

Vielteilchentheorie

A. Klümper

Theoretische Physik, Bergische Universität Wuppertal

Inhaltsverzeichnis

Vielteilchentheorie	
A. Klümper	1
1 Vielteilchentheorie	3
1.1 Zweite Quantisierung	3
1.2 Lineare-Antwort-Theorie	8
1.3 Kubo-Theorie, Leitfähigkeiten	10
1.4 Green-Funktionen	12
2 Diagrammatische Störungsrechnung	21
2.1 Diagrammatische Störungsrechnung	21
2.2 Wicksches Theorem und Rechenregeln	22
2.3 Graphische Darstellung, Verbundene Graphen	24

1 Vielteilchentheorie

Für die Beschreibung von Vielteilchensystemen werden wir häufig das großkanonische Ensemble wählen, das neben Energie- auch Teilchenaustausch erlaubt. Wir werden daher zunächst einen geeigneten Formalismus herleiten, der den geeigneten Rahmen schafft: die sog. 2. Quantisierung. Danach werden wir Korrelationsfunktionen betrachten.

1.1 Zweite Quantisierung

Generelle Vorbemerkung: es wird nicht “noch einmal” quantisiert. Ausgangspunkt ist die Darstellung von N -Teilchenzuständen. Sei eine 1-Teilchenbasis gegeben: $|1\rangle, |2\rangle, \dots$ (weiter unten wichtig: Basis diskret und geordnet). Normierung: $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$.

Es lassen sich alle N -Teilchenzustände darstellen durch Superposition von

$$P_{\pm}(|r_1\rangle|r_2\rangle\cdots|r_N\rangle) \quad (1.1)$$

wobei P_{\pm} symmetrisiert bzw. antisymmetrisiert für Bosonen bzw. Fermionen (wir setzen die Symmetrieeigenschaften ununterscheidbarer Teilchen voraus; neben Bosonen und Fermionen gibt es – zumindest konzeptionell – noch in $d = 2$ (auch 1) sog. Anyonen mit gemischter Statistik).

Explizit haben wir

$$P_{-}(|r_1\rangle|r_2\rangle\cdots|r_N\rangle) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P |r_{P(1)}\rangle|r_{P(2)}\rangle\cdots|r_{P(N)}\rangle \quad (1.2)$$

und

$$P_{+}(|r_1\rangle|r_2\rangle\cdots|r_N\rangle) = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\cdots}} \sum_P |r_{P(1)}\rangle|r_{P(2)}\rangle\cdots|r_{P(N)}\rangle \quad (1.3)$$

wobei P alle Permutationen durchläuft und n_i die Anzahl des 1-Teilchenzustandes $|i\rangle$ im Produkt bezeichnet.

Offenbar reicht es, zu der Besetzungszahldarstellung überzugehen, um die (Basis-) Zustände zu charakterisieren

$$|n_1, n_2, \dots\rangle := P_{\pm}(|1\rangle\cdots|1\rangle|2\rangle\cdots|2\rangle\cdots) \quad (1.4)$$

(Offensichtlich muß für Fermionen gelten $n_i = 0, 1$.)

Ein weiterer Schritt zur ökonomischen Darstellung ist die Einführung von Teilchen-Erzeugern und -Vernichtern: c_i^+ , c_i . Dies geschieht hier zunächst für Fermionen, das Ergebnis für Bosonen zitieren wir unten. c_i und c_i^+ seien durch die Wirkung auf die Basiszustände wie folgt definiert:

$$c_i|\dots n_i \dots\rangle = (-1)^{\nu_i} |\dots (n_i - 1) \dots\rangle, \quad \nu_i := \sum_{j=1}^{i-1} n_j$$

$$c_i^+ |\dots n_i \dots\rangle = (-1)^{\nu_i} |\dots (n_i + 1) \dots\rangle \quad (1.5)$$

Zur Notation: c_i^+ ist tatsächlich zu c_i adjungiert:

$$\begin{aligned} \langle \{m\} | c_i | \{n\} \rangle &= \begin{cases} (-1)^{\nu_i}, & \text{falls } m_i = n_i - 1, m_j = n_j \text{ für } j \neq i, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \\ \langle \{n\} | c_i^+ | \{m\} \rangle &= \begin{cases} (-1)^{\mu_i}, & \text{falls } n_i = m_i + 1, n_j = m_j \text{ für } j \neq i, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.6)$$

wobei $\mu_i := \sum_{j < i} m_j$ analog zu ν_i definiert ist.

Bemerkung: c_i bildet total antisymmetrische N -Teilchenzustände auf total antisymmetrische $(N-1)$ -Teilchenzustände ab; c_i^+ wirkt “umgekehrt”: Vernichter bzw. Erzeuger. Als zugrundeliegenden Hilbertraum benutzt man den sog. Fockraum:

$$\mathcal{F} = \sum_{N=0}^{\infty} H^{(N)} \quad (1.7)$$

die direkte Summe aus allen N -Teilchenzuständen (+topologischer Abschluß). Dieser Raum wird immer explizit oder implizit den großkanonischen Behandlungen zugrunde gelegt.

Für die Teilchenoperatoren gelten wichtige Antikommutatorregeln:

$$\{c_i, c_j\} = c_i c_j + c_j c_i = 0 \quad (1.8)$$

dann auch

$$\{c_i^+, c_j^+\} = c_i^+ c_j^+ + c_j^+ c_i^+ = 0 \quad (1.9)$$

Begründung: wir nehmen an $i < j$ (sonst vertauschen, $i = j$ klar):

$$\begin{aligned} c_i c_j |\{n\}\rangle &= c_i (-1)^{\nu_j} |\dots (n_j - 1) \dots\rangle \\ &= (-1)^{\nu_i + \nu_j} |\dots (n_i - 1) \dots (n_j - 1) \dots\rangle \\ c_j c_i |\{n\}\rangle &= c_j (-1)^{\nu_i} |\dots (n_i - 1) \dots\rangle \\ &= (-1)^{\nu_j - 1 + \nu_i} |\dots (n_i - 1) \dots (n_j - 1) \dots\rangle \end{aligned} \quad (1.10)$$

Ferner gilt

$$\{c_i, c_j^+\} = \delta_{ij} \quad (1.11)$$

Begründung: wir nehmen an $i < j$ (sonst vertauschen): analog zu oben

$$\begin{aligned} c_i c_j^+ |\{n\}\rangle &= (-1)^{\nu_i + \nu_j} |\dots (n_i - 1) \dots (n_j + 1) \dots\rangle \\ c_j^+ c_i |\{n\}\rangle &= (-1)^{\nu_j - 1 + \nu_i} |\dots (n_i - 1) \dots (n_j + 1) \dots\rangle \end{aligned} \quad (1.12)$$

Nun sei $i = j$

$$\begin{aligned} c_i c_i^+ |\{n\}\rangle &= \begin{cases} |\{n\}\rangle, & \text{falls } n_i = 0, \\ 0, & \text{falls } n_i = 1, \end{cases} \\ c_i^+ c_i |\{n\}\rangle &= \begin{cases} 0, & \text{falls } n_i = 0, \\ |\{n\}\rangle, & \text{falls } n_i = 1, \end{cases} \end{aligned} \quad (1.13)$$

Definieren wir nun das Vakuum als

$$|0\rangle := |00\dots 0\dots\rangle \quad (1.14)$$

dann folgt

$$|\{n\}\rangle = (c_1^+)^{n_1} (c_2^+)^{n_2} \dots |0\rangle, \quad (1.15)$$

also für N -Teilchenzustände erhalten wir

$$c_{r_1}^+ c_{r_2}^+ \dots c_{r_N}^+ |0\rangle, \quad (1.16)$$

Für Bosonen halten wir kurz die Definitionen fest

$$\begin{aligned} c_i |\dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |\dots (n_i - 1) \dots\rangle \\ c_i^+ |\dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |\dots (n_i + 1) \dots\rangle \end{aligned} \quad (1.17)$$

sowie die Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned} [c_i, c_j] &= [c_i^+, c_j^+] = 0 \\ [c_i, c_j^+] &= \delta_{ij} \end{aligned} \quad (1.18)$$

