarrow,\boldsymbol{k}_1\uparrow\rangle + v\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}_1} g(\boldsymbol{k}_1)\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}_2}|-\boldsymbol{k}_2\downarrow,\boldsymbol{k}_2\uparrow\rangle \\ = E\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}_3} g(\boldsymbol{k}_3)|-\boldsymbol{k}_3\downarrow,\boldsymbol{k}_3\uparrow\rangle\,.\end{aligned} \tag{8.8}$$

Durch Ausnützung der Orthonormalität der Zustände $|-\boldsymbol{k}\downarrow,\boldsymbol{k}\uparrow\rangle$ finden wir:

$$g(\boldsymbol{k})(2\epsilon_{\boldsymbol{k}}+E_0) + v\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}_1} g(\boldsymbol{k}_1) = E\,g(\boldsymbol{k})\,. \tag{8.9}$$

Für eine konstante Wechselwirkung v lässt sich diese Integralgleichung leicht lösen. Setzt man

$$C = -v\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}_1} g(\boldsymbol{k}_1) \tag{8.10}$$

dann ist

$$g(\boldsymbol{k}) = \frac{C}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}}+E_0-E}, \quad C = -v\sideset{}{'}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{C}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}}+E_0-E} \tag{8.11}$$

und für $C \neq 0$ gilt

$$1 = -v \sum_{\boldsymbol{k}}' \frac{1}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}} + E_0 - E} \,. \tag{8.12}$$

Für ein diskretes k-Spektrum hat diese Eigenwert-Gleichung eine Unzahl von Lösungen für E, die im Allgemeinen leicht verschobenen Zweiteilchen-Anregungsenergien entsprechen (das sieht man, wenn man die rechte Seite als Funktion von E zeichnet). Wir suchen die Lösung mit $E < E_0 + 2\epsilon_F$, der Mindestenergie für zwei zusätzliche Teilchen an der Fermikante. Wir setzen $\xi = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_F$, $\Delta E = E - (E_0 + 2\epsilon_F)$. Nach Umwandlung der k-Summe in ein Integral ($N(\epsilon_F)$ Zustandsdichte an der Fermikante) erhalten wir

$$\begin{aligned} 1 &= -vN(\epsilon_F) \int_0^{\hbar\omega_c} d\xi \frac{1}{2\xi - \Delta E} = -vN(\epsilon_F) \frac{1}{2} \ln \left| \frac{\hbar\omega_c - \Delta E/2}{-\Delta E/2} \right| \\ &\simeq -vN(\epsilon_F) \frac{1}{2} \ln \frac{\hbar\omega_c}{|-\Delta E/2|}, \quad \hbar\omega_c \gg |\Delta E| \,. \end{aligned} \tag{8.13}$$

Hier sieht man: eine Lösung exisitiert nur für $v < 0$. Die Auflösung nach $\Delta E < 0$ liefert für die Energieabsenkung:

$$\Delta E = -2\hbar\omega_c \mathrm{e}^{-2/\lambda}, \quad E = E_0 + 2\epsilon_F - 2\hbar\omega_c \, \mathrm{e}^{-2/\lambda} \,, \tag{8.14}$$

d.h. ein Paarzustand gebildet aus Elektronzuständen mit Wechselwirkung oberhalb der Fermikante hat niedrigere Energie als ein Zustand mit zwei zusätzlichen Elektronen ohne Wechselwirkung an der Fermikante. Das hat die Konsequenz, daß die Gesamtenergie des Elektronensystems abgesenkt wird, wenn man zwei Elektronen direkt unterhalb der Fermikante in einen Paarzustand oberhalb der Fermikante bringt. Damit ist die Instabilität der Fermiverteilung gegenüber einer (beliebig kleinen) attraktiven Wechselwirkung für dieses Modell nachgewiesen. Damit ist allerdings noch nicht gezeigt, was passiert, wenn sich mehrere Paarzustände bilden. Diese Paarbildung bildet die Grundlage der BCS-Theorie, bei der man von einer Wechselwirkung ausgeht, die attraktiv oberhalb und unterhalb der Fermikante ist.

Da $\exp(-2/\lambda)$ keine analytische Funktion von λ bei $\lambda = 0$ ist, kann man dieses Resultat nicht durch eine störungstheoretische Entwicklung nach der Wechselwirkung v erhalten. Das ist sicherlich ein Grund dafür, warum es 50 Jahre nach der Entdeckung der Supraleitung gedauert hat, bis eine gültige mikroskopische Theorie gefunden wurde.

Zwei Fragen stellen sich noch: 1. Warum paart man Elektronen mit entgegengesetztem Impuls? 2. Warum verwendet man entgegengesetzte Spins? Paart man Elektronen mit einem endlichen Schwerpunktsimpuls $\boldsymbol{q}$, dann ist die Energie-Absenkung durch die Paar-Wechselwirkung nicht so groß. Andererseits braucht man solche Paarzustände, um einen Zustand mit endlichem Suprastrom zu beschreiben. Die Antwort auf die zweite Frage ist nicht so offensichtlich. Auf den ersten Blick spielt die Spinorientierung bei der Berechnung der Energieabsenkung keine Rolle. Daß trotzdem eine Paarung mit parallelem Spin (für diese Form der Wechselwirkung) nicht möglich ist, ist eine Konsequenz des Pauliprinzips, d.h. der Antisymmetrie der Wellenfunktion zweier Fermionen. Daß im obigen Fall ein „Spin-Singlet“ (antiparallele Spins) benötigt wird, sieht man folgendermaßen: Definiert man

$$|\uparrow,\uparrow\rangle := \sum_{\boldsymbol{k}}{}' g(\boldsymbol{k})|-\boldsymbol{k}\uparrow,\boldsymbol{k}\uparrow\rangle\,, \tag{8.15}$$

dann erhält man für die Funktion $g(\boldsymbol{k})$ die gleiche Formel wie oben. Insbesondere ist für eine konstante Wechselwirkung $g(-\boldsymbol{k}) = g(\boldsymbol{k})$. Andererseits gilt für den Zustand nach Konstruktion $|-\boldsymbol{k}\uparrow,\boldsymbol{k}\uparrow\rangle = -|+\boldsymbol{k}\uparrow,-\boldsymbol{k}\uparrow\rangle$. Deshalb ist $g(\boldsymbol{k}) = 0$. Für eine k-abhängige Wechselwirkung der Form $v(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ mit $v(-\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}') = -v(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ wäre auch $g(-\boldsymbol{k}) = -g(\boldsymbol{k})$, und damit eine Paarung mit parallelem Spin möglich. Diese Art von Paarung findet man bei supraflüssigem ^{3}He; hier koppeln die Spin-Freiheitsgrade zu einem Gesamtspin 1 und die Antisymmetrie der Wellenfunktion wird durch einen Ortsanteil mit Bahndrehimpuls 1 hergestellt. Aufgrund der Symmetrie der Ortswellenfunktion spricht man in einem solchen Fall von p-Wellen-Supraleitung. In dem zuvor diskutierten Fall hat der Ortsanteil (im wesentlichen) den Bahndrehimpuls 0 und man spricht von s-Wellen-Supraleitung.

8.2 Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS)-Theorie

In der BCS-Theorie der Supraleitung verwendet man einen Hamilton-Operator der Form (8.1). Hierbei wird angenommen, daß die effektive Zweiteilchen-Wechselwirkung attraktiv ist für Elektronenzustände in der Nähe der Fermikante, und zwar für Zustände oberhalb und unterhalb der Fermikante. Seit Cooper weiß man, daß die Fermiverteilung bei einer attraktiven Wechselwirkung instabil gegenüber der Bildung von Paarzuständen $(\boldsymbol{k}\uparrow,-\boldsymbol{k}\downarrow)$ ist. Wir erwarten deshalb, daß Matrixelemente der Form $\langle N-2,G|c_{\boldsymbol{k}_2\sigma_2}c_{\boldsymbol{k}_1\sigma_1}|N,G\rangle$ im Grundzustand makroskopisch groß sind für $\boldsymbol{k}_2 = -\boldsymbol{k}_1, \sigma_2 = -\sigma_1$. Die Existenz solcher Matrixelemente lässt sich am einfachsten im Rahmen einer Hartree-Fock-ähnlichen Molekularfeld-Theorie behandeln. Zweckmäßig ist es außerdem, ein großkanonisches Ensemble zu verwenden, weil sich dann diese Matrixelemente, bei der die Teilchenzahl nicht erhalten ist, als Erwartungswerte schreiben lassen. Man ersetzt $K = H - \mu N$ durch den Molekularfeld-Operator

$$K_{MF} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \xi_{\boldsymbol{k}} c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k}} (\Delta_{\boldsymbol{k}} c^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \Delta^{*}_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) \,. \tag{8.16}$$

Die Parameter dieses Molekularfeld-Hamilton-Operators lassen sich selbstkonsistent bestimmen, indem man je zwei Operatoren des ursprünglichen Hamilton-Operators durch ihren Erwartungswert ersetzt. Berücksichtigt man nur die anomalen Erwartungswerte $\langle c_{\boldsymbol{k}\uparrow} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \rangle$ und $\langle c^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \rangle$ (der Rest ergibt Hartree-Fock-Korrekturen zu den Einteilchen-Energien), dann erhält man die Selbstkonsistenz-Gleichung:

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}'} \mathcal{V}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \langle c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} c_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} \rangle \tag{8.17}$$

mit

$$\mathcal{V}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \langle -\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k} | V | -\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}' \rangle \tag{8.18}$$

und

$$\xi_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu \,. \tag{8.19}$$

Die Details der Herleitung wollen wir hier nicht weiter diskutieren, da wir später mit der Technik der Greenschen Funktionen einen systematischeren Weg kennenlernen werden. Bevor wir den allgemeinen Fall mit der echten Zweiteilchen-Wechselwirkung behandeln, wollen wir die Struktur der Anregungen mit Hilfe des Molekularfeld-Hamiltonians analysieren. Dazu müssen wir K_{MF} diagonalisieren, d.h. in folgende Form bringen:

$$K^{\mathrm{diag}}_{MF} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} E_{\boldsymbol{k}\sigma} \gamma^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} \gamma_{\boldsymbol{k}\sigma} \,. \tag{8.20}$$

Die Operatoren $\gamma_{\boldsymbol{k}\sigma}$ sind Linear-Kombinationen der urspünglichen elektronischen Operatoren $c_{\boldsymbol{k}\sigma}$ und müssen ebenfalls die Fermi-Vertauschungsregeln erfüllen. Die eleganteste Weise, diese Diagonalisierung durchzuführen, besteht in der Analyse der Bewegungsgleichungen der Operatoren. Für K_{MF} in Diagonalform gilt:

$$[K^{\mathrm{diag}}_{MF}, \gamma_{\boldsymbol{k}\sigma}] = -E_{\boldsymbol{k}\sigma} \gamma_{\boldsymbol{k}\sigma} \,. \tag{8.21}$$

Hier kann $E_{\boldsymbol{k}\sigma}$ kann als Quasiteilchen-Energie interpretiert werden, $\gamma^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}$ als Erzeuger für ein Quasiteilchen. In der ursprünglichen Form von K_{MF} erhalten wir für den Kommutator mit $c_{\boldsymbol{k}\uparrow}$:

$$[K_{MF}, c_{\boldsymbol{k}\uparrow}] = -\xi_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \Delta_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \,. \tag{8.22}$$

Hier werden Operatoren mit entgegengesetztem Spin und Impuls gemischt. Für den Kommutator mit $c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}$ finden wir analog:

$$[K_{MF}, c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}] = +\xi_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \Delta^*_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \,. \tag{8.23}$$

Daher machen wir folgenden Ansatz für die Quasiteilchen-Operatoren

$$\gamma = x c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + y c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \tag{8.24}$$

und fordern

$$[K_{MF}, \gamma] = -\lambda\gamma \,. \tag{8.25}$$

Mit dem obigen Ansatz finden wir

$$\begin{aligned} [K_{MF}, \gamma] &= x(-\xi_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \Delta_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) + y(\xi_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \Delta^*_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow}) \\ &= -\lambda(x c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + y c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) \,. \end{aligned} \tag{8.26}$$

Vergleicht man die Koeffizienten der elektronischen Operatoren, dann erhält man das folgende Gleichungssystem

$$(\lambda - \xi_{\boldsymbol{k}})x + \Delta^*_{\boldsymbol{k}} y = 0 \tag{8.27}$$

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} x + (\lambda + \xi_{\boldsymbol{k}})y = 0 \,. \tag{8.28}$$

Die Eigenwerte sind

$$\lambda = \pm E_{\boldsymbol{k}}, \quad E_{\boldsymbol{k}} = +\sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}} + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2} \,; \tag{8.29}$$

die zwei Lösungen für die Quasiteilchen-Operatoren sind:

$$1. \quad \lambda_1 = +E_{\boldsymbol{k}} : \quad \gamma_1 = \gamma_{\boldsymbol{k}\uparrow} = u_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} - v_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \tag{8.30}$$

$$2. \quad \lambda_2 = -E_{\boldsymbol{k}} : \quad \gamma_2 = \gamma^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} = v^*_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + u^*_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \tag{8.31}$$

mit

$$|u_{\boldsymbol{k}}|^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right), \quad |v_{\boldsymbol{k}}|^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right), \quad u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} = \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} \,. \tag{8.32}$$

Wegen des Vorzeichens des Eigenwertes ist γ_1 ein Vernichter, γ_2 ein Erzeuger. Die Bezeichung ist so gewählt, daß sie weit oberhalb der Fermikante mit der Bezeichnung der Elektronen-Operatoren übereinstimmt.

Die Absolutwerte der Koeffizienten $u_{\boldsymbol{k}}, v_{\boldsymbol{k}}$ sind durch die Forderung bestimmt, daß die Quasiteilchen-Operatoren Fermi-Vertauschungsregeln genügen müssen:

$$\gamma^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\gamma_{\boldsymbol{k}'\sigma'} + \gamma_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\gamma^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} = \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{8.33}$$

$$\gamma_{\boldsymbol{k}\sigma}\gamma_{\boldsymbol{k}'\sigma'} + \gamma_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\gamma_{\boldsymbol{k}\sigma} = 0\,. \tag{8.34}$$

Daraus folgt

$$|u_{\boldsymbol{k}}|^2 + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 1\,. \tag{8.35}$$

O.B.d.A. kann $u_{\boldsymbol{k}}$ reell und positiv gewählt werden. Die Phase von $v_{\boldsymbol{k}}$ ist dann durch die Phase von $\Delta_{\boldsymbol{k}} = |\Delta_{\boldsymbol{k}}|\exp(i\varphi_{\boldsymbol{k}})$ bestimmt. Beachte: durch die Selbstkonsistenz-Gleichung sind die Phasen $\varphi_{\boldsymbol{k}}$ miteinander gekoppelt. Für s-Wellen-Supraleiter sind alle Phasen gleich. Für einen *einzelnen* Supraleiter (ohne äußeres Magnetfeld und Ströme) kann diese globale Phase Null gesetzt werden.

Im Allgemeinen kann die Transformation zwischen Elektronen-Operatoren und Quasiteilchen-Operatoren in der kompakten Form geschrieben werden:

$$\gamma_{\boldsymbol{k}\sigma} = u_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}\sigma} - v_{\boldsymbol{k}}\mathrm{sign}(\sigma)c^\dagger_{-\boldsymbol{k},-\sigma} \tag{8.36}$$

$$c_{\boldsymbol{k}\sigma} = u^*_{\boldsymbol{k}}\gamma_{\boldsymbol{k}\sigma} + v^*_{\boldsymbol{k}}\mathrm{sign}(\sigma)\gamma^\dagger_{-\boldsymbol{k},-\sigma}\,. \tag{8.37}$$

Damit schreibt sich der Molekularfeld-Hamilton-Operator

$$K_{MF} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} E_{\boldsymbol{k}}\,(\gamma^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\gamma_{\boldsymbol{k}\sigma} - 1)\,. \tag{8.38}$$

Die Konstante (-1) wird meist weggelassen, da sie für das Anregungsspektrum nicht von Bedeutung ist. In diesem Hamilton-Operator (der $H - \mu N$ entspricht) kommen nur positive Energien $E_{\boldsymbol{k}}$ vor. Das sind die Energien der Quasiteilchen (Einteilchen-Anregungen). Der Grundzustand ist ein Zustand ohne Anregungen, d.h. ohne Quasiteilchen.

Das Anregungsspektrum ist in Abb. 8.1 für konstantes Δ gezeigt. Es hat eine Energielücke von Δ an der Fermikante. Abb. 8.1 zeigt auch die sogenannten Kohärenzfaktoren $u_{\boldsymbol{k}}, v_{\boldsymbol{k}}$. Für k-Werte weit oberhalb der Fermikante hat die Anregung Teilchen-Charakter, für k-Werte weit unterhalb der Fermikante Loch-Charakter und in der Nähe der Fermikante gemischten Teilchen-Loch-Charakter

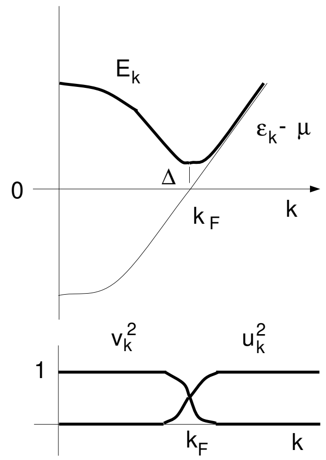


Abbildung 8.1: *Anregungsspektrum für Quasiteilchen und Kohärenzfaktoren im supraleitenden Zustand.*

(genau so lassen sich auch Anregungen des Fermisees im Normalzustand charakterisieren, dann sind $u_{\boldsymbol{k}}, v_{\boldsymbol{k}}$ Stufenfunktionen).

Berechnung der Ordnungsparameter-Funktion $\Delta_{\boldsymbol{k}}$

Der Ordnungsparameter $\Delta_{\boldsymbol{k}}$, der in diesem Fall (keine magnetischen Felder, keine magnetischen Störstellen) auch die Energielücke bestimmt, erhält man aus der Selbstkonsistenz-Gleichung (8.17), d.h. $\Delta_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}'} \mathcal{V}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \, \langle c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} c_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} \rangle$. Den Erwartungswert auf der rechten Seite berechnet man mit Hilfe des Molekularfeld-Hamilton-Operators, der diagonal in den Quasiteilchen-Operatoren ist. Drückt man die Elektron-Operatoren durch die Quasiteilchen-Operatoren aus und verwendet deren Fermi-Statistik:

$$\langle \gamma^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} \gamma_{\boldsymbol{k}'\sigma'} \rangle = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} f(E_{\boldsymbol{k}}), \quad f(E_{\boldsymbol{k}}) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta E_{\boldsymbol{k}}} + 1} \tag{8.39}$$

$$\langle \gamma_{\boldsymbol{k}\sigma} \gamma_{\boldsymbol{k}'\sigma'} \rangle = 0 \,, \tag{8.40}$$

dann findet man (wir beschränken uns im Folgenden auf reelle $\Delta_{\boldsymbol{k}}, u_{\boldsymbol{k}}, v_{\boldsymbol{k}}$):

$$\langle c_{\boldsymbol{k}\uparrow} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \rangle = -u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \langle \gamma_{\boldsymbol{k}\uparrow} \gamma^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \rangle + u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \langle \gamma^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \gamma_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \rangle = -u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} (1 - 2f(E_{\boldsymbol{k}})) \tag{8.41}$$

oder

$$\langle c_{\boldsymbol{k}\uparrow} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \rangle = -\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}} \tanh \frac{\beta E_{\boldsymbol{k}}}{2} \,. \tag{8.42}$$

Die Selbstkonsistenz-Gleichung lautet dann

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\sum_{\boldsymbol{k}'} \mathcal{V}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{2E'_{\boldsymbol{k}}} \tanh \frac{\beta E_{\boldsymbol{k}'}}{2} \tag{8.43}$$

mit $E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}, \xi_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu$. Da $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ die Bedeutung einer Energielücke besitzt, spricht man bei (8.43) auch von einer „Gap-Gleichung".

