

# Kapitel 4

## Vielteilchentheorie

### 4.1 Erzeugungsoperatoren und Vernichtungsoperatoren

#### 4.1.1 Fockraum

Läßt man im Hilbertraum eine beliebige Anzahl von (hier: identischen) Teilchen zu so nennt man diesen (Produkt-) Raum den *Fockraum*. Man kann nun “Absteige-” und “Aufsteigeoperatoren” zwischen Segmenten des Fockraums mit verschiedenen Teilchenzahlen definieren. Diese Operatoren erzeugen und vernichten als Teilchen, man nennt sie demzufolge die *Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren*. Sie spielen eine zentrale Rolle bei allen ernsthaften Rechnungen innerhalb der Quantenmechanik.

#### Vakuum

Das Segment des Fockraumes ohne ein einziges Teilchen nennt man das Vakuum, wir bezeichnen es mit

$$|0\rangle \quad : \text{Vakuum} .$$

Die (basisunabhängige) Notation für einen Zustand mit N Teilchen mit (vollständigen) Quantenzahlen  $\alpha_1, \dots, \alpha_N$  (z.B.  $(\alpha_i = k_i, \sigma_i$  für Elektronen) bezeichnen wir mit

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \quad : \text{N-Teilchen Zustand} .$$

#### Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bezeichnen wir mit  $c_\alpha^\dagger$  und  $c_\alpha$  für Fermionen und  $b_\alpha^\dagger$  und  $b_\alpha$  für Bosonen. Sie sind via

$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger  0\rangle &=  \alpha\rangle , & c_\alpha  \alpha\rangle &=  0\rangle & : \text{Fermionen} , \\ b_\alpha^\dagger  0\rangle &=  \alpha\rangle , & b_\alpha  \alpha\rangle &=  0\rangle & : \text{Bosonen} \end{aligned}$
--

definiert, diese Darstellung nennt man auch zweite Quantisierung. Für einen allgemeinen  $N$ -Teilchenzustand gilt analog

$$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle, & c_\alpha |\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle, \\ b_\alpha^\dagger |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle, & b_\alpha |\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle. \end{aligned}$$

Das Vakuum enthält keine Teilchen, also  $c_\alpha |0\rangle \equiv 0$ .

### 4.1.2 Vertauschungsrelationen

Zentral ist nun die folgende Fragestellung (hier am Beispiel von 2-Fermionen): Sind die Zustände

$$c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger |0\rangle \quad \text{und} \quad c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger |0\rangle$$

gleich oder unterscheiden sie sich durch eine Phase? Mehr als durch eine Phase können sie sich nicht unterscheiden, denn  $c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger |0\rangle$  und  $c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger |0\rangle$  haben identische Quantenzahlen. Die Antwort hierauf wird durch die Vertauschungsrelationen gegeben. Wir definieren denn Kommutator  $[,]_-$  und den Antikommutator  $[,]_+$  via

$$[A, B]_- = AB - BA, \quad [A, B]_+ = AB + BA.$$

#### Bosonen

Für Bosonen und diskrete Quantenzahlen sind die Vertauschungsrelationen

$$[b_\alpha, b_\beta]_- = 0, \quad [b_\alpha^\dagger, b_\beta^\dagger]_- = 0, \quad [b_\alpha, b_\beta^\dagger]_- = \delta_{\alpha, \beta}.$$

Für kontinuierliche Quantenzahlen ersetzen wir  $\delta_{\alpha, \beta} \rightarrow \delta(\alpha - \beta)$ . Bosonen unterschiedlicher Quantenzahlen vertauschen also.

#### Fermionen

Für Fermionen lauten die Vertauschungsrelationen

$$[c_\alpha, c_\beta]_+ = 0, \quad [c_\alpha^\dagger, c_\beta^\dagger]_+ = 0, \quad [c_\alpha, c_\beta^\dagger]_+ = \delta_{\alpha, \beta}.$$

Damit können wir die Eingangsfrage beantworten. Es gilt

$$|\alpha, \beta\rangle = b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger |0\rangle = b_\beta^\dagger b_\alpha^\dagger |0\rangle = |\beta, \alpha\rangle$$

für Bosonen und

$$|\alpha, \beta\rangle = c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger |0\rangle = -c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger |0\rangle = -|\beta, \alpha\rangle$$

für Fermionen. Insbesondere folgt hieraus für  $\alpha = \beta$ , daß für Fermionen

$$|\alpha, \beta\rangle = -|\beta, \alpha\rangle = 0.$$

Also: Zwei Fermionen können nicht die gleichen Quantenzahlen haben.

### Teilchenzahloperator

Aus den Vertauschungsrelationen folgt zudem, daß der Operator  $n_\alpha = c_\alpha^\dagger c_\alpha$  (für Bosonen:  $n_\alpha = b_\alpha^\dagger b_\alpha$ ) der Teilchenzahloperator ist: Für Fermionen gilt

$$\begin{aligned} n_\alpha |0\rangle &= c_\alpha^\dagger c_\alpha |0\rangle = 0 \\ n_\alpha |\alpha\rangle &= c_\alpha^\dagger c_\alpha c_\alpha^\dagger |0\rangle = c_\alpha^\dagger (1 - c_\alpha^\dagger c_\alpha) |0\rangle = |\alpha\rangle . \end{aligned}$$

Für Bosonen gilt

$$n_\alpha (b_\alpha^\dagger)^N |0\rangle = N (b_\alpha^\dagger)^N |0\rangle ,$$

wie man leicht rekursiv beweisen kann.

### Basiswechsel

Gehen wir von einer Teilchenbasis  $|i\rangle$  zu  $|\tilde{i}\rangle$  über, also

$$\tilde{c}_j^+ |0\rangle \equiv |\tilde{j}\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\tilde{j}\rangle = \sum_i c_i^+ |0\rangle \langle i|\tilde{j}\rangle , \quad (4.1)$$

so gehen aus  $c_i$  die Operatoren  $\tilde{c}_j$  gemäß

$$\tilde{c}_j^+ = \sum_i \langle i|\tilde{j}\rangle c_i^+ , \quad \tilde{c}_j = \sum_i \langle \tilde{j}|i\rangle c_i \quad (4.2)$$

hervor.

### 4.1.3 Operatoren in zweiter Quantisierung

Wir haben bisher eine diskrete ein-Teilchen-Basis  $|i\rangle$  betrachtet. Wir wollen nun Feldoperatoren  $\psi(\vec{x})$  über die ein-Teilchen-Zustände zum Ortsoperator und analog  $c_{\vec{k}}$  zum Impulsoperator definieren:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \langle \vec{x}|\vec{k}\rangle c_{\vec{k}} , \quad c_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int d^3x e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}) .$$

Mit  $\int d^3x e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{q})$  gilt

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} c_{\vec{k}} \quad (4.3)$$

sowie

$$\begin{aligned} \{\psi(x), \psi(y)\} &= \{\psi^+(x), \psi^+(y)\} = 0, \\ \{\psi(x), \psi^+(y)\} &= \sum_{i,j} \langle \vec{x}|i\rangle \langle j|\vec{y}\rangle \{c_i, c_j^+\} \\ &= \sum_i \langle \vec{x}|i\rangle \langle i|\vec{y}\rangle = \langle \vec{x}|\vec{y}\rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

und das analoge für  $c_{\vec{k}}$ .

### Bemerkung

Für Systeme mit endlichem Volumen  $V$  definiert man  $\psi(x)$  und  $c_k$  wie oben, dabei variiert  $\vec{x}$  kontinuierlich über  $V$  und  $\vec{k}$  ist quantisiert mit zugehörigem Volumen  $d^3k = \frac{(2\pi)^3}{V}$ . Umtransformieren von  $\psi(x)$  auf  $c_k$  mit  $\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\vec{x}}$ . Die (Anti) Kommutatorrelationen gelten wie oben notiert, das  $\delta$ -Symbol für Operatoren  $c_k^{(+)}$  wird zum Kronecker-Delta.

