

Kapitel 7

Diagrammatische Störungsrechnung

7.1 Matsubara Green-Funktionen

Wir erinnern uns an die Definition

$$\begin{aligned} G_{A,B}^r(t) &:= -i\Theta(+t)\langle [A(t), B]_\epsilon \rangle, & A(t) &= e^{itH} A e^{-itH}, \\ G_{A,B}^c(t) &:= -i\Theta(+t)\langle A(t)B \rangle + i\epsilon\Theta(-t)\langle BA(t) \rangle \equiv -iT_t \langle A(t)B \rangle, \end{aligned} \quad (7.1)$$

der retardierte und der kausalen Green-Funktion in Kap. 4.3, mit $[A, B]_\epsilon = AB + \epsilon BA$. Für fermionische Operatoren A und B wählen wir $\epsilon = 1$, für Bosonen $\epsilon = -1$. Aus der Quantenmechanik wissen wir, siehe auch Kap. 7.2, dass der Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild elegant mit Hilfe des Zeitordnungsoperators

$$\mathcal{T}_t \{ A(t_1)B(t_2) \} = \begin{cases} A(t_1)B(t_2), & \text{für } t_1 > t_2 \\ (-\epsilon)B(t_2)A(t_1), & \text{für } t_1 < t_2 \end{cases} \quad (7.2)$$

formuliert werden kann. Es liegt daher nahe, dass sich eine (diagrammatische) Störungstheorie am besten für die kausale Green-Funktion $G_{A,B}^c(t)$ formulieren lässt, welche nach (7.1) eine zeitgeordnete Green-Funktion ist. Eine solche diagrammatische Entwicklung gibt es nun in zwei Varianten:

- Für $T = 0$ direkt für $G_{A,B}^c(t)$ und
- für $T > 0$ für die Fortsetzung von $G_{A,B}^c(t)$ auf die imaginäre Achse (thermodynamische Green-Funktion).

Wir werden hier ausschliesslich die thermodynamische Störungstheorie diskutieren, alle Resultate für $T = 0$ lassen sich durch den Übergang $T \rightarrow 0$ für die thermodynamische Green-Funktion gewinnen.

Komplexe Zeiten

Wie wir schon in Kap. 4.3 bemerkt hatten ist $G_{A,B}^r(t)$ für reelle t wohldefiniert und auch für komplexe Zeiten t wenn wir

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

$$\langle BA(t) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{i(i\beta-t)H} B e^{+itH} A), \quad 0 \leq \text{Im } t \leq +\beta \quad (7.3)$$

betrachten, sofern die Imaginärteile in den angegebenen Intervallen liegen. Dadurch ist gewährleistet, daß die Exponentialausdrücke von nach oben beschränkten Operatoren genommen werden.

Matsubara Green-Funktionen

Diese Bemerkung legt nahe, eine sog. thermodynamische Green-Funktion über die kausale Green-Funktion zu rein imaginären Zeiten $\tau = it$

$$\begin{aligned} G_{A,B}(\tau) &:= \frac{1}{i} G_{A,B}^c(-i\tau) \\ &= -\Theta(+\tau) \langle A(-i\tau) B \rangle + \epsilon \Theta(-\tau) \langle BA(-i\tau) \rangle, \end{aligned} \quad (7.4)$$

zu definieren, also

$$G_{A,B}(\tau) = \begin{cases} -\langle e^{\tau H} A e^{-\tau H} B \rangle & \tau > 0 \\ \epsilon \langle B e^{\tau H} A e^{-\tau H} \rangle & \tau < 0 \end{cases}. \quad (7.5)$$

$G_{A,B}(\tau)$ entspricht also der analytische Fortsetzung von negativen (positiven) t zu imaginären $t = -i\tau$ (bzw. $\tau = it$) mit negativem (positivem) τ . Man nennt $G_{A,B}(\tau)$ auch Matsubara Green-Funktion.

Periodizität

Für $-\beta \leq \tau \leq 0$ gilt $0 \leq \tau + \beta \leq \beta$ und somit

$$G_{A,B}(\tau + \beta) = -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta H} e^{(\tau+\beta)H} A e^{-(\tau+\beta)H} B \right] = -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta H} B e^{\tau H} A e^{-\tau H} \right],$$

also

$$G_{A,B}(\tau + \beta) = -\epsilon G_{A,B}(\tau), \quad -\beta \leq \tau \leq 0. \quad (7.6)$$

Insbesondere haben wir für $G_{A,B}(\tau)$ eine 2β -Periodizität.

Matsubara-Frequenzen

Für die 2β -periodische Funktion G führen wir die Fouriertransformation ein

$$\begin{aligned} G(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n G(z_n) e^{-z_n \tau} \\ G(z_n) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G(\tau) e^{z_n \tau} \end{aligned} \quad (7.7)$$

wobei

$$z_n = \begin{cases} \frac{i\pi}{\beta} 2n \equiv \nu_n, & \text{für } \epsilon = -1 \quad (\text{Bosonen}), \\ \frac{i\pi}{\beta} (2n + 1) \equiv \omega_n, & \text{für } \epsilon = +1 \quad (\text{Fermionen}), \end{cases} \quad (7.8)$$

wegen der β -(Anti-)Periodizität in Gl. (7.6).

Analytische Fortsetzung

Als nächstes rechnen wir

$$\begin{aligned}
\int_0^\beta d\tau G(\tau) e^{z_n \tau} &= - \int_0^\beta d\tau f(-i\tau) e^{z_n \tau} \\
&= - \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) \int_0^\beta d\tau e^{(z_n - \omega)\tau} \\
&= \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1 + \epsilon e^{-\beta\omega}}{z_n - \omega} f(\omega) ,
\end{aligned} \tag{7.9}$$

wobei zuletzt

$$\int_0^\beta d\tau e^{(z_n - \omega)\tau} = \frac{1}{z_n - \omega} e^{(z_n - \omega)\tau} \Big|_0^\beta = \frac{-\epsilon e^{-\beta\omega} - 1}{z_n - \omega} \tag{7.10}$$

benutzt wurde, mit $e^{z_n \beta} = -\epsilon$. Vergleich mit der Fouriertransformierten von der retardierten Green-Funktion, Gl. (4.31), zeigt uns, daß $G(z_n)$ identisch zu $G^r(z_n)$ ist, wenn z_n in der oberen Halbebene liegt (insbesondere liegt keine widersprüchliche Notation vor). Rechentechnisch bedeutet dies: aus $G^r(z)$ folgt die volle Information über $G(z_n)$.

Umgekehrt folgt: mit allen Daten $G(z_n)$ und dem asymptotischen Verhalten von $G(z)$ bei $z \rightarrow \infty$ folgt die volle Information zu $G(z)$. Die tatsächliche Durchführung der analytischen Fortsetzung

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} G_{A,B}(z_n) \Big|_{z_n \rightarrow \omega + i\delta} = G_{A,B}^r(\omega) \tag{7.11}$$

ergibt sich bei “analytischen” Rechnungen von selbst. Numerischen Rechnungen (Monte Carlo, Dichte-Matrix-Renormierungs-Gruppe) liefern häufig primär die Green-Funktion auf der imaginären Achse, also $G_{A,B}(z_n)$. Die Durchführung einer numerischen analytischen Fortsetzung kann nicht einfach mit (7.11) durchgeführt werden, da nur die Zahlenwerte von $G_{A,B}(z_n)$, $n = 1, 2, \dots$ bekannt sind. In der Tat ist die numerischen analytischen Fortsetzung ein mathematisch schlecht konditioniertes Problem und bereitet bis heute Schwierigkeiten.

Bemerkung

Der Zusammenhang (7.11) zwischen der Matsubara Green-Funktion und der retardierten Green-Funktion auf der reellen Achse ist einer der beiden Gründe, warum es für $T > 0$ bequem ist auf der imaginären Achse zu arbeiten, denn aus Kap. 4.2 wissen wir, dass die physikalischen Response-Funktionen retardierte Green-Funktionen sind. Der andere Grund für $T > 0$ mit den Matsubara Green-Funktionen zu arbeiten ist die einfache Darstellung der S-Matrix im Wechselwirkungsbild für $T > 0$, ein Zusammenhang welchen wir nun diskutieren werden.

7.2 S-Matrix Entwicklung

Wir notieren den Imaginärzeit-Evolutionsoperator

$$e^{-itH} \Big|_{t \rightarrow -i\tau} \longrightarrow e^{-\tau H} . \tag{7.12}$$

Wir definieren den Zeitentwicklungs-Operator im Wechselwirkungs-Bild (U -Operator)

$$U(\tau) := e^{\tau H_0} e^{-\tau H}, \quad H = H_0 + H' \quad (7.13)$$

wobei wir H_0 als ungestörtes System und H' als Störung auffassen wollen. Es ist zweckmäßig durch

$$A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0} \quad (7.14)$$

in die Wechselwirkungsdarstellung überzugehen wobei A ein beliebiger Operator ist. Beachte: Häufig wird statt $A(\tau)$ auch $A_w(\tau)$ geschrieben. Wir können uns die verkürzte Schreibweise ohne Verwechslungsgefahr leisten.

Zeitentwicklungs-Operator

Ziel ist die Bestimmung von Korrelationsfunktionen des Gesamtsystems H . Dazu benötigen wir die Heisenbergdarstellung

$$A_H(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H} = U^{-1}(\tau) A(\tau) U(\tau) \quad (7.15)$$

wobei zuletzt der U -Operator benutzt wurde, dem Zeitentwicklungsoperator auf der imaginären Achse. Wir bemerken, dass die mittlere Darstellung in (7.15) nur für Zeit-unabhängige Hamilton-Operatoren gültig ist, der rechte jedoch generell.

Die Bewegungsgleichung für $U(\tau)$ lautet

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau) = e^{\tau H_0} (-H_0 + H) e^{-\tau H} = H'(\tau) U(\tau), \quad (7.16)$$

mit der expliziten Lösung

$$\begin{aligned} U(\tau) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\tau} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n H'(\tau_1) \cdots H'(\tau_n) \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathcal{T} \int_0^{\tau} \cdots \int_0^{\tau} d\tau_1 \cdots d\tau_n H'(\tau_1) \cdots H'(\tau_n) \\ &=: \mathcal{T} \exp \left\{ - \int_0^{\tau} d\bar{\tau} H'(\bar{\tau}) \right\} \end{aligned} \quad (7.17)$$

wobei das Zeitordnungssymbol (auch Zeitordnungs-Operator genannt)

$$\mathcal{T} \{ H'(\tau_1) H'(\tau_2) \} = \begin{cases} H'(\tau_1) H'(\tau_2), & \text{für } \tau_1 > \tau_2 \\ H'(\tau_2) H'(\tau_1), & \text{für } \tau_1 < \tau_2 \end{cases} \quad (7.18)$$

benutzt wurde. Dieses entspricht dem Zeitordnungsoperator T_t in Gl. (7.1) mit $\epsilon = -1$, da alle Terme des Hamilton-Operators gerade Anzahl von fermionische Operatoren enthält.

S-Matrix

Wir definieren die S-Matrix

$$U(\tau, \tau') := \mathcal{T} \exp \left\{ - \int_{\tau'}^{\tau} d\bar{\tau} H'(\bar{\tau}) \right\}, \quad (\tau > \tau'). \quad (7.19)$$

Sie hat die Eigenschaften

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau, \tau') = H'(\tau) U(\tau, \tau'), \quad U(\tau, \tau) = 1$$

$$\begin{aligned} U(\tau_1, \tau_3) &= U(\tau_1, \tau_2)U(\tau_2, \tau_3), & (\tau_1 > \tau_2 > \tau_3) \\ U(\tau_1, \tau_2) &= U(\tau_1)U^{-1}(\tau_2). & (\tau_1 > \tau_2) \end{aligned} \quad (7.20)$$

Wir können nun die Zustandssumme Z mit Hilfe der S-Matrix, bzw. mit Hilfe des Zeitentwicklungs-Operators in imaginärer Zeit umschreiben. Dieser Zusammenhang ist ausschlaggebend für den Nutzen von imaginärer Zeiten bei der Behandlung von Green-Funktionen bei endlichen Temperaturen.