Bemerkung: Basiswechsel: gehen wir von einer Teilchenbasis $|i\rangle$ zu $|\widetilde{i}\rangle$ über, so gehen aus c_i die Operatoren \widetilde{c}_j hervor gemäß

$$\widetilde{c}_j = \sum_i \langle \widetilde{j} | i \rangle c_i, \quad \widetilde{c}_j^+ = \sum_i \langle i | \widetilde{j} \rangle c_i^+ \quad (1.19)$$

Denn genau dann gilt auch

$$\widetilde{c}_j^+ |0\rangle = \sum_i \langle i | \widetilde{j} \rangle \underbrace{c_i^+ |0\rangle}_{|i\rangle} = \left(\sum_i |i\rangle \langle i| \right) |\widetilde{j}\rangle = |\widetilde{j}\rangle \quad (1.20)$$

Wir haben bisher eine diskrete 1-Teilchenbasis $|i\rangle$ betrachtet. Wir wollen nun Feldoperatoren $\psi(\vec{x})$ über die 1-Teilchenzustände zum Ortsoperator und analog $c_{\vec{k}}$ zum Impulsoperator definieren:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &= \sum_i \langle \vec{x} | i \rangle c_i \\ c_{\vec{k}} &= \sum_i \langle \vec{k} | i \rangle c_i = \int d^3x \langle \vec{k} | \vec{x} \rangle \sum_i \langle \vec{x} | i \rangle c_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int d^3x e^{-i\vec{k}\vec{x}} \psi(\vec{x}) \end{aligned} \quad (1.21)$$

Es gilt

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

$$= \sum_i \langle \vec{x} | i \rangle \langle i | \vec{y} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \quad (1.22)$$

und analog 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 δ -Symbol für Operatoren $c_k^{(+)}$ wird zum Kronecker-Delta.

Darstellung von Zuständen

Sei $|\psi\rangle$ ein N -Teilchenzustand, dann läßt sich $|\psi\rangle$ schreiben als

$$|\psi\rangle = \frac{1}{N!} \int d^3x_1 \dots d^3x_N \psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \psi^+(x_1) \dots \psi^+(x_N) |0\rangle \quad (1.23)$$

mit einer Funktion die o.B.d.A. total (anti-) symmetrisch gewählt sei. Wir erinnern uns dazu, daß

$$P_- (|\vec{x}_1\rangle |\vec{x}_2\rangle \dots |\vec{x}_N\rangle) =: |\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N\rangle = \psi^+(\vec{x}_1) \psi^+(\vec{x}_2) \dots \psi^+(\vec{x}_N) |0\rangle \quad (1.24)$$

Offenbar ist die Funktion $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ gerade die Wellenfunktion in 1. Quantisierung.

[Eine gute Übung zum Vertrautwerden: Man sieht durch Anwenden der (Anti-) Kommutatorregeln, daß

$$\langle \vec{y}_1 \vec{y}_2 \dots \vec{y}_N | \psi \rangle = \psi(\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_N):$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{y}_1 \vec{y}_2 \dots \vec{y}_N | \psi \rangle &= \frac{1}{N!} \int d^3x_1 \dots d^3x_N \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \times \\ &\quad \times \langle 0 | \psi(\vec{y}_N) \dots \psi(\vec{y}_1) \psi^+(\vec{x}_1) \dots \psi^+(\vec{x}_N) | 0 \rangle \\ &= \psi(\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_N) \end{aligned} \quad (1.25)$$

Dies stellt den expliziten Zusammenhang zwischen 1. und 2. Quantisierung dar!]

Wir haben bisher nur eine Teilchenspezies betrachtet. Wir werden häufig Wechselwirkungen von Elektronen (Fermionen) und Phononen (Bosonen) behandeln. Die entsprechenden Zustände werden hier erzeugt von Produkten von fermionischen sowie bosonischen Erzeugern, z.B.

$$a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ b_{q_1}^+ b_{q_2}^+ b_{q_3}^+ |0\rangle \quad (1.26)$$

als Zustand von zwei Fermionen und drei Bosonen mit Impulsen k_1, k_2 , und q_1, q_2, q_3 . (Antikommutieren unter – auch verschiedenen – Fermionen, Kommutieren unter Bosonen und zwischen Bosonen und Fermionen.)

Warum trägt die 2. Quantisierung ihren Namen?

Wir betrachten einen 1-Teilchenoperator “ K_1 ” in 1. Quantisierung

$$K_1 = \sum_i k_1(x_i; y_i) \cdot \prod_{j \neq i} \delta(x_j; y_j) \quad (1.27)$$

mit der Wirkung auf Wellenfuntionen $\psi(x_1 \dots x_N)$

$$\langle x_1 \dots x_N | K_1 | \psi \rangle = (K_1 \cdot \psi)(x_1, \dots, x_N) = \sum_i \int dy_i k_1(x_i; y_i) \psi(x_1 \dots y_i \dots x_N) \quad (1.28)$$

[Dieser allgemeinstmögliche Formalismus führt wieder auf vertrautes Gebiet mit dem Spezialfall

$$k_1(x; y) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \delta(x - y), \quad (1.29)$$

dazu zweimal partiell integrieren.]

In 2. Quantisierung erhalten wir

$$K_1 = \int d^3x d^3y \psi^+(x) k_1(x; y) \psi(y) \quad (1.30)$$

Begründung:

$$\begin{aligned} & K_1 \cdot \int dx_1 \dots dx_N \psi(x_1 \dots x_N) \psi^+(x_1) \dots \psi^+(x_N) |0\rangle \\ &= \sum_i \int dx_1 \dots dx_N d\tilde{x} d\tilde{y} k_1(\tilde{x}; \tilde{y}) \psi(x_1 \dots x_N) \times \\ & \quad \times \psi^+(x_1) \dots [\psi^+(\tilde{x}) \delta(\tilde{y} - x_i)] \dots \psi^+(x_N) |0\rangle \\ &= \sum_i \int (dx_1 \dots d\tilde{x} \dots dx_N) [dx_i k_1(\tilde{x}; x_i) \psi(x_1 \dots x_N)] \psi^+(x_1) \dots \psi^+(\tilde{x}) \dots \psi^+(x_N) |0\rangle \end{aligned} \quad (1.31)$$

(4.V)

Analog lautet ein 2-Teilchen-Operator in 1. Quantisierung

$$K_2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} k_2(x_i, x_j; y_i, y_j) \cdot \prod_{k \neq i, j} \delta(x_k; y_k) \quad (1.32)$$

und in 2. Quantisierung

$$K_2 = \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 d^3y_1 d^3y_2 \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) k_2(x_1, x_2; y_1, y_2) \psi(y_2) \psi(y_1) \quad (1.33)$$

(Achtung: Reihenfolge). Man sieht, daß die lästigen Summationen verschwinden.

Der Hamiltonoperator für ein System von Teilchen mit kinetischer Energie $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ und Paarwechselwirkung $V(x-y)$ berechnet sich mit k_1 wie in (1.30) und

$$k_2(x_1, x_2; y_1, y_2) = \delta(x_1 - y_1)\delta(x_2 - y_2)V(x_1 - x_2) \quad (1.34)$$

zu

$$H = \int d^3x \psi^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(x) + \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) V(x_1 - x_2) \psi(x_2) \psi(x_1) \quad (1.35)$$

Bemerkung: Ursprung der Bezeichnung 2. Quantisierung: “Wellenfunktion wird zum Operator” und klassische Energie zum Hamiltonoperator.

