31 Pfadintegrale für Bosonen

Wir wollen nun betrachten, wie man die Zustandssumme $Z = \mathrm{tr} \mathrm{e}^{-\beta H}$ eines bosonischen Systems mittels Pfad-Integralen darstellen kann.

31.a Kohärente Zustände und Zustandssumme

Es sei $|c\rangle$ eine Überlagerung von Zuständen unterschiedlicher Besetzungszahl eines Bosons (Erzeuger $b^\dagger$ und Vernichter b), die die Gleichung

$$b|c\rangle = c|c\rangle \tag{31.1}$$

erfüllt, wobei c eine komplexe Zahl ist. Die Lösung findet man mit

$$b(b^\dagger)^n|0\rangle = n(b^\dagger)^{n-1}|0\rangle \tag{31.2}$$

als

$$|c\rangle = \exp(cb^\dagger)|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} c^n (b^\dagger)^n |0\rangle. \tag{31.3}$$

Man bezeichnet solche Zustände als kohärente Zustände. Man erhält für die Matrixelemente

$$\langle c'|c\rangle = \sum_{n,m} \frac{1}{n!}(c'^*)^n \frac{1}{m!} c^m \underbrace{\langle 0|b^n(b^\dagger)^m|0\rangle}_{\delta_{n,m} m!} = \exp(c'^* c). \tag{31.4}$$

Wir behaupten nun, dass sich die Identität schreiben lässt als

$$\mathbb{1} = \int \mathrm{d}^2 c |c\rangle\langle c| \mathrm{e}^{-c^* c}, \tag{31.5}$$

wobei wir unter $\mathrm{d}^2 c$ die Integration über c in der gesamten komplexen Ebene meinen,

$$\mathrm{d}^2 c = \frac{\mathrm{d}\Re c \mathrm{d}\Im c}{\pi} = \frac{\mathrm{d}c\mathrm{d}c^*}{2\pi \mathrm{i}} = \frac{r\mathrm{d}r\mathrm{d}\phi}{\pi} \tag{31.6}$$

mit $c = r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$. Denn mit den normierten n- und m-Teilchenzuständen $|n\rangle$ und $|m\rangle$ folgt

$$\begin{aligned} \langle n|\mathbb{1}|m\rangle &= \int \mathrm{d}^2 c \underbrace{\langle n|c\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{n!}} c^n} \underbrace{\langle c|m\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{m!}} (c^*)^m} \mathrm{e}^{-c^* c} \\ &= \int \frac{r\mathrm{d}r\mathrm{d}\phi}{\pi} \frac{1}{\sqrt{n!m!}} r^{n+m} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-m)\phi} \mathrm{e}^{-r^2} = \frac{\delta_{n,m}}{n!} \int \mathrm{d}r^2 (r^2)^n \mathrm{e}^{-r^2} = \delta_{n,m}. \end{aligned} \tag{31.7}$$

Wir bestimmen nun das Matrix-Element

$$\begin{aligned} \langle c'|(b^\dagger)^k b^l|c\rangle &= \sum_{m,n} \frac{(c'^*)^m c^n}{m!n!} \underbrace{\langle 0|b^m(b^\dagger)^k}_{\frac{m!}{(m-k)!}\langle 0|b^{m-k}} \underbrace{b^l(b^\dagger)^n|0\rangle}_{(b^\dagger)^{n-l}|0\rangle \frac{n!}{(n-l)!}} \\ &= \sum_{m',n'} \frac{(c'^*)^{m'+k} c^{n'+l}}{m'!n'!} \underbrace{\langle 0|b^{m'}(b^\dagger)^{n'}|0\rangle}_{\delta_{m',n'} m'!} = (c'^*)^k c^l \mathrm{e}^{c'^* c}. \end{aligned} \tag{31.8}$$

Hieraus folgt die für das Weitere wichtige Identität

$$\langle c'|A(b^\dagger, b)|c\rangle = \mathrm{e}^{c'^* c} A(c'^*, c), \tag{31.9}$$

wobei der Operator $A(b^\dagger, b)$ normalgeordnet sein muss, dass heißt die Erzeuger $b^\dagger$ müssen links von den Vernichtern b stehen.