Zeit-Entwicklung/Ordnung

Für Zeitentwicklungs-Operatoren gilt allgemein die Produktzerlegung

$$U(\beta) = U(\beta, \tau)U(\tau, 0), \quad 0 \leq \tau \leq \beta.$$

Damit finden wir für $\beta \geq \tau_1 \geq \tau_2 \geq \tau_3 \dots \geq 0$

$$\mathcal{T}\{A(\tau_1)B(\tau_2)\dots U(\beta)\} = U(\beta, \tau_1)A(\tau_1)U(\tau_1, \tau_2)B(\tau_2)\dots$$

Zustandssumme

Es gilt

$$Z = \text{Sp} [e^{-\beta H}] = \text{Sp} [e^{-\beta H_0} U(\beta)]. \quad (7.21)$$

Wir definieren nun mit

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\text{Sp} [e^{-\beta H_0} A]}{\text{Sp} [e^{-\beta H_0}]} \quad (7.22)$$

den Erwartungswert eines Operators bezüglich des ungestörten Systems (etwas was man ausrechnen kann, da die Lösung von H_0 bekannt). Damit wird die Zustandssumme Z zu

$$\frac{Z}{Z_0} = \langle U(\beta) \rangle_0, \quad Z_0 = \text{Sp} [e^{-\beta H_0}], \quad (7.23)$$

sie läßt sich also formal als Erwartungswert des Zeitentwicklungs-Operators schreiben.

S-Matrix Entwicklung

Für $\tau > 0$ folgt

$$\begin{aligned} G_{A,B}(\tau) &= -\langle A_H(\tau)B_H(0) \rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Sp} [e^{-\beta H} U^{-1}(\tau)A(\tau)U(\tau)B(0)] \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Sp} [e^{-\beta H_0} U(\beta, \tau)A(\tau)U(\tau, 0)B(0)] \end{aligned} \quad (7.24)$$

also

$$\boxed{G_{A,B}(\tau) = -\frac{\mathcal{T} \langle A(\tau)B(0)U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}}, \quad (7.25)$$

wobei der Zeitordnungs-Operator via (7.18) definiert ist.

Mit der Entwicklung (7.17) für $U(\beta)$ erhalten wir

$$\mathcal{T} \langle A(\tau)B(0)U(\beta) \rangle_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathcal{T} \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle A(\tau)B(0)H'(\tau_1) \cdots H'(\tau_n) \rangle_0 \quad (7.26)$$

für den Zähler von (7.25) und die sog. S-Matrix Entwicklung

$$\langle U(\beta) \rangle_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathcal{T} \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle H'(\tau_1) \cdots H'(\tau_n) \rangle_0 \quad (7.27)$$

für den Nenner von (7.25). Nun handelt es sich bei der verbleibenden Aufgabe darum, die Mittelwerte $\langle \dots \rangle_0$ des ungestörten Systems zu berechnen. Offensichtlich gibt es hierbei jede Menge Terme und eine Systematik muss entwickelt werden.

7.3 Wicksches Theorem

Bevor wir an das Ende des letzten Paragraphen anknüpfen, wollen wir uns fragen, wie wir in wechselwirkungsfreien Theorien Erwartungswerte von beliebigen Produkten von Feldoperatoren berechnen. Es wird sich zeigen, daß dazu die Kenntnis allein von "2-Punkt-Korrelationsfunktionen" von Feldoperatoren ausreichend ist, d.h. Mittelwerte von Produkten von zwei Feldoperatoren. Dabei wird vorausgesetzt, dass der wechselwirkungsfreien Hamilton-Operator quadratisch in den Feldoperatoren ist.

Wir wiederhole hierfür zunächst kurz die Eigenschaften wechselwirkungsfreier Hamilton-Operatoren.

Quadratische Hamilton-Operatoren

Wir betrachten Fermionen mit dem Hamiltonoperator H und den Eigenzuständen $|k_1, \dots, k_N\rangle$,

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^+ c_k, \quad |\alpha\rangle \equiv |k_1, \dots, k_N\rangle = c_{k_1}^+ c_{k_2}^+ \cdots c_{k_N}^+ |0\rangle .$$

Die Zustandszsumme ist dann durch

$$Z = \langle e^{-\beta H} \rangle_0 = \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta H} | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}, \quad E_{\alpha} = \sum_{p \in \alpha} \epsilon_p$$

gegeben.

Lemma

Seien b, c, d, e, \dots, g, h insgesamt m Feldoperatoren (d.h. $\psi(r), \psi^+(r), c_k$ etc.), so gilt für wechselwirkungsfreie Hamiltonoperatoren H_0

$$\begin{aligned} \langle bcde\dots gh \rangle_0 &= && \langle bc \rangle_0 \langle de\dots gh \rangle_0 \\ &+ (-\epsilon) && \langle bd \rangle_0 \langle c e\dots gh \rangle_0 \\ &+ (-\epsilon)^2 && \langle be \rangle_0 \langle cd \dots gh \rangle_0 \\ &&& \vdots \\ &+ (-\epsilon)^{m-2} && \langle bh \rangle_0 \langle cde\dots g \rangle_0 \end{aligned}$$

Die Anzahl m der Feldoperatoren kann als gerade angenommen werden kann, da andernfalls beide Seiten gleich null wären. $\epsilon = -1$ für Bosonen, $\epsilon = 1$ für Fermionen.

Motivation

Für ausführliche Beweise dieses Lemmas verweisen wir auf die entsprechende Lehrbücher, hier diskutieren wir den Fall $m = 4$.

Es genügt O.B.d.A. für $m = 4$ nach dem Lemma

$$\langle c_k^+ c_k c_p^+ c_p \rangle_0 = \langle c_k^+ c_k \rangle_0 \langle c_p^+ c_p \rangle_0 - \underbrace{\langle c_k^+ c_p^+ \rangle_0}_{=0} \underbrace{\langle c_k c_p \rangle_0}_{=0} + \langle c_k^+ c_p \rangle_0 \langle c_k c_p^+ \rangle_0$$

zu betrachten, da alle anderen nicht-verschwindene Terme höchstens Permutationen hiervon sein können. Wir definieren die Besetzungszahlen $n_p = \langle c_p^+ c_p \rangle_0$ und unterscheiden zwei Fälle;

- $k \neq p$

Dann ist

$$\underbrace{\langle c_k^+ c_k c_p^+ c_p \rangle_0}_{=n_k n_p} = \underbrace{\langle c_k^+ c_k \rangle_0}_{=n_k} \underbrace{\langle c_p^+ c_p \rangle_0}_{=n_p} + \underbrace{\langle c_k^+ c_p \rangle_0}_{=0} \underbrace{\langle c_k c_p^+ \rangle_0}_{=0} .$$

- $k = p$

Dann gilt

$$\langle c_k^+ c_k c_k^+ c_k \rangle_0 = \underbrace{\langle c_k^+ c_k \rangle_0}_{=n_k} = \underbrace{\langle c_k^+ c_k \rangle_0}_{=n_k} \underbrace{\langle c_p^+ c_p \rangle_0}_{=n_k} + \underbrace{\langle c_k^+ c_k \rangle_0}_{=n_k} \underbrace{\langle c_k c_k^+ \rangle_0}_{=(1-n_k)} ,$$

$$\text{also } n_k = n_k^2 + n_k(1 - n_k).$$

Also stimmt die direkte Rechnung mit der Formel des Lemmas überein.

Wicksches Theorem

Nun folgt per Induktion

$$\langle bcde\dots gh \rangle_0 = \sum_{\substack{\text{alle Paarungen } P \\ \text{(Kontraktionen)}}} (-\epsilon)^{\#P} \langle \dots \rangle_0 \langle \dots \rangle_0 \cdots \langle \dots \rangle_0 \quad (7.28)$$

wobei $\#P$ die Anzahl der Transpositionen mißt, die nötig sind, alle Faktoren wie auf der linken Seite vorkommend in die Reihenfolge des betreffenden Summanden auf der rechten Seite überzuführen.

Wieviele Summanden gibt es? Sei $2k$ die Anzahl der Faktoren, dann lautet die Antwort

$$(2k - 1)(2k - 3)\dots 3 \cdot 1 = \frac{(2k)!}{2k \cdot (2k - 2)\dots 2 \cdot 1} = \frac{(2k)!}{2^k k!} \quad (7.29)$$

Eine Anwendung für Bosonen

Sei A ein Operator linear in bosonischen Feldoperatoren, dann gilt

$$\begin{aligned}\langle e^A \rangle_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle A^n \rangle_0 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \langle A^{2k} \rangle_0 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \left(\frac{(2k)!}{2^k k!} (\langle A^2 \rangle_0)^k \right) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\langle A^2 \rangle_0}{2} \right)^k = e^{\frac{1}{2} \langle A^2 \rangle_0}.\end{aligned}$$

Wir bemerken, $\langle e^A \rangle_0 \neq e^{\langle A \rangle_0}$!

Anwendung: Fermi-Loch

Die Dichte-Dichte-Korrelation in wechselwirkungsfreien Systemen ist

$$\begin{aligned}\langle n(x) n(0) \rangle_0 &= \langle \psi(x)^+ \psi(x) \psi(0)^+ \psi(0) \rangle_0 \\ &= \langle \psi(x)^+ \psi(x) \rangle_0 \langle \psi(0)^+ \psi(0) \rangle_0 + (-\epsilon)^2 \langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 \langle \psi(x) \psi(0)^+ \rangle_0 \\ &= \underbrace{\langle n(x) \rangle_0}_{=\bar{n}} \underbrace{\langle n(0) \rangle_0}_{=\bar{n}} - \epsilon \left| \langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 \right|^2,\end{aligned}\quad (7.30)$$

wobei \bar{n} die mittlere Teilchendichte ist. Einzig zu berechnen bleibt

$$\langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 = \frac{1}{V} \sum_k e^{-ikx} \langle c_k^+ c_k \rangle_0 = \frac{1}{V} \sum_k \frac{e^{-ikx}}{e^{\beta\epsilon_k} + \epsilon} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{e^{-ikx}}{e^{\beta\epsilon_k} + \epsilon}$$

für $\epsilon = \pm 1$ (Fermionen/Bosonen). Interessant ist insbesondere das Verhalten der Grundzustandskorrelationen für freie Fermionen

$$\langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{k}| < k_F} d^3k e^{-ikx} \quad (7.31)$$

welche wir hier für den eindimensionalen Fall ausrechnen wollen:

$$\langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk e^{-ikx} = \frac{\sin k_F x}{\pi x} = \frac{k_F}{\pi} \frac{\sin k_F x}{k_F x} = \bar{n} \frac{\sin k_F x}{k_F x}.$$

Damit wir die (statische) Dichte-Dichte Korrelation zu

$$\langle n(x) n(0) \rangle_0 = \bar{n}^2 \left(1 - \left| \frac{\sin k_F x}{k_F x} \right|^2 \right). \quad (7.32)$$

Das Verhalten $\lim_{x \rightarrow 0} \langle n(x) n(0) \rangle_0 = 0$ bezeichnet man mit Fermi-Loch, die $2k_F$ -Oszillationen mit Friedel-Oszillationen.

Wicksches Theorem für \mathcal{T} -Produkte

Das Wicksche Theorem läßt sich trivial auf Produkten von zeitgeordneten Operatoren verallgemeinern,

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{T} b(\tau_1) c(\tau_2) d(\tau_3) e(\tau_4) \dots g(\tau_{2k-1}) h(\tau_{2k}) \rangle_0 & \\ &= \sum_{\substack{\text{alle Paarungen } P \\ \text{(Kontraktionen)}}} (-\epsilon)^{\#P} \langle \mathcal{T} \dots \rangle_0 \langle \mathcal{T} \dots \rangle_0 \dots \langle \mathcal{T} \dots \rangle_0,\end{aligned}\quad (7.33)$$

denn für jede Realisierung von Zeiten τ_j gibt es genau ein Produkt von Operatoren. Die “elementaren Kontraktionen” $\langle \mathcal{T} \dots \rangle_0$ auf der rechten Seite von (7.33) sind die zeitgeordnete Erwartungswerte der entsprechenden Operatoren, sind also nach Def. (7.5) mit den entsprechenden zwei-zeitigen Matsubara Green-Funktionen identisch!