(Teil 5.V, weiter mit 2.2)

1.2 Lineare-Antwort-Theorie

Wir behandeln den Fall eines Systems beschrieben durch H_0 mit kleiner Störung $H'(t) = -A \cdot F(t)$

$$H(t) = H_0 + H'(t) \quad (1.36)$$

Die Störung soll adiabatisch eingeschaltet werden. Darunter verstehen wir folgendes: Vor der Störung (d.h. bei $t = -\infty$) soll der Dichteoperator ρ_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!

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

$$\langle B \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp}(B\rho(t)) \quad (1.37)$$

wobei (von Neumann-Gleichung aus $i\hbar\dot{\psi} = H\psi$):

$$\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)], \quad \text{mit } \rho(t = -\infty) = \rho_0, \quad (1.38)$$

(denn letzteres hat Lösung $\rho(t) = U(t)\rho_0U^{-1}(t)$, wobei $U(t)$ der Zeitevolutionsoperator ist $i\dot{U}(t) = H(t)U(t)$.) Wir gehen jetzt ins Wechselwirkungsbild, d.h. zum Operator X definieren wir $X_w(t) = U_0^{-1}(t)XU_0(t)$ mit $U_0(t) = e^{-iH_0t}$. Es gilt nun

$$\langle B \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp}(B_w(t)\rho_w(t)), \quad \rho_w(t) = U_0^{-1}(t)\rho(t)U_0(t). \quad (1.39)$$

Die Bewegungsgleichung lautet nun

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_w(t) &= U_0^{-1}(\dot{\rho}(t) + i[H_0, \rho(t)])U_0 = -iU_0^{-1}(t)[H'(t), \rho(t)]U_0(t) \\ &= +i[A_w(t), \rho_w(t)]F(t), \quad \text{und } \rho_w(t = -\infty) = \rho_0 \end{aligned} \quad (1.40)$$

Das Anfangswertproblem für $\rho_w(t)$ ist äquivalent zur Picardschen Integralgleichung

$$\rho_w(t) = \rho_0 + i \int_{-\infty}^t [A_w(t'), \rho_w(t')] F(t') dt' \quad (1.41)$$

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

$$\rho_w(t) = \rho_0 + i \int_{-\infty}^t [A_w(t'), \rho_0] F(t') dt' + O(F^2) \quad (1.42)$$

Der Mittelwert von B wird somit

$$\langle B \rangle_{\rho(t)} = B_0 + i \int_{-\infty}^t \langle [B_w(t), A_w(t')] \rangle_{\rho_0} F(t') dt' + O(F^2) \quad (1.43)$$

wobei benutzt wurde

$$\begin{aligned} B_0 &= \text{Sp}(B\rho_0) = \text{Sp}(B_w(t)\rho_0), \\ \text{Sp}(B_w(t)[A_w(t'), \rho_0]) &= \text{Sp}([B_w(t), A_w(t')]\rho_0). \end{aligned} \quad (1.44)$$

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

$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{B,A}(t-t') F(t') dt' \quad (1.45)$$

mit Responsefunktion χ (verallgemeinerte Suszeptibilität):

$$\chi_{B,A}(t-t') = i \langle [B(t), A(t')] \rangle_{\rho_0} \Theta(t-t') \quad (1.46)$$

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

Bemerkung:

- diese Responsefunktion ist eine retardierte Green-Funktion

$$\chi_{B,A}(t-t') = -G_{B,A}^r(t-t') \quad (1.47)$$

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

- die lineare Antwort ΔB ist allein durch Gleichgewichtsgrößen bestimmt.

(7.V)

1.3 Kubo-Theorie, Leitfähigkeiten

Wir wenden die Lineare-Antworttheorie auf ein System in einem externen elektrischen Feld an. Als Störung betrachten wir das elektrische Feld \vec{E} , haben dieses aber quantenmechanisch durch Vektorpotential \vec{A} und Skalarpotential ϕ zu beschreiben. Der volle Hamiltonoperator H ergibt sich aus demjenigen ohne externes Feld H_0 durch Ersetzen des Impulsoperators eines jeden Teilchens/Elektrons nach minimaler Kopplung $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i)$, dies führt auf

$$H = H_0 + H', \quad H' = -\frac{1}{c} \int d^3r \vec{j}(r) \vec{A}(r, t) + \int d^3r \rho(r) \phi(r, t). \quad (1.48)$$

Hier sind \vec{j} und ρ Strom- und Ladungsdichten. Gemessen wird der eichinvariante Strom \vec{J} , der sich aus \vec{j} durch Ersetzen von $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i)$ ergibt:

$$\vec{J} = \vec{j} - \frac{e}{mc} \rho(r) \vec{A}(r). \quad (1.49)$$

Aus den Potentialen berechnet sich das elektrische Feld nach

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{A}} - \nabla \phi. \quad (1.50)$$

Wir haben nicht vor, die Eichinvarianz des Formalismus' zu zeigen. Wir gehen pragmatisch vor und nutzen diesen, um uns das Leben zu vereinfachen. Wir nehmen $\phi \equiv 0$ und monochromatisches $\vec{A}(t) = \vec{A}_0 \exp(i(\vec{q}\vec{r} - \omega t))$ an

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{A}} = i \frac{\omega}{c} \vec{A} \quad (1.51)$$

Damit gilt

$$\langle \vec{J}(r, t) \rangle = \langle \vec{j}(r, t) \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \vec{E}(r, t) \quad (1.52)$$

In linearer Antwort

$$\begin{aligned} \langle \vec{j}_\alpha(r, t) \rangle &= i \int_{-\infty}^t dt' \langle [j_\alpha(r, t), \frac{1}{c} \underbrace{\int d^3r' \vec{j}(r', t') \vec{A}(r', t')}_{\int d^3r' j_\beta(r', t') (-\frac{i}{\omega}) E_\beta(r', t')}] \rangle \\ &= \frac{1}{\omega} E_\beta(r, t) \cdot \int_{-\infty}^t dt' \int d^3r' e^{i[q(r'-r) - \omega(t'-t)]} \langle [j_\alpha(r, t), j_\beta(r', t')] \rangle \end{aligned} \quad (1.53)$$

Wegen der Translationsinvarianz in Raum und Zeit hängt $\langle [j_\alpha(r, t), j_\beta(r', t')] \rangle$ nur von $r - r'$ und $t - t'$ ab. Folglich ist das Integral über r' unabhängig von r .

Wir führen die Fouriertransformation der Stromdichte ein

$$\vec{j}_q(t) = \int d^3r e^{i\vec{q}\vec{r}} \vec{j}(r, t) \quad (1.54)$$

womit für die Leitfähigkeit $\sigma(q, \omega)$ ($j = \sigma E$) folgt

$$\sigma_{\alpha,\beta}(q, \omega) = \frac{1}{\omega} e^{-iqr} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle [j_{\alpha}(r, t), j_{q,\beta}(t')] \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \delta_{\alpha,\beta} \quad (1.55)$$

Man beachte: wenn hier ω einen nichtverschwindenden Imaginärteil haben sollte, dann muß es ein positiver sein. Ferner: die rechte Seite der obigen Beziehung kann nicht von r abhängen, also können wir über r räumlich mitteln, d.h. $\frac{1}{V} \int d^3r(\dots)$, ohne das Ergebnis abzuändern. Dies liefert

$$\sigma_{\alpha,\beta}(q, \omega) = \frac{1}{\omega V} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle [j_{q,\alpha}^+(t), j_{q,\beta}(t')] \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \delta_{\alpha,\beta} \quad (1.56)$$

Wir wollen nun zeigen, daß der Ausdruck für σ als ein Doppelintegral allein über Strom-Strom-Korrelatoren geschrieben werden kann

$$\tilde{\sigma}_{\alpha,\beta}(q, \omega) = \frac{1}{V} \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_0^{\beta} d\tau \langle j_{q,\beta} j_{q,\alpha}^+(t + i\tau) \rangle, \quad \omega = \omega + 0i, \quad (1.57)$$

also $\sigma = \tilde{\sigma}$.