### Hamilton-Operator

Der Hamilton-Operator für ein System von Teilchen mit kinetischer Energie  $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$  und Paarwechselwirkung  $V(x-y)$  ist in zweiter Quantisierung

$$\begin{aligned} H &= \int d^3x \psi^+(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \right) \psi(x) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) V(x_1 - x_2) \psi(x_2) \psi(x_1). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Unter Verwendung von (4.3) wird die Ortraum-Darstellung (4.5) des Hamilton-Operators zur Impulsraum-Darstellung

$$H = \int d^3k \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} + \int d^3k d^3p d^3q c_{\vec{k}+\vec{q}}^+ c_{\vec{p}-\vec{q}}^+ V_{\vec{q}} c_{\vec{p}} c_{\vec{k}}, \quad (4.6)$$

wobei  $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$  die Dispersionsrelation freier Elektronen ist und

$$V_{\vec{q}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} V(\vec{x}). \quad (4.7)$$

die Fourier-Transformierte des Wechselwirkungs-Potentials. Man beachte die Impulserhaltung

$$(\vec{k} + \vec{q}) + (\vec{p} - \vec{q}) = \vec{p} + \vec{k}$$

im Wechselwirkungs-Term von Gl. (4.6).

## 4.2 Lineare-Antwort-Theorie

Wir behandeln den Fall eines Systems beschrieben durch  $H_0$  mit kleiner Störung,

$$H(t) = H_0 + H'(t), \quad H'(t) = A \cdot F(t),$$

wobei  $A$  ein Operator ist und  $F(t)$  eine reelle Funktion. Dieses ist die Form, welche fast alle (experimentellen) Messungen beschreibt.

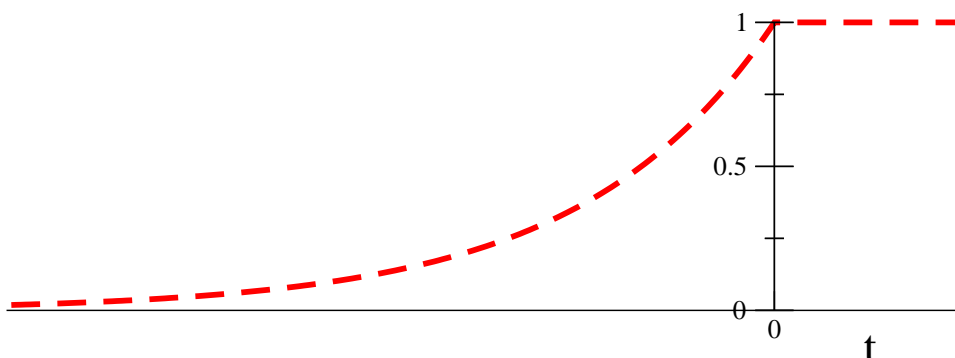
### Adiabatische Störung

Für die theoretische Behandlung nehmen wir nun an, dass die Störung adiabatisch eingeschaltet werde. Darunter verstehen wir folgendes:

Vor der Störung (d.h. bei  $t = -\infty$ ) soll der Dichteoperator  $\rho_0$  sein (insbes. zeitunabhängig bzgl. der Evolution unter  $H_0$ ). Nach dem Einschalten von  $H'(t)$  sollen sich (im Schrödingerbild) zwar die Zustände gemäß  $H(t)$  entwickeln, die statistischen Gewichte sollen sich nicht ändern. Formal läßt sich dies durch eine Zeitabhängigkeit

$$H'(t) \sim e^{\delta t}, \quad (t < 0) \quad (4.8)$$

erreichen.



### Dichte-Matrix

Wir sind nun an dem Erwartungswert einer Observablen  $B$  zur Zeit  $t$  interessiert:

$$\langle B \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp}(B\rho(t)), \quad \text{mit} \quad \rho(t) = e^{iHt} \rho e^{-iHt} \quad (4.9)$$

(Heisenberg-Darstellung). Die Dichtematrix

$$\rho = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n|, \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad (4.10)$$

genügt der Bewegungsgleichung (von Neumann-Gleichung)

$$\dot{\rho}(t) = i[H(t), \rho(t)], \quad \text{mit} \quad \rho(t = -\infty) = \rho_0. \quad (4.11)$$

Diese hat die Lösung

$$\rho(t) = U(t) \rho_0 U^{-1}(t) \quad \text{mit} \quad \dot{U}(t) = iH(t)U(t). \quad (4.12)$$

Für  $H(t) \equiv H$  (zeitunabhängig) ist  $U(t) = e^{iHt}$ .

### Wechselwirkungs-Bild

Wir gehen jetzt ins Wechselwirkungs-Bild, d.h. zum Operator  $X$  definieren wir

$$X_w(t) = U_0^{-1}(t) X(t) U_0(t), \quad \text{mit} \quad U_0(t) = e^{iH_0 t}. \quad (4.13)$$

Es gilt nun

$$\langle B \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp}(B_w(t)\rho_w(t)) , \quad \rho_w(t) = U_0^{-1}(t) \rho(t) U_0(t) . \quad (4.14)$$

Die Bewegungsgleichung lautet im Wechselwirkungs-Bild

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_w(t) &= U_0^{-1} \left( \dot{\rho}(t) - i [H_0, \rho(t)] \right) U_0 = i U_0^{-1} \left( [H, \rho(t)] - [H_0, \rho(t)] \right) U_0 \\ &= i U_0^{-1}(t) [H'(t), \rho(t)] U_0(t) = i [A_w(t), \rho_w(t)] F(t) , \end{aligned} \quad (4.15)$$

mit der Anfangsbedingung  $\rho_w(t = -\infty) = \rho_0$ . Das Anfangswertproblem für  $\rho_w(t)$  ist äquivalent zur Picard'schen Integralgleichung

$$\rho_w(t) = \rho_0 + i \int_{-\infty}^t [A_w(t'), \rho_w(t')] F(t') dt'$$

Iteration führt zur Lösung in 1. Ordnung in  $F(t)$

$$\rho_w(t) = \rho_0 + i \int_{-\infty}^t [A_w(t'), \rho_0] F(t') dt' + O(F^2) . \quad (4.16)$$

### Verallgemeinerte Suszeptibilitäten

Der Mittelwert von  $B$  wird somit

$$\langle B \rangle_{\rho(t)} = B_0 + i \int_{-\infty}^t \langle [B_w(t), A_w(t')] \rangle_{\rho_0} F(t') dt' + O(F^2) , \quad (4.17)$$

mit  $B_0 = \text{Sp}(B_w(t)\rho_0)$  und

$$\text{Sp}(B_w(t)[A_w(t'), \rho_0]) = \text{Sp}([B_w(t), A_w(t')]\rho_0) . \quad (4.18)$$

Wir sehen also, daß die Änderung in  $B$  auf die Störung  $A$  mit Stärke  $F$  in linearer Ordnung gegeben ist durch

$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{B,A}(t-t') F(t') dt' \quad (4.19)$$

gegeben ist, mit der Responsefunktion  $\chi$  (verallgemeinerte Suszeptibilität):

$$\chi_{B,A}(t-t') = i \Theta(t-t') \langle [B(t), A(t')] \rangle_{\rho_0} . \quad (4.20)$$

Der Index  $w$  wurde fallengelassen und ab hier vorausgesetzt, daß die Zeitentwicklung zum ungestörten Operator  $H_0$  gemeint ist.

### Bemerkungen

- Retardierte Green-Funktion

Die Responsefunktion ist eine sog. *retardierte Green-Funktion*

$$\chi_{B,A}(t-t') = -G_{B,A}^r(t-t') \quad (4.21)$$

wobei “retardiert” sich auf  $\theta(t-t')$  bezieht. Eine Störung zur Zeit  $t'$  bewirkt eine Änderung zur Zeit  $t$ , sofern  $t' < t$ .