Damit schließt sich der Formalismus: Die S-Matrix Entwicklung (7.27) ist eine Entwicklung nach zeitgeordneten Produkten von Operatoren in der Wechselwirkungs-Darstellung. Nach dem Wick’schen Theorem (7.33) lassen sich die einzelnen Terme der S-Matrix Entwicklung mittels Summen von Produkten von elementaren (wechselwirkungs-freien) Green-Funktionen auswerten. Da es viele derartiger Terme gibt, ist eine Systematik von Nöten. Am einfachsten ist eine Bild-behaftet Systematik (Graphen), welche wir nun diskutieren werden.

7.4 Feynmann-Diagramme

Wir betrachten nun ein allgemeines Vielteilchensystem in Impulsdarstellung

$$H = H_0 + H' = \sum_p \epsilon_p c_p^+ c_p + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl|V|nm \rangle c_k^+ c_l^+ c_n c_m, \quad (7.34)$$

wobei $\langle kl|V|nm \rangle$ das Matrixelement der Zweiteilchen-Wechselwirkung ist und \sum_{klmn} die Impulserhaltung $k + l = n + m$ enthält (wir haben die Vektor-Pfeile einfachhalber unterdrückt).

Entwicklung der Einteilchen-Green-Funktion

Wir wollen die Einteilchen-Green-Funktion $G(p\tau, p'\tau') = G_{c_p, c_{p'}}^+(\tau, \tau')$

$$G(p\tau, p'\tau') = - \frac{\mathcal{T} \langle c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \cdot \delta_{p, p'} \quad (7.35)$$

berechnen. Aus der Impulserhaltung folgt sofort dass $G(p\tau, p'\tau')$ für $p \neq p'$ verschwindet. Mit

$$H'(\tau_i) = \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl|V|nm \rangle c_k^+(\tau_i) c_l^+(\tau_i) c_n(\tau_i) c_m(\tau_i) \quad (7.36)$$

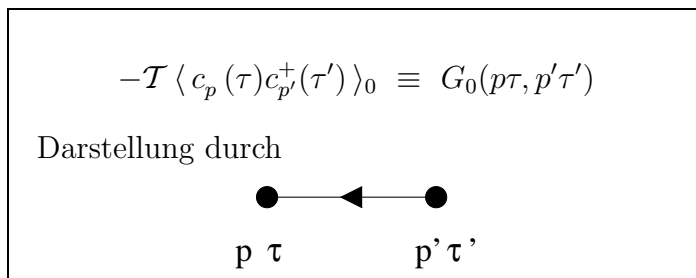
folgt für den Zähler von (7.26)

$$\begin{aligned} -\mathcal{T} \langle c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') U(\beta) \rangle_0 &= - \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_\nu \\ &\cdot \sum_{\substack{k_1 l_1 m_1 n_1 \\ k_\nu l_\nu m_\nu n_\nu}} \left(\frac{1}{2}\right)^\nu \langle k_1 l_1 | V | n_1 m_1 \rangle \cdots \langle k_\nu l_\nu | V | n_\nu m_\nu \rangle \\ &\cdot \left\langle \mathcal{T} c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') \cdot c_{k_1}^+(\tau_1) c_{l_1}^+(\tau_1) c_{n_1}(\tau_1) c_{m_1}(\tau_1) \cdots \right. \\ &\quad \left. \cdots c_{k_\nu}^+(\tau_\nu) c_{l_\nu}^+(\tau_\nu) c_{n_\nu}(\tau_\nu) c_{m_\nu}(\tau_\nu) \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (7.37)$$

Graphische Notation

Wir notieren die ersten Terme ($\nu = 0, 1$) und führen einige graphische Notationen ein.

$\nu = 0$



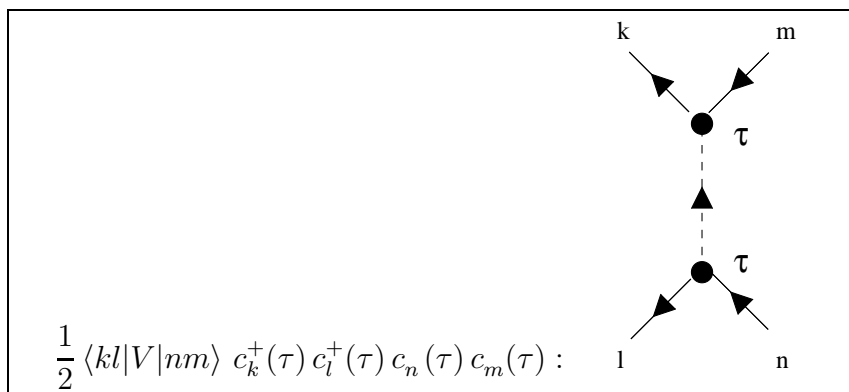
$\nu = 1$

$$-(-1) \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{k_1 l_1 m_1 n_1} \frac{1}{2} \langle k_1 l_1 | V | n_1 m_1 \rangle \cdot \langle \mathcal{T} c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') \cdot c_{k_1}^+(\tau_1) c_{l_1}^+(\tau_1) c_{n_1}(\tau_1) c_{m_1}(\tau_1) \rangle_0 \tag{7.38}$$

Hier gilt es, alle möglichen Kontraktionen durchzuführen. Bei 3 Erzeugern und 3 Vernichtern gibt es $3!=6$ Möglichkeiten. Man führt dies graphisch durch, indem folgende Identifizierung getroffen wird,



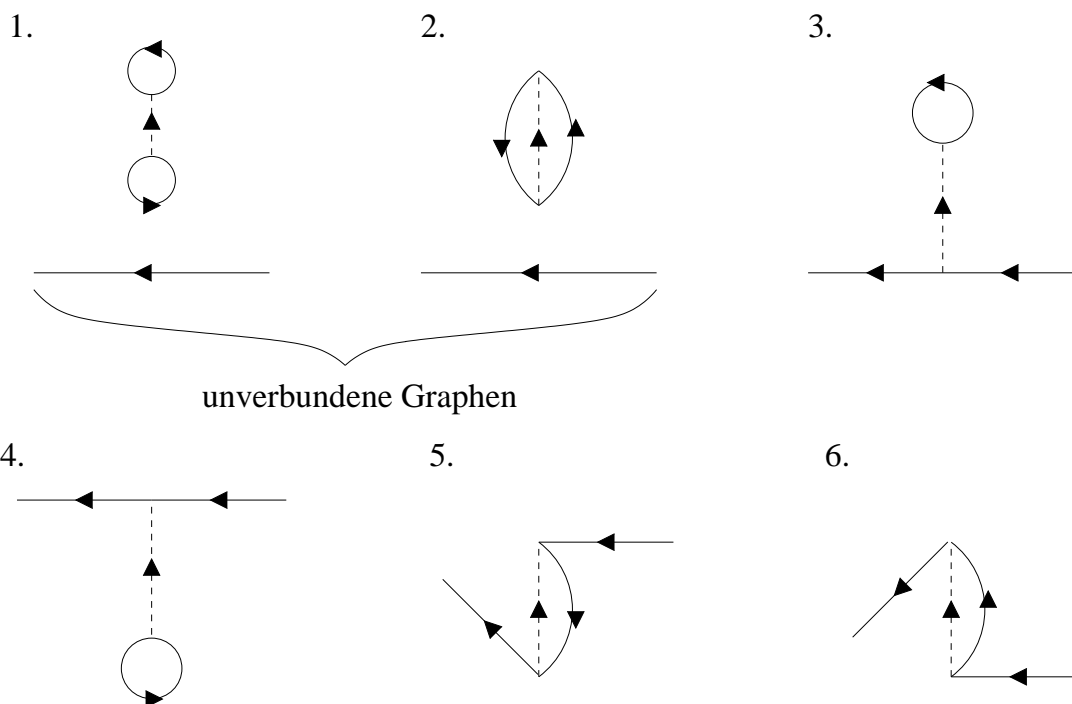
für die elementaren Erzeuger und Vernichter und



für die Wechselwirkung.

$\nu = 1$: Graphische Kontraktionen

Die ausstehende Bildung aller Kontraktionen von (7.38) reduziert sich nun auf die Aufgabe die einlaufende und auslaufende Pfeile (externe Linien) auf alle möglichen Arten zu verbinden.

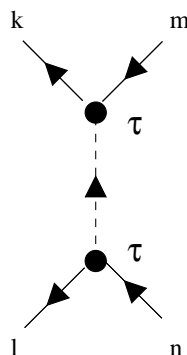


unverbundene Graphen

Diese Diagramme nennt man Feynmann-Diagramme. 3. und 4. sind gleich und heissen Hartree-Diagramm, 5. und 6. Austausch-Diagramm. Der Integrand zu jedem der obigen $\nu = 1$ Terme ergibt sich dann aus dem jeweiligen Graphen durch Identifizierung einer durchgezogenen Linie



mit $G_0(p\tau, p'\tau')$ und einer gebrochenen Linie (Vertex)



mit $\frac{1}{2}\langle kl|V|nm\rangle$.

$\nu = 1$: Auswertung der Kontraktionen

Wir werten nun die Kontraktionen aus und erhalten, für den Integranden von (7.37) linear in der Wechselwirkung,

- Fall 1.

$$\frac{-1}{2}\langle kl|nm\rangle G_0(p\tau, p'\tau') G_0(m\tau_1, k\tau_1) G_0(n\tau_1, l\tau_1) \cdot \delta_{p,p'} \delta_{m,k} \delta_{n,l}$$

Das Vorzeichen aus (7.28) ist $(-\epsilon)^{\#P} = +1$. Die Delta-Funktionen $\delta_{n,k}$ und $\delta_{m,l}$ geben die Impulserhaltung der Einteilchen-Green-Funktionen (7.35) wieder.

- Fall 2.

$$\frac{+1}{2} \langle kl|nm \rangle G_0(p\tau, p'\tau') G_0(n\tau_1, k\tau_1) G_0(m\tau_1, l\tau_1) \cdot \delta_{p,p'} \delta_{n,k} \delta_{m,l}$$

Das Vorzeichen aus (7.28) ist $(-\epsilon)^{\#P} = -1$.

- Fall 3. und 4.: Hartree-Diagramm

$$\frac{+1}{2} \langle kl|nm \rangle G_0(p\tau, k\tau_1) G_0(m\tau_1, p'\tau') G_0(n\tau_1, l\tau_1) \cdot \delta_{p,k} \delta_{m,p'} \delta_{n,l}$$

Das Vorzeichen aus (7.28) ist $(-\epsilon)^{\#P} = +1$.

- Fall 5. und 6.: Fock-Diagramm

$$\frac{-1}{2} \langle kl|nm \rangle G_0(p\tau, l\tau_1) G_0(n\tau_1, k\tau_1) G_0(m\tau_1, p'\tau') \cdot \delta_{p,l} \delta_{n,k} \delta_{m,p'}$$

Das Vorzeichen aus (7.28) ist $(-\epsilon)^{\#P} = -1$.