Wir beachten zunächst, daß auf der rechten Seite o.B.d.A. $t = 0$ gewählt werden kann

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha,\beta}(q, \omega) &= \frac{1}{\omega V} \int_{-\infty}^0 dt' e^{-i\omega t'} \langle [j_{q,\alpha}^+(0), j_{q,\beta}(t')] \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \delta_{\alpha,\beta} \\ &= \frac{1}{\omega V} \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [j_{q,\alpha}^+(t), j_{q,\beta}(0)] \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \delta_{\alpha,\beta}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Mit der Abkürzung $A = j_{q,\alpha}^+$, $B = j_{q,\beta}$ und der Notation der Greenschen Funktionen finden wir

$$\sigma_{\alpha,\beta}(q, \omega) = \frac{i}{\omega} \left(\frac{1}{V} G_{A,B}^r(\omega) + \frac{n_0 e^2}{m} \delta_{\alpha,\beta} \right). \quad (1.59)$$

Für $\tilde{\sigma}$ finden wir mit (1.73)

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{\alpha,\beta}(q, \omega) &= \frac{1}{V} \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_0^{\beta} d\tau \underbrace{f(t + i\tau - i\beta)}_{= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} f(\omega') e^{-i\omega'(t+i\tau-i\beta)}}, \\ &= \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{1 - e^{-\beta\omega'}}{\omega'} f(\omega') \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega - \omega')t} \\ &= \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} (1 - e^{-\beta\omega'}) f(\omega') \underbrace{\left(\frac{1}{\omega'} \frac{i}{\omega - \omega'} \right)}_{= \frac{i}{\omega} \left(\frac{1}{\omega'} + \frac{1}{\omega - \omega'} \right)} \\ &= \frac{i}{\omega V} [G_{A,B}^r(\omega) - G_{A,B}^r(0)]. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Wir haben nun die folgende interessante Situation vorliegen: wir wissen bzw. erwarten, daß $\sigma_{\alpha,\beta}(q, \omega)$ für $\omega \rightarrow 0$ einen endlichen Wert annimmt, die explizite Darstellung (1.59) liefert dies nur bzw. genau dann, wenn der zweite, von ω unabhängige Term in der Klammer den richtigen Wert annimmt. Dieser muß also gleich $-G_{A,B}^r(0)/V$ sein. Dann sind aber wegen (1.60) $\sigma_{\alpha,\beta}(q, \omega)$ und $\tilde{\sigma}_{\alpha,\beta}(q, \omega)$ für alle ω identisch.

1.4 Green-Funktionen

Wir haben im vorherigen Paragraphen den Nutzen der zeitabhängigen retardierten Green-Funktionen kennengelernt. Hier wollen wir verschiedene mathematische Eigenschaften besprechen.

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

$$[A, B]_\epsilon = AB - \epsilon BA, \quad \begin{aligned} [A, B]_{+1} &= AB - BA, \\ [A, B]_{-1} &= AB + BA \end{aligned} \quad (1.61)$$

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

Wir definieren zu Operatoren A, B retardierte/avancierte/zeitgeordnete Green-Funktionen durch

$$\begin{aligned} G_{A,B}^r(t) &:= -i\Theta(+t)\langle [A(t), B]_\epsilon \rangle, & A(t) &= e^{itH} A e^{-itH}, \\ G_{A,B}^a(t) &:= +i\Theta(-t)\langle [A(t), B]_\epsilon \rangle, \\ G_{A,B}^o(t) &:= -i\Theta(+t)\langle A(t)B \rangle - i\epsilon\Theta(-t)\langle BA(t) \rangle, \end{aligned} \quad (1.62)$$

Bemerkung: 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 eine Funktion $G(t, t')$ mit t in A , t' in B , und $t - t'$ in der Θ -Funktion identisch ist zu unserer Funktion $G(t - t')$!

Wir bemerken, daß alle Ausdrücke für reelle t wohldefiniert sind. Wir schreiben kurz

$$\begin{aligned} f(t) &:= \langle A(t)B \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{i(i\beta+t)H} A e^{-itH} B), & -\beta \leq \text{Im } t \leq 0 \\ \langle BA(t) \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{i(i\beta-t)H} B e^{+itH} A), & 0 \leq \text{Im } t \leq +\beta \\ &= \langle A(t - i\beta)B \rangle = f(t - i\beta), \end{aligned} \quad (1.63)$$

wobei zuletzt zyklisches Vertauschen unter der Spur benutzt wurde.

Wir sehen, daß die Funktionen auch für komplexe t definiert sind, sofern die Imaginärteile in den angegebenen Intervallen liegen. Dadurch ist gewährleistet, daß die Exponentialausdrücke von nach oben beschränkten Operatoren genommen werden.

Wir finden nun

$$\begin{aligned} G_{A,B}^r(t) &:= -i\Theta(+t)[f(t) - \epsilon f(t - i\beta)], \\ G_{A,B}^a(t) &:= +i\Theta(-t)[f(t) - \epsilon f(t - i\beta)], \\ G_{A,B}^o(t) &:= -i\Theta(+t)f(t) - i\epsilon\Theta(-t)f(t - i\beta), \end{aligned} \quad (1.64)$$

woraus wir erkennen, daß $G_{A,B}^r(t)$ und $G_{A,B}^a(t)$ nicht analytisch fortgesetzt werden können, aber $G_{A,B}^o(t)$ schon. Die Fouriertransformierten verhalten sich genau anders: $G_{A,B}^r(\omega)$ und $G_{A,B}^a(\omega)$ können in die obere und untere komplexe Halbebene fortgesetzt werden, $G_{A,B}^o(\omega)$ hingegen nicht (außer für $T = 0$, siehe unten).

$$\begin{array}{ccc} & G^{r,a}(t) & \xleftrightarrow{\text{Fourier-}} G^{r,a}(\omega) \\ & \text{transformation} & \\ G^o(t) & \downarrow \text{analytische} & \downarrow \text{analytische} \\ & \text{Fortsetzung} & \text{Fortsetzung} \\ G(\tau) & \xleftrightarrow{\text{Fourier-}} G(z) \\ & \text{transformation} & \end{array}$$

Wir definieren nun die thermodynamische Green-Funktion über die zeitgeordnete Green-Funktion zu rein imaginären Zeiten

$$\begin{aligned} G_{A,B}(\tau) &:= \frac{1}{i} G_{A,B}^o(-i\tau) \\ &= -\Theta(+\tau)\langle A(-i\tau)B \rangle - \epsilon\Theta(-\tau)\langle BA(-i\tau) \rangle, \end{aligned} \quad (1.65)$$

d.h. analytische Fortsetzung von negativen (positiven) t zu imaginären $t = -i\tau$ mit negativem (positivem) τ . Wir halten fest:

$$G_{A,B}(\tau + \beta) = \epsilon G_{A,B}(\tau), \quad -\beta \leq \tau \leq 0, \quad (1.66)$$

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

Einschub: Spektraldarstellung

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

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Sp}(\rho \mathcal{O}) = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{-\beta H} \mathcal{O}) = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \mathcal{O} | n \rangle e^{-\beta E_n} \quad (1.67)$$

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

– Analog liegt in

$$\langle A(t)B \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle n|A|m \rangle \langle m|B|n \rangle e^{i(i\beta+t)E_n - itE_m} \quad (1.68)$$

Konvergenz vor, wenn die oben genannte Bedingung für t gültig ist.

Wir werden so lange wie möglich Spektraldarstellungen vermeiden und fundamentale Relationen mit Mitteln der Funktionentheorie herleiten.

Frequenzdarstellung

Wir führen für $G^{r,a,o}$ die Fouriertransformation für beliebige reelle ω ein

$$\begin{aligned} G^{r,a,o}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G^{r,a,o}(\omega) e^{-i\omega t} \\ G^{r,a,o}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt G^{r,a,o}(t) e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (1.69)$$

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

$$\begin{aligned} G(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n G(z_n) e^{-z_n \tau} \\ G(z_n) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G(\tau) e^{z_n \tau} \end{aligned} \quad (1.70)$$

wobei

$$z_n = \begin{cases} \frac{i\pi}{\beta} 2n =: \nu_n, & \text{für } \epsilon = +1, \\ \frac{i\pi}{\beta} (2n+1) =: \omega_n, & \text{für } \epsilon = -1, \end{cases} \quad (1.71)$$

wegen der β -(Anti-)Periodizität.