Dies können wir nun zur Darstellung der Zustandssumme verwenden

$$\begin{aligned}
Z &= \mathrm{tr}\mathrm{e}^{-\beta H} = \lim_{n\to\infty} \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta H/n})^n \\
&= \lim \prod_{l=1}^{n} \int \mathrm{d}^2 c_l \langle c_n|\mathrm{e}^{-\beta H/n}|c_{n-1}\rangle\langle c_{n-1}|\mathrm{e}^{-\beta H/n}|c_{n-2}\rangle ... \langle c_1|\mathrm{e}^{-\beta H/n}|c_n\rangle \mathrm{e}^{-c_n^* c_n - ... - c_1^* c_1} \\
&= \lim \prod_l \mathrm{d}^2 c_l \exp(\sum_l c_l^* c_{l-1} - \sum_l c_l^* c_l) \prod_l (1 - \beta H(c_l^*, c_{l-1})/n) \\
&= \lim_{n\to\infty} \prod_l \int \mathrm{d}^2 c_l \exp \sum_l (c_l^* c_{l-1} - c_l^* c_l - \beta H(c_l^*, c_{l-1})/n).
\end{aligned} \tag{31.10}$$

Dabei ist $c_0 \equiv c_n$ zu verstehen. Wir können also die Zustandssumme in der Form

$$Z = \int \mathrm{D}^2 c \exp(-S), \quad S = \sum_l ((c_l^* c_l - c_l^* c_{l-1} + \beta H(c_l^*, c_{l-1})/n)) \tag{31.11}$$

schreiben.

Wir wollen diesen Ausdruck nun für ein ideales Gas auswerten. Es sei

$$H_0 = (\epsilon - \mu) b^\dagger b. \tag{31.12}$$

Dann folgt für die Zustandssumme

$$Z_0 = \prod_l \int \mathrm{d}^2 c_l \exp(-\sum_l c_l^* c_l + \sum_l c_l^* c_{l-1} a) \text{ mit } a = 1 - \beta(\epsilon - \mu)/n. \tag{31.13}$$

Mit

$$\prod_l \int \mathrm{d}^2 c_l \exp(-c^\dagger K c) = \frac{1}{\det K} \tag{31.14}$$

erhalten wir

$$Z_0 = 1/\begin{vmatrix} 1 & -a & & & \\ & 1 & -a & & \\ & & 1 & -a & \\ & & & \ddots & \\ -a & & & & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{1 - a^n} = \frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)}}, \tag{31.15}$$

was auch mit dem bekannten Ergebnis $Z_0 = 1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)} + \mathrm{e}^{-2\beta(\epsilon-\mu)} + ...$ übereinstimmt.

31.b Kontinuums-Limes

Wir betrachten noch den Kontinuums-Limes. In diesem führen wir $c(\tau)$ ein durch

$$c_l = c(\tau_l), \quad \tau_l = \frac{l}{n}\beta, \quad \Delta\tau = \frac{\beta}{n} \tag{31.16}$$

und führen in der Wirkung S in (31.10) den Kontinuums-Limes $n \to \infty$, $\Delta\tau \to 0$ durch und erhalten

$$S = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau (c^*(\tau)\dot{c}(\tau) + H(c^*(\tau), c(\tau))). \tag{31.17}$$

Wir transformieren bezüglich der imaginären Zeit in den Frequenz-Raum

$$c(\tau) = k \sum_j c(\omega_j) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_j \tau} \tag{31.18}$$

mit

$$\beta\omega_j = 2\pi j, \quad \omega_j = 2j\pi k_\mathrm{B} T, \tag{31.19}$$

womit dann die Randbedingung $c_n = c(\beta) = c_0 = c(0)$ erfüllt ist. Die Frequenzen ω_j bezeichnet man als Matsubara-Frequenzen. k ist eine Konstante, über die wir noch in verschiedener Weise verfügen werden. Damit erhält man dann umgekehrt

$$c(\omega_j) = \frac{1}{k\beta} \int_0^\beta \mathrm{d}\tau c(\tau) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_j \tau} \tag{31.20}$$

oder solange man noch mit diskreten $c(\tau_l)$ arbeitet,

$$c(\omega_j) = \frac{1}{kn} \sum_l c(\tau_l) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_j \tau_l} \tag{31.21}$$

Wir stellen nun die Wirkung S durch die $c(\omega)$ dar. In der Kontinuums-Formulierung erhalten wir

$$S = k^2 \beta \sum_j (-\mathrm{i}\omega_j + \epsilon - \mu) c^*(\omega_j) c(\omega_j), \tag{31.22}$$

in der diskreten

$$S = k^2 n \sum_j (1 - a\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}j/n}) c^*(\omega_j) c(\omega_j). \tag{31.23}$$