- Lineare Antwort vs. ungestörtes System

Die lineare Antwort  $\Delta B$  ist allein durch Gleichgewichtsgrößen bestimmt, d.h. durch die Eigenschaften des ungestörten Systems.

- Dynamische Dielektrizitätskonstante

Beispiel:  $H'(t) = e\vec{r} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t)$ , Dipol-Kopplung an ein äußeres elektrisches Feld  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ . Dann ist die Responsefunktion  $\chi_{\vec{r},\vec{r}'}(t-t')$  die (nicht-lokale) dynamische Dielektrizitätskonstante.

## 4.3 Green-Funktionen

### 4.3.1 Definitionen

Wir haben im vorherigen Paragraphen den Nutzen der zeitabhängigen retardierten Green-Funktionen kennengelernt. Hier wollen wir verschiedene mathematische Eigenschaften erläutern. Später wird dann zu besprechen sein, wie man Green-Funktionen konkret berechnen kann.

Wir wollen mit dem Symbol  $[\cdot, \cdot]_\epsilon$  Kommutatoren ( $\epsilon = -1$ ) und Antikommutatoren ( $\epsilon = +1$ ) bezeichnen, d.h.

$$\begin{aligned} [A, B]_\epsilon &= AB + \epsilon BA, & [A, B]_{-1} &= AB - BA, \\ & & [A, B]_{+1} &= AB + BA. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Typischerweise tritt der Kommutator mit  $\epsilon = -1$  häufig im Zusammenhang mit Bosonen und  $\epsilon = +1$  bei Fermionen auf.

### Zeitordnungs-Operator

Wir definieren zu Operatoren  $A, B$  die retardierte Green-Funktion, die avancierte Green-Funktion und die kausale Green-Funktion durch (vergl. Gl. (4.12))

$$\begin{aligned} G_{A,B}^r(t) &:= -i\Theta(+t)\langle [A(t), B]_\epsilon \rangle, & A(t) &= e^{itH} A e^{-itH}, \\ G_{A,B}^a(t) &:= +i\Theta(-t)\langle [A(t), B]_\epsilon \rangle, & & \\ G_{A,B}^c(t) &:= -i\Theta(+t)\langle A(t)B \rangle + i\epsilon\Theta(-t)\langle BA(t) \rangle \equiv -iT_t \langle A(t)B \rangle, \end{aligned} \quad (4.23)$$

wobei  $T_t$  in der letzten Gleichung der *Zeitordnungs-Operator*,

$$T_t A(t)B(t') = \begin{cases} A(t)B(t') & (t > t') \\ \epsilon B(t')A(t) & (t < t') \end{cases}$$

ist.

- Wenn  $A$  und  $B$  zwei fermionische Operatoren sind, welche antikommutieren, so wählt man  $\epsilon = 1$  in (4.23), für den Fall von zwei kommutierenden Operatoren  $\epsilon = -1$ .
- Häufig werden diese Green-Funktionen “2-zeitig” genannt, obwohl bei uns nur eine Zeitvariable  $t$  auftritt. Bei uns ist die Zeitvariable des Operators  $B$  gleich 0. Dies ist jedoch keine Einschränkung, da z.B.

$$G_{A,B}^r(t_A - t_B) = G_{A,B}^r(t_A, t_B) = -i\Theta(t_A - t_B)\langle [A(t_A), B(t_B)]_\epsilon \rangle .$$

Im Folgenden werden wir uns auf die retardierte Green-Funktion konzentrieren, die Eigenschaften der avancierten (und der kausalen) Green-Funktion folgen dann analog.

### Spektraldarstellung

Bei der Berechnung der Erwartungswerte von Operatoren  $\mathcal{O}$  in der thermodynamischen Gesamtheit macht man häufig Gebrauch vom Einschleiben von Darstellungen der Eins  $1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$  durch orthonormierte Eigenzustände zu  $H$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Sp}(\rho \mathcal{O}) = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{-\beta H} \mathcal{O}) = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \mathcal{O} | n \rangle e^{-\beta E_n} . \quad (4.24)$$

Da  $E_n$  durch die Grundzustandsenergie  $E_0$  nach unten beschränkt ist, ist  $(-\beta E_n)$  nach oben beschränkt und die Reihe konvergent.

Analog analog erhalten wir mit

$$\boxed{\langle A(t)B \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle n | A | m \rangle \langle m | B | n \rangle e^{i(i\beta+t)E_n - itE_m}} . \quad (4.25)$$

Diese Spektraldarstellung wird auch Lehmann-Darstellung genannt.

## 4.3.2 Frequenzdarstellung

### Komplexe Zeiten

Im folgenden werden wir die Definitionen (4.23) für reelle  $t$  auf komplexe Zeiten erweitern. Zu diesem Zwecke führen wir mit  $f(t)$

$$\begin{aligned} f(t) := \langle A(t)B \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{i(i\beta+t)H} A e^{-itH} B), & -\beta \leq \text{Im } t \leq 0 \\ \langle BA(t) \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{i(i\beta-t)H} B e^{+itH} A), & 0 \leq \text{Im } t \leq +\beta \end{aligned} \quad (4.26)$$

eine Hilfsfunktion ein, welche, für den Fall dass  $G_{A,B}^r$  eine Response-Funktion ist, auch (dynamischer) Strukturfaktor genannt wird.

Wir sehen aus (4.26), daß  $f(t)$  auch für komplexe  $t$  definiert ist, sofern die Imaginärteile in den angegebenen Intervallen liegen. Betrachten wir z.B. für die erste Gl. in (4.26) und  $t = t' + it''$ :

$$e^{i(i\beta+t)H} = e^{-(\beta+it'')H} e^{it'H}, \quad e^{-itH} = e^{t''H} e^{-it'H} ,$$



dann wird mit  $t'' \in [-\beta, 0]$  gewährleistet, daß die Exponentialausdrücke von nach oben beschränkten Operatoren genommen werden.

Ferner gilt

$$f(t - i\beta) = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{itH} A e^{-i(t-i\beta)H} B) = \frac{1}{Z} \text{Sp}(B e^{itH} A e^{-itH} e^{-\beta H}) = \langle BA(t) \rangle \quad (4.27)$$

und somit

$$G_{A,B}^r(t) = -i\Theta(+t) [f(t) + \epsilon f(t - i\beta)] . \quad (4.28)$$

### Frequenzdarstellung

Wichtig sind nicht die eigentliche Fouriertransformierten der avanzierten und der retardierten Green's Funktionen sondern insbesondere die Frequenzdarstellungen,

$$G^r(z) = \int_0^\infty dt G^r(t) e^{izt} , \quad G^a(z) = \int_{-\infty}^0 dt G^a(t) e^{izt} , \quad (4.29)$$

welche für all komplexe  $z$  definiert sind. Es gilt:

$G^r(z)$  ist in der oberen komplexen Halbebene analytisch, denn für  $z = z' + iz''$  und  $z'' > 0$  konvergiert Gl. (4.29).

Analog ist  $G^a(z)$  in der unteren komplexen Halbebene analytisch.

### Frequenzdarstellung vs. Fourier-Transformation

Als nächstes wollen wir die Fourier-Transformierten aller Green-Funktionen auf die Fouriertransformierte,

$$f(t) = \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) e^{-i\omega t} , \quad f(\omega) = \int_{-\infty}^\infty dt f(t) e^{i\omega t} ,$$

von  $f(t) = \langle A(t)B \rangle$  zurückführen. Unter Benutzung von

$$\int_0^\infty dt e^{i(z-\omega)t} = \frac{-1}{i(z-\omega)} \quad (4.30)$$

für  $\text{Im } z > 0$  und  $\omega$  reell (obere komplexe Halbenene), folgt mit Gl. (4.27)

$$\begin{aligned} G^r(z) &= -i \int_0^\infty dt [f(t) + \epsilon f(t - i\beta)] e^{izt} \\ &= -i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) (1 + \epsilon e^{-\beta\omega}) \int_0^\infty dt e^{i(z-\omega)t} \\ &= \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1 + \epsilon e^{-\beta\omega}}{z - \omega} f(\omega) . \end{aligned} \quad (4.31)$$

Wir halten hier die Asymptotik von  $G^r(z)$ ,

$$G^r(z) \simeq \frac{1}{z} , \quad \text{für } z \rightarrow \infty , \quad (4.32)$$

fest.