Diese Gleichung hat immer die triviale Lösung $\Delta_{\boldsymbol{k}} = 0$. Dies entspricht dem Normalzustand. Nichtriviale Lösungen sind möglich für tiefe Temperaturen, falls die Wechselwirkung $\mathcal{V}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') < 0$ ist in der Nähe der Fermikante. Je nach Form und Symmetrie dieser Wechselwirkung findet man unterschiedliche Paarzustände (s-Wellen, p-Wellen, d-Wellen-Paarung).

Das einfachste Modell erhält man für eine in einer Umgebung $\pm\hbar\omega_c$ um die Fermikante konstante attraktive Wechselwirkung (oder etwas allgemeiner: für eine in $\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'$ faktorisierbare Wechselwirkung):

$$\mathcal{V}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \begin{cases} v < 0 & \text{für } |\epsilon_{\boldsymbol{k}_i} - \mu| < \hbar\omega_c \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{8.44}$$

Für eine durch Phononen induzierte Wechselwirkung entspricht der cut-off $\hbar\omega_c$ der Debye-Energy. Dann lautet die Selbstkonsistenz-Gleichung

$$\Delta = -v {\sum_{\boldsymbol{k}'}}' \frac{\Delta}{2E_{\boldsymbol{k}'}} \tanh \frac{\beta E_{\boldsymbol{k}'}}{2} \,. \tag{8.45}$$

Hier bedeutet der Strich ein Abschneiden der Summe bei der Cut-off Energie $\hbar\omega_c$. Innerhalb diese Energiebereichs ist Δ unabhängig von $\boldsymbol{k}$, außerhalb Null. Eine nichttriviale Lösung findet man offenbar nur für $v < 0$.

Wir nehmen an, daß die cut-off Energie klein gegenüber der Bandbreite der Elektronenzustände ist und die Zustandsdichte der Elektronen in diesem Bereich durch eine Konstante $N(\epsilon_F)$ approximiert werden kann, dann erhalten wir:

$$1 = \lambda \int_0^{\hbar\omega_c} \frac{1}{E(\xi)} \tanh \frac{\beta E(\xi)}{2} d\xi \tag{8.46}$$

mit $E(\xi) = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$ and $\lambda = N(\epsilon_F)|v|$. Diese Gleichung bestimmt Δ als Funktion von T (siehe Abb. 8.2).

In den folgenden beiden Fällen findet man eine analytische Lösung:

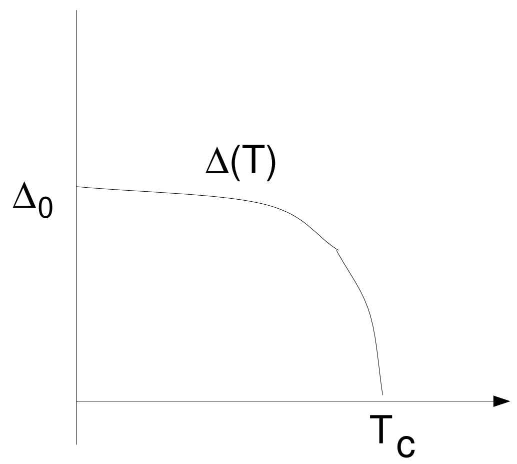


Abbildung 8.2: *Temperaturabhängigkeit der Energielücke.*

a) $T = 0, \Delta(T = 0) = \Delta_0$.

Dann ist

$$1 = \lambda \int_0^{\hbar\omega_c} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}} = \lambda \ln \left(\xi + \sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2} \right) \Bigg|_0^{\hbar\omega_c} . \tag{8.47}$$

Meist ist die cut-off Energie groß im Vergleich zu Δ_0. Dann gilt

$$1 = \lambda \ln \left(\frac{2\hbar\omega_c}{\Delta_0} \right) , \tag{8.48}$$

woraus man den Gap-Wert bei $T = 0$ erhält:

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_c \exp(-1/\lambda) . \tag{8.49}$$

b) $T \to T_c, \Delta \to 0$.

In diesem Grenzfall gilt

$$1 = \lambda \int_0^{\hbar\omega_c} d\xi \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\beta_c \xi}{2} \tag{8.50}$$

mit $\beta_c = 1/(k_B T_c)$. Eine grobe Näherung für das Integral erhält man, wenn man die tanh-Funktion durch eine Konstante für $\xi > k_B T_c$ approximiert:

$$1 = \lambda \int_{k_B T_c}^{\hbar\omega_c} d\xi \frac{1}{\xi} = \lambda \ln \left(\frac{\hbar\omega_c}{k_B T_c} \right) . \tag{8.51}$$

Einen genaueres Resultat erhält man wie folgt: Wir substitutieren in dem Integral (8.50) $x = \beta_c \xi/2$ und setzen $A = \hbar\omega_c \beta_c/2$. Man integriert nun zunächst partiell und läßt dann $A \to \infty$ gehen:

$$\begin{aligned}
\int_0^A dx \, \frac{1}{x} \tanh x &= \ln x \, \tanh x \Big|_0^A - \int_0^A dx \, \frac{\ln x}{\cosh^2 x} \overset{\tanh A \,\to\, 1}{\approx} \ln A - \int_0^\infty dx \, \frac{\ln x}{\cosh^2 x} \\
&= \ln A - \ln \left(\frac{4}{\pi \, \mathrm{e}^\gamma} \right) = \ln \left(\frac{2 \, \mathrm{e}^\gamma \, \hbar\omega_c}{\pi \, k_B T_c} \right) . \qquad (8.52)
\end{aligned}$$

Hierbei tritt die Eulersche Konstante $\gamma = 0.577\ldots$ auf. Glg. (8.50) ergibt schließlich Wert von T_c für $\hbar\omega_c \gg k_B T_c$:

$$k_B T_c = \frac{2 \, \mathrm{e}^\gamma}{\pi} \, \hbar\omega_c \, \exp\left(-\frac{1}{\lambda} \right) = 1.134 \, \hbar\omega_c \, \exp\left(-\frac{1}{\lambda} \right) . \qquad (8.53)$$

Man beachte, daß in der BCS-Theorie das Verhältnis $2\Delta_0/(k_B T_c) = 3.527\ldots$ unabhängig von den Material-Parametern ist. Δ_0 kann nicht durch Störungstheorie in v berechnet werden, weil das Resultat nicht-analytisch in v ist.

8.3 BCS-Theorie mit Greenschen Funktionen

Im Falle einer frequenzabhängigen Wechselwirkung, wie sie der Austausch von Phononen darstellt, und bei Verunreinigungs-Streuung, kann man die elementaren Anregungen nicht mehr durch reelle Quasiteilchen-Energien ausdrücken. Zur Behandlung solcher Effekte braucht man eine auf Greenschen Funktionen basierende Technik, die im Folgenden eingeführt werden soll. Ein weiterer Vorteil dieser Methode ist, daß wir nach Einführung sogenannter anomaler Greenscher Funktionen die Paarwechselwirkung störungstheoretisch als Selbstenergie berechnen können. Wir können damit auf die Molekularfeld-Faktorisierung verzichten und diese durch eine Auswahl von Graphen ersetzen.

Wir starten von der Einteilchen-Greenschen Funktion (vgl. (3.1))

$$G(\boldsymbol{k}, t) = -i\Theta(t) \langle [c_{\boldsymbol{k}\uparrow}(t), c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}]_+ \rangle = \langle\langle c_{\boldsymbol{k}\uparrow}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \rangle\rangle_t \qquad (8.54)$$

und deren Laplace-Transformierten (3.4)

$$G(\boldsymbol{k}, z) = \int_0^\infty dt \, \mathrm{e}^{izt} \, G(\boldsymbol{k}, t) = \langle\langle c_{\boldsymbol{k}\uparrow}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \rangle\rangle_z , \quad \Im\mathrm{m} z > 0 . \qquad (8.55)$$

Die Bewegungsgleichung hat im Frequenzraum die aus (3.6) bekannte allgemeine Form

$$z\langle\langle A; B\rangle\rangle + \langle\langle \mathcal{L}A; B\rangle\rangle = \langle [A, B]_+\rangle\,. \tag{8.56}$$

In unserem Fall ergibt der Kommutator mit dem Molekularfeld-Hamilton-Operator (8.16):

$$\mathcal{L}_{MF} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} = [K_{MF}, c_{\boldsymbol{k}\uparrow}]_- = -\xi_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \Delta_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\,. \tag{8.57}$$

Die Bewegungsgleichung lautet damit (wir beschränken uns im folgenden auf reelle $\Delta_{\boldsymbol{k}}$):

$$(z - \xi_{\boldsymbol{k}})\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\uparrow}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle\rangle + \Delta_{\boldsymbol{k}}\langle\langle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle\rangle = 1\,. \tag{8.58}$$

Damit koppelt die normale Greensche Funktion an eine anomale Greensche Funktion mit zwei Erzeugern. Stellt man dafür die analoge Bewegungsgleichung auf, dann erhält man:

$$\mathcal{L}_{MF} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} = +\xi_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \Delta_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \tag{8.59}$$

$$(z + \xi_{\boldsymbol{k}})\langle\langle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle\rangle + \Delta_{\boldsymbol{k}}\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\uparrow}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle\rangle = 0\,. \tag{8.60}$$

Hier wird man also wieder auf die normale Greensche Funktion zurückgeführt. Durch Einsetzen erhält man die Lösung:

$$\langle\langle c_{\boldsymbol{k}\uparrow}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle\rangle = \frac{z + \xi_{\boldsymbol{k}}}{z^2 - \xi^2_{\boldsymbol{k}} - \Delta^2_{\boldsymbol{k}}}\,, \tag{8.61}$$

$$\langle\langle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}; c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle\rangle = -\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{z^2 - \xi^2_{\boldsymbol{k}} - \Delta^2_{\boldsymbol{k}}}\,. \tag{8.62}$$

Kompakter lassen sich die Bewegungsgleichungen formulieren, wenn man die Operatoren $c_{\boldsymbol{k}\uparrow}, c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}$ zu einem Nambu-Spinor zusammenfaßt:

$$\Psi_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix} \tag{8.63}$$

mit $\Psi_{1\boldsymbol{k}} = c_{\boldsymbol{k}\uparrow}, \Psi_{2\boldsymbol{k}} = c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}$ und eine entsprechende Matrix-Greensche Funktion definiert:

$$\hat{G}_{\mu\nu}(\boldsymbol{k}, z) = \langle\langle \Psi_{\mu\boldsymbol{k}}, \Psi^\dagger_{\nu\boldsymbol{k}}\rangle\rangle_z\,. \tag{8.64}$$

Der Molekularfeld-Hamilton-Operator läßt sich mit Hilfe der Pauli-Matrizen

$$\tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{8.65}$$

umschreiben in:

$$K_{MF} = \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}} \Psi_{\boldsymbol{k}}^\dagger \tau_3 \Psi_{\boldsymbol{k}} - \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}} \Psi_{\boldsymbol{k}}^\dagger \tau_1 \Psi_{\boldsymbol{k}} \,. \tag{8.66}$$

Damit erhält man die Bewegungsgleichungen in kompakter Form:

$$(z\tau_0 - \xi_{\boldsymbol{k}}\tau_3 + \Delta_{\boldsymbol{k}}\tau_1)\hat{G}(\boldsymbol{k}, z) = \tau_0 \tag{8.67}$$

mit der Lösung:

$$\hat{G}(\boldsymbol{k}, z) = \frac{z\tau_0 + \xi_{\boldsymbol{k}}\tau_3 - \Delta_{\boldsymbol{k}}\tau_1}{z^2 - \xi_{\boldsymbol{k}}^2 - \Delta_{\boldsymbol{k}}^2} \,. \tag{8.68}$$

Die oben hergeleitete normale Greensche Funktion ist die (11)-Komponente, die anomale Greensche Funktion die (21)-Komponente dieser Matrix. Alle Komponenten haben Pole bei den Quasiteilchenenergien $\pm E_{\boldsymbol{k}}$, mit $E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}}^2 + \Delta_{\boldsymbol{k}}^2}$ (vgl. (8.29)), wobei $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ die Rolle einer Energielücke spielt.

Für die normale Greensche Funktion erhält man insbesondere die Partialbruch-Zerlegung:

$$G_{11}(\boldsymbol{k}, z) = \frac{z + \xi_{\boldsymbol{k}}}{z^2 - E_{\boldsymbol{k}}^2} = u_{\boldsymbol{k}}^2 \frac{1}{z - E_{\boldsymbol{k}}} + v_{\boldsymbol{k}}^2 \frac{1}{z + E_{\boldsymbol{k}}} \tag{8.69}$$

mit

$$u_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right), \quad v_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right) \,. \tag{8.70}$$

Die Koeffizienten $u_{\boldsymbol{k}}, v_{\boldsymbol{k}}$ sind bereits in (8.30) und (8.31) aufgetreten und somit ein Maß für den Teilchen- bzw. Loch-Charakter der Anregung. Diese Interpretation ist auch damit konsistent, daß $u_{\boldsymbol{k}}^2$ das Gewicht des Poles bei $+E_{\boldsymbol{k}}$ ist und $v_{\boldsymbol{k}}^2$ das Gewicht des Poles bei $-E_{\boldsymbol{k}}$.

Bisher haben wir nur die Bewegungsgleichungen für den Ersatz-Hamilon-Operator untersucht. Im Folgenden soll nun die echte Zweiteilchen-Wechselwirkung verwendet werden. Von den Ergebnissen mit dem Ersatz-Hamilton-Operator übernehmen wir nur die Struktur der Greenschen Funktionen, d.h. die Existenz einer anomalen Greenschen Funktion mit Paarung zwischen Elektronen mit entgegengesetztem Impuls und Spin.

Die Bewegungsgleichung für den echten Hamilton-Operator $K = H - \mu N$ lautet (für eine konstante Wechselwirkung v):

$$[K, c_{\boldsymbol{k}\uparrow}]_- = -(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)c_{\boldsymbol{k}\uparrow} - \sum_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{q}\sigma'} v c_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}\sigma'}^\dagger c_{\boldsymbol{k}'\sigma'} c_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}\uparrow} \,. \tag{8.71}$$

Nähern wir diese in Molekularfeld-Manier, indem wir zwei Operatoren durch ihre Erwartungswerte ersetzen, dann finden wir:

$$[K, c_{\boldsymbol{k}\uparrow}]_- \simeq -(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) c_{\boldsymbol{k}\uparrow} - \sum_{\boldsymbol{k}'} v \langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}'\downarrow} \rangle c_{\boldsymbol{k}\uparrow} - \sum_{\boldsymbol{k}'} v \langle c_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \rangle c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \,. \tag{8.72}$$

Durch Vergleich mit der entsprechenden Bewegungsgleichung für den Ersatz-Hamilton-Operator lassen sich die Parameter des letzteren selbstkonsistent bestimmen:

$$\xi_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu + \sum_{\boldsymbol{k}'} v \langle c^\dagger_{\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}'\downarrow} \rangle \tag{8.73}$$

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}'} v \langle c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} c_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} \rangle \,. \tag{8.74}$$

Diese Herleitung ist etwas unbefriedigend, da wir eine unkontrollierte Näherung in der Bewegungsgleichung machen. Viel systematischer gehen wir vor, wenn wir eine formale Entwicklung nach Feynman-Graphen in der Zweiteilchen-Wechselwirkung vornehmen und uns dann auf eine bestimmte Graphenklasse konzentrieren.

Der Hamilton-Operator $K = H - \mu N$ lautet in Nambu-Notation für das in (8.1) angegebene H und eine konstante Wechselwirkung:

$$K = \sum_{\boldsymbol{k}} (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)\, \Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} \tau_3 \Psi_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{q}} v \big(\Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{q}} \tau_3 \Psi_{\boldsymbol{k}_1}\big)\big(\Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{q}} \tau_3 \Psi_{\boldsymbol{k}_2}\big) \,. \tag{8.75}$$

Wir definieren die Matrix-Greensche Funktion:

$$\hat{G}_{\mu\nu}(\boldsymbol{k}, \tau) = -\langle \mathcal{T} \Psi_{\mu\boldsymbol{k}}(\tau) \Psi^\dagger_{\nu\boldsymbol{k}}(0) \rangle \tag{8.76}$$

und deren Fourier-Transformierte:

$$\hat{G}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \, \mathrm{e}^{i\omega_n \tau} \, \hat{G}(\boldsymbol{k}, \tau) \,. \tag{8.77}$$

Für die Zweiteilchen-Wechselwirkung soll im Folgenden die Selbstenergie $\hat{\Sigma}$ berechnet werden. Mit dieser Selbstenergie erhalten wir als Verallgemeinerung von (4.41) eine Dyson-Gleichung für die Nambu-Matrizen der Greenschen Funktion:

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{\Sigma} \hat{G} \,, \tag{8.78}$$

beziehungsweise

$$\hat{G}^{-1} = \hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}\,, \tag{8.79}$$

deren Struktur wir zunächst analysieren wollen. Für die Greensche Funktion ohne Wechselwirkung $\hat{G}_0$ gilt:

$$\hat{G}_0^{-1} = i\omega_n \tau_0 - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)\tau_3\,. \tag{8.80}$$

Die Selbstenergie zerlegen wir nach Anteilen der Pauli-Matrizen:

$$\hat{\Sigma} = \Sigma_0 \tau_0 + \Sigma_3 \tau_3 + \Sigma_1 \tau_1\,. \tag{8.81}$$

Damit erhalten wir

$$\hat{G}^{-1} = (i\omega_n - \Sigma_0)\tau_0 - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu + \Sigma_3)\tau_3 - \Sigma_1 \tau_1 = i\tilde{\omega}_n \tau_0 - \xi_{\boldsymbol{k}} \tau_3 + \Delta(\boldsymbol{k}, i\omega_n)\tau_1\,, \tag{8.82}$$

wobei $\Delta(\boldsymbol{k}, i\omega_n)$ lediglich eine andere Bezeichnung für $-\Sigma_1$ ist und $i\tilde{\omega}_n, \xi_{\boldsymbol{k}}$ Abkürzungen für die entsprechenden Ausdrücke sind.