Wir wählen nun $k = 1/\sqrt{n}$. Dann ist die Transformation unitär und die Normierung von Z ungeändert. Im diskreten Fall erhalten wir hieraus

$$Z_{\mathrm{disk}} = \prod_j \frac{1}{1 - a\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}j/n}} = \frac{1}{1 - a^n} \tag{31.24}$$

wie vorher. Wir wollen nun für die Kontinuums-Formulierung j nur von $-(n-1)/2$ bis $(n-1)/2$ laufen lassen, so dass wir die gleiche Anzahl von Feldern $c(\omega_j)$ haben wie für die diskrete. Dann erhalten wir

$$Z_{\mathrm{kont}} = \prod_{j=-\frac{n-1}{2}}^{\frac{n-1}{2}} \frac{n}{-2\pi\mathrm{i}j + \beta(\epsilon - \mu)} = \frac{n^n}{\prod_{j=1}^{\frac{n-1}{2}} (2\pi j)^2} \frac{1}{\beta(\epsilon - \mu) \prod_{j \neq 0} (1 + \left(\frac{\beta(\epsilon-\mu)}{2\pi j}\right)^2)}, \tag{31.25}$$

was im Limes großer n

$$Z_{\mathrm{kont}} \sim \left(\frac{\mathrm{e}}{\pi}\right)^n \frac{1}{2\sinh(\frac{\beta(\epsilon-\mu)}{2})} = \left(\frac{\mathrm{e}}{\pi}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{\beta(\epsilon-\mu)}{2}} Z_{\mathrm{disk}} \tag{31.26}$$

ergibt. Der Faktor $(\mathrm{e}/\pi)^n$ rührt daher, dass die Ersetzung von $1 - \exp(\mathrm{i}\omega_j \beta/n)$ durch $-\mathrm{i}\omega_j \beta/n$ für Werte j in der Größenordnung $n/2$ nicht mehr gut ist. Sobald aber $\omega_j \gg \epsilon - \mu$ ist die Abweichung durch $\epsilon - \mu$ vernachlässigbar, so dass nur ein von $\epsilon - \mu$ unabhängiger Faktor zwischen Z_{kont} und Z_{disk} auftreten sollte. Tatsächlich findet man aber einen Faktor $\mathrm{e}^{-\frac{\beta(\epsilon-\mu)}{2}}$. Woher rührt er?

Der Grund liegt darin, dass wir $c^*(\tau_l)c(\tau_l - \Delta\tau) \hat{=} b^\dagger b$ durch $c^*(\tau_l)c(\tau_l)$ im Hamilton-Operator ersetzt haben. Nun entspricht aber $c^*(\tau_l)c(\tau_l + \Delta\tau) \hat{=} bb^\dagger = b^\dagger b + 1$. Das heißt $c^*(\tau)c(\tau')$ ist an der Stelle $\tau' = \tau$ diskontinuierlich. Da wir die Funktionen mittels der Fourier-Transformierten dargestellt haben, ergibt die Rücktransformation den Mittelwert aus $\tau' = \tau + 0$ und $\tau' = \tau - 0$, das heißt $c^*(\tau_l)c(\tau_l) \hat{=} b^\dagger b + \frac{1}{2}$. Wir müssen daher entweder in einer störungstheoretischen Entwicklung stets den Vernichter $c(\tau - 0)$ verwenden oder $b^\dagger b$ durch $c^* c - \frac{1}{2}$ ersetzen. In letzterem Fall bedeutet das, dass man eine Normalordnung mit $\langle b^\dagger b \rangle = \frac{1}{2}$ einführen muss und in diesem so normal-geordneten Hamilton-Operator $b^\dagger \hat{=} c^*$ und $b \hat{=} c$ ersetzt. Insbesondere folgt dann auch $b^{\dagger 2} b \hat{=} c^{*2} c - c^*$, $b^\dagger b^2 \hat{=} c^* c^2 - c$ und $b^{\dagger 2} b^2 \hat{=} c^{*2} c^2 - 2c^* c + \frac{1}{2}$. Siehe auch Gollisch und Wetterich cond-mat/0008273.

Für unser obiges Beispiel bedeutet das, dass wir zu S noch einen Term $-\frac{\beta(\epsilon-\mu)}{2}$ hinzuzufügen haben, was dann

$$Z = \mathrm{e}^{\beta(\epsilon-\mu)/2} Z_{\mathrm{kont}} = \left(\frac{\mathrm{e}}{\pi}\right)^n Z_{\mathrm{disk}} \tag{31.27}$$

ergibt und wir damit abgesehen von der Gesamt-Normierung Übereinstimmung mit dem diskreten Limes erhalten.

