15 Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren kennen wir bereits von den Phononen. Sie waren das Vorbild für die Photonen- Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren der Quantenelektrodynamik. Fast zur gleichen Zeit stellte sich heraus, dass man sie auch für Teilchen, die durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben werden, verwenden kann. Tatsächlich nimmt durch ihre Verwendung der Hamilton-Operator eine wesentlich übersichtliche Form an. Ihre Verwendung erlaubt über die Schrödinger-Gleichung hinaus auch Prozesse zu beschreiben, bei denen die Anzahl der Teilchen nicht erhalten ist.

Es sei angemerkt, dass die Operatoren, die wir hier betrachten, eine (nicht-kommutative) Algebra bilden. Es gelten also Kommutativ- und Assoziativ-gesetz der Addition, das Assoziativ-Gesetz der Multiplikation und das Distributiv-Gesetz.

15.a Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Fermionen

Wir wollen nun die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Fermionen einführen. Hierzu gehen wir aus von einem vollständigen Satz orthonormierter Einteilchenfunktionen $\phi_i(q)$, wobei wir der Einfachheit halber Orts- und Spinfreiheitsgrad zu einer Variablen $q = (\mathbf{r}, s)$ zusammengefasst haben. Statt einer Orts- und Spinbasis kann man auch von einer anderen ausgehen. Tatsächlich wird die Basis, in der wir schließlich arbeiten, aus den Zuständen der Basis, die wir mit i gekennzeichnet haben, aufgebaut. Wir können nun die Slaterdeterminante aus N Teilchen schreiben als

$$|i_1, i_2, ...i_N\rangle \hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{i_1}(q_1) & \phi_{i_1}(q_2) & ... & \phi_{i_1}(q_N) \\ \phi_{i_2}(q_1) & \phi_{i_2}(q_2) & ... & \phi_{i_2}(q_N) \\ ... & ... & & ... \\ \phi_{i_N}(q_1) & \phi_{i_N}(q_2) & ... & \phi_{i_N}(q_N) \end{vmatrix}, \tag{15.1}$$

genauer $\langle q_1, q_2, ...q_N|i_1, i_2, ...i_N\rangle = |...|$. (Der Faktor $1/\sqrt{N!}$ verschwindet, wenn wir für die Definition von $|q_1, q_2, ...q_N\rangle$ die gleiche Konvention verwenden). Vertauschen wir die Zeilen der Nummern m und n, so ändert sich das Vorzeichen. Die Wellenfunktion ist antisymmetrisch

$$|i_1...i_m...i_n...i_N\rangle = -|i_1...i_n...i_m...i_N\rangle. \tag{15.2}$$

Im Folgenden benötigen wir noch eine Formel zur Bestimmung des Überlapps

$$\langle j_1, j_2...j_N|i_1, i_2...i_N\rangle = \frac{1}{N!} \int \mathrm{d}q_1\mathrm{d}q_2...\mathrm{d}q_N \det_{k,l}(\phi^*_{j_k}(q_l)) \det_{k,l}(\phi_{i_k}(q_l)). \tag{15.3}$$

Hierzu wollen wir beispielsweise zunächst die $\phi^*_{j_1}$-Integrale durchführen. Diese Funktion tritt für alle q_1, ... q_N auf. Wollen wir gerade über $\phi^*_{j_1}(q_l)$ integrieren, so können wir die Spalte l mit der Spalte 1 in beiden Determinanten vertauschen und dann die Integrations-Variable q_1 mit q_l vertauschen. Das ergibt N gleiche Beiträge und es bleibt

$$\langle j_1, j_2...j_N|i_1, i_2...i_N\rangle = \frac{1}{(N-1)!} \int \mathrm{d}q_1\mathrm{d}q_2...\mathrm{d}q_N \phi^*_{j_1}(q_1) \det_{k>1,l>1}(\phi^*_{j_k}(q_l)) \det_{k,l}(\phi_{i_k}(q_l)). \tag{15.4}$$

Wir führen jetzt die Integration über q_1 durch und erhalten

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_2...j_N|i_1, i_2...i_N\rangle &= \sum_m \delta_{j_1,i_m} \frac{(-)^{m-1}}{(N-1)!} \int \mathrm{d}q_2...\mathrm{d}q_N \det_{k>1,l>1}(\phi^*_{j_k}(q_l)) \det_{k\neq m,l>1}(\phi_{i_k}(q_l)) \\ &= \sum_m \delta_{j_1,i_m} (-)^{m-1} \langle j_2...j_N|i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle. \end{aligned} \tag{15.5}$$

Diese Gleichung kann iteriert werden und ergibt schließlich

$$\langle j_1, j_2...j_N|i_1, i_2...i_N\rangle = \det_{m,n}(\delta_{j_m,i_n}). \tag{15.6}$$

Wir bemerken, dass Zustände unterschiedlicher Teilchenzahl als orthogonal auf einander angesehen werden

$$\langle j_1, j_2...j_M | i_1, i_2...i_N \rangle = 0 \text{ für } M \neq N. \tag{15.7}$$

Die Rekursionsformel (15.5) bleibt (ohne den Zwischenschritt mit der q-Integration) gültig für Zustände unterschiedlicher Teilchenzahl. Für $N \neq M$ steht eben links und rechts 0

$$\langle j_1, j_2...j_M | i_1, i_2...i_N \rangle = \sum_m \delta_{j_1, i_m} (-)^{m-1} \langle j_2...j_M | i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N \rangle. \tag{15.8}$$

Wir definieren nun den Erzeugungs-Operator $c_i^\dagger$ durch seine Wirkung auf einen beliebigen Zustand

$$c_i^\dagger | i_1...i_N \rangle = | i, i_1...i_N \rangle. \tag{15.9}$$

Er fügt also dem N-Teilchenzustand ein weiteres Teilchen im Zustand i hinzu. Ist dieser Zustand bereits im N-Teilchenzustand besetzt, so ist das Ergebnis 0. Ein Zustand kann nicht zweimal besetzt werden. Bei Anwendung zweier Erzeugungs-Operatoren folgt

$$c_i^\dagger c_j^\dagger | i_1...i_N \rangle = | i, j, i_1...i_N \rangle = -| j, i, i_1...i_N \rangle = -c_j^\dagger c_i^\dagger | i_1...i_N \rangle. \tag{15.10}$$

Da dies bei Anwendung auf beliebige Zustände gilt, folgt generell für die Operatoren

$$c_i^\dagger c_j^\dagger = -c_j^\dagger c_i^\dagger, \tag{15.11}$$

das heißt, die Erzeugungs-Operatoren antikommutieren, was man auch

$$[c_i^\dagger, c_j^\dagger]_+ = c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger = 0 \tag{15.12}$$

schreibt. Wir kennzeichnen hier den Antikommutator mit $[.., ..]_+$. Auch die Bezeichnung $\{.., ..\}$ ist üblich.

Als nächstes führen wir Vernichtungs-Operatoren als hermitesch adjungierte Operatoren zu $c^\dagger$ ein

$$\begin{aligned} \langle j_1...j_M | c_i | i_1...i_N \rangle &= \langle i_1...i_N | c_i^\dagger | j_1...j_M \rangle^* = \langle i_1...i_N | i, j_1...j_M \rangle^* = \langle i, j_1...j_M | i_1...i_N \rangle \\ &= \begin{cases} \sum_m (-)^{m-1} \delta_{i,i_m} \langle j_1...j_M | i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N \rangle & N = M+1 \\ 0 & N \neq M+1 \end{cases} \end{aligned} \tag{15.13}$$

Damit folgt dann, dass c_i ein Teilchen mit der Quantenzahl i vernichtet,

$$c_i | i_1...i_N \rangle = \sum_m (-)^{m-1} \delta_{i,i_m} | i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N \rangle, \tag{15.14}$$

$$c_i | \text{vak} \rangle = 0. \tag{15.15}$$

Dabei ist $|\text{vak}\rangle$ der Vakuum-Zustand, also der Zustand ohne Teilchen. Wir finden weiter

$$\langle a | c_i c_j | b \rangle = \langle b | c_j^\dagger c_i^\dagger | a \rangle^* = -\langle b | c_i^\dagger c_j^\dagger | a \rangle^* = -\langle a | c_j c_i | b \rangle. \tag{15.16}$$

Daher antikommutieren auch c_i und c_j,

$$c_i c_j = -c_j c_i \text{ oder } [c_i, c_j]_+ = c_i c_j + c_j c_i = 0. \tag{15.17}$$

Wir werten noch $[c_i^\dagger, c_j]_+ = c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger$ aus

$$c_i^\dagger c_j | i_1...i_N \rangle = \sum_m (-)^{m-1} \delta_{j,i_m} | i i_1...i_{m-1} i_{m+1}...i_N \rangle, \tag{15.18}$$

$$c_j c_i^\dagger | i_1...i_N \rangle = c_j | i, i_1...i_N \rangle = \delta_{i,j} | i_1...i_N \rangle + \sum_m (-)^m \delta_{j,i_m} | i i_1...i_{m-1} i_{m+1}...i_N \rangle, \tag{15.19}$$

$$(c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger) | i_1...i_N \rangle = \delta_{i,j} | i_1...i_N \rangle. \tag{15.20}$$

Damit ergibt sich für den Antikommutator

$$[c_j, c_i^\dagger]_+ = c_j c_i^\dagger + c_i^\dagger c_j = \delta_{j,i}. \tag{15.21}$$

Häufig arbeitet man mit orthonormierten Zuständen. Dies ist aber nicht zwingend. Falls die Zustände nicht orthonormiert sind, folgt

$$\langle \mathrm{vak}|[c_j, c_i^\dagger]_+|\mathrm{vak}\rangle = \langle j|i\rangle, \tag{15.22}$$

zum Beispiel mit Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren im Orts-Raum

$$\psi^\dagger(\mathbf{r})|\mathrm{vak}\rangle = |\mathbf{r}\rangle, \quad [\psi(\mathbf{r}'), \psi^\dagger(\mathbf{r})]_+ = \delta^3(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \tag{15.23}$$

Allgemein ist dann in den obigen Formeln $\delta_{j,i}$ durch $\langle j|i\rangle$ zu ersetzen. Es gelten weiterhin die Anti-Kommutatoren (15.12 und 15.17).

15.b Einteilchen-Operatoren

Wir betrachten nochmal Gleichung (15.18). Vertauschen wir der Reihe nach i mit $i_1, ...i_m$, so finden wir

$$c_i^\dagger c_j |i_1...i_N\rangle = \sum_m \delta_{j,i_m} |i_1..i_{m-1}, i, i_{m+1}...i_N\rangle. \tag{15.24}$$

Falls sich also j unter den Quantenzahlen i_m befindet, so wird es durch i ersetzt. Wir betrachten nun den Teilchenzahl-Operator. Er lautet

$$\mathcal{N} = \sum_i c_i^\dagger c_i, \tag{15.25}$$

denn aus

$$c_i^\dagger c_i |i_1...i_N\rangle = (\delta_{i,i_1} + ...\delta_{i,i_N})|i_1...i_N\rangle \tag{15.26}$$

folgt nach Summation über i

$$\mathcal{N}|i_1...i_N\rangle = N|i_1...i_N\rangle. \tag{15.27}$$

Die Anwendung des Operators $\mathcal{N}$ multipliziert also den N-Teilchen-Zustand mit N.

Wir betrachten nun den allgemeinen Einteilchen-Operator $\mathcal{T}$. Er wirkt im Ortsraum im Allgemeinen als Integral-Kern auf die Wellenfunktion

$$\mathcal{T}|\Phi\rangle \mathrel{\hat{=}} \int \mathrm{d}^3r' t(r_1, r')\Phi(r', r_2...r_N) + \int \mathrm{d}^3r' t(r_2, r')\Phi(r_1, r'...r_N) + ... + \int \mathrm{d}^3r' t(r_N, r')\Phi(r_1, r_2...r'). \tag{15.28}$$

Mit der Transformation auf die Basis der i

$$t(r, r') = \sum_{i,j} t_{i,j}\phi_i(r)\phi_j^*(r') \Longleftrightarrow t_{i,j} = \int \mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\phi_i^*(\mathbf{r})t(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\phi_j(\mathbf{r}') \tag{15.29}$$

folgt zunächst für den Einteilchen-Zustand

$$\mathcal{T}|i_1\rangle \mathrel{\hat{=}} \sum_{i,j} t_{i,j}\phi_i(\mathbf{r}_1) \underbrace{\int \mathrm{d}^3r'\phi_j^*(\mathbf{r}')\phi_{i_1}(\mathbf{r}')}_{\delta_{j,i_1}} = \sum_i t_{i,i_1}\phi_i(\mathbf{r}_1) \tag{15.30}$$

und

$$\mathcal{T}|i_1\rangle = \sum_i t_{i,i_1}|i\rangle. \tag{15.31}$$

Für den N-Teilchen-Zustand gilt dann

$$\mathcal{T}|i_1...i_N\rangle = \sum_i t_{i,i_1}|i, i_2...i_N\rangle + \sum_i t_{i,i_2}|i_1, i, i_3...i_N\rangle + ..., \tag{15.32}$$

da der Operator auf jeden Einteilchenzustand wirkt, die anderen aber ungeändert lässt. Daraus schließen wir

$$\mathcal{T} = \sum_{i,j} t_{i,j} c_i^\dagger c_j, \tag{15.33}$$

denn der Einteilchen-Zustand j wird stets durch $\sum_i t_{i,j} i$ ersetzt.

Beispiele: Einteilchenpotential

$$t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r})\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Longleftrightarrow t_{i,j} = \int \mathrm{d}^3 r \phi_i^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}). \tag{15.34}$$

Kinetische Energie:

$$t_{i,j} = \int \mathrm{d}^3 r \phi_i^*(\mathbf{r})(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle)\phi_j(\mathbf{r}). \tag{15.35}$$

Verwenden wir speziell ebene Wellen

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{15.36}$$

so folgt

$$\mathcal{T} = \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k},s}, \tag{15.37}$$

wobei jetzt die Spin-Variable s (genauer die z-Komponente) wieder hinzugefügt wurde. Dies ist die kinetische Energie in der Impuls-Darstellung.