### 4.3.3 Spektralfunktion

Wir definieren die Spektralfunktion als Sprung der Green-Funktion an der reellen Achse

$$\boxed{A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \operatorname{Im} G^r(\omega + i\delta)} = -\frac{1}{2\pi i} [G^r(\omega) - G^a(\omega)] \quad (4.33)$$

Mittels der Frequenzdarstellung (4.31) für  $G^r(z)$  folgt mit  $z = \omega + i\delta$  und

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \operatorname{Im} \frac{1}{x + i\delta} = -\pi \delta(x)$$

der Zusammenhang

$$\begin{aligned} A(\omega) &= \frac{-1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{1 + \epsilon e^{-\beta\omega'}}{\omega + i\delta - \omega'} f(\omega') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} (1 + \epsilon e^{-\beta\omega'}) \delta(\omega' - \omega) f(\omega') \\ &= \frac{1}{2\pi} (1 + \epsilon e^{-\beta\omega}) f(\omega). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Damit finden wir für die Funktion  $f(t)$ , welche bisher nur implizit aufgetreten ist:

$$\frac{f(\omega)}{2\pi} = \frac{A(\omega)}{1 + \epsilon e^{-\beta\omega}} \quad (4.35)$$

$$\langle A(t)B \rangle = f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{A(\omega)}{1 + \epsilon e^{-\beta\omega}} e^{-i\omega t}. \quad (4.36)$$

### Komplexe Ebene

Nun wollen wir noch die Green-Funktion  $G(z)$  auf der gesamten komplexen Ebene (ohne reelle Achse) durch einen Integralausdruck mittels der Spektralfunktion schreiben. Aus Gl. (4.28) und (4.36) sehen wir

$$G_{A,B}^r(t) = -i\Theta(t) [f(t) + \epsilon f(t - i\beta)] = -i\Theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\omega) e^{-i\omega t} \quad (4.37)$$

und mit  $G^r(z) = \int_0^{\infty} dt G^r(t) e^{izt}$  folgt nun

$$\boxed{G^r(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{z - \omega} A(\omega)} . \quad (4.38)$$

Derselbe Ausdruck gilt auch für die avancierte Green-Funktion in der unteren komplexen Halbenbene.

Ein “unabhängiger” Beweis für (4.38) verläuft so:

- (i) Die Funktionen auf der linken und der rechten Seite sind beide analytisch für  $z$  oberhalb und unterhalb der reellen Achse;
- (ii) Für  $z \rightarrow \infty$  verhalten sich beide Seiten wie  $\simeq 1/z$ ;
- (iii) An der reellen Achse liegt ein Sprung vor, der auf der linken Seite per definitionem gleich  $A(\omega)$  ist, und auf der rechten Seite nach Cauchy!

### Normierung

Nach der Definition (4.23) gilt und Gl. (4.37) gilt

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} G_{a,B}^r(t) = -i \langle [A, B]_\epsilon \rangle, \quad \boxed{\langle [A, B]_\epsilon \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\omega)}. \quad (4.39)$$

Die Spektralfunktion  $A(\omega)$  ist also normiert. Für die Einteilchen-Greensfunktion,  $A = c_{\vec{r}}$  (Vernichter) und  $B = c_{\vec{r}}^\dagger$  (Erzeuger) ist sowohl für Bosonen wie für Fermionen  $\langle [A, B]_\epsilon \rangle = 1$  und die dazugehörige Spektralfunktion ist auf eins normiert.

### Symmetrie der Spektralfunktion

Wir betrachten nun den Fall  $B = A$ . Dieses ist häufig sinnvoll. Z.B. möchte man wissen wie gross die induzierte Magnetisierung  $M$  ist wenn ein äusseres Magnetfeld angelegt wird, welche via  $-MB$  ankoppelt, die Response

In diesem Fall gilt

$$\boxed{A(-\omega) = \epsilon A(\omega)}.$$

Zum Beweis betrachten wir Gl. (4.26),

$$f(t) = \langle A(t)A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{i(i\beta+t)H} A e^{-itH} A), \quad \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{i(i\beta-t)H} A e^{+itH} A), = \langle AA(t) \rangle,$$

für den Fall  $B = A$ . Zusammen mit der Beziehung (4.27),  $f(t - i\beta) = \langle AA(t) \rangle$  ergibt dieses

$$f(-t) = \langle AA(t) \rangle, \quad f(-t) = f(t - i\beta).$$

Damit folgt für die Fouriertransformierte

$$\begin{aligned} f(-\omega) &= \int_0^\infty dt f(t) e^{-i\omega t} = \int_0^\infty d\tilde{t} f(-\tilde{t}) e^{i\omega \tilde{t}} = \int_0^\infty d\tilde{t} f(\tilde{t} - i\beta) e^{i\omega \tilde{t}} \\ &= \int_0^\infty d\bar{t} f(\bar{t}) e^{i\omega(\bar{t} + i\beta)} = e^{-\beta\omega} f(\omega). \end{aligned}$$

Nun folgt damit aus der Beziehung (4.34)

$$A(-\omega) = \frac{1 + \epsilon e^{\beta\omega}}{2\pi} f(-\omega) = \frac{1 + \epsilon e^{\beta\omega}}{2\pi} e^{-\beta\omega} f(\omega) = \frac{e^{-\beta\omega} + \epsilon}{2\pi} f(\omega) = \epsilon A(\omega)$$

(mit  $\epsilon^2 = 1$ ), was zu beweisen war.

### 4.3.4 Einteilchen-Green-Funktionen

Die am häufigsten betrachteten Green-Funktionen sind die "Propagatoren" von Teilchen mit  $A = c_{\vec{r}}$  (Vernichter) und  $B = c_{\vec{r}}^+$  (Erzeuger), da diese ein-Teilchen-Green-Funktionen das Propagieren eines am Ort  $\vec{r}'$  zur Zeit 0 erzeugten Teilchens beschreiben zum Ort  $\vec{r}$  zur Zeit  $t$ , wo es dann vernichtet wird.

#### Freie Fermionen

Wir betrachten freie Elektronen mit der Dispersions-Relation  $\epsilon_k$ , z.B.  $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$  und dem Hamilton-Operator

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}}, \quad c_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_{\vec{r}}, \quad \xi_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} - \mu, \quad (4.40)$$

wobei  $\mu$  das chemische Potential ist. Die Zeitentwicklung der Operatoren ist

$$c_{\vec{k}}(t) = e^{iH_0 t} c_{\vec{k}} e^{-iH_0 t} = e^{-i\xi_{\vec{k}} t} c_{\vec{k}}, \quad (4.41)$$

was mit  $c_{\vec{k}}(0) = c_{\vec{k}}$  aus der Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_{\vec{k}}(t) &= i e^{iH_0 t} [H_0, c_{\vec{k}}] e^{-iH_0 t} = i \xi_{\vec{k}} e^{iH_0 t} [c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}}, c_{\vec{k}}] e^{-iH_0 t} \\ &= i \xi_{\vec{k}} e^{iH_0 t} \left( c_{\vec{k}}^+ \underbrace{c_{\vec{k}} c_{\vec{k}}}_{=0} - \underbrace{c_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+}_{1 - c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}}} c_{\vec{k}} \right) e^{-iH_0 t} = (-i \xi_{\vec{k}}) c_{\vec{k}}(t) \end{aligned}$$

folgt.

