18 Effektive Paar-Wechselwirkung

18.a Elektron-Phonon-Wechselwirkung

In diesem Abschnitt formulieren wir die für die Supraleitung wichtige Elektron-Phonon-Wechselwirkung durch Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren. Für ein einfaches Gitter können wir die Elektron-Phonon-Wechselwirkung (1.4) durch die Auslenkung $\boldsymbol{\eta}_n$ der Ionen darstellen

$$H_{\mathrm{el-ion}} = \sum V_{\mathrm{el-ion}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n - \boldsymbol{\eta}_n). \tag{18.1}$$

Dabei hat man die Vorstellung eines starren Ions. Man entwickelt nun

$$V_{\mathrm{el-ion}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n - \boldsymbol{\eta}_n) = \underbrace{V_{\mathrm{el-ion}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n)}_{\text{zum Einteilchen}-\text{Potential der Elektronen}} \quad \underbrace{-\boldsymbol{\eta}_n \mathrm{grad}_r V_{\mathrm{el-ion}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_n)}_{H_{\mathrm{el-ph}}} \tag{18.2}$$

Wir drücken nun gemäss (6.23) die Auslenkungen durch die Normal-Koordinaten aus

$$\boldsymbol{\eta}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\lambda\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_\lambda(\mathbf{q})}} \mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} (a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})), \tag{18.3}$$

wobei wir zur Unterscheidung von den Elektron-Operatoren die Polarisations-Vektoren der Phononen mit $\mathbf{e}$ statt $\mathbf{c}$ bezeichnet haben. Zum anderen drücken wir den Gradienten des Potentials hier für ebene Wellen (aber ähnlich auch für Bloch-Zustände) aus

$$\begin{aligned}
(\mathrm{grad}_r V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n))_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} &= \frac{1}{V_\mathrm{P}} \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{\mathrm{i}(-\mathbf{k}'+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \mathrm{grad}_r V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \\
&= -\mathrm{i}(-\mathbf{k}' + \mathbf{k}) \frac{1}{V_\mathrm{P}} \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{\mathrm{i}(-\mathbf{k}'+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \\
&= \mathrm{i}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(-\mathbf{k}'+\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_n} \frac{1}{V_\mathrm{P}} \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{\mathrm{i}(-\mathbf{k}'+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \\
&= \mathrm{i}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(-\mathbf{k}'+\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_n} \frac{1}{V_\mathrm{P}} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}.
\end{aligned} \tag{18.4}$$

Damit ergibt sich für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung

$$H_{\mathrm{el-ph}} = -\frac{\mathrm{i}}{V_\mathrm{P}} \sum_{n,\lambda,\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}',s} \frac{1}{\sqrt{MN}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda(\mathbf{q})}} \mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} (a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})) c_{\mathbf{k}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_n} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}. \tag{18.5}$$

Die Summe über die Gitterpunkte durch n gekennzeichnet, ergibt $N \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{G}}$ mit den reziproken Gittervektoren $\mathbf{G}$. Damit folgt

$$H_{\mathrm{el-ph}} = -\frac{\mathrm{i}}{V_\mathrm{P}} \sqrt{\frac{N}{M}} \sum_{\lambda,\mathbf{q},\mathbf{k},s,\mathbf{G}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda(\mathbf{q})}} \mathbf{e}^\lambda(\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{G}) V_{\mathbf{G}-\mathbf{q}} (a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{G}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \tag{18.6}$$

Die Vektoren $\mathbf{k}$, $\mathbf{q}$ und $\mathbf{k}' = \mathbf{q} + \mathbf{k} - \mathbf{G}$ liegen innerhalb der (ersten) Brillouinzone. Falls $\mathbf{G} \neq \mathbf{0}$, spricht man von Umklapp-Prozessen. Eine Näherung, die wir hier der Einfachheit halber verwenden wollen, besteht darin, a) bei den Umklapp-Prozessen $\mathbf{q} - \mathbf{G}$ durch $\mathbf{q}$ zu ersetzen und b) für die Polarisation der Phononen anzunehmen, dass die longitudinalen Phononen des Impulses $\mathbf{q}$ in dieser Richtung orientiert sind, so dass nur diese zur Elektron-Phonon-Wechselwirkung beitragen, d.h. $\mathbf{e}(\mathbf{q}) \parallel \mathbf{q}$. Dann gilt