Wir wollen nun wichtige Eigenschaften der Frequenzdarstellungen untersuchen. Zuerst finden wir, daß das Fourierintegral für $G^{r,a}$ auch für komplexe Frequenzen z aus der oberen (unteren) Halbebene für r (a) definiert und als Funktion von z analytisch ist

$$G^{r,a}(z) = \int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} dt G^{r,a}(t) e^{izt} \quad (1.72)$$

Häufig versteht man unter $G(z)$ einfach die Funktion auf der komplexen Ebene ohne reelle Achse, die stückweise definiert ist durch $G^{r,a}(z)$. $G(z)$ ist analytisch bis auf einen Sprung an der reellen Achse.

Als nächstes wollen wir die Fouriertransformierten aller Green-Funktionen auf die Fouriertransformierte von $f(t)$ zurückführen

$$\begin{aligned} f(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) e^{-i\omega t}, & \text{Konvergenz für } -\beta \leq \text{Im } t \leq 0 \\ f(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (1.73)$$

Unter Benutzung von

$$\int_{0(-\infty)}^{\infty(0)} dt e^{i(z-\omega)t} = \mp \frac{1}{i(z-\omega)} \quad (1.74)$$

für $\text{Im } z > (<) 0$ folgt

$$\begin{aligned} G^r(z) &= -i \int_0^{\infty} dt (f(t) - \epsilon f(t - i\beta)) e^{izt} \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) (1 - \epsilon e^{-\beta\omega}) \int_0^{\infty} dt e^{i(z-\omega)t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1 - \epsilon e^{-\beta\omega}}{z - \omega} f(\omega) \end{aligned} \quad (1.75)$$

und analog

$$G^a(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1 - \epsilon e^{-\beta\omega}}{z - \omega} f(\omega) \quad (1.76)$$

Wir halten hier die Asymptotik von $G(z)$ fest

$$G(z) \simeq \frac{1}{z}, \quad \text{für } z \rightarrow \infty \quad (1.77)$$

Als nächstes rechnen wir

$$\begin{aligned} \int_0^{\beta} d\tau G(\tau) e^{z_n \tau} &= - \int_0^{\beta} d\tau f(-i\tau) e^{z_n \tau} \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) \int_0^{\beta} d\tau e^{(z_n - \omega)\tau} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1 - \epsilon e^{-\beta\omega}}{z_n - \omega} f(\omega) \end{aligned} \quad (1.78)$$

wobei zuletzt benutzt wurde

$$\int_0^{\beta} d\tau e^{(z_n - \omega)\tau} = \frac{1}{z_n - \omega} e^{(z_n - \omega)\tau} \Big|_0^{\beta} = \frac{\epsilon e^{-\beta\omega} - 1}{z_n - \omega} \quad (1.79)$$

da $e^{z_n \beta} = \epsilon$. Analog finden wir $\int_{-\beta}^0 d\tau G(\tau) e^{z_n \tau}$ mit gleichem Ergebnis (warum?).

Wir sehen, daß $G(z_n)$ identisch ist zu $G^{r(a)}(z_n)$, wenn z_n in der oberen (unteren) Halbebene liegt (insbesondere liegt keine widersprüchliche Notation vor). Rechentechnisch bedeutet dies: aus $G^{r(a)}(z)$ 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 $G(z)$. (Eindeutigkeit: $G(1/z)$ ist analytische Funktion in Nachbarschaft von $z = 0$ und auf einer Punktfolge mit Häufungspunkt 0 vorgegeben.) Die tatsächliche Durchführung der analytischen Fortsetzung ergibt sich bei “analytischen” Rechnungen von selbst, bei numerischen Rechnungen (Monte Carlo, Dichte-Matrix-Renormierungs-Gruppe) bis heute ein Problem.

Wir definieren die **Spektralfunktion** als Sprung der Green-Funktion $G(z)$ an der reellen Achse

$$A(\omega) := -\frac{1}{2\pi i} [G^r(\omega) - G^a(\omega)] = -\frac{1}{2\pi i} [G(\omega + i\delta) - G(\omega - i\delta)]. \quad (1.80)$$

Mittels obiger Darstellungen von $G(z)$ folgt:

$$\begin{aligned} A(\omega) &= \frac{1}{2\pi i} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{1 - \epsilon e^{-\beta\omega'}}{\omega - i\delta - \omega'} f(\omega') - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{1 - \epsilon e^{-\beta\omega'}}{\omega + i\delta - \omega'} f(\omega') \right] \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{geschloss. Weg}} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{1 - \epsilon e^{-\beta\omega'}}{\omega' - \omega} f(\omega') \\ &= \frac{1}{2\pi} (1 - \epsilon e^{-\beta\omega}) f(\omega) \end{aligned} \quad (1.81)$$

Wir haben jetzt eine Möglichkeit, die bisher nur implizit auftretende Funktion $f(t)$ auszudrücken

$$\frac{f(\omega)}{2\pi} = \frac{A(\omega)}{1 - \epsilon e^{-\beta\omega}} \quad (1.82)$$

$$\langle A(t)B \rangle = f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{A(\omega)}{1 - \epsilon e^{-\beta\omega}} e^{-i\omega t} \quad (1.83)$$

Nun wollen wir noch die Green-Funktion $G(z)$ auf der gesamten komplexen Ebene (ohne reelle Achse) durch einen Integralausdruck mittels der Spektralfunktion schreiben. Mit dem obigen Integralausdruck für G mittels f (1.75) und dem Ausdruck von f durch A (1.82) folgt

$$G(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{z - \omega} A(\omega) \quad (1.84)$$

Ein “unabhängiger” Beweis verläuft so: (i) die beiden Funktionen auf l.S. und r.S. sind 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 l.S. per definitionem gleich $A(\omega)$ ist, und auf der r.S. nach Cauchy!

Wenn wir die Differenz von l.S. und r.S. betrachten haben wir eine an der

reellen Achse stetige Funktion, die überall sonst analytisch ist. Damit ist die Differenzfunktion überall analytisch. Außerdem ist die Differenzfunktion wegen der Asymptotik global beschränkt, somit konstant. Diese Konstante ist gleich 0, also l.S. identisch zur r.S.!

Wir wollen noch einen Ausdruck für $G^o(\omega)$ herleiten und bemerken dazu, daß

$$G^o(t) = -i\langle A(t)B \rangle + G^a(t) \quad (1.85)$$

Also folgt

$$G^o(\omega) = -2\pi i \frac{A(\omega)}{1 - \epsilon e^{-\beta\omega}} + G^a(\omega) = \frac{G^r(\omega) - G^a(\omega)}{1 - \epsilon e^{-\beta\omega}} + G^a(\omega) \quad (1.86)$$

Kramers-Kronig-Relationen

Wir nutzen nun die Analytizität von $G(z)$ in der oberen Halbebene, sowie die Asymptotik $\simeq 1/z$ für $z \rightarrow \infty$. Nach Cauchy gilt für z aus der oberen Halbebene (mit infinitesimalem Imaginärteil)

$$\begin{aligned} G(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{obengeschl. Halbkreis}} d\omega \frac{G(\omega)}{\omega - z} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{reelle Achse}} d\omega \frac{G(\omega)}{\omega - z} \\ &= \frac{1}{2} G(z) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{Hauptwert}} d\omega \frac{G(\omega)}{\omega - z} \end{aligned} \quad (1.87)$$

Hier haben wir auf Grund der Asymptotik, das Integral über den “großen” Halbkreis gleich 0 setzen können. Das Integral über den infinitesimalen Halbkreis lieferte den expliziten Anteil $\pi i G(z)$.