#### Retardierte Green-Funktion freier Fermionen

Die retardierte Einteilchen-Green-Funktion  $G_{\vec{k}}(t)$  hat also (mit  $\epsilon = +1$  in (4.23)) die Form

$$G_{\vec{k}}(t) = -i \Theta(t) \langle \{c_{\vec{k}}(t), c_{\vec{k}}^+\} \rangle = -i e^{-i\xi_{\vec{k}} t} \Theta(t) \underbrace{\langle \{c_{\vec{k}}, c_{\vec{k}}^+\} \rangle}_{=1} = -i e^{-i\xi_{\vec{k}} t} \Theta(t).$$

Aus der Frequenzdarstellung

$$\int_0^\infty dt G_{\vec{k}}(t) e^{izt} = \boxed{G_{\vec{k}}(z) = \frac{1}{z - \xi_{\vec{k}}}} \quad (4.42)$$

finden wir mit  $z = \omega + i\delta$  für das Spektralgewicht

$$-\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \text{Im} G_{\vec{k}}(\omega + i\delta) = \boxed{A_{\vec{k}}(\omega) = \delta(\omega - (\epsilon_k - \mu))}. \quad (4.43)$$

Damit wird das Spektralgewicht auch seinem Namen gerecht, die normale Zustandsdichte  $\rho(\omega)$  ist dann durch

$$\rho(\omega) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \xi_{\vec{k}}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} A_{\vec{k}}(\omega) \quad (4.44)$$

gegeben.

### Harmonischer Oszillator

Bevor wir uns der Green-Funktion freier Bosonen zuwenden rekapitulieren wir kurz den harmonischen Oszillator

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} \left( \beta^2 x^2 - \frac{1}{\beta^2} \frac{d^2}{dx^2} \right), \quad \beta^2 = \frac{m\omega}{\hbar},$$

welcher mittel der Auf-/Absteige-Operatoren  $a^\dagger$  und  $a$  diagonalisiert werden kann:

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \quad x = \frac{1}{\beta\sqrt{2}} (a + a^\dagger), \quad \frac{d}{dx} = \frac{\beta}{\sqrt{2}} (a - a^\dagger).$$

Die Auf-/Absteige-Operatoren erfüllen die bosonischen Kommutationsrelationen. Haben wir viele harmonische Oszillationen, wie bei den Phononen, dann schreiben wir allg.

$$H = \sum_{\vec{q}} \hbar\Omega_{\vec{q}} \left( a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right), \quad [a_{\vec{q}}, a_{\vec{q}'}^\dagger] = \delta_{\vec{q}, \vec{q}'}, \quad a_{\vec{q}}(t) = e^{-i\hbar\Omega_{\vec{q}}t} a_{\vec{q}}.$$

Photonen oder Phononen sind keine Elementarteilchen mit fester Anzahl, sie können in beliebiger Anzahl erzeugt oder vernichtet werden, man bezeichnet sie als *Austausch-Bosonen*.

Es ist üblich den Impuls von Austausch-Bosonen mit  $\vec{q}$  zu bezeichnen.

### Freie Austausch-Bosonen

Da Austausch-Bosonen in der Regel in der Kombination  $a + a^\dagger$  auftreten, und da

$$(a_{\vec{q}})^\dagger = a_{-\vec{q}}^\dagger$$

ist, definiert man die bosonische Greenfunktion  $D_{\vec{q}}(t)$  als

$$\begin{aligned} D_{\vec{q}}(t) &= -i \Theta(t) \langle [a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger, a_{-\vec{q}} + a_{\vec{q}}^\dagger] \rangle \\ &= -i \Theta(t) e^{-i\hbar\Omega_{\vec{q}}t} \underbrace{\langle [a_{\vec{q}}, a_{\vec{q}}^\dagger] \rangle}_{=1} - i \Theta(t) e^{i\hbar\Omega_{-\vec{q}}t} \underbrace{\langle [a_{-\vec{q}}^\dagger, a_{-\vec{q}}] \rangle}_{=-1}, \end{aligned}$$

wobei wir

$$[a_{\vec{q}}, a_{-\vec{q}}] = 0, \quad [a_{-\vec{q}}^\dagger, a_{\vec{q}}^\dagger] = 0$$

verwendet haben. Damit erhalten wir

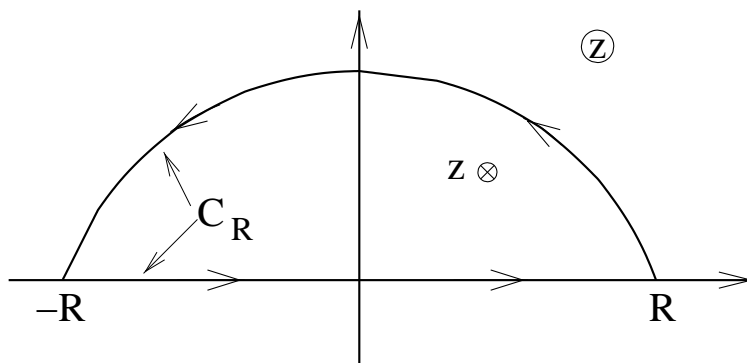
$$\int_0^\infty dt D_{\vec{q}}(t) e^{izt} = \boxed{D_{\vec{q}}(z) = \frac{1}{z - \hbar\Omega_{\vec{q}}} - \frac{1}{z + \hbar\Omega_{-\vec{q}}}}. \quad (4.45)$$

Im allgemeinen haben wir aufgrund einer Inversionssymmetrie  $\Omega_{\vec{q}} = \Omega_{-\vec{q}}$  und somit

$$D_{\vec{q}}(z) = \frac{2\hbar\Omega_{\vec{q}}}{z^2 - (\hbar\Omega_{\vec{q}})^2}$$

### 4.3.5 Kramers-Kronig-Relationen

Wir nutzen nun die Analytizität von  $G^r(z)$  in der oberen Halbebene für ein geeignetes Kontour-Integral.



Aufgrund des Satzes von Cauchy gilt mit  $z = \omega + \delta$ ,

$$\begin{aligned} G^r(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{obengeschl. Halbkreis}} dz' \frac{G^r(z')}{z' - z} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{Achse}}^{\text{reelle}} d\omega' \frac{G^r(\omega')}{\omega' - \omega - i\delta} \\ &= \frac{1}{2} G^r(z) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{Hauptwert}} d\omega' \frac{G^r(\omega')}{\omega' - \omega} \end{aligned} \quad (4.46)$$

für  $\delta \rightarrow 0$ . Die Umformungen sind die folgenden:

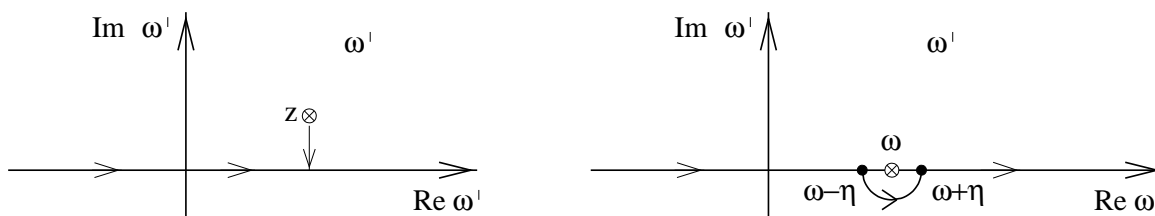
- Das Integral über den großen Halbkreis trägt nicht zum Kontour-Integral bei, aufgrund der Asymptotik  $G^r(Z) \sim 1/Z$  für  $z \rightarrow \infty$ , siehe Gl. (4.32),

$$\sim \frac{1}{R^2} R \rightarrow 0, \quad (R \rightarrow \infty).$$

- Das Integral über den kleinen Halbkreis berechnet sich zu

$$\int d\omega' \frac{G^r(\omega')}{\omega' - \omega} \approx G^r(\omega) \int \frac{d(\eta e^{i\phi})}{\eta e^{i\phi}} = iG^r(\omega) \int_{\pi}^{2\pi} d\phi = i\pi G^r(\omega),$$

mit  $d(\eta e^{i\phi}) = \eta e^{i\phi} i(d\phi)$ .