Zur Berechnung der Selbstenergie können wir die aus Kapitel 4 bekannten Feynman-Graphenregeln verwenden. Wir müssen allerdings an geeigneter Stelle die Nambu-Matrizen τ_i einfügen. Insbesondere tritt an jedem Vertex, der eine Elektron-Linie mit einer Potential-Linie verbindet, ein Faktor τ_3 auf. Der Grund hierfür ist, daß die Wechselwirkungsterme in (8.75) von der Form $\Psi^\dagger \tau_3 \Psi$ sind.

Wir beschränken wir uns hier auf die Berechnung der Hartree-Fock-ähnlichen Graphen (siehe Abb. 4.3c, die ersten beiden Diagramme). Der Hartree-Graph, welcher die Wechselwirkung des propagierenden Teilchens mit der Teilchen-Dichte der anderen Teilchen enthält, ergibt im supraleitenden Zustand kein wesentlich anderes Ergebnis als im Normalzustand. Wir lassen diesen Beitrag hier weg. Interessanter ist der Fock-Graph. Die Auswertung nach den Graphenregeln ergibt

$$\hat{\Sigma}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} \sum_{\boldsymbol{k}'} v\, \tau_3 \hat{G}(\boldsymbol{k}', i\omega_m)\tau_3\,. \tag{8.83}$$

Setzen wir

$$\tau_3 \hat{G}(\boldsymbol{k}', i\omega_m)\tau_3 = \frac{i\tilde{\omega}_m \tau_0 + \xi_{\boldsymbol{k}'} \tau_3 + \Delta(\boldsymbol{k}', i\omega_m)\tau_1}{(i\tilde{\omega}_n)^2 - \xi_{\boldsymbol{k}'}^2 - \Delta^2(\boldsymbol{k}', i\omega_m)} \tag{8.84}$$

in den Ausdruck für die Selbstenergie ein, dann stellen wir fest, daß die Beiträge zu Σ_0 verschwinden. Σ_3 gibt nur einen kleinen konstanten Beitrag, der bei Teilchen-Loch-Symmetrie ebenfalls verschwindet, d.h. $\xi_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu$. Für $\Delta = -\Sigma_1$ erhalten wir dagegen:

$$\Delta(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \sum_{\boldsymbol{k}'} v \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} \frac{\Delta(\boldsymbol{k}', i\omega_m)}{(i\omega_m)^2 - \xi_{\boldsymbol{k}'}^2 - \Delta^2(\boldsymbol{k}', i\omega_m)} . \tag{8.85}$$

Dies ist die Selbstkonsistenz-Gleichung zur Bestimmung des Gap-Parameters $\Delta(\boldsymbol{k}, i\omega_n)$.

Zunächst erkennen wir, daß $\Delta(\boldsymbol{k}, i\omega_n)$ nicht von ω_n abhängt. Bei konstanter Wechselwirkung V ist auch die k-Abhängigkeit nicht vorhanden, bis auf den cut-off in der Wechselwirkung im k-Raum, den wir bei der Auswertung berücksichtigen müssen.

Auswertung der Frequenz-Summe mit Hilfe der Poissonschen Summenformel ergibt (vgl. (3.90) und (3.91))

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\sum_{\boldsymbol{k}'}{}' v \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{2E_{\boldsymbol{k}'}} \tanh \frac{\beta E_{\boldsymbol{k}'}}{2} , \tag{8.86}$$

wobei sich die Summe nur über Zustände mit $|\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu| < \hbar\omega_c$ erstreckt. Damit sind wir wieder bei bekannten Resultaten angelangt (siehe (8.45)). Die Auswertung der Greenschen Funktion im Nambu-Raum in Hartree-Näherung ist damit äquivalent zu der vorher verwendeten Molekularfeld-Näherung.

Alternativ können wir auch zunächst die Integration über $\boldsymbol{k}$ ausführen und dann die Frequenz-Summation durchführen. Mit $\Delta_n := \Delta(i\omega_n)$ erhalten wir:

$$\Delta_n = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} v \int d\xi N(\xi) \frac{\Delta_m}{\xi^2 + \omega_m^2 + \Delta_m^2} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} v\pi N(\epsilon_F) \frac{\Delta_m}{\sqrt{\omega_m^2 + \Delta_m^2}} . \tag{8.87}$$

Nun müssen wir einen cut-off in der Frequenz einführen. Mit $|\omega_m| \leq \omega_c$ erhalten wir das gleiche Resultat für Δ wie oben. Eine Verallgemeinerung dieser Formel für eine frequenzabhängige Wechselwirkung $v(i\omega_n - i\omega_m)$ mit frequenzabhängiger Gap-Funktion werden wir in der Eliashberg-Theorie kennenlernen.

8.4 Leitfähigkeit und Meißner-Effekt

Für ein elektrisches Feld der Form

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}, t) = \boldsymbol{E} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x} - i\omega t}$$

ist eine Leitfähigkeit definiert durch die Antwort des Stromes auf das elektrische Feld

$$\langle J_\alpha(\boldsymbol{x})\rangle_t = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega) E_\beta(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{8.88}$$

Für isotrope Systeme ist der Tensor diagonal. Da das elektrische Feld im Hamilton-Operator nicht direkt vorkommt, schreiben wir es um als Antwort auf die Potentiale:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t) = -\boldsymbol{\nabla}\Phi(\boldsymbol{x},t) - \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{8.89}$$

In der Eichung $\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A} = 0$ beschreibt der Gradient des Potentials die longitudinale Komponente, die Zeitableitung des Vektorpotentials die transversale Komponente des elektrischen Feldes bezüglich des Wellenvektors $\boldsymbol{q}$. Entsprechend unterscheidet man eine longitudinale und eine transversale Leitfähigkeit. Sei $\boldsymbol{q}\|\boldsymbol{e}_z$, dann ist

$$\langle J_x(\boldsymbol{x})\rangle_t = \sigma_T(\boldsymbol{q},\omega)\, E_x(\boldsymbol{q},t) =: -K(\boldsymbol{q},\omega)\, A_x(\boldsymbol{q},\omega) \tag{8.90}$$

mit $K(\boldsymbol{q},\omega) = -i\omega\sigma_T(\boldsymbol{q},\omega)$. Es genügt hier, die transversale Leitfähigkeit zu betrachten. Im Supraleiter beschreibt sie die Antwort auf ein zeitabhängiges magnetisches Feld und damit den Meißnereffekt. Im Normalfall sind σ_T und σ_L gleich für kleine q.

Ergebnisse:

Im normalen Metall erhalten wir für $q \to 0$ ein Drude-Verhalten für die Leitfähigkeit (τ Streuzeit)

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{\tau}{1-i\omega\tau}\,, \tag{8.91}$$

d.h. $\lim_{\omega\to 0} K(\boldsymbol{q},\omega) = 0$. Im Supraleiter ist dagegen $\lim_{\omega\to 0} K(\boldsymbol{q},\omega) \neq 0$ und man erhält (für kleine q und ω) die *London-Gleichung*

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x},t) = -K(\boldsymbol{q},\omega)\Big|_{\omega\to 0}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) = -\frac{1}{\mu_0\lambda^2}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{8.92}$$

Für ein Vektorpotential, das langsam eingeschaltet wird und dann auf einem konstanten Wert stehenbleibt, erhält man während des Einschaltvorgangs ein elektrisches Feld und damit einen Induktionsstrom, der im Normalzustand während der Zeit τ wieder abklingt. Im supraleitenden Zustand bleibt dagegen der induzierte Strom erhalten: man erhält einen Dauerstrom.

Da die London-Geichung insbesondere auch für ein zeitlich konstantes Feld gilt, liefert sie den Meißnereffekt: ein magnetisches Feld wird teilweise aus dem Supraleiter verdrängt. Das sieht man so: Mit Hilfe der Maxwell-Gleichung

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{J}$$

erhält man aus der London-Gleichung

$$\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{B}) = -\frac{1}{\lambda^2} \boldsymbol{B} \,.$$

Für ein Feld in x-Richtung, das in z-Richtung variiert, erhält man

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} B_x(z) = \frac{1}{\lambda^2} B_x(z)$$

mit der Lösung für einen supraleitenden Halbraum $z > 0$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}) = B_0 \, \boldsymbol{e}_x \, \mathrm{e}^{-z/\lambda} \,,$$

d.h. λ beschreibt die Eindringtiefe des magnetischen Feldes. Mit dem magnetischen Feld sind entsprechende Abschirmströme verknüpft:

$$\boldsymbol{J} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda} \, \boldsymbol{e}_y \, B_0 \, \mathrm{e}^{-z/\lambda} \,.$$

Achtung: Ein Metall mit unendlicher Leitfähigkeit würde durch Induktion beim Einschalten des Magnetfeldes nach der Lenzschen Regel ähnliche Abschirmströme erzeugen. Im Supraleiter findet die Feldverdrängung auch beim Abkühlen im konstanten Feld (also ohne Induktion) beim Phasenübergang statt und ist deshalb ein unabhängiger Effekt.

Als Ergebnis dieser Diskussion sehen wir, daß es sich lohnt, die Antwort-Funktion $K(\boldsymbol{q}, \omega)$ genauer anzuschauen.

Antwort-Theorie:

Der Hamilton-Operator für Elektronen im Magnetfeld lautet:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \sum_\sigma \int d^3x \, \Psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x}) (-i\hbar \boldsymbol{\nabla} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t))^2 \Psi_\sigma(\boldsymbol{x}) \\ &= H_0 + H_1 + H_2 \,, \end{aligned} \tag{8.93}$$

dabei ist H_1 linear, H_2 quadratisch in $\boldsymbol{A}$. Für den Strom-Operator erhalten wir:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) &= -\frac{e}{2m} \sum_\sigma \Psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x}) \big(-i\hbar \boldsymbol{\nabla} + e\boldsymbol{A}\big) \Psi_\sigma(\boldsymbol{x}) \\ &= \boldsymbol{j}_p(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{j}_d(\boldsymbol{x}) \,, \end{aligned} \tag{8.94}$$

mit der sogenannten paramagnetischen Stromdichte

$$\boldsymbol{j}_p(\boldsymbol{x}) = \frac{ei\hbar}{2m}\sum_\sigma \Big(\Psi^\dagger_\sigma(\boldsymbol{\nabla}\Psi_\sigma) - (\boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger_\sigma)\Psi_\sigma\Big)$$

und dem diamagnetischen Anteil

$$\boldsymbol{j}_d(\boldsymbol{x}) = -\frac{e^2}{m}\boldsymbol{A}\sum_\sigma \Psi^\dagger_\sigma\Psi_\sigma = -\frac{e^2}{m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\, n(\boldsymbol{x})\,.$$

Bei der Berechnung des Stromes müssen wir beide Anteile berücksichtigen. Für den diamagnetischen Anteil brauchen wir nur die Elektronendichte im Gleichgewichtszustand. Für den paramagnetischen Anteil müssen wir die Antwort auf die Störung durch das Vektorpotential ausrechnen. Hier genügt uns der lineare Term H_1 als Störoperator, der sich durch den paramagnetischen Strom-Operator ausdrücken lässt:

$$H_1 = -\int d^3x\, \boldsymbol{j}_p(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\,. \tag{8.95}$$

Damit erhalten wir für die Strom-Antwort mit der anfangs genannten Orts- und Zeitabhängigkeit

$$\langle J_\alpha(\boldsymbol{q})\rangle_t = \sum_\beta \Big(\chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega) - \frac{e^2 n}{m}\delta_{\alpha\beta}\Big)A_\beta(\boldsymbol{x},t) \tag{8.96}$$

mit

$$\chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dt\, \mathrm{e}^{i(\omega+i\delta)t}\,\frac{1}{\mathrm{Vol}}\langle[j^p_\alpha(\boldsymbol{q},t), j^p_\beta(-\boldsymbol{q},0)]\rangle\,. \tag{8.97}$$

Drücken wir die Strom-Suszeptiblität durch die entsprechende retardierte Greensche Funktion aus, dann erhalten wir schließlich für isotrope Systeme:

$$K(\boldsymbol{q},z) = \left[\frac{1}{\mathrm{Vol}}\langle\langle j_x(\boldsymbol{q}); j_x(-\boldsymbol{q})\rangle\rangle_z + \frac{e^2 n}{m}\right]. \tag{8.98}$$

Im Normalzustand wird der konstante diamagnetische Term e^2n/m durch einen gleich großen konstanten Term in der Korrelationsfunktion gerade kompensiert. Das ist nicht so im supraleitenden Zustand.

Berechnung der Strom-Korrelationsfunktion im Normalzustand

Im Falle $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{0}$ erhält man:

$$j_\alpha(\boldsymbol{0}) = -\frac{e\hbar}{m}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} k_\alpha c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}\sigma}\,. \tag{8.99}$$

Wir wollen die Leitfähgikeit für ein System mit statistisch verteilten Verunreinigungen berechnen[22]. Durch die Streuung an Verunreinigungen ist die Einteilchen-Greensche Funktion nicht mehr diagonal in $\boldsymbol{k}$. Durch Mittelung über die Position der Verunreinigung wird die Translationsinvarianz wieder hergestellt und wir erhalten

$$\overline{G(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',i\omega_n)} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\,G(\boldsymbol{k},i\omega_s) = \frac{\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}}{i\omega_n + i\gamma s(n) - \xi_{\boldsymbol{k}}} \tag{8.100}$$

mit $\xi_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu$, $\gamma = 1/2\tau = \pi N(\epsilon_F)V^2$ bei Streuung in Bornscher Näherung an einem punktförmigen Störstellen-Potential V und $s(n) := \mathrm{sign}(\omega_n)$.

Eine analoge Näherung machen wir auch bei der Berechnung der Strom-Korrelationsfunktion und erhalten dann (bei Vernachlässigung der Vertex-Korrekturen):

$$\begin{aligned}\Pi(i\omega_s) &= \frac{1}{\mathrm{Vol}}\langle\langle j_x(\boldsymbol{q}); j_x(-\boldsymbol{q})\rangle\rangle_{i\omega_s}\\ &\approx \frac{e^2}{m^2}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{2}{\mathrm{Vol}}\sum_{\boldsymbol{k}} k_x^2\,G(\boldsymbol{k},i\omega_n+i\omega_s)\,G(\boldsymbol{k},i\omega_n)\end{aligned} \tag{8.101}$$

einen ganz ähnlichen Ausdruck wie die Dichte-Korrelations-Funktion. Im Folgenden werden wir unter dem Integral k_x^2 durch $k^2/3$ ersetzen und die k-Summe durch ein Integral über die Energie $\xi_{\boldsymbol{k}}$ ersetzen.

Am einfachsten wäre es, wenn wir zuerst über $\xi_{\boldsymbol{k}}$ integrieren. Das ist aber gefährlich, wenn wir dabei die Integration von $-\infty$ bis $+\infty$ erstrecken wegen der schlechten Kovergenz des Integrals. Das sieht man an folgendem Beispiel:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\int d\xi \frac{1}{(i\omega_n - \xi)^2}\,. \tag{8.102}$$

Wenn wir zuerst über ξ integrieren, erhalten wir 0, weil die Pole auf der gleichen Seite der reellen Achse liegen. Summieren wir zuerst über ω_n, dann erhalten wir mit der Poissonschen Summenformel:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\int d\xi\frac{1}{(i\omega_n-\xi)^2} &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\int d\xi\frac{1}{(i\omega_n-\xi-\epsilon)(i\omega_n-\xi+\epsilon)}\\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\int d\xi\frac{f(\xi+\epsilon)-f(\xi-\epsilon)}{2\epsilon} = -1\end{aligned} \tag{8.103}$$

[22]Der entsprechende Formalismus ist ausführlich in Kapitel 7 diskutiert. Hier wollen wir uns auf die wesentlichen Aspekte beschränken.

und sehen gleichzeitig, daß nur das Verhalten an der Fermikante wichtig ist. Korrekt ist es, wenn wir zuerst über ω_n summieren. Das ist umständlich bei endlicher Verunreinigungsstreuung. Wir können das umgehen, indem wir in dem Integranden einen Term mit dem gleichen asymptotischen Verhalten subtrahieren und dessen exaktes Ergebnis wieder dazu adddieren:

$$\begin{aligned}\Pi(i\omega_s) &= \frac{2e^2k_F^2}{3m^2}N(\epsilon_F) \\ &\Big[\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\int d\xi\Big(\frac{1}{(i\omega_n+i\omega_s+i\gamma s(n+s)-\xi)(i\omega_n+i\gamma s(n)-\xi)} \\ &-\frac{1}{(i\omega_n-\xi)(i\omega_n-\xi)}\Big)-1\Big]\,. \end{aligned} \tag{8.104}$$

Dann können wir sorglos zuerst über ξ mit dem Residuensatz integrieren und erhalten mit (für $\omega_s > 0$)

$$\begin{aligned}&\sum_{\omega_n}\int d\xi\,\frac{1}{(i\omega_n+i\omega_s+i\gamma s(n+s)-\xi)(i\omega_n+i\gamma s(n)-\xi)} \\ &\qquad = \sum_{-i\omega_s<\omega_n<0} 2\pi i\frac{1}{i\omega_s+2i\gamma} = \frac{i\omega_s}{i\omega_s+2i\gamma}\end{aligned} \tag{8.105}$$

das Resultat:

$$\Pi(i\omega_s) = \frac{2e^2k_F^2}{3m^2}N(\epsilon_F)\Big[\frac{i\omega_s}{i\omega_s+2i\gamma}-1\Big]\,, \tag{8.106}$$

oder nach analytischer Fortsetzung auf die reelle Achse (von oben):

$$\Pi(\omega) = \frac{2e^2k_F^2}{3m^2}N(\epsilon_F)\Big[\frac{\omega}{\omega+i/\tau}-1\Big]\,. \tag{8.107}$$

Nun ist $N(\epsilon_F) = mk_F/2\pi^2$, $n = k_F^3/3\pi^2$, damit ist der Vorfaktor genau

$$\frac{2e^2k_F^2}{3m^2}N(\epsilon_F) = \frac{e^2n}{m} \tag{8.108}$$

und hebt den diamagnetischen Term weg. Für die Antwort-Funktion erhalten wir damit

$$K(\mathbf{0},\omega) = \frac{e^2n}{m}\frac{\omega}{\omega+i/\tau}, \quad \sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m}\frac{1}{1-i\omega\tau}\,. \tag{8.109}$$

Berechnung der Strom-Korrelationsfunktion im supraleitenden Zustand

Zunächst ohne Verunreinigungsstreuung für $\omega = 0, \boldsymbol{q} = \mathbf{0}$:

Wir schreiben den Strom-Operator für $\boldsymbol{q} = \mathbf{0}$ im Nambu-Raum:

$$j_\alpha(\mathbf{0}) = -\frac{e\hbar}{m} \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} k_\alpha c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} = -\frac{e\hbar}{m} \sum_{\boldsymbol{k}} k_\alpha \Psi^\dagger(\boldsymbol{k}) \tau_0 \Psi(\boldsymbol{k})\,. \tag{8.110}$$

Dann erhalten wir für die Strom-Korrelationsfunktion bei der Frequenz $i\omega_s = 0$:

$$\Pi(0) = \frac{e^2}{3m^2} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{2}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}} k^2 \big(G_{11}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) G_{11}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) + G_{12}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) G_{21}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) \big)\,. \tag{8.111}$$

Mit Hilfe der Partialbruch-Zerlegungen

$$G_{11}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = u^2_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{i\omega_n - E_{\boldsymbol{k}}} + v^2_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{i\omega_n + E_{\boldsymbol{k}}} \tag{8.112}$$

$$G_{12}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = -u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{i\omega_n - E_{\boldsymbol{k}}} + u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{i\omega_n + E_{\boldsymbol{k}}} \tag{8.113}$$

und mit Hilfe der Poissonschen Summenformel

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{(i\omega_n - E_{\boldsymbol{k}})(i\omega_n - E_{\boldsymbol{k}})} &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{1}{(i\omega_n - E_{\boldsymbol{k}} - \epsilon)(i\omega_n - E_{\boldsymbol{k}} + \epsilon)} \\ &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(E_{\boldsymbol{k}} + \epsilon) - f(E_{\boldsymbol{k}} - \epsilon)}{2\epsilon} = \frac{\partial f(E_{\boldsymbol{k}})}{\partial E_{\boldsymbol{k}}} \end{aligned} \tag{8.114}$$

und ähnlichen Termen erhalten wir das einfache Resultat (die $u_{\boldsymbol{k}}, v_{\boldsymbol{k}}$ kombinieren sich zu 1)

$$\Pi(0) = \frac{2e^2}{3m^2} \frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\partial f(E_{\boldsymbol{k}})}{\partial E_{\boldsymbol{k}}} \tag{8.115}$$

und damit

$$\begin{aligned} K(\mathbf{0}, 0) &= \frac{e^2 n}{m} \left(1 + \int d\xi \, \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \\ &= \frac{e^2 n}{m} \left(1 - 2 \int_\Delta^\infty dE \, \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \right) \end{aligned} \tag{8.116}$$

ausgedrückt durch die Tunnel-Zustandsdichte $N_s(E) = (\Re e) E / \sqrt{E^2 - \Delta^2}$. Bei $T = 0$ ist der zweite Term 0. Bei $T \to T_c$ verschwindet der gesamte Ausdruck. Der Term in der Klammer kann auch als temperaturabhägige Kondensatdichte interpretiert werden

$$K(\mathbf{0}, 0) = \frac{e^2 n_s(T)}{m} = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2(T)}\,. \tag{8.117}$$

Damit erhalten wir die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Eindringtiefe.