7.5 Vakuum-Polarization

Bis jetzt haben wir den Zähler $\mathcal{T} \langle c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') U(\beta) \rangle_0$ der Matsubara Green-Funktion

$$G(p\tau, p'\tau') = - \frac{\mathcal{T} \langle c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \quad (7.39)$$

betrachtet. Nun wenden wir uns der Zustandssumme $Z = \langle U(\beta) \rangle_0$ zu, dem Nenner der Green-Funktion, welche wir via

$$\begin{aligned} \langle U(\beta) \rangle_0 &= + \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_\nu \\ &\cdot \sum_{\substack{k_1 l_1 m_1 n_1 \\ k_\nu l_\nu m_\nu n_\nu}} \left(\frac{1}{2}\right)^\nu \langle k_1 l_1 | V | n_1 m_1 \rangle \cdots \langle k_\nu l_\nu | V | n_\nu m_\nu \rangle \\ &\cdot \mathcal{T} \langle c_{k_1}^+(\tau_1) c_{l_1}^+(\tau_1) c_{n_1}(\tau_1) c_{m_1}(\tau_1) \cdots c_{k_\nu}^+(\tau_\nu) c_{l_\nu}^+(\tau_\nu) c_{n_\nu}(\tau_\nu) c_{m_\nu}(\tau_\nu) \rangle_0 \end{aligned} \quad (7.40)$$

mit den gleichen Symbolen graphische beschreiben können wie den Zähler. Im Unterschied zu Gl. (7.37) fällt der Wegfall der äusseren Linien $c_p(\tau)$ und $c_{p'}^+(\tau')$ auf.

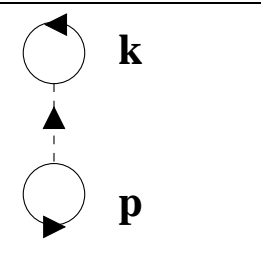
Der Term nullter-Ordnung (in der Wechselwirkung), $\nu = 0$ ist trivial und gibt gleich eins.

Kontraktionen für $\nu = 1$

$$(-1) \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{k_1 l_1 m_1 n_1} \frac{1}{2} \langle k_1 l_1 | V | n_1 m_1 \rangle \mathcal{T} \langle c_{k_1}^+(\tau_1) c_{l_1}^+(\tau_1) c_{n_1}(\tau_1) c_{m_1}(\tau_1) \rangle_0 \cdot \quad (7.41)$$

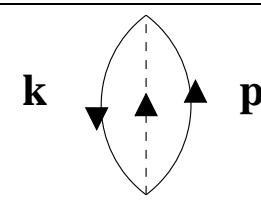
Die zwei nicht-verschwindenden Kontraktionen sind

a)

$$\frac{1}{2} \langle kp|V|kp\rangle c_k^+(\tau) c_p^+(\tau) c_p(\tau) c_k(\tau) :$$


und

b)

$$\frac{1}{2} \langle pk|V|kp\rangle c_p^+(\tau) c_k^+(\tau) c_p(\tau) c_k(\tau) :$$


Dabei haben wir diesmal gleich die Impulserhaltung der Einteilchen-Green-Funktionen berücksichtigt.

Extensivität der $\nu = 1$ Beiträge

Diese beiden Beiträge zu (7.41) sind extensiv, d.h. proportional zum Volumen. Typische Matrixelemente der Wechselwirkung haben die Form

$$\frac{1}{2} \langle kl|V|nm\rangle = \frac{V_q}{V}, \quad q = k - m = -(l - n), \quad (7.42)$$

wobei q der Impulsübertrag und V ist das Volumen des Kristalls ist. Es ist also proportional zu V^{-1} . Für die Coulomb-Wechselwirkung hatten wir z.B. in Kap. 5.1.4 $V_q = 4\pi e^2/q^2$ gefunden.

Die beiden Vakuum-Polarizations-Diagramme **a)** und **b)** mit $q = 0$ und $q = k - p$ respektive, haben wegen der Impulserhaltung an den beiden Vertizes die Größenordnung

$$\sum_{k,p} \frac{V_q}{V} \propto \frac{V^2}{V} \int \frac{d^3k}{2\pi^3} \int \frac{d^3p}{2\pi^3} \propto V,$$

siehe (7.42) und (7.41), sind also divergent im thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$.

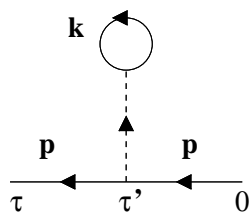
Verbunden vs. unverbundene Diagramme

Man sich leicht überlegen, dass zur Zustandsumme Terme mit beliebigen Potenzen in V beitragen, und zwar für jeden unverbundenen Beitrag eine Potenz im Volumen V .

Diese Problem haben wir allerdings auch für die Feynmann-Diagramm, welche zum Zähler der Green-Funktion beitragen. Die unverbundenen Graphen 1. und 2. auf Seite 129 sind auch extensiv sind, die verbundenen Graphen 3.-6. jedoch intensiv. Letzteres folgt direkt aus der Impulserhaltung an jedem Vertex.

Als Illustration betrachten wir das Hartree-Diagramm

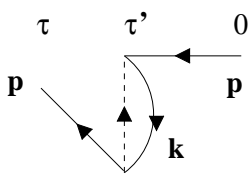
$$(7.43)$$



$$G_0(p\tau, p\tau') G_0(p\tau', p0) \frac{V_{q=0}}{V} \sum_k G_0(k\tau', k\tau') \approx O(V)$$

sowie das Austausch-Diagramm

(7.44)



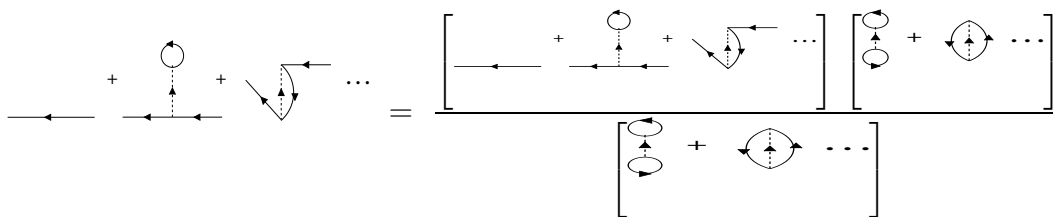
$$G_0(p\tau, p\tau') G_0(p\tau', p0) \sum_k \frac{V_{k-p}}{V} G_0(k\tau', k\tau') \approx O(V)$$

Entwicklung nach verbundenen Diagrammen

Auf den ersten Blick haben wir jetzt also eine ernsthaftes Problem, da die Matsubara Green-Funktion (7.39) nach Definition intensiv, also von der Grössenordnung $O(V^0)$ sein sollte.

Die Lösung dieses (scheinbaren) Problem ist ebenso einfach wie überraschend. Wir erkennen, dass die Vakuum-Polarizations-Graphen wie **a)** und **b)** zu allen Beiträgen des Zählers **multiplikativ** auftreten, und zwar in allen Ordnungen, und somit die Beiträge des Nenners gerade aufheben.

Diese Erkenntnis für $G(p\tau, p'\tau')$ können wir graphisch folgendermassen beschreiben:



Wir kommen damit zum zentralen Ergebnis

$$-\frac{\mathcal{T} \langle c_p(\tau) c_{p'}^\dagger(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} = \boxed{G(p\tau, p'\tau') = -\mathcal{T} \langle c_p(\tau) c_{p'}^\dagger(\tau') U(\beta) \rangle_0^{(c)}} \quad (7.45)$$

wobei der Index (c) andeuten soll, dass nur **verbundene Diagramme** ('connected graphs') beitragen.

7.6 Diagramm-Regeln

7.6.1 Energie- und Impulserhaltung

Wir bemerken, dass für die Einteilchen-Green-Funktion $G(p\tau, p'\tau') = \delta_{p,p'}G(p(\tau-\tau'), p0) \equiv G(p, \tau - \tau')$ gilt, mit

$$G(p, \tau) = -\langle c_p(\tau)c_p^+ \rangle, \quad (0 \leq \tau \leq \beta), \quad (7.46)$$

und definieren die Matsubara Green-Funktion

$$G(p, z_n) = \int_0^\beta d\tau e^{iz_n\tau} G(p, \tau), \quad z_n = \begin{cases} \frac{\pi}{\beta}2n \equiv \nu_n, & \text{(Bosonen),} \\ \frac{\pi}{\beta}(2n+1) \equiv \omega_n, & \text{(Fermionen),} \end{cases}$$

als Funktion Matsubara-Frequenzen z_n . Es gilt

$$G(p, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-iz_n\tau} G(p, z_n), \quad \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i(z_n-z_l)\tau} = \delta_{n,l}. \quad (7.47)$$

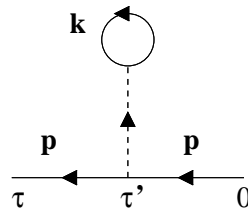
Hier betrachten wir Fermionen. Wir bemerken zudem, dass

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^-} G(p, \tau) = \langle c_p^+ c_p \rangle \equiv n_p \quad (7.48)$$

die Impulsverteilungs-Funktion ist und $\lim_{\tau \rightarrow 0^+} G(p, \tau) = -(1 - n_p) = n_p - 1$ gilt. Die Einteilchen-Green-Funktion hat also einen Sprung bei $\tau = 0$ von $G(p, 0+) - G(p, 0-) = -1$.

Wir betrachten nun anhand zweier Beispiele Beiträge zur Einteilchen-Green-Funktion.

Hartree-Diagramm



Nach Kap. 7.4, 7.43 und mit Gl. (7.42) hat das Hartree-Diagramm den Wert

$$G^{(Har)}(p, \omega_n) = \frac{1}{\beta^2} \sum_{m,l} \int_0^\beta d\tau d\tau' e^{i\omega_n\tau} e^{-i\omega_l(\tau-\tau')} e^{-i\omega_m\tau'} \frac{V_{q=0}}{V} \sum_k G_0(p, \omega_l) G_0(p, \omega_m) n_k, \quad (7.49)$$

wobei $G_0(k\tau', k\tau') \rightarrow n_k$ gesetzt wurde. Diese Substitution bedarf einer Erklärung, den $G_0(k\tau', k\tau')$ ist nicht wohldefiniert, siehe (7.48) ff.

Wenn man sich die S-Matrix-Entwicklung genauer ansieht, erkennt man das dieser Term aus der Kontraktion

$$\frac{1}{2} \sum_{kp} \langle pk|V|kp \rangle c_p^+ \underbrace{c_k^+ c_k}_{\rightarrow G_0(k,\tau',k\tau')} c_p$$

hervorgehen. Wir finden nun mit (7.47)

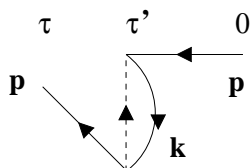
$$G^{(Har)}(p, \omega_n) = G_0(p, \omega_n) \Sigma^{(Har)}(p, \omega_n) G_0(p, \omega_n), \quad (7.50)$$

wobei mit

$$\Sigma^{(Har)}(p, \omega_n) = \frac{V_{q=0}}{V} \sum_k n_k = \frac{N}{V} V_{q=0} = \bar{n} V_{q=0} \quad (7.51)$$

die Selbstenergie $\Sigma^{(Har)}(p, \omega_n)$ in der Hartree-Approximation definiert wurde.

Austausch-Diagramm



Die analoge Rechnung für das Austauschdiagramm liefert

$$G^{(ex)}(p, \omega_n) = G_0(p, \omega_n) \Sigma^{(ex)}(p, \omega_n) G_0(p, \omega_n), \quad (7.52)$$

wobei die Selbstenergie

$$\Sigma^{(ex)}(p, \omega_n) = -\frac{1}{V} \sum_k V_{k-p} n_k \quad (7.53)$$

nun eine nicht-triviale Impuls-abhängigkeit besitzt.

Bemerkungen

Diese beiden Beispiele verdeutlichen, was physikalisch aufgrund der Translationsinvarianz in Raum und Zeit anschaulich klar ist:

- An jedem Vertex gilt Impuls und (imaginäre) Energie-Erhaltung.
- Alle multiplikativen Beiträge zur Green-Funktion haben denselben Impuls wie die äußeren Linien und dieselbe (imaginäre) Energie.