15.c Zwei-Teilchen-Operatoren

Die Coulomb-Wechselwirkung ist wie viele anderen Wechselwirkungen ein Zwei-Teilchen-Operator. Wir betrachten daher jetzt seine Darstellung durch Erzeuger und Vernichter . Die Wirkung eines Zwei-Teilchen-Operators $\mathcal{V}$ auf einen N-Teilchen-Zustand ist gegeben durch einen Integralkern V mit der Wirkung

$$\begin{aligned}
\langle r_1, r_2 ... r_N | \mathcal{V} | \Phi \rangle &= \int \mathrm{d}^3 r' \mathrm{d}^3 r'' V(r_1, r_2, r', r'') \Phi(r', r'', r_3 ... r_N) + ... \\
&= \sum_{i<j} \int \mathrm{d}^3 r' \mathrm{d}^3 r'' V(r_i, r_j, r', r'') \Phi(... r_{i-1}, r', r_{i+1} ... r_{j-1}, r'', r_{j+1} ...)
\end{aligned} \tag{15.38}$$

Wir stellen nun V in der Basis der i dar

$$V(r_1, r_2, r', r'') = \sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} \phi_i(r_1) \phi_j(r_2) \phi_{i'}^*(r') \phi_{j'}^*(r''), \tag{15.39}$$

dann folgt

$$\begin{aligned}
\langle r_1, r_2 | \mathcal{V} | i_1, i_2 \rangle &= \int \mathrm{d}^3 r' \mathrm{d}^3 r'' \sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} \phi_i(r_1) \phi_j(r_2) \phi_{i'}^*(r') \phi_{j'}^*(r'') \\
&\times \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{i_1}(r') \phi_{i_2}(r'') - \phi_{i_2}(r') \phi_{i_1}(r'')) \\
&= \sum_{i,j} (V_{i,j,i_1,i_2} - V_{i,j,i_2,i_1}) \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_i(r_1) \phi_j(r_2) = \sum_{ij} V_{i,j,i_1,i_2} \langle r_1, r_2 | i, j \rangle.
\end{aligned} \tag{15.40}$$

Das heißt für den Zwei-Teilchen-Zustand gilt

$$\mathcal{V} | i_1, i_2 \rangle = \sum_{i,j} V_{i,j,i_1,i_2} | i, j \rangle. \tag{15.41}$$

Dementsprechend ergibt die Wirkung von $\mathcal{V}$ auf den N-Teilchenzustand eine Überlagerung der Anwendung der Zweiteilchen-Wechselwirkung auf alle Paare, wobei die übrigen Zustände unverändert bleiben,

$$\mathcal{V}|i_1...i_N\rangle = \sum_{m<n}\sum_{i,j} V_{i,j,i_m,i_n}|...i_m \to i...i_n \to j...\rangle. \tag{15.42}$$

Diese Operation wird durch Operatoren $c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}$ bewirkt. Zum Nachweis berechnen wir mittels (15.18)

$$\begin{aligned} c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'}|i_1...i_N\rangle &= c_i^\dagger c_{i'} \sum_n \delta_{j',i_n}|...i_n \to j...\rangle \\ &= \delta_{j,i'} \sum_n \delta_{j',i_n}|...i_n \to i...\rangle \\ &+ \sum_{m\neq n} \delta_{j',i_n}\delta_{i',i_m}|...i_m \to i...i_n \to j...\rangle. \end{aligned} \tag{15.43}$$

Der Term in der zweiten Zeile kann geschrieben werden

$$\delta_{j,i'} \sum_n \delta_{j',i_n}|...i_n \to i...\rangle = [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_i^\dagger c_{j'}|i_1...i_N\rangle. \tag{15.44}$$

Bringen wir ihn auf die linke Seite der Gleichung, so bleibt dort vor dem Zustand $|i_1...i_N\rangle$ der Operator

$$c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'} - [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_i^\dagger c_{j'} = c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'} - c_i^\dagger [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_{j'} = -c_i^\dagger c_j^\dagger c_{i'} c_{j'} = c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'} \tag{15.45}$$

und damit

$$\begin{aligned} &\sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}|i_1...i_N\rangle \\ &= \sum_{m<n}\sum_{i,j} V_{i,j,i_m,i_n}|...i_m \to i...i_n \to j...\rangle. + \sum_{n<m}\sum_{i,j} V_{i,j,i_m,i_n}|...i_n \to j...i_m \to i...\rangle, \end{aligned} \tag{15.46}$$

wobei wir explizit die beiden möglichen Reihenfolgen von m und n berücksichtigt haben. Wir können nun in der zweiten Summe m mit n und i mit j vertauschen. Dann ist die letzte Summe ebenfalls eine mit $m < n$, das ket ist das gleiche wie in der vorhergehenden Summe und aus V_{i,j,i_m,i_n} wird durch diese Vertauschung V_{j,i,i_n,i_m}. Generell ist aber wegen der Gleichheit (Ununterscheidbarkeit) der Teilchen $V_{i,j,i_m,i_n} = V_{j,i,i_n,i_m}$. Daher stimmen die letzte und die vorletzte Summe überein und wir haben

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}. \tag{15.47}$$

Beachten Sie den Faktor 1/2 und die Reihenfolge der Indices. Der Faktor 1/2 rührt daher, dass sowohl der Term $V_{i,j,i',j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}$ als auch der Term $V_{j,i,j',i'} c_j^\dagger c_i^\dagger c_{i'} c_{j'}$ das ket $|i'j'\rangle$ in das ket $|ij\rangle$ überführt. Diese Doppelzählung wird durch den Faktor 1/2 korrigiert.

15.d Lokales Potential

Als Beispiel betrachten wir ein lokales Potential

$$V(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \mathbf{r}'_1, s'_1, \mathbf{r}'_2, s'_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)\delta^3(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2)\delta_{s_1,s'_1}\delta_{s_2,s'_2}. \tag{15.48}$$

Stellen wir es in der Impuls-Darstellung dar, so finden wir

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}_1,s_1,\mathbf{k}_2,s_2,\mathbf{k}'_1,s'_1,\mathbf{k}'_2,s'_2} &= \delta_{s_1,s'_1}\delta_{s_2,s'_2}\int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2 \phi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1)\phi^*_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\phi_{\mathbf{k}'_2}(\mathbf{r}_2)\phi_{\mathbf{k}'_1}(\mathbf{r}_1) \\ &= \delta_{s_1,s'_1}\delta_{s_2,s'_2}\frac{1}{V_{\mathrm{P}}^2}\int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'_1-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}_1+\mathrm{i}(\mathbf{k}'_2-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}_2}V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \end{aligned} \tag{15.49}$$

Die Exponential-Funktion können wir auch

$$e^{i(\mathbf{k}'_1-\mathbf{k}_1)\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)+i(\mathbf{k}'_2-\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1+\mathbf{k}'_1)\cdot\mathbf{r}_2} \tag{15.50}$$

schreiben. Führen wir nun statt $\mathbf{r}_1$ und $\mathbf{r}_2$ als unabhängige Variable $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ und $\mathbf{r}_2$ ein, so ergibt die Integration über $\mathbf{r}_2$ gerade $V_P\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2}$. In der δ-Funktion steckt die Impuls-Erhaltung, der Impuls $\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2$ der beiden Teilchen wird neu in $\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2$ aufgeteilt. Dabei bezeichnet man

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1 = -(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2) \tag{15.51}$$

als den Impuls-Übertrag. Das Matrix-Element ergibt sich dann zu

$$V_{\mathbf{k}_1,s_1,\mathbf{k}_2,s_2,\mathbf{k}'_1,s'_1,\mathbf{k}'_2,s'_2} = \delta_{s_1,s'_1}\delta_{s_2,s'_2}\frac{1}{V_P}V(\mathbf{q})\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2}, \quad V(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r}). \tag{15.52}$$

$V(\mathbf{q})$ ist also die Fourier-Transformierte des lokalen Potentials, das sich

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2V_P}\sum_{k_1,k_2,q,s_1,s_2} V(\mathbf{q})c^\dagger_{\mathbf{k}_1,s_1}c^\dagger_{\mathbf{k}_2,s_2}c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}. \tag{15.53}$$

schreiben lässt. Speziell für die Berechnung für das Coulomb-Potential gehen wir aus von einem abgeschirmten Coulomb-Potential (Yukawa-Potential) $V(r) = \frac{e^2}{r}e^{-\lambda r}$ und finden

$$\begin{aligned} V(q) &= e^2\int d^3r\frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\lambda r}}{r} = e^2\int d\Omega\int_0^\infty r dr e^{i(q\cos\theta-\lambda)r} = e^2\int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^1 d\cos\theta\frac{1}{(\lambda-iq\cos\theta)^2} \\ &= 2\pi e^2\frac{1}{iq}\left(\frac{1}{\lambda-iq}-\frac{1}{\lambda+iq}\right) = \frac{4\pi e^2}{\lambda^2+q^2}, \end{aligned} \tag{15.54}$$

was für $\lambda = 0$ den Limes des Coulomb-Potentials liefert.

15.e Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Bosonen

Wir werden uns hier vorwiegend mit Elektronen und Phononen befassen. Für letztere kennen wir bereits die Erzeuger und Vernichter. Es stellt sich heraus, dass für bosonische Teilchen die gleichen Beziehungen für Erzeuger und Vernichter gelten wir für Phononen. Wir wollen diese bosonischen Erzeuger und Vernichter hier in Analogie zu denen für Fermionen einführen. Zunächst möchte ich die fermionische Determinante (15.1) in etwas anderer Form schreiben

$$\begin{aligned} |i_1, i_2 ... i_N\rangle &\hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-)^P\phi_{i_1}(q_{P1})\phi_{i_2}(q_{P2})...\phi_{i_N}(q_{PN}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-)^P\phi_{i_{P1}}(q_1)\phi_{i_{P2}}(q_2)...\phi_{i_{PN}}(q_N). \end{aligned} \tag{15.55}$$

Dabei läuft P über alle $N!$ Permutationen der Zahlen $1, 2...N$. $(-)^P$ ist $+1$ oder -1 je nachdem, ob P eine gerade oder ungerade Permutation ist. Es hängt also davon ab, ob man die Permutation durch eine gerade oder ungerade Anzahl von Transpositionen erhält. Eine Transposition ist der Austausch von zwei Zahlen der Zahlen 1 bis N. Die aus (1,2,3) entstehenden Permutationen (1,2,3), (2,3,1) und (3,1,2) sind gerade, während (1,3,2), (2,1,3) und (3,2,1) ungerade sind. Unter Pi verstehen wir die Zahl, die durch die jeweilige Permutation aus i entsteht. So ergibt die Permutation (1,2,3)→(2,1,3) zum Beispiel $P1 = 2, P2 = 1, P3 = 3$. Für Bosonen führen wir nun ein

$$\begin{aligned} |i_1, i_2 ... i_N\rangle &\hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P\phi_{i_1}(q_{P1})\phi_{i_2}(q_{P2})...\phi_{i_N}(q_{PN}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P\phi_{i_{P1}}(q_1)\phi_{i_{P2}}(q_2)...\phi_{i_{PN}}(q_N). \end{aligned} \tag{15.56}$$

Die Vorzeichen-Faktoren $(-)^P$ fallen also weg, da es sich um Bosonen handelt. Die Wellenfunktionen sind symmetrisch

$$|i_1...i_m...i_n...i_N\rangle = |i_1...i_n...i_m...i_N\rangle \tag{15.57}$$

Für den Überlapp erhält man eine ähnliche Rekursions-Formel

$$\langle j_1, j_2...j_M|i_1, i_2...i_N\rangle = \sum_m \delta_{j_1,i_m}\langle j_2...j_M|i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle. \tag{15.58}$$

Die bosonischen Erzeuger $b_i^\dagger$ werden nun durch

$$b_i^\dagger|i_1...i_N\rangle = |i, i_1...i_N\rangle \tag{15.59}$$

definiert. Jetzt gilt allerdings

$$b_i^\dagger b_j^\dagger|i_1...i_N\rangle = |i, j, i_1...i_N\rangle = |j, i, i_1...i_N\rangle = b_j^\dagger b_i^\dagger|i_1...i_N\rangle, \tag{15.60}$$

also kommutieren die Erzeuger

$$[b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0. \tag{15.61}$$

Für den Vernichtungs-Operator definiert als hermitesch Adjungiertes des Erzeugungs-Operators findet man dann

$$\begin{aligned}\langle j_1...j_M|b_i|i_1...i_N\rangle &= \langle i_1...i_N|b_i^\dagger|j_1...j_M\rangle^* = \langle i_1...i_N|i, j_1...j_M\rangle^* = \langle i, j_1...j_M|i_1...i_N\rangle \\ &= \sum_m \delta_{i,i_m}\langle j_1...j_M|i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle. \end{aligned}\tag{15.62}$$

und

$$b_i|i_1...i_N\rangle = \sum_m \delta_{i,i_m}|i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle, \tag{15.63}$$

$$b_i|\text{vak}\rangle = 0. \tag{15.64}$$

Weiter folgt

$$\langle a|b_i b_j|b\rangle = \langle b|b_j^\dagger b_i^\dagger|a\rangle^* = \langle b|b_i^\dagger b_i^\dagger|a\rangle^* = \langle a|b_j b_i|b\rangle, \tag{15.65}$$

also

$$[b_i, b_j] = b_i b_j - b_j b_i = 0. \tag{15.66}$$

Schließlich betrachten wir noch den Kommutator zwischen Vernichter und Erzeuger

$$b_i^\dagger b_j|i_1...i_N\rangle = \sum_m \delta_{j,i_m}|i, i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle, \tag{15.67}$$

$$b_j b_i^\dagger|i_1...i_N\rangle = b_j|i, i_1...i_N\rangle = \delta_{j,i}|i_1...i_N\rangle + \sum_m \delta_{j,i_m}|i, i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle, \tag{15.68}$$

$$(b_j b_i^\dagger - b_i^\dagger b_j)|i_1...i_N\rangle = \delta_{j,i}|i_1...i_N\rangle. \tag{15.69}$$