#### Kramers-Kronig-Relationen

Wir benutzen jetzt  $z = \omega + i\delta$  und stellen um

$$G^r(\omega) = \frac{1}{\pi i} \int_{\text{Hauptwert}} d\omega' \frac{G^r(\omega')}{\omega' - \omega}. \quad (4.47)$$

Wenn wir nun Real- und Imaginär-Teile Gl. (4.47) nehmen erhalten wir die Kramers-Kronig-Relationen

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int_{\text{Hauptwert}} d\omega' \frac{\operatorname{Im} G(\omega')}{\omega' - \omega} \\ \operatorname{Im} G(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \int_{\text{Hauptwert}} d\omega' \frac{\operatorname{Re} G(\omega')}{\omega' - \omega} \end{aligned} \quad (4.48)$$

wobei wir den Index  $r$  unterdrückt haben.

- Allein aus dem Realteil (oder Imaginärteil) kann die vollständige Funktion reproduzieren werden. Dazu muss man den Real-/Imaginärteil allerdings mit hoher Genauigkeit für alle Frequenzen kennen.
- Die Kramers-Kronig Relationen gelten für alle Funktionen welchen in der oberen komplexen Halbebene analytisch sind, insbesondere für alle Responzfunktionen.
- Ein Beispiel ist die die dynamischen Dieletrizitätskonstante

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + i \frac{\sigma(\omega)}{\omega} ,$$

welche nach Kap. 4.2 eine retardierte Green-Funktion ist. Experimentell kann man nun den Realteil von  $\epsilon(\omega)$  durch Infrarot-Absorption messen und dann mittels Kramers-Kronig die dynamische Leitfähigkeit  $\sigma(\omega)$  gewinnen.

### 4.3.6 Bewegungsgleichungen

Mit

$$\dot{A}(t) = i[H, A(t)], \quad \frac{d}{dt}\Theta(t) = \delta(t)$$

finden wir für die Zeitableitung der retardierte Green-Funktion im Heisenberg-Bild

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} G_{A,B}^r(t) &= -i \delta(t) \langle [A(t), B]_\epsilon \rangle - i \Theta(t) \langle [\dot{A}(t), B]_\epsilon \rangle \\ &= -i \delta(t) \langle [A, B]_\epsilon \rangle + i G_{[H,A],B}^r(t) . \end{aligned} \quad (4.49)$$

Die Green-Funktion hat also i.A. einen Sprung bei  $t = 0$ . Tatsächlich gilt eine analoge DGL auch für die kausale und die avancierte Green-Funktion, so daß wir zusammenfassen

$$i \frac{d}{dt} G_{A,B}(t) = \delta(t) \langle [A, B]_\epsilon \rangle + G_{[A,H],B}(t) . \quad (4.50)$$

Im allgemeinen ist der Operator  $[A, H]$  irgendetwas kompliziertes und die obigen DGL verknüpfen zwei gleichermaßen schwer zugängliche Funktionen. Es mag jedoch sein, daß  $[A, H]$  "vom Typ des Operators  $A$ " ist. Dann schließt die obige DGL. (Manchmal kann ein Schließen nach mehrmaligem Differenzieren vorliegen.)

Als Beispiel wollen wir zunächst ein Vielteilchensysteme ohne Wechselwirkung behandeln. Anschaulich ist ja zu erwarten, daß eine Reduktion auf Einteilchenprobleme möglich sein muß.

### Freie Teilchen

Der Hamilton-Operator ist

$$\int d^3x \psi^\dagger(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(x), \quad \psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} c_{\vec{k}},$$

siehe Gl. (4.3). Da der Hamilton-Operator im  $k$ -Raum diagonal ist,

$$H = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}}, \quad \epsilon_{\vec{k}} = \frac{(\hbar\vec{k})^2}{2m},$$

wäre es eine triviale Aufgabestellung die Bewegungsgleichungen im Impulsraum zu lösen. Wir wollen jedoch im Ortsraum bleiben, um zu motivieren woher der Name *Green-Funktion* kommt, insbesondere den Zusammenhang mit den Green-Funktionen welche in der Lösungstheorie partieller Differentialgleichungen verwendet werden.

### Green-Funktion im Ortsraum

Wir betrachten nun den Fall der ein-Teilchen-Green-Funktion im Ortsraum mit

$$A = \psi(r), \quad B = \psi^+(r'). \quad (4.51)$$

Unter Verwendung der allgemeinen Beziehungen

$$[ab, c] = a[b, c]_\epsilon - [c, a]_\epsilon b, \quad [a, bc] = [a, b]_\epsilon c - b[c, a]_\epsilon,$$

sowie von

$$[A, B]_\epsilon = [\psi(r), \psi^+(r')]_\epsilon = \delta(r - r')$$

gilt nun

$$[A, H] = \int d^3x [\psi(r), \psi^+(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(x)] \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} &= \int d^3x [\psi(r), \psi^+(x)]_\epsilon \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(x) \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(r). \end{aligned} \quad (4.53)$$

Damit folgt

$$i \frac{d}{dt} G_{r,r'}(t) - \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \right) G_{y,r'}(t) = \delta(t) \delta(r - r') \quad (4.54)$$

oder allg.

$$\boxed{\left( i \frac{d}{dt} - H \right) G_{r,r'}(t - t') = \delta(t - t') \delta(r - r')},$$

wobei wir  $t \rightarrow t - t'$  ersetzt und für den Integraloperator, der auf den Ausdruck rechts als Funktion von  $r$  wirkt, die Notation  $H$  eingeführt haben.

Die letzte DGL ist aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen bekannt. Die Lösung dieser DGL wird Green-Funktion genannt und ist der Grund der Namensgebung für die oben eingeführten Korrelationsfunktionen!

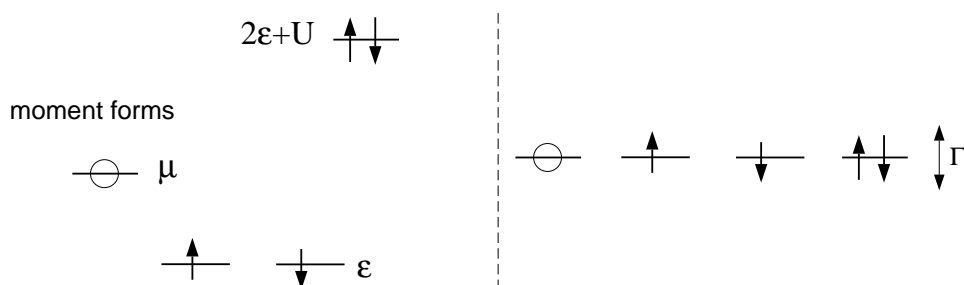


### 4.3.7 Das Hubbard Atom

Wir betrachten ein isoliertes Atom/Ion mit nur einem relevanten Orbital, welche leer sein kann oder einfach/doppelt besetzt. Die intra-atomare Coulomb-Abstossung zwischen den Elektronen beschreiben wir durch den Parameter  $U$ :

$$H = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (\varepsilon_\sigma - \mu) n_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow, \quad (4.55)$$

wobei  $n_\sigma = c_\sigma^\dagger c_\sigma$  die Anzahl der Elektronen mit Spin- $\sigma$  mißt,  $\mu$  das chemische Potential ist und  $\varepsilon_\sigma$  die orbitale Ein-Teilchen-Energie. Ohne ein äusseres Magnetfeld ist  $\varepsilon_\sigma \equiv \varepsilon_0$ .