7.6.2 Diagramm-Regeln

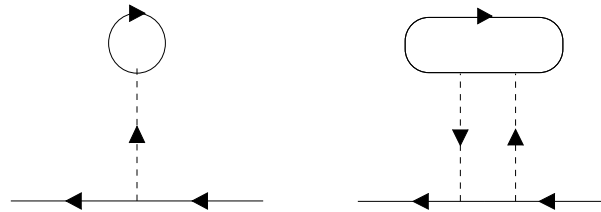
Für einfache Diagramme ist es lehrreich sich die expliziten Formeln (7.49) und (7.45) für die S-Matrix-Entwicklung herzuleiten. Für grössere Rechnungen und kompliziertere Diagramme ist es aber unumgänglich sich allgemeine Vorschriften zu überlegen, welcher exakten mathematischen Formel ein gegebenens (graphisch vorliegende) Diagramm entspricht.

Definitionen

Wir definieren:

- **Ordnung eines Diagramms (m)**

Die Ordnung eines Graphen ist gleich die Anzahl Wechselwirkungs-Linien. Beispiele: $m = 1$ (links) und $m = 2$ (rechts):



- **Anzahl Fermi-Loops (F)**

Die Anzahl **geschlossener Fermi-Linien** ist gleich der Anzahl von Fermi-‘loops’ im Graphen. Beispiele: $F = 1$ (links) und $F = 3$ (rechts):

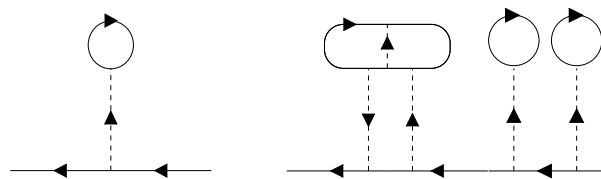
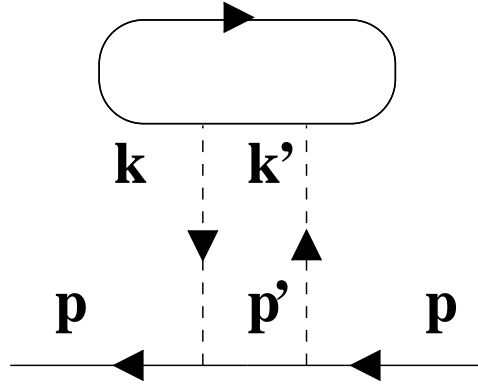


Diagramm-Regeln

Die allgemeinen Regeln zur Auswertung von Feynmann-Diagrammen lauten nun:

1. Jede Elektron-Linie entspricht $G_0(p, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - (\epsilon_p - \mu)}$.
2. Jede Wechselwirkungs-Linie entspricht V_q/V .
3. Erhalte an jedem Vertex Impuls und Energie.
4. Summiere über alle internen Freiheitsgrade von Impuls und Frequenz.
5. Multipliziere das Resultat mit $\frac{(-1)^{m+F}(2S+1)^F}{\beta^m}$
wobei $2S+1 = 2$ (für Spin-1/2) die Spin-Entartung ist.
Der Faktor $(2S+1)^F$ gilt nur für Spin-unabhängige Wechselwirkungen.

Beispiel: $m = 2, F = 1$



$$\frac{(-1)^3 2^1}{V^2 \beta^2} \sum_{k, p'} \sum_{\omega_k, \omega_{p'}} V_{p-p'} V_{p'-p} G_0(p', \omega_{p'}) G_0(k, \omega_k) G_0(k + p - p', \omega_k + \omega_p - \omega_{p'}) [G_0(p, \omega_p)]^2$$

7.6.3 Frequenz-Summen

Setzen wir $p' - k = q$ und $\omega_{p'} - \omega_k = \nu_m$ dann können wie den Selbstenergie-Anteil (siehe Kap. 7.7) in dem obigen Beispiel können wir auch wie folgt

$$\Sigma^{(2)}(p, \omega_p) = \frac{1}{V} \sum_q \frac{V_q^2}{\beta} \sum_{\nu_m} P^{(0)}(q, \nu_m) G_0(p - q, \omega_p - \nu_m)$$

schreiben, mit der Vakuum-Polarization in nullter-Ordnung

$$P^{(0)}(q, \nu_m) = \frac{-2}{V} \sum_k \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_k} G_0(k, \omega_k) G_0(k + q, \omega_k + \nu_m)$$

und $\omega_k = (2k + 1)\pi/\beta$, $\nu_m = 2\pi m/\beta$. Es gilt also typische Frequenz-Summen der Form

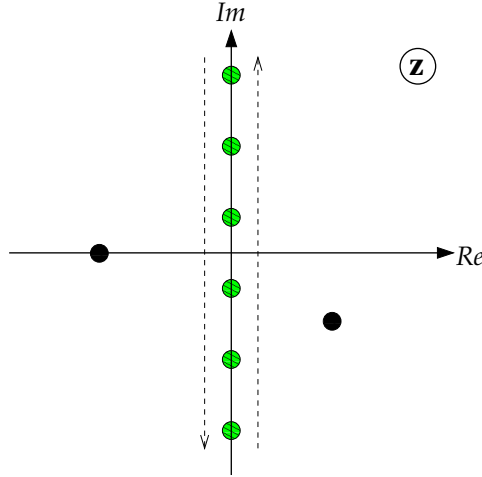
$$F = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_k} \frac{1}{i\omega_k - \xi_k} \frac{1}{i\omega_k + i\nu_m - \xi_{k+q}} \equiv \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_k} f(\omega_k) \quad (7.54)$$

auszuwerten. Wir wollen nun ein allgemeines Verfahren entwickeln um diese Summationen durchführen zu können.

Kontour-Integrale

Wir betrachten das Kontour-Integral

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint dz f(z) n_F(z), \quad n_F(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1}. \quad (7.55)$$



in der komplexen Ebene. Wir haben zwei Möglichkeiten es zu berechnen.

- (a) Wir schließen die Kontour so dass die Pole $z_k = (2k + 1)\pi/\beta = \omega_k$ der Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion $n_F(z)$ (schraffierte Punkte in der Zeichnung) mit Residuen $-1/\beta$ einschliessen:

$$I_a = \frac{-1}{\beta} \sum_{z_n} f(z_n) \equiv -F. \tag{7.56}$$

- (b) Ferner haben wir die Möglichkeit das Kontour-Integral aussen-herum zu schließen, da $f(z) \sim 1/z^2$ schnell genug zu grossen z -Werten abfällt. Das Integral schließt dann die Pole von $f(z)$ ein und hängt von der konkreten Form von $f(z)$ ab.

Wir betrachten nun das Beispiel

$$f(z) = \frac{1}{z - \xi_k} \frac{1}{z + i\nu_m - \xi_{k+q}} \tag{7.57}$$

mit den Polen:

- $\frac{z = \xi_k}{\text{Residuum}}$

$$\frac{-1}{\xi_k + i\nu_m - \xi_{k+q}} \frac{1}{e^{\beta\xi_k} + 1}.$$

- $\frac{z = -i\nu_m + \xi_{k+q}}{\text{Residuum}}$

$$\frac{-1}{-i\nu_m + \xi_{k+q} - \xi_k} \frac{1}{e^{\beta(-i\nu_m + \xi_{k+q})} + 1}.$$

Mit $e^{-i\beta\nu_m} = 1$ (bosonische Matsubara Frequenzen) ergibt sich

$$I_b = \frac{1}{i\nu_m + \xi_k - \xi_{k+q}} [n_F(\xi_{k+q}) - n_F(\xi_k)] \tag{7.58}$$

als Summe der beiden Beiträge (Pole).

Lindhardt-Funktion

Da nach Konstruktion $I_a = I_b$ finden wir mit (7.54) und (7.56)

$$P^{(0)}(q, i\nu_m) = \frac{2}{V} \sum_k \frac{-1}{i\nu_m + \xi_k - \xi_{k+q}} \left[n_F(\xi_{k+q}) - n_F(\xi_k) \right] \quad (7.59)$$

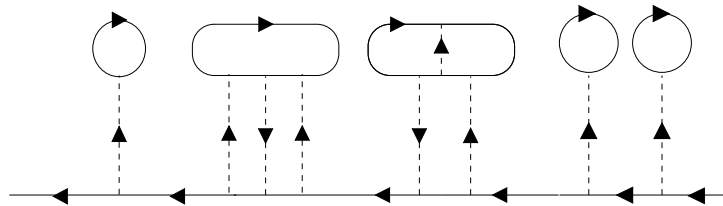
die Lindhardt-Funktion für die Vakuum Polarization in nullter Ordnung. Wir bemerken, dass der Faktor 2 in (7.59) durch die Summation $(2S + 1)^F$ über die Spin-Freiheitsgrade zustande kommt.

Allg. Frequenz-Summationen

Mit analogen Rechnungen kann man im Prinzip alle vorkommenden Frequenzsummen durchführen. Handelt es sich um eine Summe über bosonische Matsubara-Frequenzen, so nimmt man die Bose-Verteilungsfunktion $n_B(z) = [e^{\beta z} - 1]^{-1}$ in Gl. 7.55.

7.7 Dyson-Gleichung**Irreduzible Graphen**

Wir betrachten nun das Beispiel



und finden, analog zu den Beispielen in Kap. 7.6.1 und 7.6.2 einen Beitrag

$$G^{(Har)}(p, \omega_n) = G_0(p, \omega_n) \Sigma^{(Har)}(p, \omega_n) G_0(p, \omega_n) \Sigma^{(3,1)}(p, \omega_n) G_0(p, \omega_n) \Sigma^{(3,2)}(p, \omega_n) \\ \cdot G_0(p, \omega_n) \Sigma^{(Har)}(p, \omega_n) G_0(p, \omega_n) \Sigma^{(Har)}(p, \omega_n) G_0(p, \omega_n) .$$

Wegen der multiplikativen Struktur der Beiträge und der Impuls- und Energieerhaltung können wir zwei Arten von Beiträgen unterscheiden

- Beiträge identisch mit den äusseren Linien $G_0(p, \omega_n)$ und
- Selbstenergie-Beiträge $\Sigma^{(xx)}(p, \omega_n)$.

Dabei tritt zwischen je zwei Selbstenergie-Beiträge eine **einfach durchtrennbare Linie** auf. Man bezeichnet dabei mit **irreduzible Graphen** Beiträge zur Green-Funktion welche nicht einfach durchtrennt werden können. Die Selbstenergie-Beiträge sind also irreduzible.

Diese Beobachtung führt uns zur Definition:

Selbstenergie

Die Selbstenergie $\Sigma(p, \omega_n)$ ist die Summe aller unterschiedlichen Beiträge zur Einteilchen-Green-Funktion welche nicht einfach durchtrennbar sind.

Also $\Sigma(p, \omega_n) = \Sigma^{(Har)}(p, \omega_n) + \Sigma^{(ex)}(p, \omega_n) + \Sigma^{(3,1)}(p, \omega_n) + \Sigma^{(3,2)}(p, \omega_n) + \dots$

Dyson Gleichung

Bezeichnen wir symbolisch mit

- ===== die volle Einteilchen-Green-Funktion, mit
- ----- die ungestörte Einteilchen-Green-Funktion und mit
- \otimes die Selbstenergie

dann können wir die Beiträge zu ===== wie folgt

$$\text{=====} = \text{-----} + \text{-----} \otimes \text{-----} + \text{-----} \otimes \text{-----} \otimes \text{-----} \tag{7.60}$$

$$+ \text{-----} \otimes \text{-----} \otimes \text{-----} \otimes \text{-----} + \dots \tag{7.61}$$

schreiben, also

$$\text{=====} = \text{-----} + \text{-----} \otimes \text{=====} \tag{7.62}$$

Diese symbolische Gleichung nennt man **Dyson-Gleichung**. In Formeln lautet die Dyson-Gleichung

$$G(k, \omega_n) = G_0(k, \omega_n) + G_0(k, \omega_n) \Sigma(k, \omega_n) G(k, \omega_n) \tag{7.63}$$

Darstellung der Green-Funktion

Die formalen Lösung

$$\left[1 - G_0 \Sigma \right] G = G_0, \quad G = \left[1 - G_0 \Sigma \right]^{-1} G_0$$

lautet mit $\xi_k = \epsilon_k - \mu$

$$G(k, \omega_n) = \frac{1}{1 - \Sigma(k, \omega_n)/(i\omega_n - \xi_k)} \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k - \Sigma(k, \omega_n)} \tag{7.64}$$

Damit wird auch die Namensgebung ‘‘Selbstenergie’’ klar. $\Sigma(k, \omega_n)$ verhält sich wie eine Frequenz- und Impuls-abhängige Einteilchen-Energie.