$$H_{\mathrm{el-ph}} = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s} M_\mathbf{q} (a(\mathbf{q}) + a^\dagger(-\mathbf{q})) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s}, \tag{18.7}$$

wobei $\mathbf{q}$ und $\mathbf{k}$ über die ganze Brillouinzone laufen und $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger = c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{G}s}^\dagger$ angenommen wird, und

$$M_\mathbf{q} = -\mathrm{i} \frac{\sqrt{N}}{V_\mathrm{P}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mathrm{long}}(\mathbf{q})}} (\mathbf{e}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q}) V_{-\mathbf{q}}. \tag{18.8}$$

Die Wechselwirkung ist hermitesch, da $\mathbf{e}^*(-\mathbf{q}) = \mathbf{e}(\mathbf{q})$, $V^*_{\mathbf{q}} = V_{-\mathbf{q}}$, $\omega(\mathbf{q}) = \omega(-\mathbf{q})$, woraus dann $M^*_{\mathbf{q}} = M_{-\mathbf{q}}$ folgt. Wählt man $\mathbf{e}(\mathbf{q}) = \frac{\mathrm{i}\mathbf{q}}{q}$, dann folgt $-\mathrm{i}(\mathbf{e}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q}) = q$ und $M_{\mathbf{q}} \propto \sqrt{q}$.

18.b Die Fröhlichsche Transformation

Fröhlich hat erstmals eine Transformation von der Elektron-Phonon-Wechselwirkung auf eine effektive elektronische Paarwechselwirkung angegeben. Er geht aus von

$$
\begin{aligned}
H &= H_0 + H_{\mathrm{el-ph}}, && (18.9)\\
H_0 &= \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathrm{q}} : a^\dagger_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} : + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} : + E_0, && (18.10)\\
H_{\mathrm{el-ph}} &= \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k}} M_{\mathbf{q}} : (c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} + c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a^\dagger_{\mathbf{q}}) : && (18.11)
\end{aligned}
$$

und führt eine unitäre Transformation

$$
H^{\mathrm{Fr}} = \mathrm{e}^{-S} H \mathrm{e}^{S} = H + [H,S] + \frac{1}{2}[[H,S],S] + ... \tag{18.12}
$$

durch, wobei er nach Potenzen von M und S entwickelt und $S = O(M)$ annimmt und fordert, dass der Beitrag in $O(M)$ zu H^{Fr} verschwindet,

$$
H^{\mathrm{Fr}} = H_0 + \underbrace{H_{\mathrm{el-ph}} + [H_0,S]}_{=0} + \underbrace{[H_{\mathrm{el-ph}},S] + \frac{1}{2}[[H_0,S],S]}_{\frac{1}{2}[H_{\mathrm{el-ph}},S]} + O(M^3). \tag{18.13}
$$

Aus der Forderung, dass der Beitrag in erster Ordnung in M verschwindet, ergibt sich der zweite Beitrag zu $\frac{1}{2}[H_{\mathrm{el-ph}}, S]$. Wir bestimmen nun S. Der Ansatz dafür ist ähnlich dem Ausdruck für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung,

$$
S = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s} S_{\mathbf{q},\mathbf{k}} : (c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} - c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a^\dagger_{\mathbf{q}}) :, \tag{18.14}
$$

lediglich die Koeffizienten S unterscheiden sich von M und ein Minus-Zeichen steht zwischen den beiden Termen, da S als Generator einer unitären Transformation antihermitesch ist, während die Elektron-Phonon-Wechselwirkung hermitesch ist. Der Kommutator ergibt

$$
[H_0,S] = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s} S_{\mathbf{q},\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} : - \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s} S_{\mathbf{q},\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}) : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a^\dagger_{\mathbf{q}} :, \tag{18.15}
$$

Die Forderung $H_{\mathrm{el-ph}} + [H_0,S] = 0$ ergibt dann

$$
S_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \frac{M_{\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{q}}}. \tag{18.16}
$$

Bilden wir nun den Kommutator $[H_{\mathrm{el-ph}}, S]$, so erhalten wir vielerlei Beiträge, $...+ : c^\dagger c^\dagger cc : +... : c^\dagger c : +\mathrm{const.} + ... : a^\dagger a c^\dagger c : +... : a^\dagger a : +... : a^\dagger a^\dagger c^\dagger c : +... : a^\dagger a^\dagger : +... : a a c^\dagger c : +... : aa :$. Die Beiträge $... : c^\dagger c^\dagger cc :$ ergeben die effektive Wechselwirkung zwischen den Elektronen. $... : c^\dagger c :$ und $...a^\dagger a :$ ergeben Veränderungen der Elektronen- und Phononen-Energien.