Wir sind daran interessiert die retardierte Einteilchen-Greens-Funktion (4.23)

$$G_\sigma(t) = -i\Theta(+t) \langle [c_\sigma(t), c_\sigma^\dagger]_+ \rangle \quad (4.56)$$

auszurechnen. Hierzu verwenden wir die Bewegungsgleichungen (4.49)

$$\frac{d}{dt} G_\sigma(t) = -i\delta(t) \underbrace{\langle [c_\sigma(0), c_\sigma^\dagger]_+ \rangle}_{=1} - i\Theta(t) \langle [\dot{c}_\sigma(t), c_\sigma^\dagger]_+ \rangle, \quad (4.57)$$

mit  $\dot{c}_\sigma = i[H, c_\sigma]$ .

#### Kommutatoren

Wir berechnen zunächst eine Reihe von Kommutatoren:

$$\begin{aligned} [n_{\sigma'}, c_\sigma] &= \delta_{\sigma,\sigma'} (c_\sigma^\dagger c_\sigma c_\sigma - c_\sigma c_\sigma^\dagger c_\sigma) = -\delta_{\sigma,\sigma'} (1 - c_\sigma^\dagger c_\sigma) c_\sigma = -\delta_{\sigma,\sigma'} c_\sigma \\ [n_\uparrow n_\downarrow, c_\sigma] &= -n_{-\sigma} c_\sigma \\ [n_{\sigma'}, n_{-\sigma} c_\sigma] &= -\delta_{\sigma,\sigma'} n_{-\sigma} c_\sigma \\ [n_\uparrow n_\downarrow, n_{-\sigma} c_\sigma] &= -n_{-\sigma} c_\sigma \end{aligned} \quad (4.58)$$

Die letzte Gleichung gilt das  $n_\sigma n_\sigma = n_\sigma$ , für Fermionen. Wir finden daher

$$\dot{c}_\sigma = i[H, c_\sigma] = -i(\varepsilon_\sigma - \mu) c_\sigma - iU n_{-\sigma} c_\sigma \quad (4.59)$$

$$\frac{d}{dt} (n_{-\sigma} c_\sigma) = -i(\varepsilon_\sigma - \mu) n_{-\sigma} c_\sigma - iU n_{-\sigma} c_\sigma. \quad (4.60)$$

Der Operator  $n_{-\sigma}c_{\sigma}$  ist daher ein Eigenoperator des Hamilton-Operators. Damit wird die Bewegungsgleichung (4.57) zu

$$\boxed{\frac{d}{dt}G_{\sigma}(t) = -i\delta(t) - i(\varepsilon_{\sigma} - \mu)G_{\sigma}(t) - iU\tilde{G}_{\sigma}(t)}, \quad (4.61)$$

wobei wir mit  $\tilde{G}_{\sigma}(t) = -i\Theta(+t)\langle [n_{-\sigma}c_{\sigma}(t), c_{\sigma}^{\dagger}]_{+} \rangle$  eine neue Greens-Funktion definiert haben. Diese genügt mit  $[n_{-\sigma}c_{\sigma}, c_{\sigma}^{\dagger}]_{+} = n_{-\sigma}$  der Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}\tilde{G}_{\sigma}(t) = -i\delta(t)\langle n_{-\sigma} \rangle - i\Theta(t)\langle \left[ \frac{d}{dt}(n_{-\sigma}c_{\sigma})(t), c_{\sigma}^{\dagger} \right]_{+} \rangle. \quad (4.62)$$

Mit Hilfe von (4.60) wird (4.62) zu

$$\boxed{\frac{d}{dt}\tilde{G}_{\sigma}(t) = -i\delta(t)\langle n_{-\sigma} \rangle - i(\varepsilon_{\sigma} - \mu + U)\tilde{G}_{\sigma}(t)}. \quad (4.63)$$

Die beiden Gleichungen (4.61) und (4.63) bilden ein geschlossenes System welches zu lösen ist.

### Frequenzdarstellung

Unter einer Fourier-Transformation werden (4.61) und (4.63)

$$\boxed{\begin{aligned} \omega G_{\sigma}(\omega) &= 1 + (\varepsilon_{\sigma} - \mu)G_{\sigma}(\omega) + U\tilde{G}_{\sigma}(\omega) \\ \omega \tilde{G}_{\sigma}(\omega) &= \langle n_{-\sigma} \rangle + (\varepsilon_{\sigma} - \mu + U)\tilde{G}_{\sigma}(\omega), \end{aligned}}$$

mit der Lösung

$$\boxed{G_{\sigma}(\omega) = \frac{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega - (\varepsilon_{\sigma} - \mu)} + \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{\omega - (\varepsilon_{\sigma} - \mu + U)}}. \quad (4.64)$$

Wir haben hier ein Beispiel eines echten Zweiteilchen-Effektes. Wenn z.B. kein  $\uparrow$ -Teilchen vorhanden ist, dann hat die Greens-Funktion für das  $\downarrow$ -Elektron die bekannte Form  $1/(\omega - (\varepsilon_{\sigma} - \mu))$  einer Ein-Teilchen-Greens-Funktion, vergleiche (4.42).

Wenn jedoch ein  $\uparrow$ -Teilchen vorhanden ist, dann muss eine zusätzliche Energie  $U$  bezahlt werden um ein  $\downarrow$ -Elektron auf das Ion zu setzen, die Greens-Funktion hat dann die Form  $1/(\omega - (\varepsilon_{\sigma} - \mu + U))$ .

## 4.4 Streuexperimente in Born'scher Näherung

### 4.4.1 Einleitung

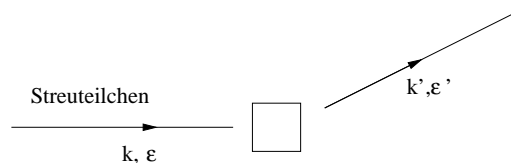
Wir wollen die Streuung von Teilchen (Neutronen, Photonen) am Kristall untersuchen. Im Gegensatz zum bisher untersuchten idealen, starren Kristall, der nur Impulsübertrag auf das Streuteilchen erlaubte, sind im realen Kristall Impuls- und Energie-Übertrag durch Phononen und andere elementare Anregungen möglich.

Wir wollen in der weiteren Beschreibung Streuteilchen mit einer Energie-Impuls-Dispersion  $\epsilon(k)$  voraussetzen. Dabei denken wir insbesondere an Neutronen, welche einmal an den Kernen durch Ankopplung an die Dichte streuen und zum anderen ein magnetisches Moment besitzen und somit an den magnetischen Momenten der Elektronen (Spin) in magnetischen Systemen streuen.

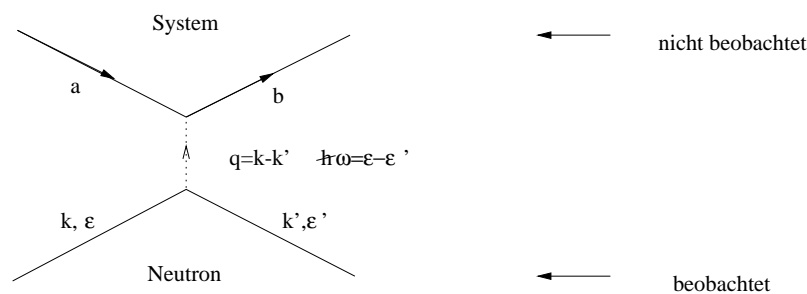
Da Neutronen nur schwach wechselwirken, dringen sie tief ein:

- Oberflächeneffekte spielen keine Rolle
- Thermische Neutronen (Reaktor) lassen grosse Energie- und Impuls-Bereiche zu:  
 $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Neutronen mit Wellenlänge 1 Angström besitzen eine Energie von  $0.082 eV \simeq 950 K$  ( $1 eV = 11.000 K$ )

Aufgrund der schwachen Wechselwirkung messen die Streuteilchen die Eigenschaften des Systems aus ohne es zu modifizieren. Mehrfachstreuung spielt zudem keine Rolle und damit ist die Born'sche Näherung zulässig



Abstraktes Diagramm:



Was wird gemessen?