7.8 Anwendungen

7.8.1 Coulomb-Gas

Wir wollen uns nun der Selbstenergie des Coulombgases zuwenden, für welches $V_q = 4\pi e^2/q^2$ ist.

Hartree-Fock-Näherung

Die Beiträge zur Selbstenergie

$$\Sigma(k, \omega_n) = \Sigma^{(Har)}(k, \omega_n) + \Sigma^{(ex)}(k, \omega_n) + \dots$$

in niedrigster Ordnung in V_q sind $\Sigma^{(Har)}$ und $\Sigma^{(ex)}$ mit

$$\Sigma^{(Har)}(k, \omega_n) = \bar{n} V_{k=0}, \quad \Sigma^{(ex)}(k, \omega_n) = -\frac{1}{V} \sum_p V_{p-k} n_p \quad (7.65)$$

nach Gl. (7.51) und (7.53). Da der Austausch-Term auch Fock-Term genannt wird, heißt die Näherung $\Sigma^{(HF)} = \Sigma^{(Har)} + \Sigma^{(ex)}$ auch Hartree-Fock-Näherung. Für das Coulomb-Gas divergiert $V_{q=0}$ und wird nicht weiter beachtet. Man stellt sich vor, dass dieser Beitrag durch den positiven Untergrund der Ionen aufgehoben wird.

Austauschterm

Der Austausch-Term hat für $T = 0$ die Form

$$\Sigma^{(ex)}(k, \omega_n) = \int_{\vec{p} \in \text{FS}} \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{-4\pi e^2}{|\vec{p} - \vec{k}|^2}.$$

Dieser Ausdruck wurde in Kap. 5.1.4 schon berechnet, als es darum ging ein Austausch-Korrelations-Potential für die Dichte-Funktional-Theorie abzuleiten. Wir übernehmen das Ergebnis Gl. (5.29):

$$\Sigma^{(ex)}(k, \omega_n) = -\frac{e^2 k_F}{\pi} \left(1 + \frac{1-y^2}{2y} \ln \left| \frac{1+y}{1-y} \right| \right),$$

mit $y = k/k_F$. Wir bemerken, dass in dieser Näherung die Selbstenergie Frequenz-unabhängig ist und an der Fermikante ($y = 1$) nicht-analytisch. Warum ist dies wichtig?

Quasiteilchen

Dazu betrachten wir uns die analytische Fortsetzung $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ von (7.64)

$$G^r(k, \omega) = \frac{1}{\omega + i\delta - \xi_k - \Sigma(k, \omega)} \quad (7.66)$$

und entwickeln (nahe der Fermi-Kante), die Selbstenergie

$$\Sigma(k, \omega) \approx \Sigma(k_F, 0) + \frac{d\Sigma(k_F, 0)}{dk} (k - k_F) + \frac{d\Sigma(k_F, 0)}{d\omega} \omega + \dots \quad (7.67)$$

nach kleinen Frequenzen und Impulsen sowie die ungestörten Einteilchen-Energie $\xi_k = \epsilon_k - \mu$:

$$\xi_k = \xi'_k(k - k_F) + \dots \equiv v_F^0(k - k_F) + \dots, \quad (7.68)$$

wobei wir $\mu(T=0) = E_F$ ausgenutzt haben. Wir setzen die beiden Taylor-Entwicklungen in (7.66) ein und finden den entsprechenden Abkürzungen für die partiellen Ableitungen

$$G^r(k, \omega) = \frac{1}{\underbrace{\omega + i\delta - v_F^0(k - k_F) - \Sigma_k(k_F, 0)(k - k_F) - \Sigma_\omega(k_F, 0)\omega}_{[1 - \Sigma_\omega(k_F, 0)][\omega + i\delta - v_F(k - k_F)]}}. \quad (7.69)$$

Dabei definieren wir die

- renormierte Fermi-Geschwindigkeit

$$v_F = \frac{v_F^0 + \Sigma_k(k_F, 0)}{1 - \Sigma_\omega(k_F, 0)} \quad (7.70)$$

sowie das

- Quasiteilchen-Gewicht

$$Z = [1 - \Sigma_\omega(k_F, 0)]^{-1}. \quad (7.71)$$

Der Faktor Z spielt eine wichtige Rolle in der Fermi-Flüssigkeits-Theorie, er beschreibt die Renormierung des Quasiteilchen-Gewichtes. Es muss streng $0 \leq Z \leq 1$ gelten (Summenregeln).

Aus (7.69) finden wir schlussendlich

$$\boxed{G^r(k, \omega) = \frac{Z}{\omega + i\delta - v_F(k - k_F)}}, \quad (7.72)$$

d.h. unsere Green-Funktion beschreibt ein Quasiteilchen mit einer renormierten Fermi-Geschwindigkeit v_F .

Für die Hartree-Fock-Näherung ist $Z = 1$ aber

$$\Sigma_k(k_F, 0) = \frac{d\Sigma(k_F, 0)}{dk}$$

divergiert logarithmisch. Diese Divergenz ist für das Coulombgas unphysikalisch und ein Fehler der zu einfachen Näherung. In einer besseren Näherung, der RPA-Näherung wird eine Klasse von Beiträgen zur Selbstenergie aufsummiert und diese Divergenz an der Fermi-Kante verschwindet.

Fermi-Flüssigkeits-Theorie

aus 7.72 können wir eine sehr wichtige Schlussfolgerung ziehen. Wenn die Selbstenergie analytisch ist, dies ist immer der Fall wenn die Störungsentwicklung nach der Wechselwirkung konvergiert, dann ist die Entwicklung nach kleinen Frequenzen und Impulsen (7.69)

erlaubt und 7.72 ist asymptotisch für $\omega \rightarrow 0$, $k \rightarrow k_F$ exakt. Also folgt aus 7.72 für das spektrale Gewicht (s. Gl. (4.33))

$$A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0} \text{Im} G^r(\omega + i\delta) = Z \delta(\omega - v_F(k - k_F)). \quad (7.73)$$

Es existieren also Anregungen bei renormierten Quasiteilchen-Energien $v_F(k - k_F)$ mit renormierten Quasiteilchen-Gewichten Z . Diese Anregungen stehen dabei in einer ein-zu-eins Beziehung zu den Anregungen des freien Elektronengases und gehen für $V_q \rightarrow 0$ in diese über (adiabatische Kontinuität). Aus diesem Grunde kann man alle "normalen" Metalle sehr gut mit fast-freien Elektronen beschreiben. In der Fermi-Flüssigkeits-Theorie betrachtet man dann die Rest-Wechselwirkung zwischen den Quasiteilchen (auch Landau-Quasiteilchen genannt) und findet Vorhersagen für das mögliche physikalische Verhalten. Eine wichtige Rolle spielt dabei die effektive Masse m^* mit

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*}, \quad m^* = \frac{\hbar k_F}{v_F}.$$

Für normale Metalle ist m^*/m von der Größenordnung eins, für die Schweren Fermionen gilt jedoch $m^*/m \sim 10^2 - 10^3$.

Luttinger-Flüssigkeit

Es ist wichtig festzuhalten, dass Fermi-Flüssigkeiten generisch nur in zwei- und dreiräumlichen Dimensionen sind. In einer Dimension bricht die Störungstheorie zusammen (sie divergiert logarithmisch) und das Quasiteilchen-Gewicht $Z \rightarrow 0$ verschwindet. Es tritt ein neuer kollektiver Quantenzustand auf, die sog. Luttinger-Flüssigkeit.

Inkohärente Anregungen

Die Näherung (7.72) erfüllt für $Z < 1$ nicht die Summenregel (4.39)

$$1 = \int d\omega A(\omega) = \int d\omega \left(\frac{-1}{\pi} \text{Im} G^r(k, \omega) \right)$$

für die Spektralfunktion $A(\omega)$, denn für (7.72) gilt

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{-1}{\pi} \text{Im} G^r(k, \omega) = Z \delta(\omega - v_F(k - k_F)).$$

Es gibt also noch Anregungen welche nicht durch den Quasiteilchen-Pol (7.72) beschrieben werden, und welche man mit

$$G^r(k, \omega) = \frac{Z}{\omega + i\delta - v_F(k - k_F)} + G_{inc}(k, \omega)$$

pauschal als inkohärent bezeichnet.

7.8.2 RPA-Näherung, Abschirmung und Plasmonen

Wir haben bisher den gesamten Formalismus aus Sicht der Einteilchen-Green-Funktion entwickelt. Selbstredend kann man die Sprache der Feynmann-Diagramme auch benutzen um die komplexer Green-Funktionen diagrammatisch in den Griff zu bekommen.

Abschirmung

Man kann auch gleich einen Schritt weiter gehen und sich fragen ob man nicht auch die Wechselwirkung $V_q = 4\pi e^2/q^2$ des Coulomb-Gases nicht mittels geeigneter Diagramme durch eine effective Wechselwirkung \tilde{V}_q nähern kann. Dieses ist physikalisch plausibel, da wir ja wissen dass die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung in einem Metall, wie es das Fermi-Gas ja ist, effektiv abgeschirmt wird. Eine einfache Näherung im Ortsraum für das abgeschirmte Coulomb-Potential ist

$$\tilde{V}_{\vec{r}} = \frac{e^2 e^{-\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|}.$$

Diese Potential ist kurzreichweitig, da es exponentiell abfällt.

RPA-Näherung

Wir bezeichnen symbolisch mit

- ---- die nackte Wechselwirkung V_q , mit
- === die effective Wechselwirkung \tilde{V}_q , und mit
- ○ die einfache Blase (Fermi-Loop) $P^{(0)}(q, \omega)$, siehe (7.59), welche für das Coulomb-Gas mit der Lindhardt-Funktion zusammenfällt.

Als RPA ('*Random-Phase-Approximation*') bezeichnet man die geometrische Reihe

$$\begin{aligned} \text{===} &= \text{----} + \text{----} \text{○} \text{----} + \text{----} \text{○} \text{----} \text{○} \text{----} \\ &+ \text{----} \text{○} \text{----} \text{○} \text{----} \text{○} \text{----} + \dots \\ &= \text{----} \sum_{n=0}^{\infty} \text{○} \text{----} = \frac{\text{----}}{1 - (\text{○} \text{----})}. \end{aligned} \quad (7.74)$$

Damit erhalten wir in RPA-Näherung

$$\boxed{\tilde{V}_q = \frac{V_q}{1 - V_q P^{(0)}(q, \omega)}} \quad (7.75)$$

eine effektive Frequenz-abhängige Wechselwirkung.

Man kann die Formel (7.75) auch mit anderen Methoden herleiten, so mit geeigneten Entkopplungen der Bewegungsgleichung für die Dichte-Dichte-Korrelationen.