Wir berechnen nun für die hier interessierende effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$
[H_{\mathrm{el-ph}},S] = [\sum_{\mathbf{q},\mathbf{k}} M_{\mathbf{q}} : (c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} + c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a^\dagger_{\mathbf{q}}) :, \sum_{\mathbf{q}',\mathbf{k}',s'} S_{\mathbf{q}',\mathbf{k}'} : (c^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'s'} c_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{q}'} - c^\dagger_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'s'} a^\dagger_{\mathbf{q}'}) :]. \tag{18.17}
$$

Die hier interessierenden $c^\dagger c^\dagger cc$ Beiträge entstehen durch Kommutieren der Phononen-Operatoren. Wir erhalten daher nur Beiträge für $\mathbf{q}' = \mathbf{q}$,

$$\begin{aligned}
[H_{\mathrm{el-ph}}, S] &= -\sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} M_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} c^\dagger_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} : ((n_{\mathbf{q}} + 1 - n_{\mathbf{q}}) \\
&+ \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} M_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q},\mathbf{k}'} : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{k}'s'} : (n_{\mathbf{q}} - (n_{\mathbf{q}} + 1)) \\
&= -\sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} (M_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q},\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + M_{-\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q},\mathbf{k}'}) : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} : \qquad (18.18)
\end{aligned}$$

Wir werten die Matrixelemente aus

$$-M_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q},\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - M_{-\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q},\mathbf{k}'} = -M^2_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}'-q} - \epsilon_{\mathbf{k}'} + \omega_{\mathbf{q}}} + \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + \omega_{-\mathbf{q}}} \right) = \frac{2M^2_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^2 - \omega^2_{\mathbf{q}}}. \qquad (18.19)$$

Damit erhalten wir schließlich den Fröhlichschen Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}
H^{\mathrm{Fr}} &= H_0 + V^{\mathrm{Fr}}, \qquad (18.20) \\
V^{\mathrm{Fr}} &= \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V^{\mathrm{Fr}}_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'} : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} :, \qquad (18.21) \\
V^{\mathrm{Fr}}_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'} &= \frac{M^2_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^2 - \omega^2_{\mathbf{q}}}. \qquad (18.22)
\end{aligned}$$

18.c Transformation mittels Flussgleichungen

Die Idee dieses in den letzten Jahren hier entwickelten Verfahrens besteht darin, den Hamilton-Operator einer kontinuierlichen unitären Transformation zu unterziehen und ihn dadurch auf eine block-diagonale Form zu bringen,

$$H(l + \mathrm{d}l) = \mathrm{e}^{\eta \mathrm{d}l} H(l) \mathrm{e}^{-\eta \mathrm{d}l} \qquad (18.23)$$

was auf die Flussgleichung

$$\frac{\mathrm{d}H(l)}{\mathrm{d}l} = [\eta(l), H(l)] \qquad (18.24)$$

mit dem antiunitären Generator η der unitären Transformation führt. Wir bezeichnen l als den Flussparameter. Wir starten bei $l = 0$ mit dem Ausgangs-Hamilton-Operator $H(0) = H$ und erwarten, dass $H(\infty)$ block-diagonal ist. Dazu zerlegt man den Hamilton-Operator in den blockdiagonalen Anteil H^{d} und den außerdiagonalen Anteil H^{r}. Wir geben nun ein Argument, dass dann

$$\eta(l) = [H(l), H^{\mathrm{r}}(l)] \qquad (18.25)$$

eine gute Wahl für den Generator ist. Dazu betrachten wir

$$\frac{\mathrm{d}}{2\mathrm{d}l} \mathrm{tr}((H^{\mathrm{r}})^2) = \mathrm{tr}(H^{\mathrm{r}} \frac{\mathrm{d}H^{\mathrm{r}}}{\mathrm{d}l}) = \mathrm{tr}(H^{\mathrm{r}} \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}l}), \qquad (18.26)$$