Das ergibt für den Kommutator

$$[b_j, b_i^\dagger] = \delta_{j,i}. \tag{15.70}$$

Iteriert man den Ausdruck für den Überlapp (15.58), so findet man

$$\langle j_1...j_N|i_1..i_N\rangle = \sum_P \delta_{j_1,i_{P1}}\delta_{j_2,i_{P2}}...\delta_{j_N,i_{PN}}. \tag{15.71}$$

Teilchenzahl-Darstellung: Das Matrix-Element ist nur von 0 verschieden, wenn beide N-Teilchen-Zustände alle Einteilchen-Zustände in gleicher Anzahl besetzt haben. Auf die Reihenfolge kommt es nicht an. Man kann also angeben, wie oft jeder Zustand i besetzt ist. Bezeichnet man diese

Anzahl mit n_i, dann stellt sich heraus, dass der Überlapp das Produkt aller $n_i!$ ist, da es jeweils $n_i!$ Permutationen gibt, für die die Kronecker-Delta gleich 1 werden,

$$\langle i_1 ... i_N | i_1 ... i_N \rangle = \prod_i n_i!, \quad n_i = \sum_{m=1}^{N} \delta_{i,i_m}. \tag{15.72}$$

Das Produkt läuft dabei über alle Einteilchen-Zustände i des Hilbert-Raums. Verwendet man statt der obigen Notation, in der wir die N Einteilchen-Zustände aufführen, die Besetzungen, so führt man die normierten Zustände, die durch alle Besetzungszahlen n_i charakterisiert sind, ein

$$|...n_i...\rangle = \prod_i \frac{(b_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |\mathrm{vak}\rangle. \tag{15.73}$$

Man erkennt, dass für diese die bereits von den Phononen bekannten Beziehungen

$$b_i^\dagger |...n_i...\rangle = \sqrt{n_i + 1} |...n_i + 1...\rangle, \quad b_i |...n_i...\rangle = \sqrt{n_i} |...n_i - 1...\rangle \tag{15.74}$$

gelten. Für Fermionen kann man diese Teilchenzahl-Darstellung auch verwenden, allerdings muss man die Reihenfolge der Zustände wegen der Vorzeichen genau definieren. Die Faktoren $n_i!$ spielen dann keine Rolle, da dann nur $n_i = 0$ und $n_i = 1$ auftritt und $0! = 1! = 1$, allerdings ist dann in (15.74) $\sqrt{n_i + 1}$ durch $\sqrt{1 - n_i}$ zu ersetzen.

16 Hartree-Fock-Näherung, RPA (Random-Phase-Approximation), Plasmonen

Wir suchen einen Operator A, der die Eigenschaft

$$[H, A] = \epsilon A \tag{16.1}$$

hat. Ein solcher Operator beschreibt eine Anregung der Energie ϵ, denn ist $|\Phi\rangle$ ein Zustand der Energie E, d.h. $H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$, dann folgt

$$HA|\Phi\rangle = [H, A]|\Phi\rangle + AH|\Phi\rangle = \epsilon A|\Phi\rangle + AE|\Phi\rangle = (E + \epsilon)A|\Phi\rangle. \tag{16.2}$$

Die Energie des Zustandes $A|\Phi\rangle$ ist also um ϵ höher als die des Zustandes $|\Phi\rangle$. Allerdings ist es nur in idealen Fällen möglich, solche Operatoren exakt zu finden. Doch kann man näherungsweise solche Operatoren bestimmen.

16.a Einteilchen-Anregungen in Hartree-Fock-Näherung

Der Operator $c^\dagger_{\mathbf{k}s}$ beschreibt die Hinzufügung eines Teilchens mit Impuls $\hbar\mathbf{k}$ und Spin s. Wir berechnen

$$[H, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] = \sum_{\mathbf{k}_1,s_1} \epsilon_{\mathbf{k}_1}[c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1,s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] + \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{k}_2 s_2 \mathbf{q}} V_\mathbf{q}[c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]. \tag{16.3}$$

Der erste Kommutator ergibt

$$[c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1,s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] = c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1}[c_{\mathbf{k}_1,s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]_+ - [c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]_+ c_{\mathbf{k}_1,s_1} = c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1}\delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}}\delta_{s_1,s} \tag{16.4}$$

und der zweite Kommutator

$$\begin{aligned}
[c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] &= c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}[c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]_+ \\
&- c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2}[c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]_+ c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1} \\
&= c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\mathbf{k}}\delta_{s_1,s} \\
&- c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}\delta_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\mathbf{k}}\delta_{s_2,s}.
\end{aligned} \tag{16.5}$$

Damit folgt dann

$$\begin{aligned}
[H, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] &= \epsilon_\mathbf{k} c^\dagger_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_2 s_2 \mathbf{q}} V_\mathbf{q} c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2 s_2} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2} - \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{q}} V_\mathbf{q} c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} \\
&= \epsilon_\mathbf{k} c^\dagger_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1 \mathbf{q}} V_\mathbf{q} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}.
\end{aligned} \tag{16.6}$$

Dabei wurde in der ersten Summe $\mathbf{q}$ durch $-\mathbf{q}$ und $\mathbf{k}_2$ durch $\mathbf{k}_1$ ersetzt und in der zweiten Summe wurden die beiden Erzeugungs-Operatoren miteinander vertauscht. Man beachte, dass $V_{-\mathbf{q}} = V_\mathbf{q}$ wegen der Ununterscheidbarkeit der Elektronen gilt.

Während der erste Term wieder der Erzeugungs-Operator ist, mit dem wir H kommutiert haben, gilt das nicht für den zweiten Term. Wir müssen für diesen eine Näherung vornehmen. Dazu überlegen wir uns, dass einige Einteilchen-Zustände bereits besetzt sind. Das heißt, dass für $\mathbf{k}_1$ unterhalb der Fermikante die Anwendung des Operators $c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1 s_1}$ den Faktor 1 ergibt, während er für $\mathbf{k}$ oberhalb der Fermikante den Faktor 0 ergibt. Man ersetzt aus diesem Grund

$$c^\dagger_{\mathbf{k}+qs} c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} \approx c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}\langle c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}\rangle - c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1}\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}\rangle = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}} n_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}s} - \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1}\delta_{s,s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}. \tag{16.7}$$

Damit erhalten wir

$$[H, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] = \Big(\epsilon_\mathbf{k} \underbrace{+\frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} V_0 n_{\mathbf{k}_1 s_1}}_{\text{Hartree}-\text{Term}} \underbrace{-\frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}} V_\mathbf{q} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}}_{\text{Fock}-\text{Term}}\Big) c^\dagger_{\mathbf{k}s} = \epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} c^\dagger_{\mathbf{k}s}. \tag{16.8}$$

Der Hartee-Term $V_0 N/V_{\rm P}$ wird für das Elektronengas durch die Wechselwirkung mit der positiven Ionenladung kompensiert. Analog findet man

$$[H, c_{\mathbf{k}s}] = [c^\dagger_{\mathbf{k}s}, H]^\dagger = -[H, c^\dagger_{\mathbf{k}s}]^\dagger \approx -\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}. \tag{16.9}$$

Die Anwendung von $c_{\mathbf{k}s}$ ermiedrigt die Energie des Zustandes um $\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}}$.

Noch einige Anmerkungen:

a) Diese Rechnung ist nicht auf den Grundzustand beschränkt. Für endliche Temperaturen hat man $n_{\mathbf{k}s}$ durch den thermischen Erwartungswert zu ersetzen.

b) Wir sind hier von einem translationsinvarianten Hamilton-Operator ausgegangen. Haben wir etwa ein gitterperiodisches Potential und rechnen mit ebenen Wellen, so wird das periodische Einteilchen-Potential zwischen Elektronen und Ionen auf der rechten Seite der Gleichung (16.8) auch Beiträge mit Operatoren $c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{G}s}$ erzeugen, wobei $\mathbf{G}$ reziproke Gittervektoren sind. Dann muss erst ähnlich wie im Abschnitt (11.b) diagonalisiert werden, was auf die Blochzustände führt. Dabei ist zu beachten, dass dann die Besetzungen n selbst-konsistent bestimmt werden müssen. Das führt faktisch auf ein nicht-lineares Gleichungssystem.

16.b Normal-Ordnung

Wir haben oben die Ersetzung (16.7) vorgenommen. Es gibt ein systematisches Verfahren dafür, das als Normal-Ordnung bezeichnet wird. Im Detail findet es sich unter http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~wegner/Wick_Normal.ps . Hier nur einige Bemerkungen dazu. Die Normal-Ordnung wird durch Doppelpunkte gekennzeichnet. Dabei gilt

$$\begin{aligned}
:1: &= 1, && (16.10)\\
:\alpha A(c^\dagger, c) + \beta B(c^\dagger, c): &= \alpha : A(c^\dagger, c) : + \beta : B(c^\dagger, c) :, && (16.11)\\
c^\dagger_k : A : &= : c^\dagger_k A : + \sum_l \langle c^\dagger_k c_l \rangle : [c^\dagger_l, A]_\pm :, && (16.12)\\
c_k : A : &= : c_k A : + \sum_l \langle c_k c^\dagger_l \rangle : [c_l, A]_\pm : . && (16.13)
\end{aligned}$$

Sie gilt also für bestimmte Erwartungswerte $\langle c^\dagger_k c_l \rangle$, wobei auf Grund der Antikommutator-Beziehung dann natürlich $\langle c_k c^\dagger_l \rangle = \delta_{k,l} - \langle c^\dagger_l c_k \rangle$ gelten muss. Dabei ist $[.., A]_\pm$ als Kommutator auszuwerten für Monome in A mit einer geraden Anzahl von Faktoren c und $c^\dagger$, und als Anti-Kommutator für eine ungerade Anzahl derartiger Faktoren. Grob gesagt wird aus A ein Faktor c_l herausgezogen und in den Erwartungswert $\langle c^\dagger_k c_l \rangle$ hineingezogen, was auf $\langle c^\dagger_k c_l \rangle [c^\dagger_l, A]_\pm$ führt.

Zunächst finden wir

$$c^\dagger_k = : c^\dagger_k :, \quad c_k = : c_k : \tag{16.14}$$

Man muss sich nur vorstellen, man multipliziert $c^\dagger_k$ oder c_k mit $1 =: 1$:.Dann ergibt sich obiges Resultat, da $c^\dagger_l$ und c_l mit der 1 kommutieren. Als nächstes betrachten wir

$$c^\dagger_k c_{k'} = c^\dagger_k : c_{k'} : = : c^\dagger_k c_{k'} : + \sum_l \langle c^\dagger_k c_l \rangle : [c^\dagger_l, c_{k'}]_\pm : = : c^\dagger_k c_{k'} : + \langle c^\dagger_k c_{k'} \rangle \tag{16.15}$$

Ähnlich finden wir

$$c_{k'} c^\dagger_k = : c_{k'} c^\dagger_k : + \langle c_{k'} c^\dagger_k \rangle. \tag{16.16}$$

Addiert man beide Ausdrücke, so findet man

$$: c^\dagger_k c_{k'} : + : c_{k'} c^\dagger_k : = 0. \tag{16.17}$$

Dies ist ein Beispiel für den allgemeinen Satz, dass man unter der Normal-Ordnung Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren miteinander vertauschen kann und dass sich dabei nur das Vorzeichen ändert. Eine δ-Funktion tritt dabei nicht auf. Diese steckt bereits in den abgespaltenen Erwartungs-Werten.

Der normalgeordnete Anteil $:c_k^\dagger c_{k'}:$ stellt die Fluktuation des Operators $c_k^\dagger c_{k'}$ um seinen Mittelwert dar.

Für den obigen Operator $c_{k+qs}^\dagger c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} c_{k+qs}^\dagger c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1} &= c_{k+qs}^\dagger (:c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}: + \langle c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}\rangle) \\ &= :c_{k+qs}^\dagger c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}: - :c_{k_1 s_1}^\dagger: \langle c_{k+qs}^\dagger c_{k_1+qs_1}\rangle + :c_{k+qs}^\dagger: \langle c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}\rangle. \end{aligned} \tag{16.18}$$

Wir haben also in der Hartree-Fock-Näherung den Fluktuations-Anteil $:c_{k+qs}^\dagger c_{k_1 s_1}^\dagger c_{k_1+qs_1}:$ vernachlässigt.

Die normal geordneten Produkte haben noch eine weitere interessante Eigenschaft. Falls $H - \mu\mathcal{N}$ eine Linearkombination von Operatoren $c_k^\dagger c_l$ ist, dann ist der Erwartungswert im großkanonischen Ensemble beschrieben durch $\mathrm{e}^{-\beta(H-\mu\mathcal{N})}$ für einen Operator $A =: \hat{A}:$ gegeben durch den konstanten Beitrag von $\hat{A}$.