Kleine Impuls-Überträge

Wir brachten nun die Lindhardt-Funktion für kleine Impuls-Überträge q und $T = 0$ und verwenden

$$\xi_{\vec{k}+\vec{q}} - \xi_{\vec{q}} \approx \hbar \vec{q} \cdot \vec{v}_F, \quad n_F(\xi_{\vec{k}+\vec{q}}) - n_F(\xi_{\vec{k}}) \approx -\delta(\xi_{\vec{k}}) \hbar \vec{q} \cdot \vec{v}_F, \quad \left(\frac{\partial n_F(\xi)}{\partial \xi} \right)_{T=0} = -\delta(\xi).$$

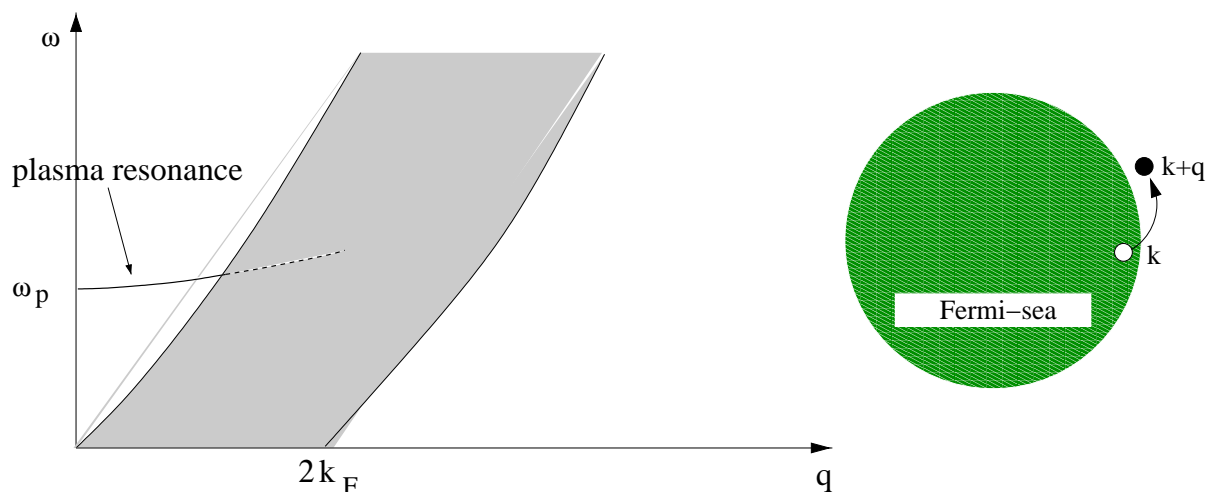


Abbildung 7.1: Die Lindhardt-Funktion (linke Abbildung, schattiert), welche dem Kontinuum der Teilchen-Loch-Anregungen (rechte Abbildung) $c_{k+q}^\dagger c_k |FS\rangle$ entspricht, sowie die Plasma-Resonanz.

Damit wird (7.59) zu

$$P^{(0)}(\vec{q}, \omega) = -2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{v}_F \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}{\vec{q} \cdot \vec{v}_F - \omega - i\epsilon}. \quad (7.76)$$

Thomas-Fermi-Abschirmung

Wir betrachten zunächst den statischen Fall $\omega = 0$, welche den Effekt der elektrostatischen Abschirmung beschreibt:

$$P^{(0)}(q, 0)|_{q \rightarrow 0} = \frac{-8\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^2 dk \delta(\hbar v_F(k - k_F)) = \frac{-1}{\pi^2} \frac{k_F^2}{\hbar v_F}.$$

Damit erhalten wir mit $V_q = 4\pi e^2/q^2$ für die abgeschirmte Wechselwirkung (7.75)

$$\tilde{V}_q = \frac{4\pi e^2/q^2}{1 + \frac{1}{\pi^2} \frac{k_F^2}{\hbar v_F} \frac{4\pi e^2}{q^2}} \equiv \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2}, \quad k_{TF}^2 = \frac{4}{\pi} \frac{k_F^2 e^2}{v_F}. \quad (7.77)$$

Dabei bezeichnet man k_{TF} als den Thomas-Fermi-Wellenvektor.

Damit haben wir die gewünschte Abschirmlänge $1/k_{TF}$ gefunden, denn die Fourier-Transformation von (7.77) ergibt

$$\tilde{V}_{\vec{r}} = \frac{e^2 e^{-\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|}, \quad \mu = k_{TF}.$$

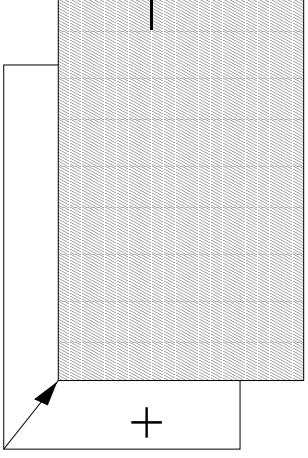


Abbildung 7.2: Plasmonen entsprechen einer Schwingung des negativ-geladenen homogenen Elektronen-Gases relativ zum negativ-geladenen Hintergrund der Atomrümpfe.

Dynamische Dielektrizitätskonstante

Wir bemerken noch, dass wir auch via

$$\tilde{V}_q \equiv \frac{V_q}{\epsilon(q, \omega)}, \quad \epsilon(q, \omega) = 1 - V_q P^{(0)}(q, \omega)$$

die dynamische Dielektrizitätskonstante $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ in RPA-Näherung bestimmt haben.

Nicht vertauschende Grenzfälle

Für die Lindhardt-Funktion können wir den Impuls und die Frequenz in unterschiedlichen Reihenfolgen nach Null gehen lassen:

- $\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0}$
: erst die Frequenz, dann der Impuls, liefert uns die Abschirmung.
- $\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0}$
: erst der Impuls, dann die Frequenz, liefert uns die langwelligen Dichte-Dichte Fluktuationen, auch Plasmonen genannt.

Für dynamische und Impuls-abhängige Respsnsfunktionen vertauschen diese beiden Grenzübergänge in der Regel nicht.

Plasma-Schwingungen

Wir betrachten also nun die Entwicklung nach kleinen q/ω der Lindhardt-Funktion und benutzen dafür als Ausgangspunkt gleich (7.76):

$$\begin{aligned} P^{(0)}(\vec{q}, \omega) &\approx -2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{v}_F \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}{\vec{q} \cdot \vec{v}_F - \omega - i\epsilon} \\ &\approx \frac{-2}{(2\pi)^2} \int_{-1}^{+1} d \cos \theta \frac{k_F^2}{\hbar v_F} \left\{ \frac{qv_F \cos \theta}{\omega + i\epsilon} + \frac{(qv_F \cos \theta)^2}{(\omega + i\epsilon)^2} + \right\} \end{aligned}$$

Tabelle 7.1: Ausgewählte Plasma-Frequenzen für einfache Metalle.

Metall	Li	Na	K	Mg	Al
ω_p (eV)	7.1	5.7	3.7	10.6	15.3

$$= \frac{k_F^2 v_F}{3\hbar\pi^2} \frac{q^2}{\omega^2} = \frac{k_F^3}{3\pi^2 m^*} \frac{q^2}{\omega^2} = \frac{n_0}{m^*} \frac{q^2}{\omega^2},$$

mit $v_F m^* = \hbar k_F$ und $\frac{4\pi}{3} \frac{k_F^3}{8\pi^3} = \frac{n_0}{2}$, wobei n_0 die Gesamt-Teilchendichte (summiert über beide Spin-Richtungen) ist.

Damit erhalten wir für die inverse Dielektrizitätskonstante

$$\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} = \frac{1}{1 - \omega_p^2/\omega^2}, \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n_0}{m^*}$$

mit der Plasma-Frequenz ω_p .

Aus semi-klassischen Berechnungen wissen wir, dass die inverse Dielektrizitätskonstante immer dann einen Pol hat, wenn an eine dielektrische Mode (Schwingung) gekoppelt wird. Die Plasma-Schwingungen bei ω_p entsprechen den langwelligen Verschiebungen des Elektronengases relativ zum positiven Hintergrund der Atomrümpfe. Sie sind für kleine Wellenvektoren \vec{q} ungedämpft, in RPA-Näherung, und stark überdämpft wenn sie in das Kontinuum der Teilchen-Loch-Anregungen eintreten.

7.8.3 Elektron-Phonon-Kopplung und der Peierls-Übergang

Phononen

Phononen sind quantisierte Gitterschwingungen mit einer Dispersions-Relation $\hbar\Omega_q$. Jedes Atom in der Einheitszelle kann in drei Richtungen ausgelenkt werden, demnach gibt es pro Atom in der Einheitszelle drei Phononen-Moden. Man unterscheidet:

- Akustische Phononen

Für diese Moden gilt $\lim_{q \rightarrow 0} \Omega_q = 0$. Sie entsprechen langwelligen Verschiebungen der Einheitszellen gegeneinander. Sie heissen 'akustisch' da sie den Schallwellen im Festkörper entsprechen, es gibt deren 3.

- Optische Phononen

Alle Phononen-Moden welche nicht akustisch sind nennt man optisch. Sie entsprechen Verschiebungen der Atome einer Einheitszelle gegeneinander. Für unterschiedlich geladene Atome (Atomrümpfe) wird dabei ein elektrisches Dipolmoment erzeugt, an welches elektromagnetische Wellen koppeln können. Da $\lim_{q \rightarrow 0} \Omega_q > 0$ lassen sich also optische Phononen via Dipol-Übergängen optisch anregen.

- Longitudinale Phononen

Die Auslenkungen sind parallel zum Wellenvektor \vec{q} .

- Transversale Phononen

Die Auslenkungen sind senkrecht zum Wellenvektor \vec{q} .

Rein longitudinale/transversale Phononen gibt es nur in Kristallrichtungen mit hoher Symmetrie. Im Kristall sind Phononen i.A. gemischter Natur.

Freie Phononen

Wir betrachten im Folgenden eine einzige Mode mit

$$H^{(p)} = \sum_q \hbar \Omega_q a_q^\dagger a_q, \quad [a_{q_1}, a_{q_2}^\dagger] = \delta_{q_1, q_2}, \quad (7.78)$$

wobei a_q^\dagger / a_q der bosonische Erzeuger/Vernichter ist. Die Streuung von Phononen untereinander, die Phonon-Phonon-Wechselwirkung, wird vernachlässigt.

Elektron-Phonon-Kopplung

Phononen sind keine erhaltenen Teilchen. Die Wechselwirkung muss jedoch den Gesamtimpuls erhalten, da das Gesamtsystem (Elektronen plus Gitter) translations-invariant ist:

$$H^{(ep)} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{q,k} M_q c_{k+q}^\dagger c_k (a_{-q}^\dagger + a_q). \quad (7.79)$$

- Der Impuls-Übertrag ist q . Entweder wird ein Phonon mit Impuls $-q$ erzeugt oder ein Phonon mit Impuls q vernichtet.
- Da die Auslenkung der Atom proportional zu $(a^\dagger + a)$ ist, siehe Kap. 4.3.4, und da die Elektronen an den Auslenkungen der Atomrümpfe von den Ruhelagen streuen, bestimmt dieser Term die Elektron-Phonon-Kopplung (7.79).

Für eine detailliert mikroskopische Herleitung von (7.79) verweisen wir auf die Literatur.

Matsubara-Green-Funktion

Die Matsubara Green-Funktion

$$D_q(t) = -T_\tau \langle (a_q(\tau) + a_{-q}^\dagger(\tau)) (a_{-q} + a_q^\dagger) \rangle \quad (7.80)$$

beschreibt die Propagation der atomaren Auslenkungen (im Impulsraum).

Für freie Phononen gilt nach Kap. 4.3.4

$$D_q(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar\Omega_q} - \frac{1}{i\omega_n + \hbar\Omega_{-q}} = \frac{2\hbar\Omega_q}{(i\omega_n)^2 - (\hbar\Omega_q)^2} \equiv \sim\sim\sim \quad (7.81)$$

Wir stellen den freien Phononen-Propagator durch eine gewellte Linie da.

Instabilitäten des Kristallgitters

Viele Festkörper wechseln als Funktion von Temperatur oder Druck ihre Phase. Falls diese Gitter-Instabilität ein Phasenübergang zweiter Ordnung ist, sollte dieser sich im Verhalten der Phononen in der Nähe des Phasenüberganges widerspiegeln, d.h. im Phononen-Propagator $D_q(i\omega_n)$.