da die Spur des Produktes aus H^{r} und H^{d} verschwindet. Das Produkt ist nämlich außerdiagonal. Dann folgt weiter

$$\frac{\mathrm{d}}{2\mathrm{d}l} \mathrm{tr}((H^{\mathrm{r}})^2) = \mathrm{tr}(H^{\mathrm{r}}(\eta H - H\eta)) = \mathrm{tr}(\eta(HH^{\mathrm{r}} - H^{\mathrm{r}}H)). \qquad (18.27)$$

Wählen wir nun $\eta = [H, H^{\mathrm{r}}]$, so folgt, da η antihermitesch ist,

$$\frac{\mathrm{d}}{2\mathrm{d}l} \mathrm{tr}((H^{\mathrm{r}})^2) = \mathrm{tr}(\eta^2) = -\mathrm{tr}(\eta^\dagger \eta) \le 0. \qquad (18.28)$$

Die Außerdiagonal-Elemente nehmen also ab bis $\eta = 0$, also H^{d} mit H^{r} kommutiert. Falls wir als H^{d} nur den Diagonal-Anteil behalten, so verschwindet η erst, wenn es nur noch Außerdiagonal-Elemente gibt zwischen Zuständen, die bezüglich H^{d} entartet sind.

Wir wollen dieses Schema jetzt auf die Elimination der Elektron-Phonon-Wechselwirkung anwenden und bezeichnen als außerdiagonal die Anteile, die die Anzahl der Phononen verändern. Daher ist die Elektron-Phonon-Wechselwirkung der Außerdiagonal-Anteil,

$$H^{\mathrm{r}} = H_{\mathrm{el-ph}} = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k}} M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} : (c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} + c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a^\dagger_{\mathbf{q}}) : \tag{18.29}$$

und der Diagonal-Anteil besteht aus H_0 und der effektiven Zweiteilchen-Wechselwirkung, die während des Flusses entsteht.

$$\begin{aligned} H^{\mathrm{d}} &= H_0 + V_{\mathrm{eff}}, && (18.30)\\ H_0 &= \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathrm{q}} : a^\dagger_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} : + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} : + E_0, && (18.31)\\ V_{\mathrm{eff}} &= \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'} : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} : && (18.32) \end{aligned}$$

Dabei wird V_{eff} von Ordnung M^2 sein. Höhere Ordnungen vernachlässigen wir, genau so wie bei Fröhlich. Wir bestimmen zunächst

$$\begin{aligned} \eta = [H^{\mathrm{d}}, H^{\mathrm{r}}] &= [H_0, H^{\mathrm{r}}] + O(M^3) = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s} \eta_{\mathbf{q},\mathbf{k}} : (c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} - c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a^\dagger_{\mathbf{q}}) :, && (18.33)\\ \eta_{\mathbf{q},\mathbf{k}} &= (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) M_{\mathbf{q},\mathbf{k}}. && (18.34) \end{aligned}$$

Wir setzen diesen Ausdruck nun in die Flussgleichung

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}l} = [\eta, H] = [\eta, H_0 + H^{\mathrm{r}}] + O(M^3) \tag{18.35}$$

ein und finden zunächst

$$[\eta, H_0] = -\sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} : (c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} + c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a^\dagger_{\mathbf{q}}) :, \tag{18.36}$$

woraus die Flussgleichung für die Elektron-Phonon-Kopplung folgt

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathbf{q},\mathbf{k}}}{\mathrm{d}l} = -(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} \tag{18.37}$$

mit der Lösung

$$M_{\mathbf{q},\mathbf{k}}(l) = \mathrm{e}^{-(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 l} M_{\mathbf{q}}. \tag{18.38}$$

Nun betrachten wir noch

$$[\eta, H^{\mathrm{r}}] = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} (M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{q},\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + M_{-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}} \eta_{-\mathbf{q},\mathbf{k}'}) : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} : . \tag{18.39}$$

Dabei haben wir Terme von anderer Form, wie nach (18.16) aufgeführt, weggelassen und erhalten damit die Flussgleichung für das effektive Potential