16.c Teilchen-Loch-Anregungen in RPA

Der Operator der Teilchendichte lässt sich

$$\rho(r) = \sum_{i,j} c_i^\dagger c_j \langle i|\rho(r)|j\rangle = \sum_{i,j} c_i^\dagger c_j \phi_i^*(r)\phi_j(r) \tag{16.19}$$

ausdrücken. Verwenden wir als Basis ebene Wellen, so folgt

$$\rho(r) = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',s} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k}',s} \frac{1}{V_\mathrm{P}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \tag{16.20}$$

und deren Fourier-Transformierte schreibt sich

$$\rho(\mathbf{q}) = \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}',\mathbf{k},s} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k}',s} \frac{1}{V_\mathrm{P}} \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k},s} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}. \tag{16.21}$$

Für Operatoren dieses Typs wollen wir nun den Kommutator mit H bilden

$$\begin{aligned} [H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}] &= [H, c_{\mathbf{k}s}^\dagger] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + c_{\mathbf{k}s}^\dagger [H, c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}] \\ &= (\epsilon_\mathbf{k} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}',\mathbf{k}_1 s_1} V_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \\ &\quad -\frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}',\mathbf{k}_1 s_1} V_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'+\mathbf{q}s}. \end{aligned} \tag{16.22}$$

Wir haben Terme der Form $c^\dagger c$ mit H kommutiert und neben Termen dieser Form auch solche vom Typ $c^{\dagger 2} c^2$ erhalten. Wir wenden daher erneut die Normalordnung an und finden

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} &= -\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} \delta_{ss_1} :c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}: + \delta_{\mathbf{q}',\mathbf{0}} n_{\mathbf{k}_1 s_1} :c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}: \\ &- \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}+\mathbf{q}} \delta_{s_1 s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} :c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1}: + \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} :c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1}: \\ &+ \text{const.} + :c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}'s_1} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}: \end{aligned} \tag{16.23}$$

Die ersten beiden Beiträge tragen zur Hartree-Fock-Energie bei, die nächsten beiden sind neu und zeigen, dass zwischen Teilchen und Loch eine Wechselwirkung besteht. Die Konstante tritt nur für $\mathbf{q} = 0$ auf. Der letzte Beitrag ist der Fluktuations-Beitrag, den wir vernachlässigen. Ähnlich gehen wir mit dem letzten Term in (16.22) vor und erhalten schließlich

$$\begin{aligned} [H, :c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}:] &= (\epsilon_\mathbf{k}^\mathrm{HF} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\mathrm{HF}) :c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}: \\ &+ \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} V_\mathbf{q} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} :c_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}: - \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} :c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'s}: \end{aligned} \tag{16.24}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \quad \frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} n_\mathbf{k} : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'s} : - \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} V_{-\mathbf{q}} n_\mathbf{k} : c^\dagger_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}s_1} c_{\mathbf{k}_1 s_1} : \\
&= \quad (\epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} : \qquad (16.25) \\
&+ \quad \frac{1}{V_\mathrm{P}}(n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_\mathbf{k}) V_\mathbf{q} \underbrace{\sum_{\mathbf{k}_1 s_1} : c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1} :}_{\rho(\mathbf{q})} - \frac{1}{V_\mathrm{P}}(n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}'s} :
\end{aligned}
$$

Die zweite Summe ist schwierig zu behandeln. Sie wird häufig vernachlässigt. Für kleine $\mathbf{q}$ ist das beim Elektronengas gerechtfertigt, da $V_\mathbf{q}$ divergiert.

Wir setzen nun unseren Operator A als Überlagerung

$$
A = \sum_{\mathbf{k},s} a_\mathbf{k} c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \qquad (16.26)
$$

mit Amplituden a an. Dann folgt durch Einsetzen unter Vernachlässigung der zweiten Summe in (16.25)

$$
[H, A] = \sum_{\mathbf{k},s} a_\mathbf{k} (\epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} + \frac{2V_\mathbf{q}}{V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_\mathbf{k}) a_\mathbf{k} \sum_{\mathbf{k}_1 s_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_1 s_1} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}s_1}, \qquad (16.27)
$$

was mit

$$
\hbar\omega \sum_{\mathbf{k}s} a_\mathbf{k} c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} \qquad (16.28)
$$

übereinstimmen soll, wobei $\hbar\omega$ die Anregungsenergie ist. Daraus ergeben sich die Koeffizienten-Gleichungen für $c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}$

$$
(\epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega) a_\mathbf{k} + 2V_\mathbf{q} \underbrace{\frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) a_{\mathbf{k}'}}_{C} = 0. \qquad (16.29)
$$

Mit der zunächst unbekannten Konstanten C finden wir

$$
a_\mathbf{k} = \frac{2V_\mathbf{q}}{\hbar\omega + \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k}} C, \qquad (16.30)
$$

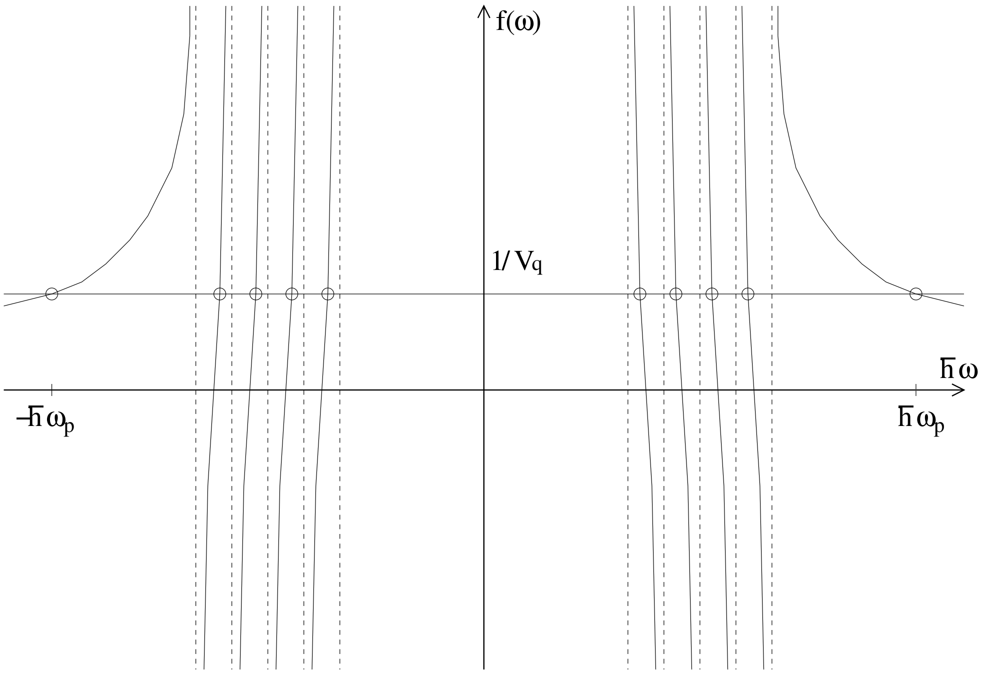
was eingesetzt in die Definition von C auf die Gleichung

$$
C = \underbrace{\frac{2V_\mathbf{q}}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}'}}} C \qquad (16.31)
$$

führt. Dies ist die Eigenwertgleichung für die Anregungsenergie $\hbar\omega$. Daraus folgt entweder $C = 0$, was ein von 0 verschiedenes $a_\mathbf{k}$ nur für $\hbar\omega = \epsilon^\mathrm{HF}_\mathbf{k} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ ergibt, oder $C \neq 0$, woraus dann folgt, dass die obige Klammer gleich 1 sein muss, d.h.

$$
f(\omega) := \frac{2}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \epsilon^\mathrm{HF}_{\mathbf{k}'}} = \frac{1}{V_\mathbf{q}} \qquad (16.32)
$$

folgt.



Die Funktion $f(\omega)$ hat Pole bei $\hbar\omega = \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$ und zwar mit positivem (negativem) Residuum bei positivem (negativem) ω, da dort $\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$ und $n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}$ ebenfalls positiv (negativ) sein muss. Zwischen diesen Polen ist die Funktion monoton fallend (steigend). Es gibt also dort jeweils einen Eigenwert. Bei Temperatur $T = 0$ erstreckt sich der Bereich der Pole über ein endliches Intervall, da ein Impuls $\mathbf{k}' + \mathbf{q}$ außerhalb der Fermifläche, der andere $\mathbf{k}'$ innerhalb liegen muss, oder umgekehrt. Das führtt bei gegebenem $\mathbf{q}$ auf eine maximale Energiedifferenz $\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$. Außerhalb kann aber $f(\omega)$ langsam auf $1/V_{\mathbf{q}}$ abfallen, so dass diese Lösung im Gegensatz zu den anderen weit von den Energiedifferenzen $\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$ entfernt liegt. Dies ist eine kollektive Lösung. Charakteristisch ist, dass $a_{\mathbf{k}}$ nur langsam variiert.

Diese kollektive Lösung betrachten wir etwas genauer: Für kleine q nehmen wir an, dass $\hbar\omega \gg \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}$. Wir setzen noch $V_{\mathbf{q}}$ für das Coulomb-Potential (15.54) ein und entwickeln in Gleichung (16.32)

$$
\begin{aligned}
&\frac{4\pi e^2}{q^2}\frac{2}{V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k}'}\frac{n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}}{\hbar\omega + \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'}} \\
= \;& \frac{8\pi e^2}{V_{\rm P} q^2}\left(\frac{1}{\hbar\omega}\sum_{\mathbf{k}'}(n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) + \frac{1}{(\hbar\omega)^2}\sum_{\mathbf{k}'}(\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})(n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) + ...\right) = 1 \quad (16.33)
\end{aligned}
$$

Nun ist $\sum_{\mathbf{k}'}(n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}'}) = 0$, da die Anzahl der Elektronen von der gleichen Anzahl abgezogen wird. Den nächsten Term formen wir für kleines q um

$$
\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{k}'}(\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})n_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{k}'}(\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} - \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})n_{\mathbf{k}'} &= \sum_{wk'}(\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - 2\epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'} + \epsilon^{\rm HF}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}})n_{\mathbf{k}'} \\
= \sum_{\mathbf{k}'} q_\alpha q_\beta \frac{{\rm d}^2\epsilon_{\mathbf{k}'}}{{\rm d}k'_\alpha {\rm d}k'_\beta} n_{k'} &= \sum_{\mathbf{k}'}\hbar^2 q_\alpha q_\beta \left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} n_{\mathbf{k}'}. \qquad (16.34)
\end{aligned}
$$

Im isotropen Fall ist das dann gleich $\hbar^2 q^2 N/(2m^*)$, wobei $1/m^*$ über die besetzten Zustände gemittelt wird. Damit ergibt sich als Frequenz die Plasmafrequenz

$$
\omega_{\rm P}^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m^*}. \qquad (16.35)
$$

16.d Plasmonen-Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Die Plasmonen sind Ladungsschwingungen, die näherungsweise Bosonen sind. Die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren kann man folgendermaßen einführen:

$$A^\dagger_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}, \quad a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \frac{2V_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega_{\mathrm{p}} + \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}}} \tag{16.36}$$

mit einer Normierung $C_{\mathbf{q}}$. Wir betrachten den Kommutator

$$[A_{\mathbf{q}'}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] = \sum_{\mathbf{k}s} (a_{\mathbf{q},\mathbf{k}} a_{\mathbf{q}',\mathbf{k}} - a_{\mathbf{q},\mathbf{k}+\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}. \tag{16.37}$$

Für $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ ersetzt man $c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \approx n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ und erhält

$$\begin{aligned} [A_{\mathbf{q}}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] &= 8V^2_{\mathbf{q}} C^2_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{(\hbar\omega_{\mathrm{p}} + \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}})^2} \\ &= -4V^2_{\mathbf{q}} C^2_{\mathbf{q}} V_{\mathrm{P}} \left.\frac{\mathrm{d}f(\omega)}{\mathrm{d}\omega}\right|_{\omega=\omega_{\mathrm{p}}} \end{aligned} \tag{16.38}$$

Diesem Ausdruck entnimmt man, dass $C_{\mathbf{q}} = O(1/\sqrt{V_{\mathrm{P}}})$, damit der Kommutator $[A_{\mathbf{q}}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] = 1$ wird. Man erhält also

$$A^\dagger_{\mathbf{q}} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}} \sum_{\mathbf{k}s} ... c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}, \tag{16.39}$$

$$[A_{\mathbf{q}'}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] \propto \frac{1}{V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}s} ... c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}} A^\dagger_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \text{ für } \mathbf{q} \neq \mathbf{q}' \tag{16.40}$$

$$[A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}] \propto \frac{1}{V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k}s} ... c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} \propto \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}} A_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'}. \tag{16.41}$$

Speziell $[A_{\mathbf{q}}, A_{-\mathbf{q}}]$ verschwindet, falls nur $\epsilon_{-\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$. Wegen der Faktoren $1/\sqrt{V_{\mathrm{P}}}$ können diese Kommutatoren häufig vernachlässigt werden. Man führt dann den Plasmonen-Anteil

$$\sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathrm{p}} A^\dagger_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} \tag{16.42}$$

separat im Hamilton-Operator mit den Bosonen-Kommutator-Beziehungen

$$[A_{\mathbf{q}'}, A^\dagger_{\mathbf{q}}] = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}, \quad [A_{\mathbf{q}'}, A_{\mathbf{q}}] = 0 \tag{16.43}$$

ein.

17 Dielektrizitätskonstante und Abschirmung

Wir wollen in diesem Abschnitt die Dielektrizitätskonstante und die Abschirmung betrachten. Dazu gehen wir aus von einer Störung

$$U(\mathbf{r},t) = u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+\mathrm{i}\omega t+\alpha t} + \text{c.c.} \tag{17.1}$$

Dabei beschreibt ein kleines positives α das adiabatische Einschalten der Störung. In erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie in u geht der Zustand

$$\exp(-\frac{\mathrm{i}\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar})|\mathbf{k}\rangle, \quad |\mathbf{k}\rangle\hat{=}\frac{1}{\sqrt{V_\mathrm{P}}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{17.2}$$

über in

$$\psi_{\mathbf{k}}(t) = \exp(-\frac{\mathrm{i}\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar})\left(|\mathbf{k}\rangle + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)|\mathbf{k}-\mathbf{q}\rangle + ...\right). \tag{17.3}$$

Eingesetzt in die Bewegungsgleichung

$$\frac{\mathrm{i}\hbar\partial\psi_{\mathbf{k}}}{\partial t} = (H_0 + u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+\mathrm{i}\omega t+\alpha t} + \text{c.c.})\psi_{\mathbf{k}} \tag{17.4}$$

ergibt das bei Weglassen des Faktors $\exp(-\frac{\mathrm{i}\epsilon_{\mathbf{k}}t}{\hbar})$

$$\begin{aligned} & \epsilon_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle + (\mathrm{i}\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\epsilon_{\mathbf{k}})|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle + (\mathrm{i}\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}\epsilon_{\mathbf{k}})|\mathbf{k}-\mathbf{q}\rangle \\ = \; & \epsilon_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t+\alpha t})|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + u^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\alpha t})|\mathbf{k}-\mathbf{q}\rangle + O(ub). \end{aligned} \tag{17.5}$$

Daraus folgt dann, wenn wir b von Ordnung u ansetzen,

$$\mathrm{i}\hbar\dot{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t+\alpha t} \tag{17.6}$$

mit der Lösung

$$b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) = \frac{u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t+\alpha t}}{-\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \mathrm{i}\hbar\alpha}. \tag{17.7}$$

Ähnlich findet man

$$b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t) = \frac{u^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\alpha t}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \mathrm{i}\hbar\alpha}. \tag{17.8}$$

Daraus ergibt sich in erster Ordnung in u folgende Änderung der Ladungsdichte

$$\begin{aligned} \delta\rho(\mathbf{r},t) &= e\sum_{\mathbf{k}s}\left(|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)|^2 - \frac{1}{V_\mathrm{P}}\right)f_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{2e}{V_\mathrm{P}}\sum_{\mathbf{k}}\left(|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}}|^2 - 1\right)f_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{2e}{V_\mathrm{P}}\sum_{\mathbf{k}}\left(b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + \text{c.c.}\right)f_{\mathbf{k}} + O(b^2) \\ &= \frac{2e}{V_\mathrm{P}}\sum_{\mathbf{k}}\left(b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t) + b^*_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t)\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}f_{\mathbf{k}} + \text{c.c.} \\ &= \frac{2e}{V_\mathrm{P}}\sum_{\mathbf{k}}\left(\frac{f_{\mathbf{k}}}{-\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \mathrm{i}\hbar\alpha} + \frac{f_{\mathbf{k}}}{\hbar\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \mathrm{i}\hbar\alpha}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+\mathrm{i}\omega t+\alpha t}u + \text{c.c.} \\ &= \frac{2e}{V_\mathrm{P}}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega + \mathrm{i}\hbar\alpha}u\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+\mathrm{i}\omega t+\alpha t} + \text{c.c.} \end{aligned} \tag{17.9}$$

Beim Übergang auf die letzte Zeile haben wir im zweiten Term der vorletzten Zeile unter der Summe $\mathbf{k}$ durch $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ ersetzt.