Bei Streuung an statistisch verteilten Verunreinigungen ändert sich an dem Verhalten der Strom-Korrelationsfunktion qualitativ nichts. Zur Berechnung müssen wir die Greenschen Funktionen mit Verunreinigungsstreuung verwenden:

$$\hat{G}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \frac{i\tilde{\omega}_n \tau_0 + \xi_{\boldsymbol{k}} \tau_3 - \tilde{\Delta}_n \tau_1}{(i\tilde{\omega}_n)^2 + \xi_{\boldsymbol{k}}^2 + \tilde{\Delta}_n^2} \tag{8.118}$$

mit

$$\tilde{\omega}_n = i\omega_n + \gamma \frac{i\omega_n}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}}, \quad \tilde{\Delta} = \Delta + \gamma \frac{\Delta}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}},$$

dann können wir nicht mehr so leicht zuerst die ω_n-Summe ausführen. Bei Integration über $\xi_{\boldsymbol{k}}$ erhalten wir

$$K(\mathbf{0}, 0) = \frac{e^2 n}{m} \pi T k_B \sum_{\omega_n} \frac{\Delta^2}{(\omega_n^2 + \Delta^2)(\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2} + \gamma)}. \tag{8.119}$$

8.5 Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Metallen

Zunächst leiten wir einen Ausdruck für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Metallen her[23]. Wir betrachten dabei insbesondere einatomige Metalle.

Wir starten mit der Wechselwirkung der elektronischen Dichte mit dem Potential der Ionen-Rümpfe in Feld-Darstellung

$$H_{ion,el} = \sum_l \int d^3x\, U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}_l) n(\boldsymbol{x}) = \sum_{\sigma l} \int d^3x \Psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x})\, U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}_l) \Psi_\sigma(\boldsymbol{x}). \tag{8.120}$$

Befinden sich die Ionen in ihren Gleichgewichtspositionen $\boldsymbol{R}_l$, dann bilden sie ein periodisches Potential für die Leitungselektronen, das deren Bandstruktur bestimmt. Zur eigentlichen Elektron-Phonon-Wechselwirkung tragen deshalb nur die Verschiebungen der Potentiale bei. Entwickeln wir das Potential bis zur ersten Ordnung in den Auslenkungen $\boldsymbol{X}_l - \boldsymbol{R}_l =: \boldsymbol{u}_l$:

$$U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}_l) - U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_l) \simeq \boldsymbol{\nabla}_l U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_l) \cdot \boldsymbol{u}_l = -\boldsymbol{\nabla}_x U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_l) \cdot \boldsymbol{u}_l\,, \tag{8.121}$$

dann erhalten wir für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung:

$$H_{ep} = -\sum_{l\sigma} \int d^3x\, \Psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{\nabla} U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_l) \cdot \boldsymbol{u}_l \Psi_\sigma(\boldsymbol{x}). \tag{8.122}$$

[23]Für eine ausführlichere Diskussion vergleiche Kapitel 6.

Zur weiteren Analyse zerlegen wir die elektronischen Feldoperatoren nach Bloch-Funktionen

$$\Psi_\sigma(\boldsymbol{x}) = \sum_{n\boldsymbol{k}} \varphi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})\, c_{n\boldsymbol{k}\sigma} \tag{8.123}$$

und die ionischen Auslenkungen nach Phononen-Operatoren:

$$\boldsymbol{u}_l = \sum_{\boldsymbol{q}\lambda} \sqrt{\frac{1}{2NM\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}}}\, \boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda)\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l} A_{\boldsymbol{q}\lambda} \tag{8.124}$$

mit $A_{\boldsymbol{q}\lambda} = b_{\boldsymbol{q}\lambda} + b^\dagger_{-\boldsymbol{q}\lambda}$. Setzt man diese Ausdrücke in H_{ep} ein, dann erhält man:

$$\begin{aligned} H_{ep} \;\; = \;\; & -\sum_{\sigma l}\sum_{\boldsymbol{q}\lambda}\int d^3x \sum_{n'\boldsymbol{k}'}\sum_{n\boldsymbol{k}} \varphi^*_{n'\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\nabla}U(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_l)\varphi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) \\ & \cdot\sqrt{\frac{1}{2NM\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}}}\, \boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda)\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l}\, A_{\boldsymbol{q}\lambda} c^\dagger_{n'\boldsymbol{k}'\sigma} c_{n\boldsymbol{k}\sigma}\,. \end{aligned} \tag{8.125}$$

Dabei sollen sich die Frequenzen und Operatoren der Phononen auf die realen Phononen im Metall beziehen, deren dynamische Matrix eine durch die Leitungselektronen abgeschirmte ionische Wechselwirkung enthält. Geht man von einem Ionensystem ohne die Leitungselektronen aus, dann erhält man als Eigenschwingungen ionische Plasmaschwingungen. Realistische akustische Phononen, deren Frequenz für $\boldsymbol{q} \to \boldsymbol{0}$ verschwindet, erhält man erst durch die elektronische Abschirmung (siehe z.B. das Buch [33]).

Das elektronische Matrixelement kann man noch weiter auswerten, wenn man die elektronischen Wellenfunktionen in ebene Welle und gitterperiodischen Anteil zerlegt:

$$\varphi_{nk}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} u_{nk}(\boldsymbol{x}), \tag{8.126}$$

dann findet man:

$$\begin{aligned} & \int d^3x\, \varphi^*_{n'k'}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\nabla}U(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_l)\varphi_{nk}(\boldsymbol{x}) \\ & \quad = \int d^3x\, u^*_{n'k'}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\nabla}U(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_l)u_{nk}(\boldsymbol{x})\, \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \\ & \quad = \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}_l} \int d^3x\, u^*_{n'k'}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\nabla}U(\boldsymbol{x})u_{nk}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}\,. \end{aligned} \tag{8.127}$$

Die Ausführung der Gittersumme ergibt:

$$\sum_l \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}_l}\, \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}_l} = N\Delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}) \tag{8.128}$$

mit $\Delta(\boldsymbol{q}) = 1$, falls $\boldsymbol{q}$ reziproker Gitter-Vektor, $\Delta(\boldsymbol{q}) = 0$ sonst. Damit erhält man schließlich

$$\begin{aligned} H_{ep} &= -\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\sigma\boldsymbol{q}\lambda} N \int d^3x\, u^*_{n'k'}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{\nabla} U(\boldsymbol{x}) u_{nk}(\boldsymbol{x}) \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-i\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}} \\ &\quad \cdot \boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda) \frac{1}{\sqrt{2NM\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}}} \Delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}) A_{\boldsymbol{q}\lambda} c^\dagger_{n'\boldsymbol{k}'\sigma} c_{n\boldsymbol{k}\sigma}\,. \end{aligned} \tag{8.129}$$

Hier sieht man, daß die Elektron-Phonon-Wechselwirkung bis auf Umklapp-Prozesse den Impuls erhält, d.h. der Impuls $\boldsymbol{q}$ wird von dem Phonon auf das Elektronensystem übertragen.

Beschränkt man sich auf ein Band und ebene Wellen für die Leitungselektronen (d.h. setzt $u_{nk}(\boldsymbol{x}) = 1/\sqrt{\mathrm{Vol}}$) und vernachlässigt Umklapp-Prozesse, dann vereinfacht sich das Matrixelement noch weiter und läßt sich durch die Fourier-transformierte $U(\boldsymbol{q})$ des Potentials ausdrücken:

$$\int d^3x\, \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}\, \boldsymbol{\nabla} U(\boldsymbol{x}) = -\int d^3x\, \boldsymbol{\nabla} \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}} U(\boldsymbol{x}) = i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}) U(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\,. \tag{8.130}$$

Damit erhält man schließlich für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung:

$$H_{ep} = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{Vol}}} \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{q}\lambda} g_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q}\lambda) A_{\boldsymbol{q}\lambda} c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{8.131}$$

mit

$$g_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q}\lambda) = g(\boldsymbol{q}\lambda) = -i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{e}(\boldsymbol{q}\lambda) U(\boldsymbol{q}) \frac{N}{\mathrm{Vol}} \frac{1}{\sqrt{2\rho\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}}} \tag{8.132}$$

und der Massendichte $\rho = MN/\mathrm{Vol}$.

Man sieht, daß in dieser Näherung nur longitudinale Phononen ankoppeln. Das liegt aber u.a. an den vernachlässigten Umklapp-Prozessen. Man könnte meinen, daß die Elektron-Phonon-Wechselwirkung wegen der Singularität des Coulomb-Potentials, $U(\boldsymbol{q}) \sim 1/q^2$ bei kleinen q-Werten besonders groß ist. In der hier verwendeten Theorie der renormierten Phononen werden alle Potentiale durch die Elektronen abgeschirmt. Daher ist die nackte Coulomb-Wechselwirkung durch eine abgeschirmte Wechselwirkung $U(\boldsymbol{q}) \to U(\boldsymbol{q})/\epsilon(\boldsymbol{q})$ zu ersetzen. Für akustische Phononen mit $\omega_q \sim q$ wird dann $g(q) \sim \sqrt{q}$.

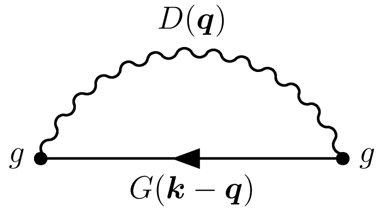


Abbildung 8.3: *Niedrigster phononischer Beitrag zur Elektronen-Selbstenergie.*

8.6 Berechnung der elektronischen Selbstenergie im Normalzustand

Zunächst wollen wir als Vorbereitung auf die Behandlung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung im supraleitenden Zustand die elektronische Selbstenergie im Normalzustand berechnen. In zweiter Ordnung in der Elektron-Phonon-Wechselwirkung ist diese durch den Graphen in Abb. 8.3 gegeben:

$$\Sigma(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = -\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_m}\frac{1}{\mathrm{Vol}}\sum_{\boldsymbol{q}\lambda}|g(\boldsymbol{q},\lambda)|^2\, G(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}, i\omega_m)D(\boldsymbol{q}\lambda, i\omega_n - i\omega_m)\,. \quad (8.133)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} D(\boldsymbol{q}\lambda, i\omega_s) &= \langle\langle A_{\boldsymbol{q}\lambda}; A_{-\boldsymbol{q}\lambda}\rangle\rangle \\ &= \frac{1}{i\omega_s - \omega_{\boldsymbol{q}\lambda}} - \frac{1}{i\omega_s + \omega_{\boldsymbol{q}\lambda}} = \frac{2\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}}{(i\omega_s)^2 - \omega_{\boldsymbol{q}\lambda}} \end{aligned} \quad (8.134)$$

der Propagator für ein Phonon mit Wellenvekor $\boldsymbol{q}$ und Polarisation λ, ω_s ist eine gerade Matsubara-Frequenz. Im Folgenden werden lassen wir den Polarisationsindex weg.

Die Poisson-Summen über die ungerade Matsubara-Frequenz ω_m lassen sich leicht ausführen:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_m}\frac{1}{i\omega_m - \epsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + \mu}\,\frac{1}{i\omega_n - i\omega_m \mp \omega_{\boldsymbol{q}}} = \frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} - \mu) - f(i\omega_n \mp \omega_{\boldsymbol{q}})}{i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + \mu \mp \omega_{\boldsymbol{q}\lambda}}\,. \quad (8.135)$$

Mit $\exp(i\omega_n) = -1$ folgt

$$f(i\omega_n \mp \omega_{\boldsymbol{q}\lambda}) = \begin{cases} 1 + n(\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}) \\ -n(\omega_{\boldsymbol{q}\lambda}) \end{cases} \quad (8.136)$$

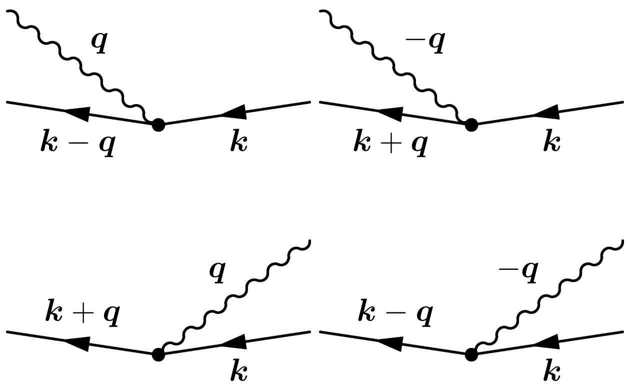


Abbildung 8.4: *Emissions- und Absorptions-Prozesse eines Phonons mit Wellenvektor* $\pm\boldsymbol{q}$.

mit der Bosefunktion $n(x) = 1/(\exp(\beta x) - 1)$. Damit erhält man für die Selbstenergie der Elektronen:

$$\Sigma(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{q}} |g(\boldsymbol{q})|^2 \left(\frac{1 + n_{\boldsymbol{q}} - f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}}{i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + \mu - \omega_{\boldsymbol{q}}} + \frac{n_{\boldsymbol{q}} + f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}}{i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + \mu + \omega_{\boldsymbol{q}}} \right) . \tag{8.137}$$

Die Terme der Selbstenergie entsprechen den 4 verschiedenen Streuprozessen in Abb. 8.4 von Elektronen mit Erzeugung und Vernichtung von Phononen mit Wellenvektor $\pm\boldsymbol{q}$. Das wird deutlicher, wenn wir die Zähler in der Form

$$\begin{aligned} 1 + n_{\boldsymbol{q}} - f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} &= (1 + n_{\boldsymbol{q}})\,(1 - f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}) + n_{\boldsymbol{q}}\, f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} \\ n_{\boldsymbol{q}} + f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} &= (1 + n_{\boldsymbol{q}})\, f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + n_{\boldsymbol{q}}\,(1 - f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}) \end{aligned} \tag{8.138}$$

schreiben und den Imaginärteil der Selbstenergie betrachten, welche zu einer endichen Lebensdauer des Elektronenzustandes $\boldsymbol{k}$ führt. Hierzu tragen nur reelle Prozesse mit Energie-Erhaltung bei:

$$\begin{aligned} -\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k}, \omega + i\delta) \;&=\; \frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{q}} |g(\boldsymbol{q})|^2 \\ &\Big[\big((1 + n_{\boldsymbol{q}})\,(1 - f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}) + n_{\boldsymbol{q}}\, f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}\big)\, \delta(\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + \mu - \omega_{\boldsymbol{q}}) \\ &+ \big((1 + n_{\boldsymbol{q}})\, f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + n_{\boldsymbol{q}}\,(1 - f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}})\big)\, \delta(\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + \mu + \omega_{\boldsymbol{q}}) \Big] . \end{aligned} \tag{8.139}$$

Für $\omega = \epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu$ beschreibt der erste Prozess eine Streuung des Elektrons von $\boldsymbol{k}$ nach $\boldsymbol{k} - \boldsymbol{q}$ mit Erzeugung eines Phonons. Dieser Prozess ist nur möglich, wenn der elektronische Endzustand unbesetzt (Faktor $(1 - f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}})$ ist und ist auch möglich bei $T = 0$, wenn keine Phononen vorhanden sind (Faktor $(1 + n_{\boldsymbol{q}})$). In entsprechende Weise lassen sich die anderen Prozesse interpretieren. Der Realteil der Selbstenergie beschreibt eine Energieverschiebung der Elektronenzustände.

Um die Selbstenergie auszurechnen, muß über das Phononenspektrum summiert werden. Im Falle der Wechselwirkung mit longitudinalen akustischen Phonone können wir einen Trick verwenden, welcher für dreidimensionale Systeme faktisch zu einer Entkopplung der Integration über die Energien der Elektronen und Phononen führt und auch im supraleitenden Zustand verwendet wird.