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}V_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'}(l)}{\mathrm{d}l} &= M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{q},\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + M_{-\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}} \eta_{-\mathbf{q},\mathbf{k}'} \\ = M^2_{\mathbf{q}}(0) \quad &\times \quad \Big((\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}) \mathrm{e}^{-\left((\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})^2\right) l} \\ &+ (\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{q}}) \mathrm{e}^{-\left((\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{q}})^2\right) l} \Big), \qquad (18.40) \end{aligned}$$

woraus dann

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\infty) = M^2_{\mathbf{q}} \quad \times \quad &\Bigg(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}})^2} \\ &+ \frac{\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{q}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{q}})^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})^2} \Bigg) \qquad (18.41) \end{aligned}$$

folgt. Wir stellen einen kurzen Vergleich mit dem Ergebnis von Fröhlich an:
a) Die Wechselwirkung, die sich mit den Flussgleichungen ergibt, ist weniger singulär. Im Nenner von (18.41) steht die Summe zweier Quadrate, in dem von (18.22) die Differenz zweier Quadrate.
b) Für energie-erhaltende Prozesse (on-shell), das heißt für $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}'}$ erhält man mit beiden Verfahren das gleiche Ergebnis.
c) Für die Supraleitung sind die Prozesse mit $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ wichtig (Elektronen-Paare mit Gesamt-Impuls $\mathbf{0}$ wechselwirken). Dort erhält man

$$V^{\mathrm{Fr}}_{\mathbf{q},\mathbf{k},-\mathbf{k}} = -\frac{M^2_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}}{\omega^2_{\mathbf{q}} - (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})^2}, \quad V^{\mathrm{eff}}_{\mathbf{q},\mathbf{k},-\mathbf{k}} = -\frac{M^2_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}}{\omega^2_{\mathbf{q}} + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})^2}. \tag{18.42}$$

Das Flussgleichungs-Potential ist nicht singulär und stets attraktiv.
d) In der unitären Transformation hat man folgenden Unterschied: Aus

$$H(l) = U(l)HU^\dagger(l), \quad \frac{\mathrm{d}H(l)}{\mathrm{d}l} = [\eta(l), H(l)] \tag{18.43}$$

schließt man auf

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}l}HU^\dagger + UH\frac{\mathrm{d}U^\dagger}{\mathrm{d}l} = \eta UHU^\dagger - UHU^\dagger\eta \tag{18.44}$$

und damit folgt für $U(l)$ die Flussgleichung

$$\frac{\mathrm{d}U(l)}{\mathrm{d}l} = \eta(l)U(l) \tag{18.45}$$

mit der Anfangsbedingung $U(0) = 1$. Durch Iteration findet man

$$U(l) = 1 + \int_0^l \mathrm{d}l'\eta(l') + \int_0^l \mathrm{d}l'' \int_0^{l''} \mathrm{d}l'\eta(l'')\eta(l') + ... \tag{18.46}$$

Bilden wir den Logarithmus

$$-S = \ln U(\infty) = \int_0^\infty \mathrm{d}l'\eta(l') + \frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}l'' \int_0^{l''} \mathrm{d}l'[\eta(l''), \eta(l')] + ..., \tag{18.47}$$

so kann man leicht nachrechnen, dass der Term in Ordnung η mit dem Fröhlichschen $-S^{\mathrm{Fr}}$ übereinstimmt. Der zweite Term mit dem Kommutator ergibt den Unterschied zwischen beiden Transformationen. Generell haben wir den Eindruck gewonnen, dass das permanente Anpassen des Generators $\eta(l)$ an die jeweilige Wechselwirkung $H(l)$ zu weniger singulären Wechselwirkungen führt als die einmalige wie sie von Fröhlich verwendet wurde. Man kann sich fragen, wieso zwei Störungsrechnungen unterschiedliche Ergebnisse liefern können. Dies liegt daran, dass wir nicht diagonalisieren, sondern block-diagonalisieren. Die Blockdiagonalisierung ist aber nicht eindeutig festgelegt. Vielmehr können sich verschiedene derartige Blockdiagonalisierungen noch durch unitäre Transformationen innerhalb der Blöcke unterscheiden.