Beim Hinzufügen einer Testladung (äußerer Ladung) $\rho_{\rm a}$ entsteht ein Potential $U_{\rm a}$. Außerdem wird eine innere Ladung $\delta\rho$ induziert. $\rho_{\rm a}+\delta\rho$ erzeugen das Gesamtpotential U. Wir haben bereits $\delta\rho$ als Funktion von U bestimmt. Wir bestimmen noch $U=e\phi$ als Funktion von ρ

$$\begin{aligned}
\triangle U(\mathbf{r},t) &= e\triangle\phi(\mathbf{r},t) = -4\pi e\rho(\mathbf{r},t), &(17.10)\\
q^2 U(\mathbf{r},t) &= 4\pi e\rho(\mathbf{r},t) \text{ für } U\propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, &(17.11)\\
\mathrm{div}\mathbf{E} &= 4\pi\rho, &(17.12)\\
\epsilon_{\rm D}\mathrm{div}\mathbf{E} &= \mathrm{div}\mathbf{D} = 4\pi\rho_{\rm a}. &(17.13)
\end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q},\omega) = \frac{\rho_{\rm a}}{\rho} = 1-\frac{\delta\rho}{\rho} = 1-\frac{4\pi e\delta\rho}{q^2 U} = 1+\frac{8\pi e^2}{q^2 V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f_{\mathbf{k}}-f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}}+\hbar\omega-\mathrm{i}\hbar\alpha}. \qquad (17.14)$$

Dies ist die Lindhard-Gleichung für die Dielektrizitätskonstante des Elektronengases. Berücksichtigen wir den Limes

$$\lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\omega-\mathrm{i}\alpha} = \mathrm{P}\frac{1}{\omega}+\mathrm{i}\pi\delta(\omega), \qquad (17.15)$$

so folgt

$$\begin{aligned}
\Re\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q},\omega) &= 1+\frac{8\pi e^2}{q^2V_{\rm P}}\mathrm{P}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f_{\mathbf{k}}-f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}}+\hbar\omega}, &(17.16)\\
\Im\epsilon_{\rm D} &= \frac{8\pi e^2}{q^2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k}}(f_{\mathbf{k}}-f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\delta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}}+\hbar\omega). &(17.17)
\end{aligned}$$

Man sieht,dass $\Re\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q},\omega)=0$ für die Plasma-Frequenz $\omega=\omega_{\rm P}$. Der Imaginärteil beschreibt die Absorption durch Teilchen-Loch-Anregungen (Dämpfung der elektromagnetischen Welle).

17.a Statische Abschirmung: Metall

Wir betrachten die statische Abschirmung ($\omega=0$) in einem Metall. Wir werten dazu die statische Dielektrizitätskonstante

$$\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q},0) = 1+\frac{8\pi e^2}{q^2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f_{\mathbf{k}}-f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}}} \qquad (17.18)$$

und zwar für $\hbar q v_{\rm F} = q|\nabla\epsilon_{\mathbf{k}}| \ll k_{\rm B}T$ aus. Wir können dann

$$f_{\mathbf{k}}-f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = -\frac{\partial f}{\partial\epsilon}(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}}) \qquad (17.19)$$

setzen und erhalten

$$\epsilon_{\rm D}(q,0) = 1+\frac{8\pi e^2}{q^2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k}}(-\frac{\partial f}{\partial\epsilon}) = 1+\frac{4\pi e^2}{q^2}\int D(\epsilon)(-\frac{\partial f}{\partial\epsilon})\mathrm{d}\epsilon = 1+\frac{\lambda^2}{q^2} \qquad (17.20)$$

mit

$$\lambda^2 = 4\pi e^2 D(\epsilon_{\rm F}). \qquad (17.21)$$

mit der Zustandsdichte (10.17) $D(\epsilon_{\rm F})$ an der Fermikante. Daher ergibt sich für die Fourier-Transformierte von Potential und Ladung

$$\begin{aligned}
\epsilon_{\rm D}(q,0)\cdot(-q^2)\phi_{\mathbf{q}} &= -4\pi\rho_{\rm a}(\mathbf{q}),\\
(-q^2-\lambda^2)\phi_{\mathbf{q}} &= -4\pi\rho_{\rm a}(\mathbf{q}),\\
(\triangle-\lambda^2)\phi(\mathbf{r}) &= -4\pi\rho_{\rm a}(\mathbf{r}), &(17.22)
\end{aligned}$$

woraus sich dann für die Punktladung $\rho_{\rm a}=e\delta^3(\mathbf{r})$ das abgeschirmte Potential $\phi(r)=\frac{e}{r}\mathrm{e}^{-\lambda r}$ ergibt. Die Punktladung umgibt sich mit einer Abschirmungswolke. Ihre Ausdehnung ist von der Größenordnung $1/\lambda$. Man bezeichnet diese Größe als Abschirmlänge.

17.b Statische Abschirmung: Halbleiter

In einem Halbleiter erhalten wir eine schwache statische Abschirmung zusätzlich zu der Dielektrizitätskonstante auf Grund von Übergängen zwischen den Bändern (siehe nächster Abschnitt). Liegt das chemische Potential weit von der unteren Bandkante des Leitungsbandes entfernt, so kann man in guter Näherung (Siehe Hunklinger-Enss: Gl.(9.8) S. 294) $f = \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon-\mu)}$ setzen

$$\delta\epsilon_{\mathrm{D}} = \frac{8\pi e^2}{q^2 V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k},\mathrm{L}} (-\frac{\partial f}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}) = \frac{8\pi e^2}{q^2 V_{\mathrm{P}} k_{\mathrm{B}} T} \sum_{\mathbf{k}} f = \frac{4\pi e^2}{q^2 k_{\mathrm{B}} T} n_{\mathrm{e}}. \tag{17.23}$$

Ein entsprechender Beitrag kommt von den Löchern, so dass wir

$$\lambda^2 = \frac{4\pi e^2 (n_{\mathrm{e}} + n_{\mathrm{L}})}{k_{\mathrm{B}} T \epsilon_{\mathrm{iso}}} \tag{17.24}$$

finden. In der Regel erstreckt sich dann die Abschirmung über sehr viele Atomabstände.

17.c Dielektrizitätskonstante: Isolator

Bisher haben wir die Wellenfunktionen als ebene Wellen betrachtet. Im Isolator müssen wir aber explizit Blochfunktionen $|L, \mathbf{k}\rangle$ und $|V, \mathbf{k}\rangle$ betrachten. Dabei steht L für Leitungsbänder, V für Valenzbänder. Wir erhalten

$$\epsilon_{\mathrm{D}} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2 V_{\mathrm{P}}} \sum_{L,V,\mathbf{k},s} \frac{(f(\epsilon^L_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon^V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}))|\langle L, \mathbf{k}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|V, \mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle|^2}{\epsilon^V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon^L_{\mathbf{k}} + \hbar\omega - \mathrm{i}\hbar\alpha} + (L \leftrightarrow V). \tag{17.25}$$

Mit $f(\epsilon^L_{\mathbf{k}}) = 0$, $f(\epsilon^V_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) = 1$ und dem Überlapp aus (12.4)

$$\langle L, \mathbf{k}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|V, \mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle = \frac{\hbar}{m} \frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}_{L,V}}{\epsilon^V - \epsilon^L}, \tag{17.26}$$

findet man für $\omega = 0$ und $q \to 0$

$$\epsilon_{\mathrm{D}} = 1 + \frac{16\pi e^2 \hbar^2}{m^2 V_{\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{k},L,V} \frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{p}_{L,V})^2/q^2}{(\epsilon^L_{\mathbf{k}} - \epsilon^V_{\mathbf{k}})^3} = \sum_{\alpha,\beta} \epsilon_{\alpha,\beta} \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2}. \tag{17.27}$$

Eingesetzt in die Maxwell-Gleichung (17.13) ergibt das

$$-\epsilon_{\mathrm{D}} q^2 \phi_{\mathbf{q}} = -4\pi\rho_{\mathrm{a},\mathbf{q}}, \tag{17.28}$$

$$-\sum_{\alpha,\beta} q_\alpha q_\beta \epsilon_{\alpha,\beta} \phi_{\mathbf{q}} = -4\pi\rho_{\mathrm{a},\mathbf{q}}, \tag{17.29}$$

daraus dann im Ortsraum

$$\partial_\alpha(\epsilon_{\alpha,\beta}\partial_\beta\phi(\mathbf{r})) = -4\pi\rho_{\mathrm{a}}(\mathbf{r}), \tag{17.30}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi, \quad \mathbf{D} = \epsilon_{\mathrm{D}}\mathbf{E}, \quad \mathrm{div}\mathbf{D} = 4\pi\rho_{\mathrm{a}}, \tag{17.31}$$

wobei ϵ_{D} ein Tensor ist, der für $q \to 0$ endlich bleibt, während man bei Anwesenheit von beweglichen Ladungsträgern in diesem Limes eine Divergenz erhält, wie oben hergeleitet.

17.d Plasmaschwingung mit Dämpfung

Wir betrachten jetzt noch die Plasmaschwingung mit Dämpfung. Zunächst sehen wir uns die Symmetrien der Dielektrizitätskonstante an. Wir erhalten

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega - \mathrm{i}\hbar\alpha} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega - \mathrm{i}\hbar\alpha} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega + \mathrm{i}\hbar\alpha}, \tag{17.32}$$

wobei wir beim Übergang von der ersten zur zweiten Summe k durch $-k-q$ ersetzt haben und dann verwenden, dass $\epsilon_{-\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}$. Daraus finden wir

$$\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q}, \omega - \mathrm{i}\alpha) = \epsilon_{\rm D}(\mathbf{q}, -\omega + \mathrm{i}\alpha) = \epsilon_{\rm D}^*(\mathbf{q}, -\omega - \mathrm{i}\alpha) \tag{17.33}$$

und damit

$$\Re\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q}, \omega) = \Re\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q}, -\omega), \quad \Im\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q}, \omega) = -\Im\epsilon_{\rm D}(\mathbf{q}, -\omega). \tag{17.34}$$

Aus

$$\rho_{\rm a}(\omega) = \epsilon_{\rm D}(\omega)\rho(\omega) \tag{17.35}$$

folgt mit

$$\rho_{\rm a}(t) = c\delta(t) = \int \mathrm{d}\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\rho_{\rm a}(\omega), \quad \rho_{\rm a}(\omega) = \frac{c}{2\pi} \tag{17.36}$$

schließlich

$$\rho(t) = \frac{c}{2\pi}\int \mathrm{d}\omega \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\epsilon_{\rm D}(\omega)} \tag{17.37}$$

Die Hauptbeiträge rühren von $\omega \approx \pm\omega_{\rm p}$ her. Dort findet man mit

$$\epsilon_{\rm D} = \left\{ \begin{array}{ll} a(\omega - \omega_{\rm p} - \mathrm{i}\Gamma) & \omega \approx \omega_{\rm p}, \\ a(-\omega - \omega_{\rm p} + \mathrm{i}\Gamma) & \omega \approx -\omega_{\rm p}. \end{array} \right. \qquad a = \left.\frac{\partial\Re\epsilon_{\rm D}(\omega)}{\partial\omega}\right|_{\omega=\omega_{\rm p}}, \quad a\Gamma = -\Im\epsilon(\omega_{\rm p}). \tag{17.38}$$

Damit findet man

$$\rho(t) = \frac{c}{2\pi a}\int \frac{\mathrm{d}\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\omega - \omega_{\rm p} - \mathrm{i}\Gamma} - \frac{c}{2\pi a}\int \frac{\mathrm{d}\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\omega + \omega_{\rm p} - \mathrm{i}\Gamma}. \tag{17.39}$$

Der Integrand hat Pole bei $\omega = \pm\omega_{\rm p} + \mathrm{i}\Gamma$. Für $t < 0$ verschiebt man den Integrationsweg nach $\Im\omega \to -\infty$, für positives dagegen nach $\Im\omega \to +\infty$. Dann verschwinden die Integrale. Für $t < 0$ kann man das durchführen, ohne über einen Pol verschieben zu müssen. Daher ergibt sich dann $\rho(t) = 0$. Für positives t dagegen erhält man zwei Polbeiträge, so dass man

$$\rho(t) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & t < 0 \\ \frac{\mathrm{i}c}{a}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}\omega_{\rm p} - \Gamma)t} - \frac{\mathrm{i}c}{a}\mathrm{e}^{(-\mathrm{i}\omega_{\rm p} - \Gamma)t} = -\frac{2c}{a}\sin(\omega_{\rm p}t)\mathrm{e}^{-\Gamma t} & t > 0 \end{array} \right. \tag{17.40}$$

erhält. Der Imaginärteil Γ beschreibt also die Dämpfung.