31.c Korrelationen

Wir fügen nun zur Wirkung S wieder Quellterme hinzu

$$Z(J^*,J) = \int \mathrm{D}^2 c \exp(-S + J^\dagger c + c^\dagger J), \quad J^\dagger c = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau J^*(\tau) c(\tau) \tag{31.28}$$

und finden (J und J^* können unabhängig angenommen werden)

$$\frac{\delta Z}{\delta J^*(\tau)} = \int \mathrm{D}^2 c\, c(\tau) \exp(-S + J^\dagger c + c^\dagger J), \tag{31.29}$$

$$\frac{\delta Z}{\delta J(\tau)} = \int \mathrm{D}^2 c\, c^*(\tau) \exp(-S + J^\dagger c + c^\dagger J). \tag{31.30}$$

und insbesondere

$$\left.\frac{\delta^2 Z}{\delta J(\tau')\delta J^*(\tau)}\right|_{J=J^*=0} = \int \mathrm{D}^2 c\, c^*(\tau') c(\tau) \exp(-S) = Z(0)\langle c^*(\tau') c(\tau)\rangle. \tag{31.31}$$

Gehen wir auf die diskrete Formulierung (31.10) zurück, so sehen wir, dass

$$\int \mathrm{D}^2 c\, c^*(\tau') c(\tau) \exp(-S) = \begin{cases} \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-(\beta-\tau')H} b^\dagger \mathrm{e}^{(\tau-\tau')H} b \mathrm{e}^{-\tau H}) & \tau' > \tau \\ \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-(\beta-\tau)H} b \mathrm{e}^{(\tau'-\tau)H} b^\dagger \mathrm{e}^{-\tau' H}) & \tau > \tau' \end{cases} \tag{31.32}$$

Man führt daher Operatoren

$$\tilde{b}(\tau) = \mathrm{e}^{\tau H} b^\dagger \mathrm{e}^{-\tau H}, \quad b(\tau) = \mathrm{e}^{\tau H} b \mathrm{e}^{-\tau H} \tag{31.33}$$

ein und hat damit

$$\left.\frac{\delta^2 Z}{\delta J(\tau')\delta J(\tau^*)}\right|_{J=J^*=0} = -Z(0) G(\tau,\tau') \tag{31.34}$$

mit (das Minuszeichen vor G ist Konvention)

$$-G(\tau,\tau') = \langle T_\tau(\tilde{b}(\tau') b(\tau))\rangle = \begin{cases} \langle \tilde{b}(\tau') b(\tau)\rangle & \tau < \tau' \\ \langle b(\tau)\tilde{b}(\tau')\rangle & \tau > \tau'. \end{cases} \tag{31.35}$$

Man nennt T_τ den Zeit-Ordnungs-Operator. Er bringt den Operator mit der größeren Zeit stets links vor den Operator mit der kleineren Zeit. Unter Verwendung der zyklischen Invarianz unter der Spur findet man

$$G(\tau,\tau') = G(\tau-\tau'). \tag{31.36}$$

Man hat also Translationsinvarianz in τ und man findet

$$G(\tau < 0) = G(\tau + \beta). \tag{31.37}$$

Weiterhin findet man die Limites

$$-G(+0) = \langle b b^\dagger\rangle = 1 + n, \quad -G(-0) = \langle b^\dagger b\rangle = n. \tag{31.38}$$

G ist also bei $\tau = 0$ unstetig, $G(+0) - G(-0) = -1$.

Wir führen nun zu G die Fourier-Transformierte ein

$$G(\tau) = k_{\mathrm{B}} T \sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_j \tau} G(\omega_j), \quad G(\omega_j) = \int_{\tau_0}^{\beta+\tau_0} \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_j \tau} G(\tau), \tag{31.39}$$

wobei wegen der Periodizität von $G(\tau)$ ein beliebiges τ_0 zwischen $-\beta$ und 0 gewählt werden kann.