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

$$G(\omega) = \frac{1}{\pi i} \int_{\text{Hauptwert}} d\omega' \frac{G(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (1.88)$$

Wenn wir nun Real- und Imaginär-Teile nehmen erhalten wir die Kramers-Kronig-Relationen

$$\begin{aligned} \text{Re } G(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int_{\text{Hauptwert}} d\omega' \frac{\text{Im } G(\omega')}{\omega' - \omega} \\ \text{Im } G(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \int_{\text{Hauptwert}} d\omega' \frac{\text{Re } G(\omega')}{\omega' - \omega} \end{aligned} \quad (1.89)$$

Wir sehen, daß wir allein aus dem Realteil (oder Imaginärteil) die vollständige Funktion reproduzieren können.

Einteilchen-Green-Funktionen

Die häufigst betrachteten Green-Funktionen sind die “Propagatoren” von Teilchen mit $A = \psi(\vec{r})$ (Vernichter) und $B = \psi^+(\vec{r})$ (Erzeuger), da diese

1-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.

Bewegungsgleichungen

Wir betrachten nun die zeitgeordnete Green-Funktion und leiten nach der Zeit ab.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} G_{A,B}^o(t) &= -i\delta(t)\langle AB \rangle + i\epsilon\delta(t)\langle BA \rangle \\ &\quad + \text{“alter Ausdruck” mit } A(t) \text{ ersetzt durch } \frac{d}{dt} A(t) \\ &= -i\delta(t)\langle [A, B]_\epsilon \rangle - iG_{[A,H],B}^o(t) \end{aligned} \quad (1.90)$$

Tatsächlich gilt eine analoge DGL auch für die retardierte bzw. avancierte Green-Funktion, so daß wir zusammenfassen

$$i \frac{d}{dt} G_{A,B}^{r,a,o}(t) = \delta(t)\langle [A, B]_\epsilon \rangle + G_{[A,H],B}^{r,a,o}(t). \quad (1.91)$$

Für die thermodynamische Green-Funktion gilt

$$- \frac{d}{dt} G_{A,B}(t) = \delta(t)\langle [A, B]_\epsilon \rangle + G_{[A,H],B}(t). \quad (1.92)$$

(9.V)

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 Vielteilchensysteme ohne Wechselwirkung behandeln. Anschaulich ist ja zu erwarten, daß eine Reduktion auf Einteilchenprobleme möglich sein muß.

In 2. Quantisierung lautet jeder 1-Teilchen-Hamiltonoperator (mit geeigneter Funktion $h(x; y)$)

$$H = \int d^3x d^3y \psi^\dagger(x) h(x; y) \psi(y) \rightarrow \int d^3x \psi^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(x) \quad (1.93)$$

wobei sich die Spezialisierung ergibt, wenn

$$h(x; y) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \delta(x - y). \quad (1.94)$$

Wir betrachten nun den Fall der 1-Teilchen-Green-Funktionen mit

$$A = \psi(r), \quad B = \psi^\dagger(r') \quad (1.95)$$

Mit den allgemeinen Beziehungen

$$[ab, c] = a[b, c]_\epsilon - [c, a]_\epsilon b, \quad [a, bc] = [a, b]_\epsilon c - b[c, a]_\epsilon, \quad (1.96)$$

und

$$[A, B]_\epsilon = [\psi(r), \psi^+(r')]_\epsilon = \delta(r - r') \quad (1.97)$$

gilt nun

$$\begin{aligned} [A, H] &= \int d^3x d^3y [\psi(r), \psi^+(x) h(x; y) \psi(y)] \\ &= \int d^3x d^3y [\psi(r), \psi^+(x)]_\epsilon h(x; y) \psi(y) \\ &= \int d^3y h(r; y) \psi(y) \end{aligned} \quad (1.98)$$

Damit folgt

$$i \frac{d}{dt} G_{\psi(r), \psi^+(r')}^{r, a, o}(t) - \left(\int d^3y h(r; y) \right) G_{\psi(y), \psi^+(r')}^{r, a, o}(t) = \delta(t) \delta(r - r') \quad (1.99)$$

Um die Struktur besser zu erkennen, lassen wir verschiedene obere und untere Indizes fallen,

$$\left(i \frac{d}{dt} - H \cdot \right) G_{r-r'}(t - t') = \delta(t - t') \delta(r - r') \quad (1.100)$$

wobei wir $t \rightarrow t - t'$ ersetzt, die räumliche Translationsinvarianz von G benutzt und für den Integraloperator, der auf den Ausdruck rechts als Funktion von r wirkt, die Notation $H \cdot$ 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! Noch expliziter ist die Situation bei Benutzung der üblichen kinetischen Energie

$$\left(i \frac{d}{dt} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) G_{r, r'}(t - t') = \delta(t - t') \delta(r - r') \quad (1.101)$$

wobei ∇ auf r wirkt.

Lösungsstrategien: freie Teilchen

- löse die letzte DGL mittels räumlicher und zeitlicher Fouriertransformation; ODER
- führe $G_{\psi(r), \psi^+(r')}^{r, a, o}(t)$ durch räumliche Fouriertransformation auf $G_{c_p, c_{p'}^+}^{r, a, o}(t)$ mit Erzeugern und Vernichtern zu Impulseigenzuständen; die letzte Green-Funktion ist nur für $p = p'$ von 0 verschieden; die Zeitentwicklung von c_p ist bekannt!

Wie auch immer, die explizite Lösung lautet

$$G(z, p) = \frac{1}{z - e(p)} \quad (1.102)$$

wobei $e(p)$ die Einteilchenenergie ist, die nur vom Impuls abhängt. Im obigen Fall gilt $e(p) = p^2/2m$, wenn wir großkanonisch rechnen und ein chemisches Potential μ einführen haben wir $e(p) = p^2/2m - \mu$. Man sieht, daß $e(p)$ positive und negative Werte annehmen kann. Für Bandlelektronen eines Festkörpers gibt es starke Abweichungen von der einfachen Parabelform. Auch für relativistische Teilchen gibt es andere, bekannte Energie-Impuls-Beziehungen. Hier ist insbesondere der Fall der Bosonen, z.B. Photonen, bedeutsam mit je zwei Polstellen pro Impuls.

Bem.: Für freie Teilchen ist $G(z, p)$ temperaturunabhängig!

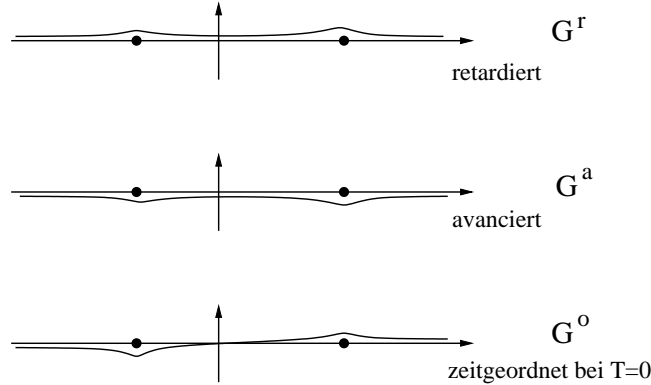
Wir übersetzen nun das Ergebnis für $G(z, p)$ in $G^{r,a,o}$. Zunächst ist offensichtlich

$$G^{r,a}(\omega, p) = \frac{1}{\omega \pm i\delta - e(p)} \quad (1.103)$$

und insbesondere temperaturunabhängig! Dieses Ergebnis bedeutet, daß in Fourierintegralen der retardierten bzw. avancierten Green-Funktion die Frequenz ω oberhalb bzw. unterhalb der Polstellen verläuft. Das Ergebnis für G^o läßt sich aus (1.86) ablesen: hier sehen wir erstmalig eine Temperaturabhängigkeit. Für $T = 0$ vereinfacht sich die Beziehung:

$$G^o(\omega, p) = \begin{cases} G^r(\omega, p), & \text{für } \omega > 0 \\ G^a(\omega, p), & \text{für } \omega < 0 \end{cases} \quad (1.104)$$

Dieses Ergebnis bedeutet, daß in Fourierintegralen der zeitgeordneten Green-Funktion die Frequenz ω entlang der negativen Halbachse unterhalb und entlang der positiven Halbachse oberhalb der Polstellen verläuft. Dies ist die Vorschrift des Feynman-Propagators! Dieser ist nicht-kausal, in der Raumzeit-Darstellung gibt es nichtverschwindende Beiträge im raumartigen Bereich.