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

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

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, $...+ : c^\dagger c^\dagger c c : + ... : c^\dagger c : + \mathrm{const.} + ... : a^\dagger a c^\dagger c : + ... : a^\dagger a : + ... : a^\dagger a^\dagger c^\dagger c : + ... : a^\dagger a^\dagger : + ... : a a c^\dagger c : + ... : a a :$. Die Beiträge $... : c^\dagger c^\dagger c c :$ 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,

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

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.

$$H^{\mathrm{d}} = H_0 + V_{\mathrm{eff}}, \tag{18.30}$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathrm{q}} : a^\dagger_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} : + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} : + E_0, \tag{18.31}$$

$$V_{\mathrm{eff}} = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{k}'} : c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s} : \tag{18.32}$$

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

$$\eta = [H^{\mathrm{d}}, H^{\mathrm{r}}] = [H_0, H^{\mathrm{r}}] + O(M^3) = \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s} \eta_{\mathbf{q},\mathbf{k}} : (c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} c_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{q}} - c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s} a^\dagger_{\mathbf{q}}) :, \tag{18.33}$$

$$\eta_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}}) M_{\mathbf{q},\mathbf{k}}. \tag{18.34}$$

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

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

woraus dann

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

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.

19 Cooper-Paare und BCS-Lösung

19.a BCS-Grundzustand

Die Grundidee von Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS) war, dass sich im supraleitenden Zustand kohärente Paare von Elektronen bilden, die einen Gesamtimpuls $\mathbf{0}$ und in vielen Fällen Gesamtspin 0 haben (Singlett-Supraleiter). Der wesentliche Anteil des Hamilton-Operators ist

$$H = \sum_k \epsilon_k (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k}) - \frac{V}{N} \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger c_{-k'} c_{k'}. \tag{19.1}$$

Dabei steht k für $\mathbf{k}, \uparrow$ und $-k$ für $-\mathbf{k}, \downarrow$. Im allgemeinen hängt die Kopplung V von k und k' ab. Hier wird der Einfachheit angenommen, dass V von k und k' unabhängig sind. Weiter wird angenommen, dass sich die Wechselwirkung nur in einer Umgebung der Fermikante erstreckt, so dass $|\epsilon_k - \mu| < \hbar\omega_{\rm D}$, da man davon ausgeht, dass nur Elektronen hinreichend nahe an der Fermikante dazu beitragen und man berücksichtigt, dass nur akustische Phononen, deren Energie bis zu $\hbar$ mal Debye-Frequenz reichen, wesentlich beitragen können. In der Tat finden wir (18.42), dass im Rahmen der Fröhlichschen Näherung die effektive Kopplung für große Energiedifferenzen abstoßend wird, und dass im Rahmen der Flussgleichungs-Näherung die Wechselwirkung zwar attraktiv bleibt, aber die Matrixelemente für $|\epsilon_k - \epsilon_{k'}| > \hbar\omega$ klein werden. Der Näherung (19.1) erlaubt uns, eine analytische Rechnung vorzunehmen.

BCS setzen nun für den Grundzustand

$$|\psi_0\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger)|\text{vak}\rangle \tag{19.2}$$

an. Es werden also Paare von Elektronen erzeugt. Interessanterweise hat dieser Zustand keine feste Teilchenzahl. Vielmehr sind alle Paare k und $-k$ unabhängig von einander mit der Wahrscheinlichkeit u_k^2 unbesetzt und mit der Wahrscheinlichkeit v_k^2 besetzt, wobei man

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \tag{19.3}$$

fordert. Dann ist der Zustand normiert

$$\langle\psi_0|\psi_0\rangle = \prod_k (u_k^2 + v_k^2) = 1. \tag{19.4}$$

Mit diesem Ansatz erhält man die Erwartungswerte

$$\langle\mathcal{N}\rangle = 2\sum_k v_k^2, \tag{19.5}$$

$$\langle H - \mu\mathcal{N}\rangle = 2\sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N}\sum_{k,k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'}. \tag{19.6}$$

Wir wollen nun die u_k und v_k unter der Nebenbedingung (19.3) variieren. Am einfachsten setzen wir

$$u_k = \cos\phi_k, \quad v_k = \sin\phi_k \tag{19.7}$$

an. Dann können wir die Winkel ϕ_k unabhängig variieren,

$$\frac{\partial}{\partial\phi_k}\langle H - \mu\mathcal{N}\rangle = 4(\epsilon_k - \mu) u_k v_k - \frac{2V}{N}\sum_{k'} u_{k'} v_{k'} (u_k^2 - v_k^2). \tag{19.8}$$

Mit der Abkürzung

$$\Delta = \frac{V}{N}\sum_{k'} u_{k'} v_{k'} \tag{19.9}$$

folgen dann die Gleichungen

$$(\epsilon_k - \mu)\cdot \underbrace{2 v_k u_k}_{\sin(2\phi_k)} = \Delta\,\underbrace{(u_k^2 - v_k^2)}_{\cos(2\phi_k)}. \tag{19.10}$$

Diese Gleichungen haben immer die triviale Lösung

$$\Delta = 0, \quad \begin{array}{ll} u_k = 1, v_k = 0 & \text{für} \quad \epsilon_k > \mu, \\ u_k = 0, v_k = 1 & \text{für} \quad \epsilon_k < \mu. \end{array} \tag{19.11}$$

Dies entspricht dem Hartree-Fock-Zustand, in dem die Elektronen bis $\epsilon_k = \mu$ aufgefüllt sind. Daneben gibt es auch noch die nicht-triviale Lösung $\Delta \neq 0$ mit

$$2v_k u_k = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}}, \quad u_k^2 - v_k^2 = \frac{\epsilon_k - \mu}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}}, \tag{19.12}$$

wobei dann Δ der Gleichung

$$\Delta = \frac{V}{2N} \sum_{k'} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_{k'} - \mu)^2}} \tag{19.13}$$

genügen muss. Mit der Zustandsdichte $D(\epsilon)$ für die Elektronen führt dies auf die Gleichung

$$1 = \frac{\hat{V}}{4} \int_{\mu - \hbar\omega_{\mathrm{D}}}^{\mu + \hbar\omega_{\mathrm{D}}} \frac{D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \text{ mit } \hat{V} = \frac{V_{\mathrm{P}}}{N} V = V_{\mathrm{z}} V, \tag{19.14}$$

da die Zustandsdichte auf das Volumen V_{P} und nicht auf die Zahl der Gitterpunkte N bezogen ist. Für $\hbar\omega_{\mathrm{D}} \gg \Delta$ und der Näherung $D(\epsilon) \approx D(\epsilon_{\mathrm{F}})$ führt dies auf

$$\Delta = 2\hbar\omega_{\mathrm{D}} \mathrm{e}^{-\frac{2}{D(\epsilon_{\mathrm{F}})\hat{V}}}. \tag{19.15}$$

Wir müssen jetzt betrachten, ob diese BCS-Lösung auf eine niedrigere Energie führt,

$$\langle H - \mu\mathcal{N} \rangle_{\mathrm{BCS}} - \langle H - \mu\mathcal{N} \rangle_{\mathrm{normal}} = \sum_k \big((\epsilon_k - \mu)(2v_k^2 - 2\theta(\mu - \epsilon_k)) - \Delta u_k v_k \big) \tag{19.16}$$

Die Summanden sind negativ, denn aus

$$2v_k^2 = 1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{\sqrt{/\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \tag{19.17}$$

folgen die Summanden

$$\begin{array}{lll} \epsilon - \mu - \frac{(\epsilon-\mu)^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{(\epsilon-\mu)^2+\Delta^2}} < 0 & \text{für} & \epsilon > \mu \\ \mu - \epsilon - \frac{(\epsilon-\mu)^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{(\epsilon-\mu)^2+\Delta^2}} < 0 & \text{für} & \epsilon < \mu, \end{array} \tag{19.18}$$

da

$$|x| < \frac{x^2 + \Delta^2/2}{\sqrt{x^2 + \Delta^2}} \text{ wegen } x^2 < \frac{(x^2 + \Delta^2/2)^2}{x^2 + \Delta^2} = x^2 + \frac{\Delta^4/4}{x^2 + \Delta^2}. \tag{19.19}$$

Für $\Delta \ll \hbar\omega_{\mathrm{D}}$ folgt eine Energieabsenkung um $\Delta E = -D(\epsilon_{\mathrm{F}})\Delta^2/4$.

19.b Anregungen

Für das Vakuum gilt, dass die Anwendung des Vernichtungs-Operators 0 ergibt, $c_{\mathbf{k}s}|\mathrm{vak}\rangle = 0$. Ähnlich kann man für den BCS-Zustand einen Vernichtungs-Operator α bilden, so dass $\alpha|\psi_0\rangle = 0$. Es ist nämlich

$$(v_l c_l^\dagger + u_l c_{-l})|\psi_0\rangle = \prod_{k \neq l} (u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) \underbrace{(v_l c_l^\dagger + u_l c_{-l})(u_l + v_l c_l^\dagger c_{-l}^\dagger)|\mathrm{vak}\rangle}_{(u_l v_l c_l^\dagger - u_l v_l c_l^\dagger)|\mathrm{vak}\rangle = 0,} \tag{19.20}$$

ähnlich

$$(-v_l c_{-l}^\dagger + u_l c_l)|\psi_0\rangle = 0. \tag{19.21}$$

Man definiert daher die Operatoren

$$\alpha_{-k} = u_k c_{-k} + v_k c_k^\dagger \quad \rightarrow \quad \alpha_{-k}^\dagger = u_k c_{-k}^\dagger + v_k c_k, \tag{19.22}$$

$$\alpha_k = u_k c_k - v_k c_{-k}^\dagger \quad \rightarrow \quad \alpha_k^\dagger = u_k c_k^\dagger - v_k c_{-k}. \tag{19.23}$$

Man überprüft nun

$$[\alpha_k, \alpha_{k'}]_+ = [\alpha_k, \alpha_{-k'}]_+ = [\alpha_{-k}, \alpha_{-k}]_+ [\alpha_k^\dagger, \alpha_{k'}^\dagger]_+ = [\alpha_k^\dagger, \alpha_{-k'}^\dagger]_+ = [\alpha_{-k}^\dagger, \alpha_{-k}^\dagger]_+ = 0, \tag{19.24}$$

$$[\alpha_k, \alpha_{-k'}^\dagger]_+ = [\alpha_{-k}, \alpha_{k'}^\dagger]_+ = 0, \quad [\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger]_+ = [\alpha_{-k}, \alpha_{-k'}^\dagger]_+ = \delta_{k,k'} \tag{19.25}$$

Es gelten also für die Operatoren α die fermionischen Vertauschungs-Beziehungen. Wir können die Beziehungen nach den ursprünglichen Elektron-Operatoren auflösen,

$$c_k^\dagger = u_k \alpha_k^\dagger + v_k \alpha_{-k}, \quad \rightarrow \quad c_k = u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^\dagger, \tag{19.26}$$

$$c_{-k}^\dagger = u_k \alpha_{-k}^\dagger - v_k \alpha_k, \quad \rightarrow \quad c_{-k} = u_k \alpha_{-k} - v_k \alpha_k^\dagger. \tag{19.27}$$

Daraus ergibt sich dann für die Teilchenzahl-Operatoren und die Erzeuger und Vernichter von Paaren

$$c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k} = (u_k^2 - v_k^2)(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) + 2u_k v_k (\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k}\alpha_k) + 2v_k^2, \tag{19.28}$$

$$c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = u_k^2 \alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger - v_k^2 \alpha_{-k}\alpha_k + u_k v_k (1 - \alpha_k^\dagger \alpha_k - \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}), \tag{19.29}$$

$$c_{-l} c_l = u_l^2 \alpha_{-l}\alpha_l - v_l^2 \alpha_l^\dagger \alpha_{-l}^\dagger + u_l v_l (1 - \alpha_l^\dagger \alpha_l - \alpha_{-l}^\dagger \alpha_{-l}). \tag{19.30}$$

und damit für den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H - \mu\mathcal{N} &= 2\sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N} \sum_{k,l} u_k v_k u_l v_l \\ &+ \sum_k \left((\epsilon_k - \mu)(u_k^2 - v_k^2) + u_k v_k \frac{2V}{N} \sum_l u_l v_l \right) (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \\ &+ \sum_k \left(\epsilon_k - \mu)2u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \frac{V}{N} \sum_l u_l v_l \right) (\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k}\alpha_k) \\ &+ O(\alpha^{\dagger 4} + \alpha^{\dagger 3}\alpha + \alpha^{\dagger 2}\alpha^2 + \alpha^\dagger \alpha^3 + \alpha^4). \end{aligned} \tag{19.31}$$

(Terme der Ordnung $O(1/N)\alpha^\dagger\alpha$, $O(1/N)\alpha^\dagger\alpha^\dagger$ und $O(1/N)\alpha\alpha$, die im thermodynamischen Limes vernachlässigbar sind, wurden weggelassen. Mit der Forderung $(\epsilon_k - \mu)2u_k v_k = \Delta(u_k^2 - v_k^2)$ reduziert sich der Hamilton-Operator auf

$$H - \mu\mathcal{N} = \sum_k \sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2} (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) + 2\sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N} \sum_{k,l} u_k v_k u_l v_l + O(\alpha^{\dagger m}\alpha^{4-m}), \tag{19.32}$$

die anomalen Terme $\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}$ fallen dann weg. Für den BCS-Zustand beträgt die Einteilchenanregungsenergie $\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon_k - \mu)^2} \geq \Delta$, es gibt also ein Energielücke Δ für das Hinzufügen eines Elektrons. Ändert man die (mittlere) Elektronenzahl nicht, so benötigt man zwei Erzeuger $\alpha^\dagger$, so dass für derartige Anregungen (z.B. optische) eine Energielücke von 2Δ auftritt.