Renormierung der Phononen in RPA-Näherung

Wir untersuchen nun die Renormierung der phononischen Green-Funktion aufgrund ihrer Wechselwirkung mit den Elektronen innerhalb der RPA-Näherung.

Wir bezeichnen symbolisch mit

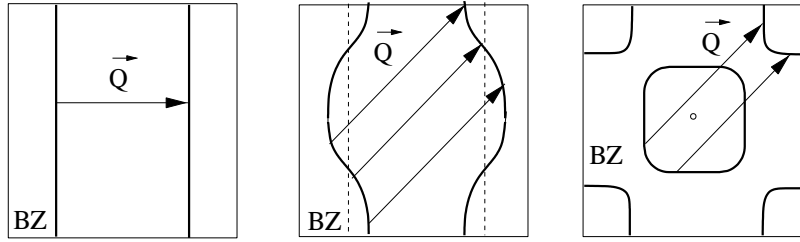


Abbildung 7.3: Nesting Eigenschaften von Fermi-Flächen. Von einer eindimensionalen (links), einer quasi-eindimensionalen (Mitte) und einer zwei-dimensionalen Fermi-Fläche (rechts).

- $\sim\sim\sim$ die nackte Green-Funktion $D_q(i\omega_n)$ der Phononen
 $\sim\sim\sim\sim$ die renormierte Green-Funktion $\tilde{D}_q(i\omega_n)$ der Phononen,
- den Elektron-Phonon-Vertex M_q/\sqrt{V} und mit
 - die Elektron-Blase $P^{(0)}(q, i\omega_n)$.

Die geometrische Reihe

$$\begin{aligned}
 \sim\sim\sim\sim &= \sim\sim\sim + \sim\sim\sim\bullet\circ\sim\sim\sim \\
 &+ \sim\sim\sim\bullet\circ\sim\sim\sim\bullet\circ\sim\sim\sim + \dots \\
 &= \sim\sim\sim \sum_{n=0}^{\infty} \bullet\circ\sim\sim\sim = \frac{\sim\sim\sim\sim\sim\sim}{1 - (\bullet\circ\sim\sim\sim)}
 \end{aligned}$$

entspricht (7.74) und führt zu

$$\boxed{\tilde{D}_q(\omega) = \frac{D_q(\omega)}{1 - P^{(0)}(q, \omega) D_q(\omega) M_q^2/V}} \quad (7.82)$$

Nesting von Fermi-Flächen

Man spricht von “perfect-nesting” wenn es eine Wellenvektor \vec{Q} gibt unter welchen die Fermi-Fläche (FS) in sich selber übergeht:

$$\forall \vec{k}_F \in \text{FS} \quad \implies \quad (\vec{k}_F + \vec{Q}) \in \text{FS} .$$

- Generisches Verhalten

Die generische Fermi-Fläche hat keine nesting-Eigenschaften, oder höchstens teilweise. Nesting kommt dagegen in niedrigdimensionalen Systemen häufig vor und ist generisch in strikt ein-dimensionalen Systemen.

- Peierls-Instabilität

Fermi-Flächen mit perfect-nesting sind instabil gegenüber jeder infinitesimale Störung, d.h. gegenüber jeder noch-so-kleinen Wechselwirkung. Hier betrachten wir die Instabilität einer eindimensionalen Fermi-Fläche gegenüber einer Gitterverzerrung, die Peierls-Instabilität.

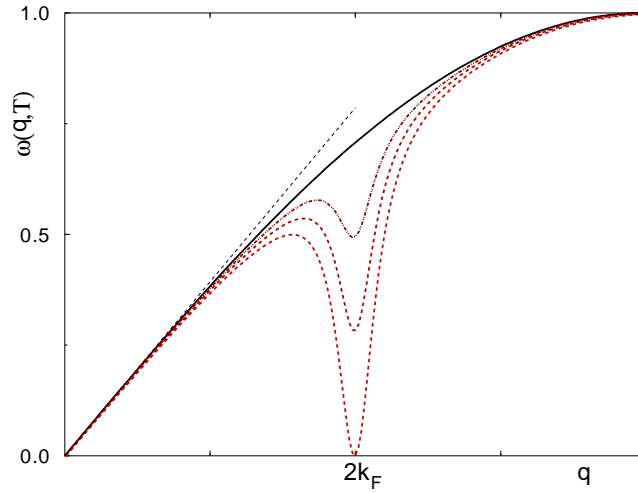


Abbildung 7.4: Temperatur-Ähngigkeit der aktiven Phononen-Mode überhalb des Peierls-Übergangs. Genau am Übergang wird die $q = 2k_F$ Mode weich (“soft”), d.h. $\omega(2k_F, T \rightarrow T_P) \rightarrow 0$.

Linearisierung der Dispersions-Relation

Wir betrachten nun ein ein-dimeinsionales System mit einem nesting-Vektor $Q = 2k_F$. Da wir es mit einer Instabilität der Fermi-Fläche zu tun haben können wir die Dispersions-Relation in der Nähe der Fermi-Fläche linearisieren:

$$\epsilon_k \simeq v_F(k - k_F), \quad \epsilon_{k+Q} \simeq -v_F(k - k_F), \quad n_F(\epsilon_{k+Q}) - n_F(\epsilon_k) = \tanh\left(\frac{\epsilon_k}{2k_B T}\right),$$

wobei $n_F(\xi) = 1/(\exp(\beta\xi) + 1)$ die Fermi-Dirac Verteilung ist.

Temperatur-Ähngigkeit der Lindardt-Funktion

Um die Übergangstemperatur T_P für den Peierls-Übergang zu berechnen benutzen wir die RPA-Näherung (7.82) für die Phononen und die linearisierte Dispersions-Relation. Wir erhalten für die Lindhardt-Funktion (7.59) im statischen Grenzfall:

$$\begin{aligned} P^{(0)}(Q, 0) &= \frac{2}{V} \sum_k \frac{n_F(\xi_{k+q}) - n_F(\xi_k)}{\xi_{k+q} - \xi_k} \\ &= \frac{2}{2\pi} \int_{-E_c}^{E_c} d\xi \frac{\tanh(\xi/(2k_B T))}{2\xi} + P_{non}^{(0)}(Q, 0) \\ &\approx \frac{1}{\pi} \int_0^{E_c/(2k_B T)} dx \frac{\tanh(x)}{x} \simeq \int_0^c \frac{dx}{\pi} \frac{\tanh(x)}{x} + \int_c^{E_c/(2k_B T)} \frac{dx}{\pi} \frac{1}{x} \quad (7.83) \\ &\approx \frac{1}{\pi} \log\left(\frac{E_c}{2k_B T c}\right) \approx \frac{1}{\pi} \log\left(\frac{1.13 E_c}{k_B T}\right) \quad (7.84) \end{aligned}$$

wobei E_c ein cutoff in der Nähe der Fermikante ist und $P_{non}^{(0)}(Q, 0)$ der fehlende Teil des Integrals.

- Da $P_{non}^{(0)}(Q, 0)$ nur Zustände beinhaltet welche weit von der Fermi-Kante sind, ist $P_{non}^{(0)}(Q, 0)$ nur schwach Temperatur-abhängig und kann in der Nähe des Überganges vernachlässigt werden.

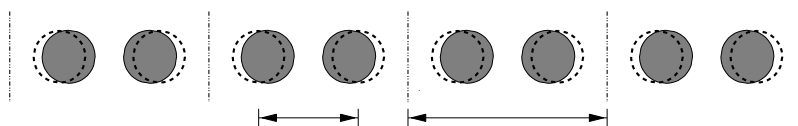


Abbildung 7.5: Verdopplung der Einheitszelle beim Peierls-Übergang unterhalb der Übergangstemperatur.

- Weiterhin hat das Integral $\int_0^c \dots dx$ auch nur eine schwache Temperaturabhängigkeit und der letzte Schritt ist das Ergebnis einer detaillierteren Rechnung.
- Wir erhalten somit als Ergebnis, dass die Lindhardt-Funktion für Fermi-Fläche mit perfect nesting für $T \rightarrow 0$ logarithmisch divergiert.

Peierls-Temperatur

Wir setzen nun das Ergebnis (7.84) für $P_{non}^{(0)}(Q, 0)$ in die RPA-Formel (7.82) und erhalten für die Nullstellen des Nenners

$$\omega^2 - (\hbar\Omega_Q)^2 = 2\hbar\Omega_Q M_Q^2 \frac{1}{\pi} \log\left(\frac{1.13E_c}{k_b T}\right).$$

Die renormierte Phononen-Frequenz ω wird weich, d.h. $\omega \rightarrow 0$ für

$$T_P = \frac{1.13E_c}{k_b} e^{-1/\lambda}, \quad \lambda = \frac{4M_Q^2}{\Omega_Q}. \quad (7.85)$$

Dieses Resultat ist generische für Phasenübergänge zweiter Ordnung in RPA-Näherung.

- Die Übergangstemperatur T_P ist nicht-analytisch in der Elektron-Phonon Kopplung M_q und endlich für alle $M_q^2 > 0$. Es bedarf also keiner kritischen Kopplungsstärke für die Instabilität. Dieses Resultat gilt nur für Fermi-Flächen mit perfect-nesting.
- Das Ergebnis (7.85) welches für $T > T_P$ aus der RPA-Näherung gewonnen wurde ist identisch mit dem T_P welche man aus einer Molekularfeld-Näherung für $T < T_P$ erhalten würde.

Verdopplung der Einheitszelle

Die Atomrümpfe haben typischerweise eine diskrete Anzahl von Elektronen. Von einem halb-gefüllten Band spricht man wenn es gerade eine Elektron pro Atom gibt. In diesem Fall ist

$$k_F = \frac{\pi}{2a}, \quad Q = 2k_F = \frac{\pi}{a}$$

und es kommt für $T < T_P$ zu einer typischen Verdopplung der Einheitszelle.

Bose-Einstein-Kondensation weicher Austauschmoden

Phononen sind Austauschbosonen und es ist kein Zufall dass sie bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung weich werden.

Quasi-klassisch wird eine Gitterverzerrung durch einen kohärenten Zustand $|c\rangle$ beschrieben,

$$|c\rangle = e^{-|c|^2/2} e^{ca^\dagger} |0\rangle, \quad a|c\rangle = c|c\rangle, \quad \langle c|a|c\rangle = c, \quad \langle c|a^\dagger|c\rangle = c^*,$$

mit

$$\langle c|c\rangle = 1, \quad \langle c|a^\dagger a|c\rangle = |c|^2.$$

Nun ist die Gitterverzerrung im Ortsraum durch

$$\langle a_R + a_R^\dagger \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q e^{iqR} \langle a_{-q} + a_q^\dagger \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iQR} \langle a_{-Q} + a_Q^\dagger \rangle$$

gegeben, wobei der letzte Schritt für $T < T_P$ gilt. Für eine endliche Auslenkung $\langle a_R + a_R^\dagger \rangle$ im thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$ muss also

$$\langle a_{-Q} + a_Q^\dagger \rangle = 2 \operatorname{Re} c_Q \sim \sqrt{V}$$

sein, d.h. die Peierls-Phononen-Mode ist makroskopisch besetzt:

$$\langle c_Q | a_Q^\dagger a_Q | c_Q \rangle = |c_Q|^2 \sim V.$$

- Bose-Einstein-Kondensation

Eine makroskopische Besetzung einer Mode in einem bosonischem System nennt man eine Bose-Einstein-Kondensation. Streng genommen ist eine eigentliche Bose-Einstein-Kondensation eine solche in Systemen mit erhaltenen Bosonen.

- Weiche Moden

Eine Mode mit einer endlichen Energie ist bei endlichen Temperaturen T nicht makroskopisch besetzt. Daher ist es notwendig dass die Anregungsenergie der Mode verschwindet um eine Bose-Einstein-Kondensation einzuleiten. Dieses kann kontinuierlich passieren, die Mode wird weich, oder durch einen zusätzlichen Pol in der Phononen-Green-Funktion bei $\omega = 0$ (zentraler peak).