2 Diagrammatische Störungsrechnung

2.1 Diagrammatische Störungsrechnung

Wir notieren den Imaginärzeit-Evolutionsoperator

$$e^{-itH} \xrightarrow[t \rightarrow -i\tau]{} e^{-\tau H} \quad (2.1)$$

Definition: U -Operator

$$U(\tau) := e^{\tau H_0} e^{-\tau H}, H = H_0 + H' \quad (2.2)$$

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

$$A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0} \quad (2.3)$$

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.

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

$$A_H(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H} = U^{-1}(\tau) A(\tau) U(\tau) \quad (2.4)$$

wobei zuletzt der U -Operator benutzt wurde.

Die Bewegungsgleichung für $U(\tau)$ lautet:

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau) = e^{\tau H_0} (-H_0 + H) e^{-\tau H} = H'(\tau) U(\tau) \quad (2.5)$$

Die explizite Lösung lautet

$$\begin{aligned} U(\tau) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\tau} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n H'(\tau_1) \cdots H'(\tau_n) \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathcal{T} \int_0^{\tau} \cdots \int_0^{\tau} d\tau_1 \cdots d\tau_n H'(\tau_1) \cdots H'(\tau_n) \\ &=: \mathcal{T} \exp \left\{ - \int_0^{\tau} d\bar{\tau} H'(\bar{\tau}) \right\} \end{aligned} \quad (2.6)$$

wobei das Zeitordnungssymbol

$$\mathcal{T} \{ H'(\tau_1) H'(\tau_2) \} = \begin{cases} H'(\tau_1) H'(\tau_2), & \text{für } \tau_1 > \tau_2 \\ H'(\tau_2) H'(\tau_1), & \text{für } \tau_1 < \tau_2 \end{cases} \quad (2.7)$$

benutzt wurde. Entsprechend erfüllt

$$U(\tau, \tau') := \mathcal{T} \exp \left\{ - \int_{\tau'}^{\tau} d\bar{\tau} H'(\bar{\tau}) \right\}, (\tau > \tau') \quad (2.8)$$

die Eigenschaften

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau, \tau') &= H'(\tau)U(\tau, \tau'), & U(\tau, \tau) &= 1 \\ \rightarrow U(\tau_1, \tau_3) &= U(\tau_1, \tau_2)U(\tau_2, \tau_3), & (\tau_1 > \tau_2 > \tau_3) \\ U(\tau_1, \tau_2) &= U(\tau_1)U^{-1}(\tau_2), & (\tau_1 > \tau_2) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Anwendung auf Green-Funktion

$$\begin{aligned} Z &= \text{Spe}^{-\beta H} = \text{Spe}^{-\beta H_0} U(\beta), & Z_0 &= \text{Spe}^{-\beta H_0} \\ \frac{Z}{Z_0} &= \langle U(\beta) \rangle_0 \quad \text{mit} \quad \langle A \rangle_0 := \frac{\text{Spe}^{-\beta H_0} A}{e^{-\beta H_0}} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Für $\tau > 0$ folgt

$$\begin{aligned} G_{A,B}(\tau) &= -\langle A_H(\tau) B_H(0) \rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Spe}^{-\beta H} U^{-1}(\tau) A(\tau) U(\tau) B(0) \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Spe}^{-\beta H_0} U(\beta, \tau) A(\tau) U(\tau, 0) B(0) \\ &= -\frac{\langle \mathcal{T}\{A(\tau) B(0) U(\beta)\} \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \end{aligned} \quad (2.11)$$

wobei

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\{A(\tau_1) B(\tau_2) \dots U(\beta)\} &:= U(\beta, \tau_1) A(\tau_1) U(\tau_1, \tau_2) B(\tau_2) \dots \\ &(\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 \dots > 0) \end{aligned} \quad (2.12)$$

Setzen wir die obige Entwicklung für $U(\beta)$ ein, so gilt

$$\begin{aligned} &\langle \mathcal{T}\{A(\tau) B(0) U(\beta)\} \rangle_0 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathcal{T} \int_0^{\beta} \dots \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots d\tau_n \langle A(\tau) B(0) H'(\tau_1) \dots H'(\tau_n) \rangle_0 \\ &\langle U(\beta) \rangle_0 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathcal{T} \int_0^{\beta} \dots \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots d\tau_n \langle H'(\tau_1) \dots H'(\tau_n) \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Nun handelt es sich bei der verbleibenden Aufgabe darum, die Mittelwerte $\langle \dots \rangle_0$ des ungestörten Systems zu berechnen.

2.2 Wicksches Theorem und Rechenregeln

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. Es gilt

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

$$\begin{aligned} \langle bcde\dots gh \rangle_0 &= \langle bc \rangle_0 \langle de\dots gh \rangle_0 \\ &\quad + \epsilon \langle bd \rangle_0 \langle c e\dots gh \rangle_0 \\ &\quad + \epsilon^2 \langle be \rangle_0 \langle cd \dots gh \rangle_0 \\ &\quad \vdots \\ &\quad + \epsilon^{m-2} \langle bh \rangle_0 \langle cde\dots g \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Bemerkung: hier ist m die Anzahl der Feldoperatoren, wobei m als gerade angenommen werden kann, da andernfalls beide Seiten gleich 0 wären. $\epsilon = 1$ für Bosonen, -1 für Fermionen.

Beweis: siehe Übungen

Nun folgt schnell per Induktion:

Wicksches Theorem

$$\langle bcde\dots gh \rangle_0 = \sum_{\substack{\text{alle Paarungen } P \\ \text{(Kontraktionen)}}} \epsilon^{\#P} \langle \dots \rangle_0 \langle \dots \rangle_0 \cdots \langle \dots \rangle_0 \quad (2.15)$$

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

$$(2k-1)(2k-3)\dots 3 \cdot 1 = \frac{(2k)!}{2k \cdot (2k-2) \dots 2 \cdot 1} = \frac{(2k)!}{2^k k!} \quad (2.16)$$

Beispiel: Sei A ein Operator linear in bosonischen Feldoperatoren, dann gilt

$$\langle e^A \rangle_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle A^n \rangle_0 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \langle A^{2k} \rangle_0 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2^k k!} \langle A^2 \rangle_0^k = e^{\frac{1}{2} \langle A^2 \rangle_0} \quad (2.17)$$

Beispiel:

$$\langle bcde \rangle_0 = \langle bc \rangle_0 \langle de \rangle_0 + \epsilon \langle bd \rangle_0 \langle ce \rangle_0 + \epsilon^2 \langle be \rangle_0 \langle cd \rangle_0 \quad (2.18)$$

Dichte-Dichte-Korrelationen in wechselwirkungsfreien Systemen

$$\begin{aligned} \langle n(x)n(0) \rangle_0 &= \langle \psi(x)^+ \psi(x) \psi(0)^+ \psi(0) \rangle_0 \\ &= \langle \psi(x)^+ \psi(x) \rangle_0 \langle \psi(0)^+ \psi(0) \rangle_0 + \langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 \langle \psi(x) \psi(0)^+ \rangle_0 \\ &= \langle n(x) \rangle_0 \langle n(0) \rangle_0 + \epsilon |\langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0|^2 \end{aligned} \quad (2.19)$$

einzig zu berechnen bleibt

$$\langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 = \frac{1}{V} \sum_k e^{-ikx} \langle c_k^+ c_k \rangle_0 = \frac{1}{V} \sum_k \frac{e^{-ikx}}{e^{\beta \epsilon_k} - \epsilon} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{e^{-ikx}}{e^{\beta \epsilon_k} - \epsilon} \quad (2.20)$$