19.c Sprungtemperatur

Wir verwenden, dass das großkanonische Potential $G(\rho') = E - \mu N - TS$ für einen beliebigen statistischen Operator ρ' größer ist als $G(\rho)$ für die tatsächliche Gleichgewichtsverteilung $\rho \propto \mathrm{e}^{-\beta(H-\mu\mathcal{N})}$, d.h. man kann für ρ' ein Variationsverfahren durchführen, bei dem $G(\rho')$ minimiert wird, um eine Näherung für ρ zu finden. Dazu setzen wir

$$\rho' \propto \mathrm{e}^{-\beta \sum_k \hat{\epsilon}_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k})} \tag{19.33}$$

an und variieren $\hat{\epsilon}_k$ und ϕ_k, (19.7). Es folgt dann

$$\langle H - \mu\mathcal{N}\rangle = 2\sum_k(\epsilon_k-\mu)(u_k^2-v_k^2)f(\hat{\epsilon}_k) + 2\sum_k(\epsilon_k-\mu)v_k^2 - \frac{V}{N}\left(\sum_k u_kv_k(1-2f(\hat{\epsilon_k}))\right)^2. \quad (19.34)$$

Wir definieren

$$\Delta = \frac{V}{N}\sum_k u_kv_k(1-2f(\hat{\epsilon}_k)). \quad (19.35)$$

Dann erhalten wir, da die Entropie S nicht von den ϕ abhängt, sondern auf Grund der Darstellung (19.33) nur von den $\hat{\epsilon}$,

$$\frac{\partial G}{\partial\phi_k} = \frac{\partial\langle H-\mu\mathcal{N}\rangle}{\partial\phi_k} = 4(\epsilon_k-\mu)u_kv_k(1-2f(\hat{\epsilon}_k)) - 2\Delta(u_k^2-v_k^2)(1-2f(\hat{\epsilon}_k)) = 0. \quad (19.36)$$

Daher gilt wie bisher Gleichung (19.10)

$$2(\epsilon_k-\mu)u_kv_k = \Delta(u_k^2-v_k^2). \quad (19.37)$$

Weiter finden wir

$$\frac{\partial G}{\partial\hat{\epsilon_k}} = 2\left((\epsilon_k-\mu)(u_k^2-v_k^2)+2\Delta u_kv_k\right)\frac{\partial f(\hat{\epsilon}_k)}{\partial\hat{\epsilon}_k} - T\frac{\partial S}{\partial\hat{\epsilon}_k} = 0. \quad (19.38)$$

Hätten wir es mit dem konventionellen Einteilchen-Problem zu tun, dann stünde in der großen Klammer $\epsilon_k - \mu$ und die Lösung wäre dann die exakte $\hat{\epsilon}_k = \epsilon_k - \mu$. Daher ist die große Klammer von (19.38) gleich $\hat{\epsilon}_k$,

$$\hat{\epsilon}_k = (\epsilon_k-\mu)(u_k^2-v_k^2)+2\Delta u_kv_k, \quad (19.39)$$

woraus mit (19.37) wieder die Anregungsenergie

$$\hat{\epsilon}_k = \sqrt{\Delta^2+(\epsilon_k-\mu)^2} \quad (19.40)$$

folgt. Lediglich der Ausdruck (19.35) für die Lücke Δ ist bei endlicher Temperatur von der bei Temperatur 0 verschieden. da $\hat{\epsilon}_k$ positiv ist, ist bei $T = 0$ $f = 0$. Bei endlicher Temperatur ergibt sich aber jetzt

$$\Delta = \frac{V\Delta}{2N}\sum_k \underbrace{\frac{1}{\hat{\epsilon}_k}\frac{1-\mathrm{e}^{-\beta\hat{\epsilon}_k}}{1+\mathrm{e}^{-\beta\hat{\epsilon}_k}}}. \quad (19.41)$$

Die unterklammerte Funktion ist für positives $\hat{\epsilon}$ eine monoton fallende Funktion von $\hat{\epsilon}$. Daher gibt es eine nicht-triviale Lösung nur, falls

$$\frac{V}{2N}\sum_k\frac{1}{|\epsilon_k-\mu|}\frac{1-\mathrm{e}^{-\beta|\epsilon_k-\mu|}}{1+\mathrm{e}^{-\beta|\epsilon_k-\mu|}} = \frac{\hat{V}D(\mu)}{2}\int_0^{\hbar\omega_\mathrm{D}}\frac{\mathrm{d}\epsilon}{\epsilon}\frac{1-\mathrm{e}^{-\beta\epsilon}}{1+\mathrm{e}^{-\beta\epsilon}} > 1. \quad (19.42)$$

Daraus folgt, dass die Sprungtemperatur T_c, das heißt die Temperatur bei der die supraleitende Phase einsetzt, gegeben ist (mit $x = \beta\epsilon$) durch

$$\frac{\hat{V}D(\mu)}{2}\int_0^{T_\mathrm{D}/T_\mathrm{c}}\frac{\mathrm{d}x}{x}\frac{1-\mathrm{e}^{-x}}{1+\mathrm{e}^{-x}} = 1. \quad (19.43)$$

Das x-Integral ergibt für großes $T_\mathrm{D}/T_\mathrm{c}$ ungefähr $0.13 + \ln(T_\mathrm{D}/T_\mathrm{c})$. Daraus folgt dann

$$T_\mathrm{c} = 1.14T_\mathrm{D}\mathrm{e}^{-2/(\hat{V}D(\mu))} = 0.57\frac{\Delta(0)}{k_\mathrm{B}}. \quad (19.44)$$

Wir bemerken noch, dass eine genauere Untersuchung der Gleichung (19.41) für Temperaturen etwas unterhalb T_c das Anwachsen der Lücke mit einem Wurzelgesetz ergibt

$$\Delta(T) \approx 3.06k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}\sqrt{1-\frac{T}{T_\mathrm{c}}} \text{ für } T \tilde{<} T_\mathrm{c}. \quad (19.45)$$

ergibt.

19.d Ergänzungen

Wir haben hier mittels der Näherung (19.1) für die Paar-Wechselwirkung demonstriert, wie es zu einem Zustand kommt, dessen Energie niedriger als die Hartree-Fock-Energie ist. Im Allgemeinen hat die Paarwechselwirkung keine solch einfache Form. Praktische Rechnungen werden mit realistischeren Paar-Wechselwirkungen durchgeführt. Dabei ist die Fröhlichsche Näherung wenig geeignet, obwohl sie in der Entwicklung der Theorie eine wesentliche Rolle gespielt hat. Tatsächlich kann man die Elektron-Phonon-Wechselwirkung besser eliminieren. Ein allgemein anerkanntes Verfahren ist das von Eliashberg, das auf eine retardierte Paar-Wechselwirkung führt. Mit den Flussgleichungen haben wir eine instantane Wechselwirkung erhalten. Andreas Mielke (Europhys. Lett. 40 (1997) 195) hat nach beiden Verfahren die Sprungtemperatur berechnet und gefunden, dass nur Unterschiede von wenigen Prozenten auftreten.

Schließlich kommen wir noch einmal auf die Normalordnung aus Abschnitt 16.b zurück. Dort hatten wir die Normalordnung mittels Erwartungswerten $\langle c^\dagger c\rangle$ und $\langle cc^\dagger\rangle$ eingeführt. Tatsächlich haben wir (für $T=0$) neben (vgl. (19.27-19.29)

$$\langle c_k^\dagger c_k\rangle = \langle c_{-k}^\dagger c_{-k}\rangle = v_k^2, \quad \langle c_k c_k^\dagger\rangle = \langle c_{-k} c_{-k}^\dagger\rangle = u_k^2 \tag{19.46}$$

auch anomale von 0 verschiedene Paar-Erwartungswerte

$$\langle c_k^\dagger c_{-k}^\dagger\rangle = -\langle c_{-k}^\dagger c_k^\dagger\rangle = u_k v_k, \quad \langle c_{-k} c_k\rangle = -\langle c_k c_{-k}\rangle = u_k v_k. \tag{19.47}$$

Damit erhält man zum Beispiel nicht nur

$$c_k^\dagger c_k =: c_k^\dagger c_k : +v_k^2, \quad c_{-k}^\dagger c_{-k} =: c_{-k}^\dagger c_{-k} : +v_k^2 \tag{19.48}$$

sondern auch

$$c_k^\dagger c_{-k}^\dagger =: c_k^\dagger c_{-k}^\dagger : +u_k v_k, \quad c_{-k} c_k =: c_{-k} c_k : +u_k v_k. \tag{19.49}$$

Für den Hamilton-Operator erhält man dann

$$\begin{aligned} H - \mu\mathcal{N} &= \; : \sum_k (\epsilon_k - \mu)(c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k} + v_k^2) - \frac{V}{N} \sum_{k,k'} (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + u_k v_k)(c_{-k'} c_{k'} + u_{k'} v_{k'}) : \\ &= 2\sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - \frac{V}{N} \left(\sum_k u_k v_k \right)^2 \\ &+ \sum_k \Big((\epsilon_k - \mu) : (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k}) : -\Delta : (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_{-k} c_k) : \Big) + : O(c^\dagger c^\dagger cc) : \end{aligned} \tag{19.50}$$

Die Terme $: O(c^\dagger c^\dagger cc) :$ werden jetzt vernachlässigt. Der konstante Term ist die Grundzustandsenergie. Unter Berücksichtigung von $\epsilon_k - \mu = (u_k^2 - v_k^2)\hat\epsilon_k$, $\Delta = 2u_k v_k \hat\epsilon_k$ mit $\hat\epsilon_k = \sqrt{((\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}$ erhält man für die Anteile mit $c^\dagger c$, $c^\dagger c^\dagger$ und cc

$$\sum_k \hat\epsilon_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \alpha_{-k}^\dagger \alpha_{-k}) \tag{19.51}$$

wie in (19.32). Die Rekursions-Formeln (16.12 und 16.13) sind nun zu verallgemeinern zu

$$c_k^\dagger : A : \;=\; : c_k^\dagger A : + \sum_l \langle c_k^\dagger c_l\rangle : [c_l^\dagger, A]_\pm : + \sum_l \langle c_k^\dagger c_l^\dagger\rangle : [c_l, A]_\pm :, \tag{19.52}$$

$$c_k : A : \;=\; : c_k A : + \sum_l \langle c_k c_l^\dagger\rangle : [c_l, A]_\pm : + \sum_l \langle c_k c_l\rangle : [c_l^\dagger, A]_\pm : . \tag{19.53}$$

Dabei sind zuerst die Kommutatoren auszuwerten, so dass aus Monomen von A, die vom Grade m in $c^\dagger$ und c sind, solche vom Grade $m-1$ werden.

20 Elektrodynamik des Supraleiters

20.a Dauerströme

Landau hat folgendes Argument für Dauerströme gegeben: Er betrachtet einen Kristall der Masse M, der sich mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v}$ bewege. Ein Elektronengas bewege sich im Beobachtungssystem mit Geschwindigkeit 0. Reibung wird nun die Geschwindigkeit des Kristalls verringern und gleichzeitig das Elektronengas beschleunigen. Dies geschieht durch Erzeugung von Anregungen im Elektronengas. Anregungsenergie und Impuls seien $E_{\rm k}$ und $\mathbf{k}$. Dann muss gelten

$$\frac{M\mathbf{v}^2}{2} = \frac{M\mathbf{v}'^2}{2} + E_{\mathbf{k}}, \quad M\mathbf{v} = M\mathbf{v}' + \hbar\mathbf{k}, \tag{20.1}$$

wobei, $\mathbf{v}'$ die Geschwindigkeit nach der Anregung ist. Eliminiert man $\mathbf{v}'$, so bleibt

$$\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{v} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + E_{\mathbf{k}}. \tag{20.2}$$

Für eine makroskopische Masse kann der $1/M$-Term vernachlässigt werden. Der niedrigste Wert von $\mathbf{v}$, der diese Bedingung erfüllt, ist die kritsche Geschwindigkeit

$$v_{\rm c} = \text{ Minimum von } \frac{E_k}{\hbar k}. \tag{20.3}$$

Für den Supraleiter ist das etwa $\Delta/(\hbar k_{\rm F})$, da an der Fermikante die Anregungsenergie am geringsten ist.

20.b Meissner-Effekt und London-Gleichung

1935 wurde von F. und H. London phänomenologisch vorgeschlagen, dass in einem Supraleiter die Stromdichte durch

$$\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda_{\rm L}^2}\mathbf{A} \tag{20.4}$$

gegeben ist. Der Vorschlag erscheint zunächst ungewöhnlich, da man üblicherweise die Beziehung

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E} \tag{20.5}$$

mit der elektrischen Leitfähigkeit σ und der Feldstärke $\mathbf{E}$ hat. Ausgangspunkt dafür ist folgende Überlegung. Falls kein Bremsmechanismus vorhanden ist, erwartet man nach Newton

$$\mathrm{d}\mathbf{j}/\mathrm{d}t = \rho\dot{v} = n_{\rm s}e^2/m\mathbf{E} = -n_{\rm s}e^2/(mc)\dot{\mathbf{A}}, \tag{20.6}$$

wobei angenommen wird, dass man in einer Eichung arbeitet, in der das Potential $\Phi = 0$ ist. $n_{\rm s}$ ist dabei die Dichte der supraleitenden Ladungsträger. Integration nach der Zeit ergibt (20.4). Wir werden unten zeigen, dass diese Beziehung im supraleitenden Zustand besteht, wollen aber erst ihre Konsequenz betrachten. Hierbei ist auch zu beachten, dass London eine bestimmte Eichung vorausgesetzt haben, die insbesondere $\mathrm{div}\mathbf{A} = 0$ und das verschwinden der Normalkomponente von $\mathbf{A}$ an einer Oberfläche, durch die kein Strom tritt, forderte. Aus (20.4) folgt

$$\mathrm{rot}\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda_{\rm L}^2}\mathbf{B} \tag{20.7}$$

und mit der Maxwell-Gleichung

$$\mathrm{rot}\mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j} \tag{20.8}$$

folgt

$$\mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\mathbf{B}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\lambda_{\rm L}^2}\mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad \text{oder} \quad -\triangle\mathbf{B}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\lambda_{\rm L}^2}\mathbf{B}(\mathbf{r}). \tag{20.9}$$

Daraus folgt, dass es im Supraleiter kein homogenes Magnetfeld gibt. Vielmehr fällt ein an der Oberfläche eines Supraleiters parallel anliegendes Magnetfeld im Inneren exponentiell ab, $\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}(0)\mathrm{e}^{-x/\lambda_{\rm L}}$. Man bezeichnet $\lambda_{\rm L}$ als die Londonsche Eindringtiefe. Gleichzeitig bewirkt dieser exponentielle Abfall einen Strom an der Oberfläche, der das Magnetfeld abschirmt. Ein Supraleiter ist ein perfekter Diamagnet.