Man kennt das einfallende Teilchen  $(\vec{k}, \epsilon)$  und man misst das gestreute Teilchen  $(\vec{k}', \epsilon')$ .

Im System:

- im thermischen Gleichgewicht ist der Eigenzustand  $|a\rangle$  des Systems mit dem Gewicht  $e^{-\beta E_a} / Z$  zu versehen, es ist über alle  $|a\rangle$  zu summieren.
- Man misst *nicht* den Endzustand  $|b\rangle$  des Systems, d.h. alle Endzustände  $|b\rangle$  verträglich mit Energie- und Impulserhaltung sind grundsätzlich möglich.

### 4.4.2 Born'sche Näherung

Das Wechselwirkungspotential sei

$$W(r) = \sum_{i=1}^N v_i(r - r_i) ,$$

wobei  $r$  die Position des Neutrons und  $r_i$  die des Atoms  $i$  kennzeichnet. Da die Neutronen im Wesentlichen nur mit dem Atomkern in Wechselwirkung treten können wir Fermis Pseudopotential

$$v_i(r) = \left( \alpha + \gamma \vec{\sigma} \cdot \vec{S}_i \right) \delta(r)$$

benutzen, mit dem Spinoperator des Streuteilchens  $\vec{\sigma}$ , und dem Kernspin  $\vec{S}_i$  des Atoms  $i$ . Allerdings werden wir an dieser Stelle nicht die die magnetische Streuung am Kernspin betrachten und setzen hier  $\gamma = 0$ .

#### Übergangswahrscheinlichkeiten

Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Ausgangszustand  $|k, a\rangle = |k\rangle|a\rangle$  in den Endzustand  $|k', b\rangle = |k'\rangle|b\rangle$  ist in erster Born'scher Näherung ( $\epsilon \hat{=} E_k$  und  $\epsilon' \hat{=} E_{k'}$ )

$$w(k, a \rightarrow k', b) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle k', b | W | k, a \rangle \right|^2 \delta(E_k + E_a - E_{k'} - E_b) . \quad (4.65)$$

Der Detektor mißt nicht einen Zustand mit scharfem  $k'$ , sondern hat Auflösung mit Raumwinkel  $d\Omega$  und Energie  $d\omega$ . Für relativistische Teilchen gilt

$$E_k^2 = (M_0 c^2)^2 + (c\hbar k)^2 \quad (4.66)$$

also

$$EdE = c^2 \hbar^2 k dk , \quad v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{c^2 \hbar k}{E} = \frac{\hbar k}{M} \quad (4.67)$$

mit der impulsabhängigen Masse  $M = E/c^2$  und der Geschwindigkeit  $v_k$ . Die Variation der Energie des austretenden Neutrons ist

$$\hbar d\omega = dE' = \frac{c^2 \hbar^2 k' dk'}{E'} = \frac{\hbar^2 k' dk'}{M'} .$$

Da die Energie des einfallenden Neutrons nicht variiert wird, ist  $d\omega$  auch klein die Änderung der Energiedifferenz. Die Anzahl der Zustände kompatibel mit Raumwinkel  $d\Omega$  und Energiedifferenz  $\hbar d\omega$  ist

$$\begin{aligned} \# \text{ Endzustände} &= \frac{V}{(2\pi)^3} k'^2 d\Omega dk' = \frac{V}{(2\pi)^3} k' d\Omega \left( \frac{M' \hbar d\omega}{\hbar^2} \right) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3 \hbar^2} v_{k'} M'^2 d\Omega d\omega . \end{aligned} \quad (4.68)$$

Die Stromdichte des einfallenden Teilchens ist

$$\text{Stromdichte} = \frac{v}{V} . \quad (4.69)$$

Der doppelt differentielle Streuquerschnitt berechnet sich zu

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} &= \sum_{a,b} \frac{e^{-\beta E_a}}{Z} \frac{(4.65)(4.68)}{(4.69) d\Omega d\omega} \\ &= \frac{2\pi V^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{v'}{v} M'^2 \sum_{a,b} \frac{e^{-\beta E_a}}{Z} \left| \langle k', b | W | k, a \rangle \right|^2 \delta(E_a - E_b + \hbar\omega) \end{aligned} \quad (4.70)$$

### Im Ortsraum

Mit dem Fourier-Integral der  $\delta$ -Funktion

$$\delta(E_a - E_b + \hbar\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\left(\omega + \frac{E_a}{\hbar} - \frac{E_b}{\hbar}\right)t} \quad (4.71)$$

und der Fourier-Darstellung der Matrixelemente

$$\langle k | W | k' \rangle = \int d^3r V e^{i(k' - k)r} W(r) = \int d^3r V e^{-iqr} W(r) \quad (4.72)$$

folgt direkt

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} &= \frac{M'^2 v'}{\hbar^4 v} \frac{1}{(2\pi)^3} \\ &\cdot \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int d^3r d^3r' e^{-iqr} e^{iqr'} \sum_{a,b} \frac{e^{-\beta E_a}}{Z} \langle a | W(r, t) | b \rangle \langle b | W(r', 0) | a \rangle, \end{aligned} \quad (4.73)$$

wobei wir die Heisenberg-Darstellung

$$W(r, t) = e^{i\frac{H}{\hbar}t} W(r) e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \quad (4.74)$$

benutzt haben. Benutzen wir nun noch

$$\begin{aligned} \sum_b |b\rangle\langle b| &= 1 \\ \sum_a \frac{e^{-\beta E_a}}{Z} \langle a | \dots | a \rangle &= \langle \dots \rangle, \end{aligned} \quad (4.75)$$

so erhalten wir

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{M'^2 v'}{\hbar^4 v} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int d^3r d^3r' e^{-iq(r-r')} \langle W(r, t) W(r', 0) \rangle. \quad (4.76)$$

### Dynamischer Strukturfaktor

Das Wechselwirkungspotential hat die Form

$$W = \sum_{i=1}^N v(r - r_i) = \int v(r - \tilde{r}) n(\tilde{r}) d^3\tilde{r}, \quad (4.77)$$

wobei  $r$  und  $r_i$  die Ortsoperatoren des Streuteilchens und des  $i$ -ten Atoms sind,  $v(r)$  das Wechselwirkungspotential und  $n(r)$  der Dichteoperator. Damit wird (4.76) zu

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{M'^2 v' |v_q|^2}{\hbar^4 v (2\pi)^3} S_q(\omega) \quad (4.78)$$

wobei  $v_q$  die Fourier-Transformierte von  $v(r)$ . Der dynamische Strukturfaktor für Dichte-Dichte-Fluktuationen ist  $S_q(\omega)$ , d.h.  $S_q(\omega)$  ist die die Frequenz- und Impulsdarstellung der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion

$$S_q(t) = \langle n_q(t)n_{-q}(0) \rangle = \int \frac{d^3r d^3r'}{V^2} e^{-iq(r-r')} \langle n(r,t)n(r',0) \rangle . \quad (4.79)$$

### Fluktuations-Dissipations-Theorem

Nach Gl. ((4.36)) (mit  $\epsilon = -1$  da die Dichte-Fluktuationen Bose-artige Operatoren sind) hängt  $S_q(\omega)$  (dort  $f$  genannt) mit der Spektralfunktion  $A_{n_q n_{-q}}$  wie folgt

$$\frac{S_q(\omega)}{2\pi} = \frac{A_{n_q n_{-q}}(\omega)}{1 - e^{-\beta\omega}} \quad (4.80)$$

zusammen. Gl. (4.80) nennen wir auch Fluktuations-Dissipations-Theorem.

Die Dichte-Dichte Korrelationsfunktion  $S_q(\omega)$  misst die Dichte-Fluktuationen, die Spektralfunktion  $A_{n_q n_{-q}}(\omega)$  ist ein Mass für die Dissipation, da diese ja proportional zum Imaginärteil der retardierten Green-Funktion ist.