Wir schreiben $\boldsymbol{k}' := \boldsymbol{k} - \boldsymbol{q}$ und ersetzen die Summe über $\boldsymbol{q}$ durch eine Summe über $\boldsymbol{k}'$ bei festem $\boldsymbol{k}$. Diese zerlegen wir in eine Integration über den Betrag k' von $\boldsymbol{k}'$ und die beiden Winkel θ (zwischen $\boldsymbol{k}'$ und $\boldsymbol{k}$) und φ (um $\boldsymbol{k}$):

$$\frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}'} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^3k' = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int dk' {k'}^2 d\varphi d(\cos\theta) \,. \tag{8.140}$$

Den Winkel θ können wir durch den Betrag von $\boldsymbol{q}$ mittels

$$q^2 = k^2 + {k'}^2 - 2kk' \cos\theta, \quad d(\cos\theta) = -\frac{qdq'}{kk'} \tag{8.141}$$

ausdrücken. Damit erhalten wir:

$$\frac{1}{\mathrm{Vol}} \sum_{\boldsymbol{k}'} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{k'dk'}{k} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} qdq \int d\varphi \tag{8.142}$$

mit $q_{\max} = k+k'$, $q_{\min} = |k-k'|$. Diese Umformung ist soweit exakt. Die Näherung besteht darin, daß für kleine Frequenzen und $k \simeq k_F$ die wichtigen Beiträge zum Integral auch von der Fermikante kommen. Deshalb setzen wir

$$q_{\max} \simeq 2k_F \,, \qquad q_{\min} \simeq 0 \,. \tag{8.143}$$

Ferner verwenden wir

$$d\xi' = k'dk'm \,, \quad N(\epsilon_F) = \frac{mk_F}{2\pi^2}$$

und erhalten damit für die Selbstenergie für $k \simeq k_F$ und kleine Frequenzen (und falls die Phononen nicht von der Richtung von $\boldsymbol{q}$ abhängen):

$$\Sigma(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} N(\epsilon_F) \int d\xi' \, G(\boldsymbol{k}', i\omega_m) \int_0^{2k_F} \frac{qdq}{2k_F^2} \, |g(q)|^2 D(q, i\omega_n - i\omega_m) \,. \tag{8.144}$$

Für den Imaginärteil der Selbstenergie finden wir damit bei $T = 0$ und für $\omega > 0$:

$$\begin{aligned}\Im\mathrm{m}\Sigma(\boldsymbol{k},\omega+i\delta) &= -\pi\frac{1}{\mathrm{Vol}}\sum_{\boldsymbol{q}}|g(q)|^2(1-f_{\boldsymbol{k}'})\delta(\omega-\epsilon_{\boldsymbol{k}'}+\mu-\omega_q) \\ &= -\pi\frac{N(\epsilon_F)}{2k_F^2}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^{2k_F} dq\,q\,|g(q)|^2\,\delta(\omega-\xi'-\omega_q) \\ &= -\pi\frac{N(\epsilon_F)}{2k_F^2}\int\limits_0^\infty\frac{1}{v^2}\int\limits_0^\omega d\omega_q\,\omega_q\,|g(q)|^2 \sim -a\,\omega^3\,. \end{aligned} \tag{8.145}$$

Hierbei haben wir $\omega_q = vq$ und $|g(q)|^2 \sim q$ für akustische Phonen verwendet. Die Streurate der Elektronen wächst wie ω^3 und ist damit proportional zur integrierten Zustandsdichte der Phononen. Beachte: Bei der Berechnung des elektrischen Widerstandes muß man Vertex-Korrekturen berücksichtigen. Dann erhält man einen Beitrag proportional zu ω^5 bzw. T^5 zum Widerstand.

8.7 Eliashberg-Theorie

Für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Nambu-Schreibweise erhält man:

$$H_s = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{Vol}}}\sum_{\boldsymbol{kq}}\gamma_{\boldsymbol{q}}\Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}\tau_3\Psi_{\boldsymbol{k}}A_{\boldsymbol{q}} \tag{8.146}$$

mit

$$\Psi_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\end{pmatrix}, \quad A_{\boldsymbol{q}} = b_{\boldsymbol{q}} + b^\dagger_{-\boldsymbol{q}}\,. \tag{8.147}$$

Die Dyson-Gleichung lautet:

$$\hat{G}^{-1}(\boldsymbol{k},i\omega_n) = \hat{G}_0^{-1}(\boldsymbol{k},i\omega_n) - \hat{\Sigma}(\boldsymbol{k},i\omega_n) \tag{8.148}$$

mit

$$\hat{G}_0^{-1}(\boldsymbol{k},i\omega_n) = i\omega_n - \tau_3(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu)\,. \tag{8.149}$$

Der Beitrag der Phononen zur Selbstenergie ist

$$\hat{\Sigma}(\boldsymbol{k},i\omega_n) = -\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{\mathrm{Vol}}\sum_{\boldsymbol{k}'}|\gamma_{\boldsymbol{q}}|^2\tau_3\hat{G}(\boldsymbol{k}',i\omega_m)\tau_3 D(\boldsymbol{q},i\omega_s) \tag{8.150}$$

mit $\omega_s = \omega_n - \omega_m$, $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$.

Wir verwenden nun die Zerlegung (8.81) der Selbstenergie nach Beiträgen der einzelnen Nambu-Matrizen. Für die meisten Systeme kann man die k-Abhängigkeit der Selbstenergie vernachlässigen, außerdem ist Σ_1 klein. Mit

$$i\tilde{\omega}_n := \omega_n - \Sigma_0, \quad \tilde{\Delta}_n := -\Sigma_1$$

kann man für die volle Greensche Funktion schreiben:

$$\hat{G}^{-1}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = i\tilde{\omega}_n\tau_0 - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)\tau_3 + \tilde{\Delta}_n\tau_1\,. \tag{8.151}$$

Für den Phonon-Beitrag zur τ_1-Komponente der Selbstenergie findet man dann

$$\tilde{\Delta}_n = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{\text{Vol}}\sum_{\boldsymbol{k}'}|\gamma_{\boldsymbol{q}}|^2\frac{\tilde{\Delta}_m}{(i\tilde{\omega}_m)^2 - \xi_{\boldsymbol{k}'}^2 - \tilde{\Delta}_m^2}D(\boldsymbol{q}, i\omega_s) \tag{8.152}$$

mit $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$ und $\omega_s = \omega_n - \omega_m$.

Zur Ausführung der $\boldsymbol{k}'$-Summation verwenden wir den gleichen Trick zur Separation der elektronischen und phononischen Energie wie im Normalzustand:

$$\tilde{\Delta}_n = -\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_m}N(\epsilon_F)\int d\xi\frac{\tilde{\Delta}_m}{\tilde{\omega}_m^2 + \xi^2 + \tilde{\Delta}_m^2}\int\limits_0^{2k_F}\frac{qdq}{2k_F^2}|\gamma_{\boldsymbol{q}}|^2\frac{2\omega_{\boldsymbol{q}}}{(i\omega_s)^2 - \omega_{\boldsymbol{q}}^2}\,. \tag{8.153}$$

Nach Integration über die Elektronenergie erhält man schließlich die Selbstkonsistenz-Gleichung für die Ordnungsparameter-Funktion

$$\tilde{\Delta}_n = -\pi N(\epsilon_F)\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_m}\frac{\tilde{\Delta}_m}{\sqrt{\tilde{\omega}_m^2 + \tilde{\Delta}_m^2}}v(i\omega_n - i\omega_m) \tag{8.154}$$

mit der effektiven Wechselwirkung

$$v(i\omega_s) = \int\limits_0^{2k_F}\frac{qdq}{2k_F^2}\,|\gamma_q|^2\,\frac{2\omega_q}{(i\omega_s)^2 - \omega_q^2}\,. \tag{8.155}$$

Das Ergebnis (8.154) ist zu vergleichen mit der entsprechenden Gleichung (8.87) im Rahmen der BCS-Theorie. Dort haben wir eine konstante attraktive Wechselwirkung in einem begrenzten Energie-Intervall. Ein ähnliches Resultat erhalten wir auch hier: die durch Phononen vermittelte Wechselwirkung $v(i\omega_s)$ ist attraktiv (< 0) für alle Frequenzen (auf der imaginären Achse). Sie geht stark gegen Null für $\omega_s > (\omega_q)_{\max}$. Ein ähnliches Resultat wie in der BCS-Theorie erhalten wir insbesondere dann, wenn die wesentlichen Beiträge von Phononen mit hohen Frequenzen kommen.

Was kann man mit dem Ergebnis anfangen? Man kann damit die Übergangstemperatur berechnen. Man kann damit Tunnelspektren berechnen und mit dem Experiment vergleichen. Auf diese Weise erhält man detaillierte Informationen über den Beitrag der verschiedenen Phononen zur Paar-Wechselwirkung. Um einigermaßen realistische Ergebnisse zu erhalten, ist es allerdings notwendig, den kurzreichweitigen Beitrag U der abstoßenden Coulomb-Wechselwirkung zu berücksichtigen. An und für sich ist die Coulomb-Wechselwirkung U sehr stark, wirkt aber nur über kurze Distanz, bzw. über die kurze Zeit, in der sich zwei Elektronen nahekommmen. Projeziert man die Coulomb-Wechselwirkung auf den Frequenzraum der Phonon-Wechselwirkung, dann erhält man (Details vgl. das Buch [33]) eine effektive Wechselwirung U^* der Stärke $\mu^* := N(\epsilon_F)U^* \simeq 0.1$.

9 Korrelationseffekte im Festkörper

9.1 Das Hubbardmodell

Abgesehen von der in Kapitel 8 besprochenen Supraleitung, wo die (effektive) Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu einer Instabilität des Fermisees und zur Ausbildung von Cooperpaaren führte, haben wir bislang stillschweigend vorausgesetzt, daß auch das wechselwirkende System für die meisten Rechnungen in guter Näherung durch ein (effektives) Einteilchenbild beschrieben werden kann. Diese Annahme liegt ganz in der Tradition von Landaus Fermi-Flüssigkeits-Theorie (siehe Kapitel 5.1), wonach im wechselwirkenden System die niederenergetischen Anregungen in der Tat adiabatisch mit denen des nichtwechselwirkenden Systems zusammenhängen. Wie in Kapitel 5.9 zusammengefaßt, kann man die Störungstheorie dann im Sinne einer Fermi-Flüssigkeit interpretieren.

Ob man tatsächlich eine Fermi-Flüssigkeit erhält, ist allerdings im Prinzip für jedes System nachzuprüfen. Außerdem stellt sich natürlich die Frage, inwieweit die Fermi-Flüssigkeit stabil gegenüber residuellen Wechselwirkungen („Quasiteilchenwechselwirkungen“) ist. Als Beispiel einer solchen Instabilität haben wir bereits in Kapitel 8.1 die Cooperpaarbildung kennengelernt, für die eine beliebig kleine attraktive Wechselwirkung ausreichend ist. Andere Möglichkeiten sind Magnetismus, Ladungsordnung etc. Nun ist es offensichtlich hoffnungslos, für jedes Material explizit nachprüfen zu wollen, ob die Annahmen hinter der Fermi-Flüssigkeits-Beschreibung zutreffen oder nicht. Aus Erfahrung weiß man jedoch, daß Systeme, bei denen die Physik durch s- oder p-Elektronen (Alkali-, Erdalkalimetalle, Halbleiter) bestimmt wird, sehr gut in dieser Theorie beschrieben werden können. Anders hingegen Verbindungen, welche partiell gefüllte d- bzw. f-Orbitale enthalten, also Übergangsmetalle und Lanthanide bzw. Actinide. Hier hängt es im Allgemeinen sehr stark von der Verbindung ab, ob das System sich noch als Fermi-Flüssigkeit beschreiben läßt. Ein paar Beispiele sind in Tabelle 9.1 aufgeführt.

Die generelle Annahme ist, daß die andiskutierten Effekte wesentlich mit der Existenz vergleichsweise lokalisierter d- bzw. f-Zustände zusammenhängen. Beispielweise ist $LaCu_6$ isostrukturell mit $CeCu_6$ aber völlig „langweilig“ in seinen physikalische Eigenschaften. Stärkere Lokalisierung von Zuständen bedeutet einerseits, daß die Beweglichkeit der Elektronen in diesen Zuständen drastisch re-

Material	Erwartet	Experiment
$CeCu_6$, $CeAl_3$	Magnetismus lokalisierter f-Spins	Fermi-Flüssigkeit mit $m^*/m \approx 10^3$
La_2CuO_4	Metall (ungerade Anzahl von Elektronen/Elementarzelle)	Antiferromagnetischer Isolator für $T < T_N \approx 300K$ Paramagnetischer Isolator für $T > T_N$
$(V_{1-x},Cr_x)_2O_3$	Metall (ungerade Anzahl von Elektronen/Elementarzelle)	Antiferromagnetischer Isolator für $T < T_N \approx 170K$ Paramagnetischer Isolator für $T > T_N$ und $x = 0$ Paramagnetisches Metall für $T > T_N$ und $x \gtrsim 1\%$

Tabelle 9.1: *Korrelierte Elektronensysteme.*

duziert sein wird, was sich in einer schmäleren Verteilung der Energieniveaus dieser Zustände im Festkörper ausdrückt („Bandbreite"). Andererseits werden aufgrund desselben Effekts sich Elektronen in diesen Zuständen vergleichsweise häufig auf atomarer Skala nahekommen, so daß die ansonsten abgeschirmte Coulombabstoßung wieder an Einfluß gewinnen wird. Auf diesen Überlegungen basiert das einfachste Modell zur Beschreibung von Wechselwirkungseffekten in Festkörpern, das Hubbardmodell.

Die Philosophie hinter dem Hubbardmodell ist folgende:

- Es treten nur wenige, vergleichsweise schmale Energiebänder an der Fermienergie auf.
- Die zugehörigen Zustände sind relativ stark am Atom (in der Elementarzelle) lokalisiert.

In diesem Fall ist es sinnvoll, die Zustände in der Wannierbasis

$$\Psi_\alpha(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} u_{\boldsymbol{k}\alpha}(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{r})$$

auszudrücken, wobei $\boldsymbol{R}_i$ die Position des i-ten Atoms (Elementarzelle), $\boldsymbol{k}$ in der ersten Brillouin-Zone, und $u_{\boldsymbol{k}\alpha}(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{r})$ der gitterperiodische Anteil der Blochfunktion ist. Damit ergibt sich z.B. für das Coulombmatrixelement[24]

$$U_{ij;i'j'} = \int d^3r\, d^3r'\, \Psi^*(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{r})\Psi^*(\boldsymbol{R}_j - \boldsymbol{r}')\tilde{V}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{R}_{i'} - \boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{R}_{j'} - \boldsymbol{r}') \quad . \tag{9.1}$$

[24] Den Index α lassen wir im Folgenden weg, d.h. wir beschränken uns auf *einen* relevanten Zustand pro Elementarzelle.

Wesentlich ist, daß

- aufgrund der Abschirmung $\tilde{V}$ nurmehr kurzreichweitig ist und
- die Wellenfunktionen $\Psi(\ldots)$ selber ebenfalls stark um die jeweiligen Zentren lokalisiert sind.

In diesem Fall wird der dominierende Beitrag $U_{ii;ii} \equiv U$ sein. Die anderen, nichtlokalen Coulombmatrixelemente werden deutlich kleiner sein und zudem extrem schnell mit dem Abstand der Zentren voneinander abfallen. Ähnliche Argumente lassen sich für den kinetischen Anteil des Hamiltonians benutzen. Allerdings muß man, da dieser nichtlokal ist, zumindest das Matrixelement zwischen nächsten Nachbarn im Gitter berücksichtigen, d.h.

$$\int d^3r\, \Psi^*(\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{r}) H_{\mathrm{kin}}(\boldsymbol{r}) \Psi(\boldsymbol{R}_j - \boldsymbol{r}) = \begin{cases} -t, \text{ falls } i \text{ und } j \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 \text{ sonst} \end{cases}$$

Faßt man diese Überlegungen zusammen, so ergibt sich das Hubbardmodell

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i} \sum_{\sigma\sigma'} c^\dagger_{i\sigma} c^\dagger_{i\sigma'} \underbrace{c_{i\sigma'} c_{i\sigma}}_{\propto \delta_{\sigma',\bar{\sigma}}} \\ &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c^\dagger_{i\bar{\sigma}} c_{i\bar{\sigma}} c_{i\sigma} \qquad (9.2) \\ &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad . \end{aligned}$$

$c^\dagger_{i\sigma}$ erzeugt dabei ein Elektron am Atom $\boldsymbol{R}_i$ mit Spin σ (genauer: in der Einheitszelle i und in dem relevanten Band an der Fermienergie) und $\langle i, j \rangle$ bezeichnet Summation über nächste Nachbarn.

9.2 Symmetrien des Hubbardmodells

Bevor wir uns den Eigenschaften des Hubbardmodells in den Grenzfällen schwacher bzw. starker Kopplung zuwenden, sollen einige interessante Symmetrieeigenschaften des Modells diskutiert werden.

1. $SU(2)$, Spinrotationsinvarianz
   Der lokale Spinoperator $\boldsymbol{S}_i$ kann mit Hilfe der Pauli-Spinmatrizen als

$$\boldsymbol{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} c^\dagger_{i\alpha} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta} \ , \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ausgedrückt werden. Für z.B. S_i^z erhält man die Standardform $S_i^z = (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})/2$. Eine Drehung der lokalen Spinbasis wird beschrieben durch eine Matrix $U \in SU(2)$ gemäß

$$c'_{i\sigma} = U_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma} \quad .$$

Der Spinoperator transformiert sich dann gemäß

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S}'_i &= \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta} {c'_{i\alpha}}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c'_{i\beta} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta} c^\dagger_{i\alpha} \left(U^{-1}\boldsymbol{\sigma}U\right)_{\alpha\beta} c_{i\beta} \\ &\overset{!}{=} \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta} c^\dagger_{i\alpha} \left(\hat{D}\boldsymbol{\sigma}\right)_{\alpha\beta} c_{i\beta} = \hat{D}\boldsymbol{S}_i \quad . \end{aligned}$$

Die Transformation U der Spinbasis induziert also eine Rotation $\hat{D}$ des Spinoperators, d.h. eine Drehung der Quantisierungsachse. Nun ist offensichtlich ohne äußeres Feld die Wahl der Quantisierungsachse beliebig, d.h. das Hubbardmodell sollte invariant genüber der obigen Transformation sein. Wegen der expliziten Spinsumme gilt dies trivialerweise für den Hüpfterm. Wie steht es aber mit der Wechselwirkung

$$H_I = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \qquad ? \tag{9.3}$$

Dies wird klar, wenn man (9.3) als

$$H_I = -\frac{2U}{3}\sum_i \boldsymbol{S}_i^2 + \frac{1}{2}N_e U \tag{9.4}$$

schreibt.
Beweis: Zunächst einmal ist

$$\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\gamma\eta} = 2\delta_{\alpha\eta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\eta} \quad . \tag{9.5}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} 4\boldsymbol{S}_i^2 &= \sum_{\alpha\beta\gamma\eta} c^\dagger_{i\alpha} c_{i\beta} c^\dagger_{i\gamma} c_{i\eta}\, \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\gamma\eta} \\ &= \sum_{\alpha\gamma} \Big\{ 2 \underbrace{c^\dagger_{i\alpha} c_{i\gamma} c^\dagger_{i\gamma} c_{i\alpha}}_{\substack{= c^\dagger_{i\alpha}[1 - c^\dagger_{i\gamma}c_{i\gamma}]c_{i\alpha} \\ = n_{i\alpha} + c^\dagger_{i\alpha}c^\dagger_{i\gamma}c_{i\alpha}c_{i\gamma} \\ = n_{i\alpha} + c^\dagger_{i\alpha}[\delta_{\alpha\gamma} - c_{i\alpha}c^\dagger_{i\gamma}]c_{i\gamma} \\ = n_{i\alpha} + n_{i\alpha}\delta_{\alpha\gamma} - n_{i\alpha}n_{i\gamma}}} - n_{i\alpha}n_{i\gamma} \Big\} = 6n_i - 3 \underbrace{\sum_{\alpha\gamma} n_{i\alpha}n_{i\gamma}}_{\substack{= 2n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} + (n_{i\uparrow})^2 + (n_{i\downarrow})^2 \\ = 2n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} + n_i}} \\ &= 3n_i - 6n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \end{aligned}$$

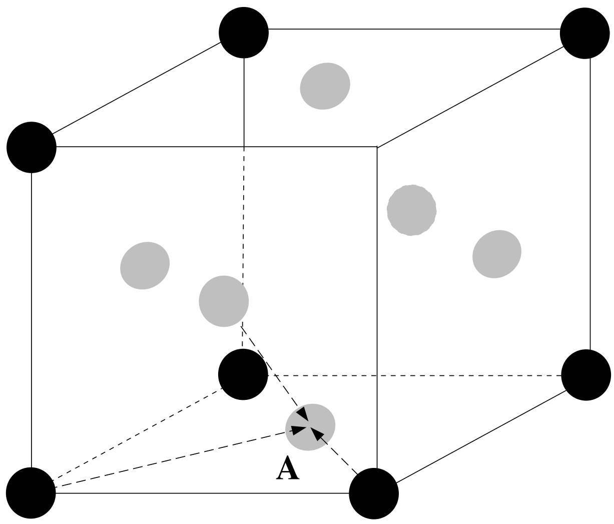


Abbildung 9.1: *Einheitszelle des fcc-Gitters.*

und schließlich (9.4).