Für ein freies Boson folgt mit

$$H_0 = (\epsilon - \mu) b^\dagger b, \quad \tilde{b}(\tau) = \mathrm{e}^{(\epsilon-\mu)\tau} b^\dagger, \quad b(\tau) = \mathrm{e}^{-(\epsilon-\mu)\tau} b \tag{31.40}$$

und daraus

$$-G_0(\tau) = \left\{ \begin{array}{cc} n\mathrm{e}^{-(\epsilon-\mu)\tau} & \tau < 0, \\ (1+n)\mathrm{e}^{-(\epsilon-\mu)\tau} & \tau > 0. \end{array} \right. \tag{31.41}$$

und

$$G_0(\omega_j) = -(1+n)\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{(\mathrm{i}\omega_j-\epsilon+\mu)\tau} = \frac{1}{\mathrm{i}\omega_j-\epsilon+\mu}. \tag{31.42}$$

Setzen wir jetzt

$$J^\dagger c + c^\dagger J = \sum_j (J_j^* c(\omega_j) + J_j c^*(\omega_j)), \tag{31.43}$$

so finden wir mit

$$S_0 = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau (c^*(\tau)\dot{c}(\tau) + (\epsilon-\mu)c^*(\tau)c(\tau) = \beta \sum_j (-\mathrm{i}\omega_j + \epsilon - \mu)c^*(\omega_j)c(\omega_j) \tag{31.44}$$

durch quadratische Ergänzung die Zustandssumme

$$Z_0(J^*,J) = Z_0(0,0)\exp\big(\sum_j \frac{J_j^* J_j}{\beta(\mathrm{i}\omega_j-\epsilon+\mu)}\big) = Z_0(0,0)\exp(k_\mathrm{B}T\sum_j J_j^* J_j G_0(\omega_j)). \tag{31.45}$$

Für allgemeines H können wir $G(\omega_j)$ umformen

$$\begin{aligned} G(\omega_j) &= k_\mathrm{B}T\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \int_0^\beta \mathrm{d}\tau' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_j(\tau-\tau')} G(\tau,\tau') \\ &= -k_\mathrm{B}T\int_0^\beta \mathrm{d}\tau \int_0^\beta \mathrm{d}\tau' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_j(\tau-\tau')} \langle c^*(\tau')c(\tau)\rangle \\ &= -\beta\langle c^*(\omega_j)c(\omega_j)\rangle, \end{aligned} \tag{31.46}$$

wobei wir in (31.18) jetzt $k=1$ wählen. Dies führt auf

$$Z(J^*,J) = \int \mathrm{D}^2 c \exp(-S + J^\dagger c + c^\dagger J) \tag{31.47}$$

mit

$$S = \int_0^\beta \mathrm{d}\tau (c^*(\tau)\dot{c}(\tau) + H(c^*(\tau),c(\tau))) = \beta\sum_j -\mathrm{i}\omega_j c^*(\omega_j)c(\omega_j) + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau H(c^*(\tau),c(\tau)). \tag{31.48}$$

Mit

$$H = \sum_{k,l} \frac{V^{(k,l)}}{k!l!} c^{*k} c^l \tag{31.49}$$

folgt

$$\int_0^\beta \mathrm{d}\tau H(c^*(\tau),c(\tau)) = \beta\sum_{k,l}\frac{V^{(k,l)}}{k!l!}\sum c^*(\omega_{j'_1})...c^*(\omega_{j'_k})c(\omega_{j_1})...c(\omega_{j_l})\delta_{\sum j'_i,\sum j_i}. \tag{31.50}$$

Dies ist jetzt wieder Ausgangspunkt einer Diagramm-Entwicklung. Dabei hat man jetzt Propagatoren $\langle c^* c\rangle_0 = -k_\mathrm{B}TG_0$ und Vertices $-\beta V$. An jedem Vertex hat man auf Grund der zeitlichen Translations-Invarianz eine δ-Funktion in den Matsubara-Frequenzen.

Wir haben bisher nur einen Bosonen-Freiheitsgrad betrachtet. Alle Überlegungen lassen sich analog für viele Bosonen-Freiheitsgrade durchführen. Man muss dann nur die Freiheitsgrade ($b^\dagger$, b, c^*, c) von den entsprechenden Orten oder Impulsen abhängen lassen.

Wir sehen hier auch, warum in der Regel bei kritischen Phänomenen die Quantennatur des Systems nicht berücksichtigt werden muss. Für $\omega_j \neq 0$ hat man im Nenner des Propagators ein zusätzliches iω_j, das verhindert, dass der Propagator divergiert. Daher tragen diese Matsubara-Frequenzen nicht wesentlich zum kritischen Verhalten bei. Man kann sich diese Freiheitsgrade vielmehr ausintegriert denken. Dann bleibt nur noch eine Theorie mit der alleinigen Matsubara-Frequenz 0 übrig. Dies ist aber eine klassische Theorie. Geht allerdings die Temperatur gegen 0, dann gibt es auch kleine Matsubara-Frequenzen. Die zugehörigen Freiheitsgrade können dann wichtig werden. Man spricht dann von quantenkritischem Verhalten.