Interessant ist noch das Verhalten der Grundzustandskorrelationen für freie Fermionen

$$\langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{Fermikugel}} d^3k e^{-ikx} \quad (2.21)$$

Oder in 1-dim:

$$\langle \psi(x)^+ \psi(0) \rangle_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk e^{-ikx} = \frac{\sin k_F x}{\pi x} \rightarrow \langle n(x) n(0) \rangle_0 = n^2 - \left| \frac{\sin k_F x}{\pi x} \right|^2 \quad (2.22)$$

Diskussion: $2k_F$ -Oszillationen, Abstoßung durch Pauliprinzip

Nächster Schritt: Wicksches Theorem für \mathcal{T} -Produkte

$$\begin{aligned} & \langle \mathcal{T} b(\tau_1) c(\tau_2) d(\tau_3) e(\tau_4) \dots g(\tau_{2k-1}) h(\tau_{2k}) \rangle_0 \\ &= \sum_{\substack{\text{alle Paarungen } P \\ (\text{Kontraktionen})}} \epsilon^{\#P} \langle \mathcal{T} \dots \rangle_0 \langle \mathcal{T} \dots \rangle_0 \dots \langle \mathcal{T} \dots \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

wobei wir unter einer elementaren Kontraktion den Mittelwert eines beliebigen zweifachen Produktes in \mathcal{T} -geordneter Form verstehen wollen. Zusätzlich merken wir uns die Parität der Paarung $\#P$.

2.3 Graphische Darstellung, Verbundene Graphen

Wir betrachten nun ein spezielles Vielteilchensystem in Impulsdarstellung

$$H = H_0 + H' = \sum_p \epsilon_p c_p^+ c_p + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl|V|mn \rangle c_k^+ c_l^+ c_n c_m \quad (2.24)$$

Wir wollen $G(p\tau, p'\tau') = G_{c_p, c_{p'}^+}(\tau, \tau')$ berechnen (tatsächlich 0 für $p \neq p'$).

$$G(p\tau, p'\tau') = - \frac{\langle \mathcal{T} \{ c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') U(\beta) \} \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \quad (2.25)$$

Mit dem letzten Paragraphen und

$$H'(\tau_i) = \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl|V|mn \rangle c_k^+(\tau_i) c_l^+(\tau_i) c_n(\tau_i) c_m(\tau_i) \quad (2.26)$$

folgt

$$\begin{aligned} & - \langle \mathcal{T} \{ c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') U(\beta) \} \rangle_0 \\ &= - \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu}{\nu!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_\nu \end{aligned}$$

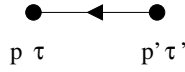
$$\begin{aligned}
 & \cdot \sum_{\substack{k_1 l_1 m_1 n_1 \\ k_\nu l_\nu m_\nu n_\nu}} \left(\frac{1}{2} \right)^\nu \langle k_1 l_1 | V | m_1 n_1 \rangle \dots \langle k_\nu l_\nu | V | m_\nu n_\nu \rangle \\
 & \cdot \langle \mathcal{T} c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') \cdot c_{k_1}^+(\tau_1) c_{l_1}^+(\tau_1) c_{n_1}(\tau_1) c_{m_1}(\tau_1) \dots \\
 & \quad c_{k_\nu}^+(\tau_\nu) c_{l_\nu}^+(\tau_\nu) c_{n_\nu}(\tau_\nu) c_{m_\nu}(\tau_\nu) \rangle_0
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

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

$n = 0$

$$-\langle \mathcal{T} \{ c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') \} \rangle_0 = G_0(p\tau, p'\tau') \tag{2.28}$$

Darstellung durch



$n = 1$

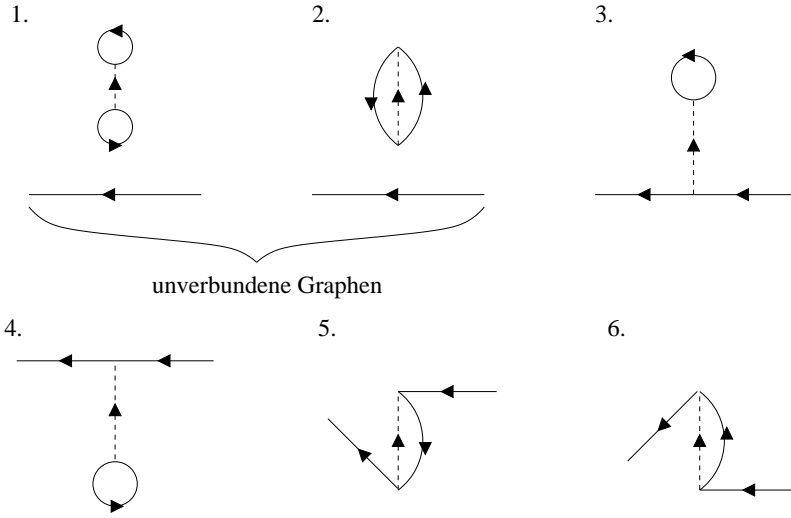
$$\begin{aligned}
 & -(-1) \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{k_1 l_1 m_1 n_1} \frac{1}{2} \langle k_1 l_1 | V | m_1 n_1 \rangle \cdot \\
 & \quad \cdot \langle \mathcal{T} c_p(\tau) c_{p'}^+(\tau') \cdot c_{k_1}^+(\tau_1) c_{l_1}^+(\tau_1) c_{n_1}(\tau_1) c_{m_1}(\tau_1) \rangle_0
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

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

$$\begin{aligned}
 c_p^+(\tau) : & \quad \text{---} \bullet \xleftarrow{\quad} \tau \\
 c_p(\tau) : & \quad \bullet \xrightarrow{\quad} \tau
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \langle kl | V | mn \rangle c_k^+(\tau) c_l^+(\tau) c_n(\tau) c_m(\tau) : \text{Diagram} \\
 & \text{Diagram: A vertical dashed line with two black dots at the ends. The top dot is labeled 'τ' and has two incoming arrows from above labeled 'k' and 'm'. The bottom dot is labeled 'τ' and has two outgoing arrows to below labeled 'n' and 'l'. A small upward-pointing triangle is on the dashed line between the two dots.}
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

Bildung aller Kontraktionen: verbinde einlaufende und auslaufende Pfeile auf alle möglichen Arten



Der Integrand zu jedem der obigen $n = 1$ Terme ergibt sich dann aus dem jeweiligen Graphen durch Identifizierung einer durchgezogenen Linie

$$\begin{array}{c} \bullet \text{---} \bullet \\ p \quad \tau \end{array} \quad p' \tau' \equiv G_0(p\tau, p'\tau') \quad (2.31)$$

und einer gebrochenen Linie

$$\begin{array}{c} k \quad m \\ \swarrow \quad \searrow \\ \bullet \quad \tau \\ \uparrow \\ \bullet \quad \tau \\ \swarrow \quad \searrow \\ l \quad n \end{array} \equiv \frac{1}{2} \langle kl | V | mn \rangle \quad (2.32)$$

Index

avancierte 12

Besetzungszahldarstellung 3
Bewegungsgleichungen 18

Diagrammatische Störungsrechnung
21

Einteilchen-Green-Funktionen 17

Feynman 20
Frequenzdarstellung 14

Graphische Darstellung 24

Kramers-Kronig-Relationen 17

Lineare-Antwort-Theorie 8

Responsefunktion 9
retardierte 12

Spektralfunktion 16
Suszeptibilität 9

thermodynamische 13

Vielteilchentheorie 3

Wicksches Theorem 22, 24

zeitgeordnete 12
Zweite Quantisierung 3