Diese spezielle Form des Hubbardmodells zeigt auch sofort, daß für $U > 0$ die Wechselwirkungsenergie minimal wird, wenn der Spin pro Gitterplatz maximal ist. Man erkennt hier bereits, daß das Hubbardmodell zumindest für den Fall $N_e = N$ (d.h. ein Teilchen pro Gitterplatz) einen magnetisch geordneten Zustand favorisiert.

2. Teilchen–Loch–Symmetrie

   Gitterstrukturen, die man so in zwei Untergitter a und B aufteilen kann, daß jeder Gitterplatz $i \in A$ nur Gitterplätze $j \in B$ als nächste Nachbarn hat, nennt man bipartite Gitter. Gitter diesen Typs sind z.B. einfach kubische und kubisch-raumzentrierte Gitter, aber nicht kubisch-flächenzentrierte (vgl. Abb. 9.1): Der Punkt A hat sowohl schwarze („Gitter A“) als auch graue („Gitter B“) nächste Nachbarn.

   Für bipartite Gitter hat das Hubbardmodell noch zwei weitere interessante Symmetrien. Diese werden besonders einfach deutlich, wenn man den Wechselwirkungsterm als

$$H_I = U \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}UN\left(n - \frac{1}{2}\right) \tag{9.6}$$

   schreibt, wobei N die Zahl der Gitterplätze und $n = N_e/N$ die mittlere

Besetzungszahl ist. Betrachten wir nun folgende Transformation

$$c_{i\sigma} \to \begin{cases} d^\dagger_{i\sigma} \text{ für } i \in A\,, \\ \\ -d^\dagger_{i\sigma} \text{ für } i \in B\,. \end{cases} \tag{9.7}$$

Die Operatoren $d^\dagger_{i\sigma}$ erzeugen ein Loch am Gitterplatz i, d.h. die Transformation vertauscht Teilchen- und Lochbild. Der Hubbardhamiltonian geht unter dieser Transformation über in

$$\begin{aligned} H' &= +t \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} d_{i\sigma} d^\dagger_{j\sigma} + U \sum_i \left(d_{i\uparrow} d^\dagger_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(d_{i\downarrow} d^\dagger_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right) + \frac{UN}{2}\left(\frac{1}{N}\sum_{i\sigma} d_{i\sigma} d^\dagger_{i\sigma} - \frac{1}{2}\right) \\ &= -t \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} d^\dagger_{i\sigma} d_{j\sigma} + U \sum_i \left(n^d_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(n^d_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right) + \frac{UN}{2}\left(2 - n^d - \frac{1}{2}\right)\,. \end{aligned}$$

Insbesondere ist für den halbgefüllten Fall $N_e = N$ bzw. $n = 1$ das Modell invariant gegenüber der Transformation (9.7) und man findet eine Symmetrie bezüglich Teilchen- ($n > 1$) und Lochdotierung ($n < 1$), d.h. die Energien in den Sektoren mit einer gegebenen Teilchen- bzw. Loch-Anzahl sind bis auf eine globale additive Konstante gleich.

3. Vorzeichen von U

   Eine letzte Symmetrie auf bipartiten Gittern kann man sich mittels der Transformation

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow} &\to d_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} &\to \begin{cases} d^\dagger_{i\downarrow} \text{ für } i \in A \\ \\ -d^\dagger_{i\downarrow} \text{ für } i \in B \end{cases} \end{aligned} \tag{9.8}$$

   erschließen. Unter dieser Transformation erhält man

$$H' = -t \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} d^\dagger_{i\sigma} d_{j\sigma} - U \sum_i \left(n^d_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(n^d_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right) - \frac{UN}{2}\left(n^d - \frac{1}{2}\right) + U N_\uparrow \quad .$$

   Abgesehen von dem letzten Term, der wegen $[N_\sigma, H] = 0$ eine Konstante ist, wird also lediglich $U \to -U$. In diesem Sinne sind also das Hubbardmodell mit $U > 0$ und das Hubbardmodell mit $U < 0$ äquivalent, wobei aber $N_e \to 2\,S^z + N$ und $S^z \to (N_e - N)/2$ abgebildet wird. Im Hubbardmodell mit $U < 0$ vertauschen also Spin und Ladung ihre Rolle!

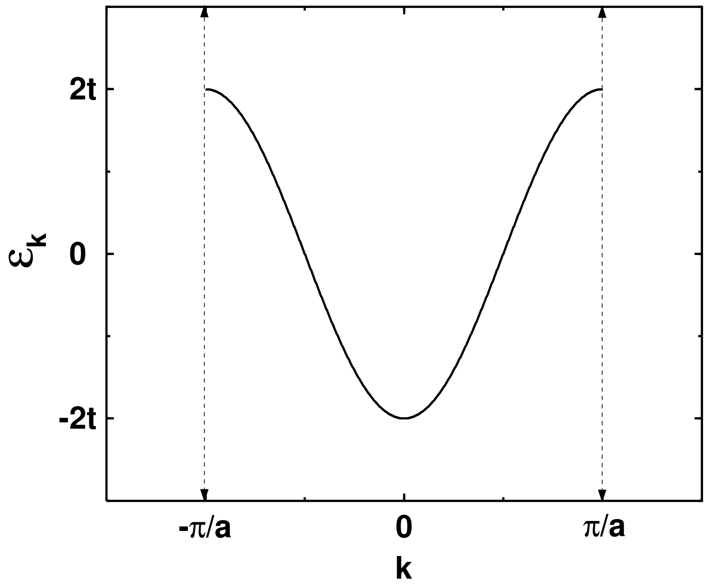


Abbildung 9.2: *Dispersion des Hubbardmodells für $U = 0$.*

9.3 Der Grenzfall schwacher Kopplung

Wir wollen uns das Modell zunächst für den Fall $U/t \ll 1$ näher anschauen. Der Einfachheit halber beschränken wir uns zudem auf ein einfach kubisches Gitter in d Dimensionen. Die Fouriertransformation des Hüpfterms führt dann auf

$$H_t = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \,, \qquad \epsilon_{\boldsymbol{k}} = -2t \sum_{l=1}^{d} \cos(k_l a) \quad . \tag{9.9}$$

Das Spektrum dieses Terms ("Bandbreite") erstreckt sich über einen Bereich $W = 4dt$ und hat schematisch die in Abbildung 9.2 gezeigte Form. Interessant sind auch die Linien konstanter Energie, die in Abbildung 9.3 für ein zweidimensionales Gitter gezeigt ist. Das etwas dicker gezeichnete Quadrat entspricht der Fermi-Fläche des Systems für $n = 1$. Sie hat die spezielle Eigenschaft, daß gegenüberliegende Teile parallel verlaufen und durch einen Impulsvektor verbunden sind, welche rationale Vielfache von reziproken Gittervektoren sind („Nesting“). Im vorliegenden Fall sind dies die Vektoren $\boldsymbol{Q} = (\pm\pi, \pm\pi)$. Wie wir später sehen werden, ist das System in einem solchen Fall instabil gegenüber langreichweitiger Ordnung mit diesem Vektor als Modulation des Ordnungsparameters.

Während der Hüpfterm im Impulsraum sehr einfach wird, ist die Struktur der

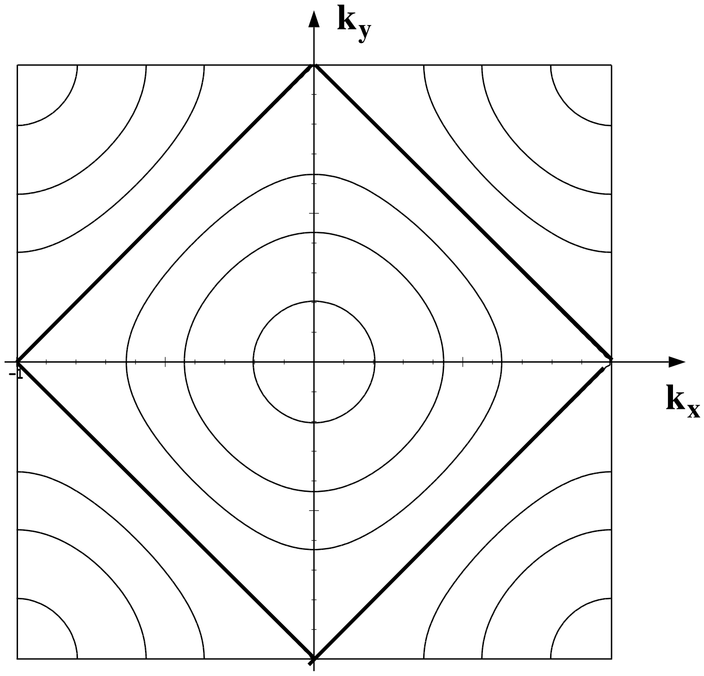


Abbildung 9.3: *Flächen konstanter Energie für ein Quadratgitter.*

Wechselwirkung entsprechend kompliziert:

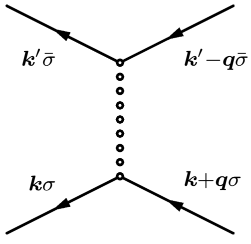
$$H_I = \frac{U}{N} \sum_{\boldsymbol{q}} \rho_\uparrow(\boldsymbol{q})\rho_\downarrow(-\boldsymbol{q}) \ , \quad \rho_\sigma(\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\sigma} \quad . \tag{9.10}$$

Damit können wir die für eine Störungstheorie notwendigen Größen angeben:

- Den freien Propagator

$$G^{(0)}_\sigma(\boldsymbol{k}, i\omega_n) = \xleftarrow[\boldsymbol{k}\sigma]{\qquad} = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}}}$$

- und den fundamentalen Vertex

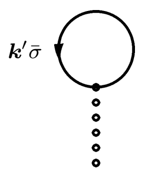


(9.11)

Die Diagrammregeln sind ansonsten identisch mit denen für die normale Coulombwechselwirkung. Man beachte jedoch, daß für das Hubbardmodell aufgrund der Form der Wechselwirkung die Spins am oberen und unteren Ende der Coulomblinie verschieden sein müssen.

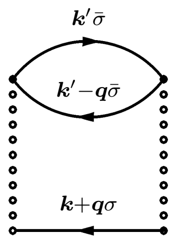
Damit ergeben sich in niedrigster Ordnung in U für die Einteilchenselbstenergie als Beiträge:

$$\Sigma_\sigma^{(1)}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) =$$



$$= U\frac{1}{N\beta}\sum_{\boldsymbol{k}',\omega_n} G_{\bar{\sigma}}^{(0)}(\boldsymbol{k}', i\omega_n)\,\mathrm{e}^{i\omega_n\delta} = U\langle n_{\bar{\sigma}}\rangle$$

$$\Sigma_\sigma^{(2)}(\boldsymbol{k}, i\omega_n) =$$



$$= -\frac{U^2}{N^2\beta^2}\sum_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q}}\sum_{\omega_m,\nu_n} G_\sigma^{(0)}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}, i\omega_n + i\nu_n)\, G_{\bar{\sigma}}^{(0)}(\boldsymbol{k}', i\omega_m)\, G_{\bar{\sigma}}^{(0)}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}, i\omega_m - i\nu_n)$$

$$= -\frac{U^2}{N\beta}\sum_{\boldsymbol{q},\nu_n} G_\sigma^{(0)}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}, i\omega_n + i\nu_n)\Pi^{(0)}(\boldsymbol{q}, i\nu_m)$$

$$\Pi^{(0)}(\boldsymbol{q}, i\nu_m) = \frac{1}{N\beta}\sum_{\boldsymbol{k},\omega_m} G_{\bar{\sigma}}^{(0)}(\boldsymbol{k}, i\omega_m) G_{\bar{\sigma}}^{(0)}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}, i\omega_m + i\nu_n) \quad .$$

Bei der Definition von $\Pi^{(0)}$ wurden noch die Summationen so umbenannt, daß die Form in Kapitel 5, Glg. (5.52) entsteht.

Der erste Term $\Sigma_\sigma^{(1)}(\boldsymbol{k}, i\omega_n)$ ist eine rein statische Energieverschiebung (Hartree-Term). Man beachte, daß wegen der unterschiedlichen Spins an beiden Enden der Coulomblinie hier kein Fockterm auftritt. Damit stammen die Renormierungen in niedrigster Ordnung für Dispersion und Quasiteilchendämpfung vom Term $\Sigma_\sigma^{(2)}(\boldsymbol{k}, i\omega_n)$, der leider bereits so kompliziert ist, daß eine weitere analytische Auswertung nicht mehr möglich ist.

Es ist aber recht illustrativ, sich die für die Berechnung von $\Sigma_\sigma^{(2)}(\boldsymbol{k}, i\omega_n)$ nötige Größe $\Pi^{(0)}(\boldsymbol{q}, i\nu)$ etwas näher zu betrachten. Analog zu Kapitel 5, Glg. (5.52) erhalten wir nach Auswertung der Frequenzsumme mittels der Poissonschen Summenformel

$$\Pi^{(0)}(\boldsymbol{q}, i\nu) = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu) - f(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - \mu)}{\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + i\nu} \quad . \tag{9.12}$$

Für $n = 1$, d.h. $\mu = 0$, und $T \to 0$ folgt mit $i\nu \to \omega + i\delta$ am Wellenvektor $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{Q}$ wegen $\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{Q}} = -\epsilon_{\boldsymbol{k}}$

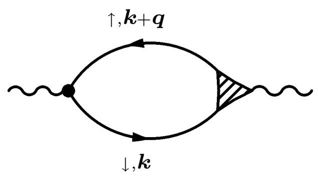
$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(\boldsymbol{Q}, \omega + i\delta) &= \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}}) - f(-\epsilon_{\boldsymbol{k}})}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}} + \omega + i\delta} = -\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\tanh\left(\frac{\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}{2}\right)}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}} + \omega + i\delta} \\ &\propto \ln(\max(T, \omega)) \quad . \end{aligned}$$

Für $T = 0$ haben wir hier also eine logarithmische Singularität für kleine Energieüberträge (Infrarotdivergenz). Hierin deutet sich bereits an, daß eine partielle Aufsummation der Störungsreihe für das Hubbardmodell zumindest in diesem Parameterbereich schief gehen kann. Zu beachten ist, daß diese Divergenz eng verknüpft ist mit der Nestingeigenschaft der Fermi-Fläche für $n = 1$ in bipartiten Gittern. Geht man beispielsweise zu endlicher Dotierung $n \neq 1$ oder betrachtet man nicht-bipartite Gitter (z.B. fcc), so wird diese Divergenz infolge des fehlenden Nestings zumindest in Dimensionen $d > 1$ abgeschnitten. Der Fall $d = 1$ bildet eine Ausnahme, da hier in gewissen Sinne immer Nesting vorliegt (die „Fermi-Fläche“ besteht nur aus zwei Punkten symmetrisch zu $k = 0$). Das hat zur Konsequenz, daß in $d = 1$ diese Infrarotdivergenzen bei $k = k_F$ erhalten bleiben. Das gilt auch noch für höhere Ordnungen Störungstheorie, d.h. jede endliche Störungstheorie in $d = 1$ divergiert! Die Lösung dieses Problems liegt darin, daß zumindest in $d = 1$ die Annahme der Existenz von Quasiteilchen falsch ist. Die niederenergetischen Anregungen eines wechselwirkenden Elektronensystems in $d = 1$ haben keinen Einteilchencharakter, sondern sind kollektive Moden des Systems wie z.B. Spindichtewellen oder Ladungsdichtewellen. Enstprechend anders sind natürlich auch die physikalischen Eigenschaften dieser Systeme. Das für sie generische Modell ist nicht das Fermigas, sondern das sog. Tomonaga-Luttinger-Modell. Entsprechend nennt man diese Systeme „Luttinger-Flüssigkeiten“ (siehe z.B. [35]).

Kehren wir nun zurück zu unserer Störungstheorie in $d > 1$. Die Divergenz von $\Pi^{(0)}$ signalisert auch hier, daß die Fermi-Flüssigkeit möglicherweise instabil ist und man zumindest in $d \geq 2$ mit einem langreichweitig geordneten Grundzustand zu rechnen hat. Aus unseren Symmetrieüberlegungen wissen wir weiterhin, daß der geeignete Kandidat eine magnetische Ordnung sein wird. Daher werden wir uns nun mit der magnetischen Suszeptibilität

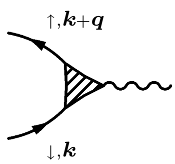
$$\chi^{\perp}(\boldsymbol{q}, i\nu) = -\langle\!\langle S^{+}(\boldsymbol{q}); S^{-}(-\boldsymbol{q})\rangle\!\rangle_{i\nu}\,, \qquad S^{\alpha}(\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{k}} c^{\dagger}_{\boldsymbol{k},\alpha} c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},-\alpha} \tag{9.13}$$

beschäftigen. Analog zur Dichte-Dichte-Suszeptibilität in Kapitel 5 beschreibt die Größe (9.13) die Antwort des Systems auf eine äußeres (in diesem Fall transversales) magnetisches Feld. Eine Divergenz dieser Größe zeigt analog an, daß das System eine Spindichtewelle mit der Modulation $\boldsymbol{q}$ ausbilden will. Geschieht das Ganze noch für $\nu = 0$, so wird dies bei der Temperatur, bei der die Divergenz auftritt, spontan stattfinden. Da die Form der Operatoren $S^{\alpha}(\boldsymbol{q})$, abgesehen vom unterschiedlichen Spin in Erzeuger und Vernichter, ähnlich den Dichteoperatoren in Kapitel 5 ist, kann man die meisten Ergebnisse von dort direkt übernehmen. Insbesondere läßt sich das Ergebnis der diagrammatischen Analyse in der Form einer Blase

$\Pi(i\nu) =$ 

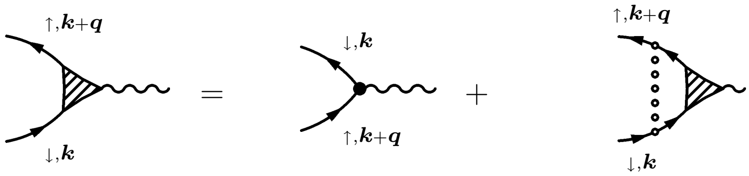
(9.14)

schreiben. Die Vertexfunktion



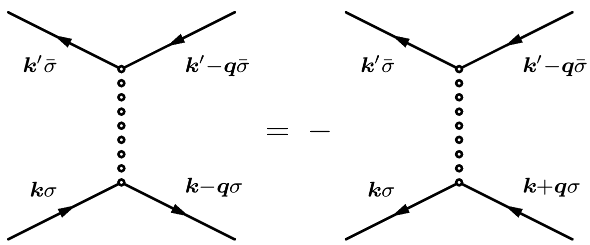
(9.15)

wollen wir wieder in einer RPA-Näherung auswerten. Dabei muß man allerdings beachten, daß der Vertex (9.11) an den beiden Enden der Coulomblinie jeweils unterschiedliche Spins aufweist. Da andererseits die ein bzw. auslaufenden Linien in (9.15) unterschiedliche Spins haben, können diejenigen Graphen, in denen zwei Blasen durch eine Coulomblinie verbunden sind (z.B. oberste Zeile Bild (5.4), S. 98), nicht auftreten. Die Graphen führender Ordnung sind Leitergraphen, wie sie auch in der Störstellenstreuung (Glg. 7.20) auftraten (s.a. untere Zeile Bild (5.4), S. 98). Als letztes muß man noch die definierte Pfeilrichtung im Vertex (9.11) beachten. Damit wird man letztlich auf folgende RPA-Struktur geführt:



(9.16)

Zu beachten ist im letzten Diagramm in (9.16), daß hier nicht der ursprüngliche Vertex (9.11) auftritt, sondern am unteren Ende der Coulomblinie die ein- und auslaufende Linien bzw. die zugehörigen Operatoren vertauscht wurden und wir so ein zusätzliches Vorzeichen erhalten:



(9.17)

Der analytische Ausdruck der Gleichung (9.16) lautet

$$\begin{aligned}\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q};i\omega_n,i\omega_n+i\nu) = \ & 1-\tfrac{U}{N\beta}\textstyle\sum_{\boldsymbol{k}',\nu_l}\ G_\downarrow(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}',i\omega_n+i\nu-i\nu_l)\times \\ & G_\uparrow(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}',i\omega_n-i\nu_l)\times \\ & \Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}';i\omega_n-i\nu_l,i\omega_n+i\nu-i\nu_l)\,.\end{aligned} \tag{9.18}$$

Durch Umbenennung der Summationen $i\omega_m = i\omega_n - i\nu_l$ und $\boldsymbol{k}' \to \boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$ erhält man

$$\begin{aligned}\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q};i\omega_n,i\omega_n+i\nu) = 1-\frac{U}{N\beta}\sum_{\boldsymbol{k}',\omega_m} & G_\downarrow(\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q},i\omega_m+i\nu)\times \\ & G_\uparrow(\boldsymbol{k}',i\omega_m)\times \\ & \Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q};i\omega_m,i\omega_m+i\nu)\,.\end{aligned} \tag{9.19}$$

In (9.19) gibt es keine explizite Abhängigkeit vom Vektor $\boldsymbol{k}$ und der Frequenz ω_n, so daß letztlich $\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q};i\omega_n,i\omega_n+i\nu) = \Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{q},i\nu)$ gilt. Die Gleichung (9.19) kollabiert dann zu

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{q},i\nu) = 1-\frac{U}{N\beta}\sum_{\boldsymbol{k}',\omega_m} G_\downarrow(\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q},i\omega_m+i\nu)G_\uparrow(\boldsymbol{k}',i\omega_m)\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{q},i\nu) \tag{9.20}$$

mit der Lösung

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{q}, i\nu) &= \frac{1}{1 + U\Pi^{(0)}(\boldsymbol{q}, i\nu)} \\
\Pi^{(0)}(\boldsymbol{q}, i\nu) &= \frac{1}{N\beta} \sum_{\boldsymbol{k}', \omega_m} G_\downarrow(\boldsymbol{k}' + \boldsymbol{q}, i\omega_m + i\nu) G_\uparrow(\boldsymbol{k}', i\omega_m) \quad .
\end{aligned} \tag{9.21}$$

Das Ergebnis für die Suszeptibilität (9.14) ist dann

$$\chi^\perp(\boldsymbol{q}, i\nu) = -\Pi^\perp(\boldsymbol{q}, i\nu) = \frac{\chi^{(0)}(\boldsymbol{q}, i\nu)}{1 - U\chi^{(0)}(\boldsymbol{q}, i\nu)} \quad . \tag{9.22}$$

Man beachte das Vorzeichen im Nenner! Da $\chi^{(0)}(\boldsymbol{q}, 0) \geq 0$, kann man für entsprechend großes U immer eine Instabilität $\chi^\perp(\boldsymbol{q})$ für geeignetes $\boldsymbol{q}$ finden.

Wir sind nun in der Lage, die magnetischen Eigenschaften des Hubbardmodells bei schwacher Kopplung zu studieren. Der Einfachheit halber beschränken wir uns auf den Fall $n = 1$ und die beiden Fälle ferromagnetischer ($\boldsymbol{q} = \boldsymbol{0}$) und antiferromagnetischer ($\boldsymbol{q} = \boldsymbol{Q}$) Ordnung.

1. Ferromagnetismus
   Für $n = 1$ gilt mit (9.12)

   $$\chi^{(0)}(\boldsymbol{q} = \boldsymbol{0}, 0) = -\frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\partial f}{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}}} \overset{T \to 0}{=} \rho_0(0) \quad ,$$

   wobei $\rho_0(\epsilon)$ die Zustandsdichte des nichtwechselwirkenden Systems ist. Eine ferromagnetische Instabilität tritt also dann auf, wenn

   $$1 - U\rho_0(0) = 0 \qquad \text{(Stoner-Kriterium).} \tag{9.23}$$

   Üblicherweise ist $\rho(0) \approx 1/\text{Bandbreite}$, so daß für $d = 3$ Ferromagnetismus für $U > U_c \approx 12t$ zu erwarten wäre, d.h. wir sind hier schon weit außerhalb der Gültigkeit unserer Theorie.

2. Antiferromagnetismus
   Gemäß der Diskussion nach Gleichung (9.12) gilt für $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{Q}$

   $$\begin{aligned}
   \chi^{(0)}(\boldsymbol{Q}, 0) &= \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\tanh \frac{\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}{2}}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}}} = \int d\epsilon \rho_0(\epsilon) \frac{\tanh \frac{\beta\epsilon}{2}}{2\epsilon} \\
   &\overset{\text{TLS}}{=} \int_0^\infty d\epsilon \rho_0(\epsilon) \frac{\tanh \frac{\beta\epsilon}{2}}{\epsilon} \approx \rho_0(0) \int_0^W d\epsilon \frac{\tanh \frac{\beta\epsilon}{2}}{\epsilon} \\
   &\overset{\text{BCS}}{=} \rho_0(0) \ln\left(\frac{2\gamma}{\pi} \frac{W}{T}\right) \quad .
   \end{aligned}$$

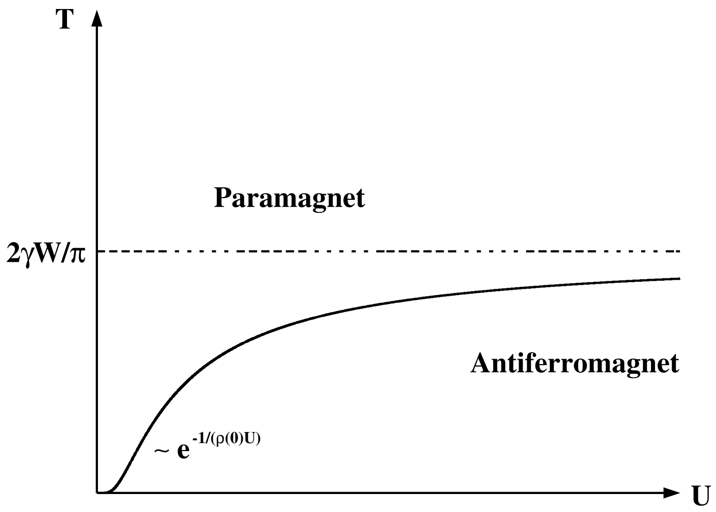


Abbildung 9.4: *Weak-coupling Phasendiagramm des Hubbardmodells.*

Bei der Rechnung wurde die Teilchen-Loch-Symmetrie (TLS) benutzt, die Zustandsdichte durch eine Konstante innerhalb einer Cutoffs W ersetzt und das Ergebnis der BCS-Theorie benutzt (S. 169, Glg. (8.53)). Somit folgt als Kriterium für Antiferromagnetismus

$$1 - U\rho_0(0)\ln\left(\frac{2\gamma}{\pi}\frac{W}{T}\right) = 0$$

für das es offensichtlich für beliebig kleine Werte von U immer eine Lösung gibt, wenn die Temperatur kleiner als

$$T_N(U) = \frac{2\gamma}{\pi} W \mathrm{e}^{-1/(U\rho_0(0))}$$

ist. Man erkennt hier die für Infrarotdivergenzen typische nichtanalytische Abhängigkeit der Übergangstemperatur von der Wechselwirkung.

Für das Phasendiagramm des Hubbardmodells erhalten wir also in erster Näherung das in Abbildung 9.4 gezeigte Bild: Das System ordnet für alle $U > 0$ antiferromagnetisch, wobei für $U \to 0$ die Néel-Temperatur nichtanalytisch von U abhängt, während sie für $U \to \infty$ gegen eine Konstante geht. Natürlich ist zu erwarten, daß bei großem U das hier berechnete T_N nicht mehr stimmen wird. In der Tat werden wir beim Studium des Grenzfalls starker Kopplung sehen, daß $T_N(U)$ für $U \to \infty$ nicht konstant wird, sondern in charakteristischer Weise wieder abnimmt.

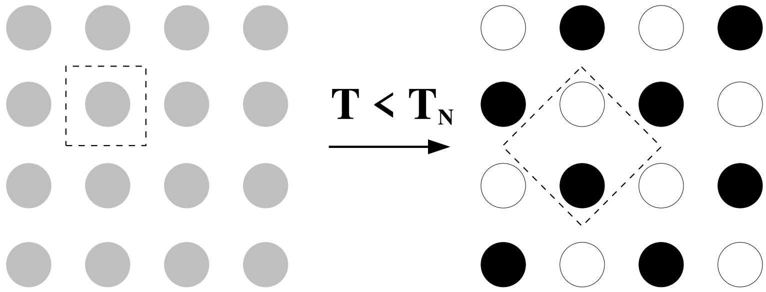


Abbildung 9.5: *Der Néel-Zustand.*

Ein interessanter Punkt ist nun, welche Eigenschaften das System in der geordneten Phase aufweist. Hierfür ist es sinnvoll, die durch die Ordnung induzierte Symmetriebrechung explizit im Hamiltonian einzubauen. Was passiert beim Übergang? Das System oberhalb und unterhalb des Phasenübergangs zeigt Abbildung 9.5. Die grauen Kreise stellen dabei den paramagnetischen Zustand dar, die weißen bzw. schwarzen Kreise symbolisieren Gitterplätze, auf denen ein Spin nach oben bzw. Spin nach unten ausgerichtet ist. Offensichtlich bricht also der Néel-Zustand neben der lokalen Rotationsinvarianz auch noch die Translationsinvarianz, d.h. wir müssen von der Elementarzelle im ungeordneten System (gestricheltes Quadrat im linken Bild) zu einer größeren im geordneten (gestricheltes Quadrat im rechten Bild) übergehen. Entsprechend der größeren Einheitszelle reduziert sich natürlich dann die Brillouinzone. Es ist nun notwendig, den Hamiltonian als Matrix

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}} \Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_{\boldsymbol{k}} \\ \epsilon_{\boldsymbol{k}} & 0 \end{pmatrix} \Psi_{\boldsymbol{k}\sigma} + \hat{U}$$

zu formulieren, wobei die „Spinoren“

$$\Psi_{\boldsymbol{k}\sigma} = \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\sigma;A} \\ c_{\boldsymbol{k}\sigma;B} \end{pmatrix}$$

eingeführt wurden. Der zusätzliche Index A bzw. B kennzeichnet dabei, ob der Operator auf dem schwarzen (A) oder weißen (B) Untergitter wirkt. Wie in der BCS-Theorie kann man dann die Greensche Funktion als Matrix schreiben, wobei man für $U = 0$

$$\hat{G}_{\boldsymbol{k}\sigma}(i\omega_n) = \left[i\omega_n \mathbb{1} - \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_{\boldsymbol{k}} \\ \epsilon_{\boldsymbol{k}} & 0 \end{pmatrix} \right]^{-1}$$

erhält, und baut die Störungstheorie mit diesen Matrizen auf. Für die niedrigste Ordnung (Hartree-Term) ergibt sich als Selbstenergie

$$\hat{\Sigma}^{(1)}_{\boldsymbol{k}\sigma}(i\omega_n) = U \begin{pmatrix} n_{A\bar{\sigma}} & 0 \\ 0 & n_{B\bar{\sigma}} \end{pmatrix} \quad .$$

Eine offensichtliche Symmetrie des Néel-Zustandes ist

$$G^A_{i\sigma}(z) = G^B_{i\bar{\sigma}}(z)$$

und insbesondere $n_{A\sigma} = n_{B\bar{\sigma}}$. Damit ist

$$\hat{G}_{\boldsymbol{k}\sigma}(i\omega_n) = \begin{pmatrix} z - Un_{A\bar{\sigma}} & \epsilon_{\boldsymbol{k}} \\ \epsilon_{\boldsymbol{k}} & z - Un_{A\sigma} \end{pmatrix}^{-1}$$

und speziell

$$G^{AA}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = \frac{z - Un_{A\sigma}}{(z - Un_{A\bar{\sigma}})(z - Un_{A\sigma}) - \epsilon^2_{\boldsymbol{k}}} \quad .$$

Es ist nun geschickt, $n_{A\sigma} = (1 + \sigma m_0)/2$ zu schreiben, wobei $m_0(T_N) = 0$ und $m_0(0) = 1$ der Ordnungsparameter des Néel-Zustandes ist.Damit wird

$$(z - Un_{A\bar{\sigma}})(z - Un_{A\sigma}) - \epsilon^2_{\boldsymbol{k}} = (z - \frac{U}{2})^2 - E^2_{\boldsymbol{k}}$$

$$E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\epsilon_{\boldsymbol{k}} + \frac{U^2 m_0^2}{4}}$$

und die Greensche Funktion erhält nach einigen einfachen Umformungen die Form

$$G^{AA}_{\boldsymbol{k}\sigma}(z) = v^-_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{z - \frac{U}{2} - E_{\boldsymbol{k}}} + v^+_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{z - \frac{U}{2} + E_{\boldsymbol{k}}}$$

mit

$$v^\alpha_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2}\left(1 + \alpha \frac{m_0 U}{2E_{\boldsymbol{k}}}\right) \quad .$$

Wie schon bei der BCS-Theorie öffnet sich auch hier eine Lücke im Spektrum, sobald das System eine endliche Untergittermagnetisierung $m_0 \neq 0$ aufbaut, d.h. der Antiferromagnet bei halber Bandfüllung in bipatiten Gittern ist ein Isolator. Dieses Verhalten wird in Abbildung 9.6 deutlich, wo die Dispersion $E_{\boldsymbol{k}}$ als Funktion von $\boldsymbol{k}$ schematisch dargestellt ist. Wir haben hier also im Prinzip eine mögliche Erklärung für die isolierende Phase solcher Materialien wie $LaCuO_4$ oder V_2O_3 gefunden, da beide Systeme antiferromagnetische Ordnung aufweisen.

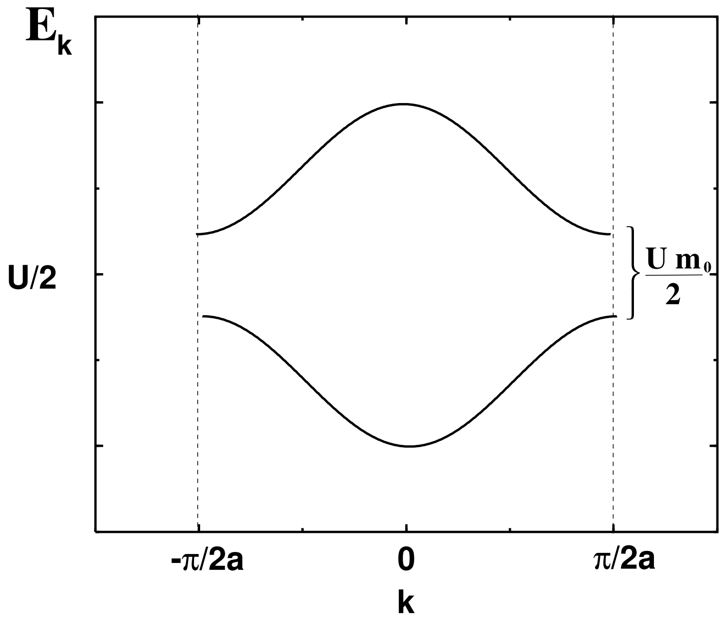


Abbildung 9.6: *Dispersion im Néel-Zustand.*

Die bisherige Rechnung bezog sich auf den Fall $U/t \ll 1$. Im Prinzip stellt sich daher Frage, ob die dort beobachtete isolierende Phase eine Spezialität dieses Grenzfalls ist. Wir möchten kurz ein Symmetrieargument angeben, das zeigt, daß der Isolator eine generische Eigenschaft des Grundzustandes des Hubbardmodells für ein bipartites Gitter bei $n = 1$ ist. Dazu vergegenwärtigen wir uns nochmals die in dieser Struktur mögliche Erweiterung der Elementarzelle aus Abbildung 9.5 und die zugehörige reduzierte Brillouinzone (hervorgehobenes Quadrat in Abbildung 9.3). Wie man sieht, entspricht die „magnetische" erste Brillouin-Zone genau der Fermi-Fläche des nichtwechselwirkenden Systems ohne Symmetriebrechung. Für $U = 0$ wäre die Dispersion in der solchermaßen künstlich reduzierten Symmetrie diejenige in Abb. 9.7, wobei die gestrichelte Linie die ursprüngliche Dispersion aus Abb. 9.2 zeigt und die vollen die bezüglich der verkleinerten Brillouinzone. Offensichtlich findet man eine Entartung zweier Bänder am Brillouinzonenrand, d.h. infolge der Bragg-Streuung wird jede beliebig kleine Wechselwirkung diese Entartung aufheben und somit zu einer Stabilisierung der reduzierten Symmetrie führen.

Dieses Argument zeigt aber auch noch einmal deutlich, daß der hier gefun-

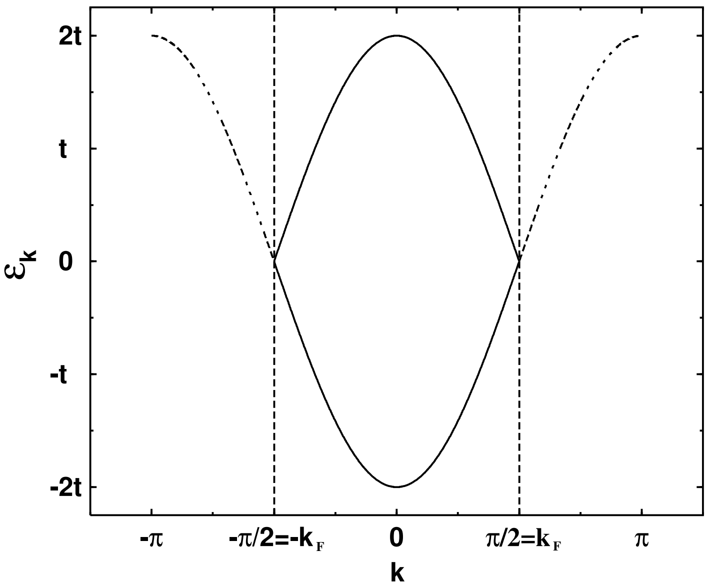


Abbildung 9.7: *Dispersion in reduzierter Symmetrie.*

dene Isolator aufgrund einer sehr speziellen Geometrie des Systems auftritt und auf keinen Fall als generisch für reale Systeme gelten kann.

9.4 Der Grenzfall starker Kopplung

(i) Halbe Füllung, $\langle n \rangle = 1$

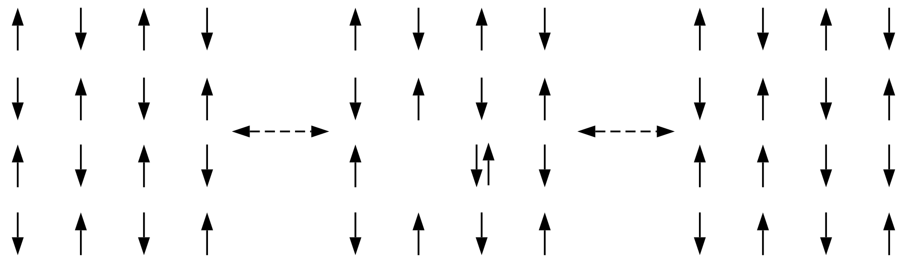
Bei der Diskussion der $SU(2)$-Invarianz des Hubbardmodells haben wir bereits die Form

$$H_I = -\frac{2}{3} U \sum_i \boldsymbol{S}_i^2$$

kennengelernt. Es ist klar, daß für $t/U \to 0$, d.h. $U \to \infty$, das System im Falle $\langle n \rangle = 1$ genau dann die niedrigste Energie einnimmt, wenn $\boldsymbol{S}_i$ *maximal für jeden Gitterplatz* ist; lokal spielen mithin nur die Zustände $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ eine Rolle, die beiden anderen, $|0\rangle$ (leer) und $|2\rangle$ (doppelt besetzt), sind energetisch extrem ungünstig. Vernachlässigt man zunächst den Hüpfterm vollständig, so ist jeder Zustand

$$|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^{N} |\sigma_i\rangle$$

ein Eigenzustand zu H_I mit der Energie $E = -\frac{2}{3}U \sum\limits_i S_i(S_i+1)$, d.h. das System ist hochgradig entartet (2^N-fach). Ein endlicher Hüpfterm wird diese Entartung aufheben, und wir wollen uns jetzt anschauen, auf welche Weise. Betrachten wir dazu zwei der 2^N entarteten Eigenzustände von H_I:



E_0 $\qquad$ $E_0 + U$ $\qquad$ E_0

Die beiden Zustände links und rechts können bei endlichem t durch einen Hüpfprozess vom Typ in der Mitte ineinander überführt werden. Die Energiedifferenz zwischen Anfangs- und Zwischenzustand ist dabei U, so daß in 2. Ordnung Störungstheorie dieser Prozess mit t^2/U zu Buche schlägt. Außerdem unterscheiden sich Anfangs und Endzustand höchstens durch einen vertauschten Spin, so daß man ganz natürlich auf einen effektiven Hamiltonoperator

$$H_{U\to\infty} \sim \frac{t^2}{U} \sum_{\langle i,j\rangle} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j \tag{9.24}$$

geführt wird. Formal erhält man dieses Ergebnis aus der Tatsache, daß in 2. Ordnung in t/U die Energie des Systems durch einen Hamiltonian (bzw. dessen Matrixelemente)

$$H' = -\frac{1}{U} H_t^2 = -\frac{t^2}{U} \sum_{\langle i,j\rangle} \sum_{\langle k,l\rangle} \sum_{\sigma,\sigma'} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} c^\dagger_{k\sigma'} c_{l\sigma'}$$

gegeben ist. Da der Endzustand keine leeren oder doppelt besetzten Plätze enthalten soll, muß zwingend $k = j$ und $i = l$ sein, d.h.

$$H_t^2 = t^2 \sum_{\langle i,j\rangle} \sum_{\sigma,\sigma'} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} c^\dagger_{j\sigma'} c_{i\sigma'} = -t^2 \sum_{\langle i,j\rangle} \sum_{\sigma} \left(c^\dagger_{i\sigma} c_{i\bar\sigma} c^\dagger_{j\bar\sigma} c_{j\sigma} - c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} c_{j\sigma} c^\dagger_{i\sigma} \right) \quad .$$

Nun ist $\sum\limits_\sigma c^\dagger_{i\sigma} c_{i\bar\sigma} c^\dagger_{j\bar\sigma} c_{j\sigma} = S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+$ und $\sum\limits_\sigma c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} c_{j\sigma} c^\dagger_{j\sigma} = n_i - \sum\limits_\sigma n_{i\sigma} n_{j\sigma} = n_i - \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})(n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) - \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) = -2S_i^Z S_j^Z - \frac{1}{2} n_i n_j + n_i$

und damit

$$H_t^2 = -4t^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} \left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) - \frac{1}{4} n_i n_j \right\} - K t^2 N_e \quad .$$

Die Größe K bezeichnet die Zahl der nächsten Nachbarn ($K = 2d$ für ein kubisches Gitter in d Dimensionen). Für den effektiven Hamiltonoperator im Limes $U \to \infty$ gilt also (die Konstante $\sim N_e$ lassen wir weg)

$$H' = \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle i,j \rangle} \left\{ \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right\} \quad . \tag{9.25}$$

In der Tat ist also der Limes starker Kopplung des Hubbardmodells für $\langle n \rangle = 1$ äquivalent zum Heisenbergmodell

$$H' = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j$$

mit Austauschkonstante $J = -4t^2/U$, also einer antiferromagnetischen Kopplung!

An diesem Ergebnis kann man zweierlei erkennen: Erstens beschreibt dieses effektive Modell *lokalisierte Spins*, d.h. man hat mit dem Hubbardmodell einer physikalisch sinnvolle Verallgemeinerung des Heisenbergmodells auf itinerante Elektronen eingeführt. Gleichzeitig bedeutet diese Äquivalenz aber auch, daß zwischen $U = 0$ (Metall) und $U \to \infty$ (Isolator!) ein Metall-Isolator-Übergang als Funktion der Coulombwechselwirkung U auftreten muß (Mott-Hubbard-Übergang).

Zweitens sieht man, daß in $d = 3$ auch für $U \gg t$ der Grundzustand des Systems ein antiferromagnetischer Isolator ist, wobei hier jedoch $T_N \sim J \sim 1/U$ gilt. Das Phasendiagramm in Bild 9.4, welches wir für schwache Kopplung erhalten haben, muß also in etwa gemäß Bild 9.8 erweitert werden.

(ii) Abseits halber Bandfüllung, $\langle n \rangle < 1$
Auch hier läßt sich das störungstheoretische Argument benutzen, nur muß man zumindest noch die Möglichkeit berücksichtigen, daß es leere Plätze im System geben kann ($\langle n \rangle < 1$!). Man wird schließlich auf ein effektives Modell der Form (auch für weiterführende Referenzen siehe z.B. Kapitel

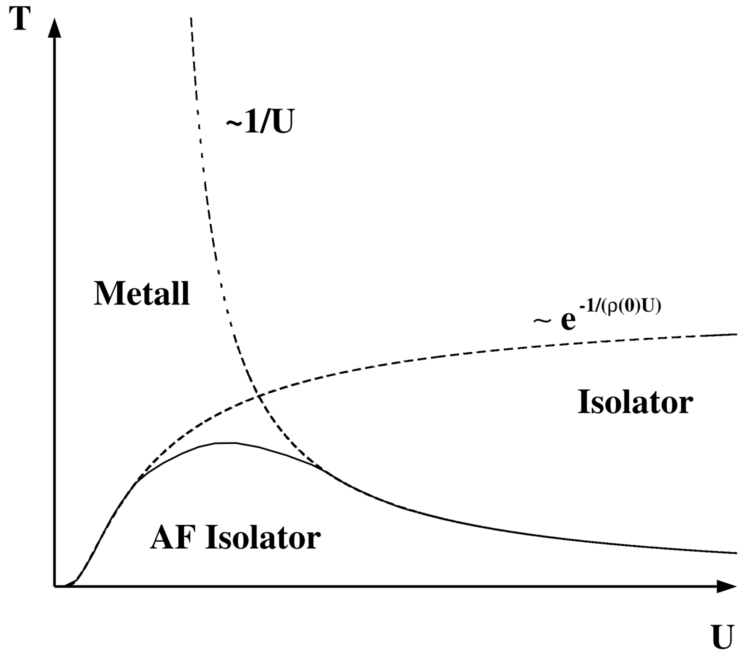


Abbildung 9.8: *Schematisches Phasendiagramm des Hubbardmodells.*

14.3.2 von [11])

$$
\begin{aligned}
H' = \quad & -t \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} \hat{c}^\dagger_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \frac{4t^2}{U}\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j - \frac{1}{4}n_i n_j\right) \\
& -\frac{t^2}{U}\sum_{\langle i,j,k\rangle\sigma}\left(\hat{c}^\dagger_{i\sigma}n_{j\bar{\sigma}}\hat{c}_{k\sigma} - \hat{c}^\dagger_{k\sigma}\hat{c}^\dagger_{j\bar{\sigma}}\hat{c}_{j\sigma}\hat{c}_{i\bar{\sigma}}\right)
\end{aligned}
\tag{9.26}
$$

geführt. Die Klammer $\langle i,j,k\rangle$ steht hier für i, k nächste Nachbarn zu j. Wichtig ist, daß in Gleichung (9.26) die Operatoren $\hat{c}_{i\sigma} = c_{i\sigma}(1 - n_{i\bar{\sigma}})$ keine fermionischen Erzeuger und Vernichter mehr sind, sondern nur auf dem Unterraum ohne Doppelbesetzungen wirken! Üblicherweise vernachlässigt man den Term in der 2. Zeile in Gleichung (9.26) und wird somit zu dem sogenannten t-J-Modell geführt, das im Hinblick auf die Hochtemperatursupraleiter einige Berühmtheit erlangt hat. In jedem Fall kann man von der Struktur des Modells (9.26) ein delikates Wechselspiel zwischen metallischem Verhalten und Magnetismus erwarten. Mehr als diese Platitude läßt sich allerdings ohne gehörigen (numerischen) Aufwand nicht sagen, weder für das Hubbardmodell selber noch das t-J-Modell. Besonders letzteres erweist sich als äußerst kompliziert, und zwar aufgrund der Projektionseigenschaften der Operatoren $\hat{c}_{i\sigma}$. Da diese Operatoren nämlich drei fermionische Standardoperatoren enthalten, gibt es im Modell (9.26) keinen Anteil mehr, der bilinear in Erzeugern und Vernichtern ist. Das bedeutet, daß die Grundlage der ganzen Feynmanschen Störungstheorie, wie wir sie in Kapitel 4 kennengelernt haben, nämlich das Wicksche Theorem (4.39) (s. Seite 61), nicht mehr anwendbar ist.

10 Nachbemerkungen

Dieses Skript ist in großen Teilen mit der Vorlage von Volker Meden und Thomas Pruschke [26] identisch. Ich habe in erster Linie satztechnische Details modifiziert und mich bemüht, Tippfehler zu korrigieren sowie stellenweise die Präsentation zu verbessern. Neu hinzugekommen sind vor allem die Unterkapitel 5.1 und 5.9. Auf eine Änderung der Struktur des Skripts zur Anpassung an die Vorlesung im Wintersemester 2006/07 habe ich jedoch verzichtet. Diese Vorlesung war wie folgt aufgebaut: Zuerst wurden kurz einige einleitende Bemerkungen nach dem Anfang von Kapitel 2 von [29] gemacht, anschließend die Kapitel 2, 1 (unter Auslassung des Unterkapitels 1.3), 3, 4 (unter Auslassung des Unterkapitels 4.5) und 5 (unter Auslassung der Unterkapitel 5.7 und 5.8) dieses Skripts in der genannten Reihenfolge behandelt. Den Abschluß der Vorlesung bildete die BCS-Theorie mit einer komprimierten Fassung der Unterkapitel 8.1 bis 8.4. Die Kapitel 6, 7 und 9 liegen hier zwar in einer überarbeiteten Fassung vor, sind aber nicht durchgesehen, also mit besonderer Vorsicht zu behandeln.

Dieses Skript erhebt in keiner Weise den Anspruch, ein Lehrbuch zu ersetzen. Unter den Lehrbüchern ist [21] sicher eine umfassende Referenz. Zum Hausgebrauch eignet sich auch unter dem Gesichtspunkt des Preises und der Verfügbarkeit wahrscheinlich am ehesten [29]. Ein anderes neueres und eingermaßen erschwingliches Lehrbuch ist [6]. Als weitere nützliche Referenzen seien [10,12,28,31] erwähnt; der Klassiker [1] ist vor allem von historischem Interesse. Kostenlos, neueren Datums und ein wenig unkonventionell sind die Skripten von Piers Coleman [7] und Chetan Nayak [27]. Weitere Referenzen zu konkreten Themen sind an geeigneter Stelle im Text zu finden.

Göttingen, 1. Februar 2007

Andreas Honecker

Die Fassung vom 20. März 2009 korrigiert satztechnische Details und einige Tippfehler insbesondere in Kapitel 9. Dies bedeutet allerdings immer noch keine systematische Durchsicht.

Literatur

[1] A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov, I.Ye. Dzyaloshinskii, *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics*, Pergamon Press (1965)

[2] A.A. Abrikosov, I.M. Khalatnikov, *The Theory of a Fermi Liquid (The Properties of Liquid ^{3}He at Low Temperatures)*, Rep. Prog. Phys. **22** (1959) 329-367

[3] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175-1204 (1957)

[4] R. Bauer, A. Schmid, P. Pavone, D. Strauch, *Electron-Phonon Coupling in the Metallic Elements Al, Au, Na, and Nb: A First-Principles Study*, Phys. Rev. B **57** (1998) 11276-11282

[5] G. Baym, L.P. Kadanoff, *Conservation Laws and Correlation Functions*, Phys. Rev. **124** (1961) 287-299

[6] H. Bruus, K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*, Oxford University Press (2004)

[7] P. Coleman, *The Evolving Monogram on Many Body Physics*, Rutgers University (2004)

[8] L.N. Cooper, *Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas*, Phys. Rev. **104** (1956) 1189-1190

[9] S. Doniach, E.H. Sondheimer, *Green's Functions for Solid State Physics*, W.A. Benjamin Inc. (1974)

[10] A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill (1971)

[11] P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Springer (1991)

[12] E.K.U. Gross, E. Runge, *Vielteilchentheorie*, Teubner (1986)

[13] Yu.A. Il'inskii, L.V. Keldysh, *Electromagnetic Response of Material Media*, Springer (1994)

[14] T. Kasuya, *A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener's Model*, Prog. Theor. Phys. **16** (1956) 45-57

[15] W. Kohn, J.M. Luttinger, *Quantum Theory of Electrical Transport Phenomena*, Phys. Rev. **108** (1957) 590-611

[16] L.D. Landau, *The Theory of a Fermi Liquid*, Soviet Physics JETP **3** (1957) 920-925

[17] L.D. Landau, *On the Theory of the Fermi Liquid*, Soviet Physics JETP **8** (1959) 70-74

[18] J.M. Luttinger, *Fermi Surface and Some Simple Equilibrium Properties of a System of Interacting Fermions*, Phys. Rev. **119** (1960) 1153-1163

[19] J.M. Luttinger, J.C. Ward, *Ground-State Energy of a Many-Fermion System. II*, Phys. Rev. **118** (1960) 1417-1427

[20] O. Madelung, *Festkörpertheorie I*, Springer-Verlag (1972)

[21] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Third Edition, Kluwer Academic/Plenum Publishers (2000)

[22] W. Marshall, S.W. Lovesey, *Theory of Thermal Neutron Scattering*, Oxford University Press (1971)

[23] P.C. Martin, *Measurements and Correlation Functions*, S. 37-136 in C. DeWitt, R. Balian (Hrsg.), *Many-Body Physics*, Les Houches Lecture Notes 1967, Gordon and Breach (1968)

[24] L. Marton, J. Arol Simpson, H.A. Fowler, N. Swanson, *Plural Scattering of 20-kev Electrons in Aluminum*, Phys. Rev. **126** (1962) 182-192

[25] R.D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, McGraw-Hill (1967)

[26] V. Meden, Th. Pruschke, *Vielteilchentheorie des Festkörpers*, Skript zur Vorlesung aus dem Sommersemester 2004

[27] C. Nayak, *Quantum Condensed Matter Physics*, Lecture Notes (2004)

[28] J.W. Negele, H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley Publishing Company (1988)

[29] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 7 – Viel-Teilchen-Theorie*, 6. Auflage, Springer (2005)

[30] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids*, W.A. Benjamin Inc. (1963)

[31] G. Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press (1980)

[32] M.A. Ruderman, C. Kittel, *Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons*, Phys. Rev. **96** (1954) 99-102

[33] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, W.A. Benjamin Inc. (1964)

[34] Y. Takahashi, *On the Generalized Ward Identity*, Nuovo Cimento **6** (1957) 371-375

[35] G.S. Uhrig, *Correlated Fermionic Systems: Fermi Liquid and Luttinger Liquid*, Lecture Notes (2004)

[36] L. Van Hove, *Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles*, Phys. Rev. **95** (1954) 249-262

[37] J.C. Ward, *An Identity in Quantum Electrodynamics*, Phys. Rev. **78** (1950) 182

[38] K. Yosida, *Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys*, Phys. Rev. **106** (1957) 893-898