20.c Störungstheorie

Um die London-Gleichung mikroskopisch herzuleiten, müssen wir untersuchen, welchen Strom ein Vektor-Potential erzeugt. Dazu führen wir eine Störungstheorie in $\mathbf{A}$ durch und betrachten zunächst das generelle Schema der Störungstheorie. Sei

$$H(t) = H_0 + H'(t) \tag{20.10}$$

der Hamilton-Operator H_0 mit einer zeitabhängigen Störung $H'(t)$. Wir bestimmen nun die Veränderung der Dichtematrix ρ auf Grund dieser Störung in erster Ordnung in H'. Wir setzen an

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho'(t). \tag{20.11}$$

Dabei beschreibe ρ_0 einen Gleichgewichtszustand zu H_0. Wir betrachten nun die von-Neumann-Gleichung

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\dot{\rho}(t) &= [H(t), \rho(t)], & (20.12)\\ \mathrm{i}\hbar\dot{\rho}'(t) &= [H_0, \rho'(t)] + [H'(t), \rho_0]. & (20.13) \end{aligned}$$

Beim Übergang von der ersten zur zweiten Zeile haben wir berücksichtigt, dass ρ_0 mit H_0 kommutiert, da ρ_0 ein Gleichgewichts-Ensemble zu H_0 beschreibt. Weiter haben wir den Kommutator $[H'(t), \rho'(t)]$ vernachlässigt, da er bereits von zweiter Ordnung in der Störung ist. Wir lösen nun (20.13). Dazu führen wir die Heisenberg-Operatoren ein (sie lösen die homogene Gleichung für ρ'.)

$$\hat{\rho}'(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}\rho'(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar}, \quad \hat{H}'(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}H'(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar}. \tag{20.14}$$

Mit diesen Operatoren reduziert sich Gleichung (20.13) auf

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\hat{\rho}}'(t) = -[H_0, \hat{\rho}'] + \mathrm{i}\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}\dot{\rho}'(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar} = [\hat{H}'(t), \rho_0] \tag{20.15}$$

mit der Lösung

$$\begin{aligned} \hat{\rho}'(t) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'[\hat{H}'(t'), \rho_0], & (20.16)\\ \rho'(t) &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar}[\hat{H}'(t'), \rho_0]\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}. & (20.17) \end{aligned}$$

Für den Erwartungswert eines Operators C zur Zeit t ergibt das

$$\begin{aligned} \langle C\rangle(t) &= \langle C\rangle_0(t) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\mathrm{tr}(C\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar}[\hat{H}'(t'), \rho_0]\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar})) \\ &= \langle C\rangle_0(t) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\mathrm{tr}(\hat{C}(t)[\hat{H}'(t'), \rho_0]) \\ &= \langle C\rangle_0(t) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\langle[\hat{C}(t), \hat{H}'(t')]\rangle_0, \qquad (20.18) \end{aligned}$$

wobei der Index $_0$ angibt, dass die Auswertung mit der Gleichgewichtsgesamtheit ρ_0 erfolgt.

20.d Herleitung der London-Gleichung

Wir wollen dies nun auf den Strom in einem Supraleiter anwenden. Wir gehen aus von einem zeitabhängigen Vektorpotential $\mathbf{A}$ und fragen nach dem daraus resultierenden Strom $\mathbf{j}$.

In (16.20) hatten wir für die Ladungsdichte die Darstellung

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{e}{V_\mathrm{P}}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',s} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}'s} \tag{20.19}$$

gefunden, wobei wir jetzt die Ladung e mit berücksichtigt haben. Für die Stromdichte erhält man zunächst

$$\mathbf{j}_0(\mathbf{r}) = \frac{e\hbar}{mV_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',s} \frac{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}{2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}'s}. \tag{20.20}$$

Fügt man noch ein Vektorpotential hinzu, so erhält man den zusätzlichen Term

$$\mathbf{j}_\mathrm{A}(\mathbf{r}) = -\frac{e}{mc}\rho(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r}). \tag{20.21}$$

Wir wollen nun betrachten, was ein zeitabhängiges Vektorpotential zum Strom beiträgt. In erster Ordnung in $\mathbf{A}$ erhalten wir zunächst den Beitrag

$$\langle \mathbf{j}_\mathrm{A}(\mathbf{r})\rangle_\mathrm{A} = -\frac{e^2 n}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r}). \tag{20.22}$$

Ein weiterer Beitrag ergibt sich aus der ersten Ordnung Störungsrechnung. Wir setzen dazu $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ an und finden die Störung

$$H' = -\frac{1}{c}\int \mathrm{d}^3 r \mathbf{j}_0(\mathbf{r})\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{e\hbar}{mc}\sum_{\mathbf{k},s}(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2})\cdot\mathbf{A}_0 c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}. \tag{20.23}$$

Damit erhalten wir für $\mathbf{j}_0$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r})\rangle_\mathrm{A} &= \mathrm{i}\frac{e^2\hbar}{m^2 c V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'',s,s'} \frac{\mathbf{k}''+\mathbf{k}'}{2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}'')\cdot\mathbf{r}}((\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2})\cdot\mathbf{A}_0) \\
&\times \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \langle [\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}''s'}(t)\hat{c}_{\mathbf{k}'s'}(t), \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}s}(t')\hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t')]\rangle_0,
\end{aligned} \tag{20.24}$$

wobei angenommen wird, dass für $\mathbf{A}=0$ kein Strom fließt, also $\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r})\rangle_0 = 0$. Wegen der Translations-Invarianz erhält man nur Beiträge für $\mathbf{k}''+\mathbf{k} = \mathbf{k}'+\mathbf{k}-\mathbf{q}$. Das erlaubt $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}'-\mathbf{q}$ zu setzen. Damit reduziert sich $\frac{\mathbf{k}''+\mathbf{k}'}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}'')\cdot\mathbf{r}} = (\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$. Bei der Berechnung des Kommutators ist nun zu faktorisieren. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten zu kontrahieren und zwar mit a) $\mathbf{k}'' = \mathbf{k}-\mathbf{q}$, $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, $s' = s$ und b) $\mathbf{k}'' = -\mathbf{k}$, $\mathbf{k}' = \mathbf{q}-\mathbf{k}$, $s' = -s$. Damit bleibt dann

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r})\rangle_\mathrm{A} &= \mathrm{i}\frac{e^2\hbar}{m^2 c V_\mathrm{P}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k},s}(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2})((\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2})\cdot\mathbf{A}_0)\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'(K_1+K_2), && (20.25)\\
K_1 &= \langle \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t)\hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t')\rangle_0 \, \langle \hat{c}_{\mathbf{k}s}(t)\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}s}(t')\rangle_0 \\
&- \langle \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t')\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t)\rangle_0 \, \langle \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}s}(t')\hat{c}_{\mathbf{k}s}(t)\rangle_0, && (20.26)\\
K_2 &= \langle \hat{c}^\dagger_{-\mathbf{k}-s}(t)\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}s}(t')\rangle_0 \, \langle \hat{c}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-s}(t)\hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t')\rangle_0 \\
&- \langle \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}s}(t')\hat{c}^\dagger_{-\mathbf{k}-s}(t)\rangle_0 \, \langle \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}s}(t')\hat{c}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}-s}(t)\rangle_0. && (20.27)
\end{aligned}$$

Zur weiteren Auswertung gehen wir auf die Operatoren α, (19.26,19.27) über und erhalten zum Beispiel

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(t)\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow}(t')\rangle_0 = \langle (u_k\hat{\alpha}_k(t) + v_k\hat{\alpha}^\dagger_{-k}(t))(u_k\hat{\alpha}^\dagger_k(t') + v_k\hat{\alpha}_{-k}(t'))\rangle_0. \tag{20.28}$$

Mit

$$\hat{\alpha}^\dagger_k(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\epsilon}_k t/\hbar}\alpha^\dagger_k, \quad \hat{\alpha}_k(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\epsilon}_k t/\hbar}\alpha_k, \quad \hat{\epsilon}_k = \sqrt{(\epsilon_k-\mu)^2+\Delta^2} \tag{20.29}$$

folgt dann

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k}s}(t)\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}s}(t')\rangle_0 = u_k^2(1-f(\hat{\epsilon}_k))\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\epsilon}_k(t'-t)/\hbar} + v_k^2 f(\hat{\epsilon}_k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\epsilon}_k(t-t')/\hbar}. \tag{20.30}$$

Wir führen die Abkürzungen

$$u = u_\mathbf{k}, \quad u' = u_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \qquad v = v_\mathbf{k}, \quad v' = v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \tag{20.31}$$

$$f = f(\hat{\epsilon}_\mathbf{k}), \quad f' = f(\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}), \qquad e_\pm = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\hat{\epsilon}_\mathbf{k}(t'-t)/\hbar}, \quad e'_\pm = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t'-t)/\hbar} \tag{20.32}$$

ein. Dann folgt

$$\begin{aligned} K_1 &= (u'^2 f' e'_- + v'^2(1-f')e'_+)(u^2(1-f)e_+ + v^2 f e_-) \\ &- (u'^2(1-f')e'_- + v'^2 f' e'_+)(u^2 f e_+ + v^2(1-f)e_-), \end{aligned} \tag{20.33}$$

$$\begin{aligned} K_2 &= uvu'v'(fe_- - (1-f)e_+)((1-f')e'_+ - f'e'_-) \\ &- uvu'v'((1-f)e_- - fe_+)(f'e'_+ - (1-f')e'_-), \end{aligned} \tag{20.34}$$

wobei beide Spineinstellungen das gleiche Ergebnis liefern. Geordnet nach den Faktoren e und e' erhält man

$$K_1+K_2 = (e_+e'_+uv'+e_-e'_-u'v)(uv'-u'v)(1-f-f')+(e_+e'_-uu'-e_-e'_+vv')(uu'+vv')(f'-f). \tag{20.35}$$

Berücksichtigt man das Zeitintegral ($w, w' = \pm 1$)

$$\mathrm{i}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' e_w e'_{w'} = \mathrm{i}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \mathrm{e}^{\mathrm{i}w\hat{\epsilon}_k(t'-t)/\hbar + \mathrm{i}w'\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(t-t')/\hbar} = \frac{\hbar}{w\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} + w'\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}, \tag{20.36}$$

wobei wir wieder angenommen haben, dass die Störung langsam eingeschaltet wird, so folgt schließlich

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'(K_1+K_2) = \frac{(u'v-uv')^2(1-f-f')}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} + \frac{(uu'+vv')^2(f'-f)}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \tag{20.37}$$

Wir betrachten nun den Limes $q \to 0$. In diesem Limes wird $u' = u$, $v' = v$, so dass der erste Term verschwindet, da der Nenner mindestens gleich 2Δ ist. Beim zweiten Term ist $uu' + vv' = 1$ zu setzen und $\frac{f'-f}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}$ wird durch die Ableitung $-\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\hat{\epsilon}}$ ersetzt.

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'(K_1+K_2) = -\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\hat{\epsilon}}. \tag{20.38}$$

Damit finden wir schließlich

$$\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r})\rangle_{\mathrm{A}} = \frac{e^2\hbar^2}{m^2 c V_{\mathrm{P}}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k},s} \mathbf{k}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}_0)(-\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\hat{\epsilon}}). \tag{20.39}$$

Mitteln wir nun über alle Richtungen, dann wird $\mathbf{k}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}_0)$ ersetzt durch $\mathbf{A}_0 k^2/3$, und wir erhalten

$$\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{r})\rangle_{\mathrm{A}} = \mathbf{A}(\mathbf{r})\frac{e^2\hbar^2}{m^2 c}\frac{2}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\int_0^\infty \mathrm{d}k k^4 \left(-\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\hat{\epsilon}_k}\right). \tag{20.40}$$

Damit finden wir

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{r})\rangle_{A} = \langle \mathbf{j}_{\mathrm{A}}(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_0(\mathbf{r})\rangle = -\frac{e^2}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r}) n_{\mathrm{s}} \tag{20.41}$$

mit

$$n_{\mathrm{s}} = n - \frac{\hbar^2}{m}\frac{2}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\int \mathrm{d}k k^4 \left(-\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\hat{\epsilon}_k}\right), \tag{20.42}$$

wobei man n_{s} als die supraleitende Dichte bezeichnet. Im supraleitenden Zustand trägt der zweite Term bei der Temperatur 0 nicht bei, da f für alle k-Werte gleich 0 ist. Im normalleitenden Zustand setzt man $|\epsilon - \mu|$ für $\hat{\epsilon}$ ein oder, da die Ableitung von f symmetrisch im Argument $\epsilon - \mu$ ist, auch einfach $\epsilon - \mu$. Dann findet man mit $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}k}\frac{m}{\hbar^2 k}$

$$n_{\mathrm{s}} = n - \frac{2}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}k_{\mathrm{F}}^3 = n - n = 0. \tag{20.43}$$

Im normalleitenden Zustand heben sich also die Beiträge weg. Tatsächlich fällt n_{s} von der Temperatur 0 bis zur Sprungtemperatur T_{c} monoton auf 0 ab. Die Londonsche Eindringtiefe ergibt sich dann zu

$$\lambda_{\mathrm{L}} = \frac{c}{e}\sqrt{\frac{m}{4\pi n_{\mathrm{s}}}}. \tag{20.44}$$

21 Hubbard-Modell

Bisher haben wir für die Elektronen das Bändermodell zu Grunde gelegt. Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen haben wir nur als Hartree-Fock-Potential wie auch für die dielektrischen Eigenschaften im Rahmen der RPA berücksichtigt (Abschnitt 16 und 17). Tatsächlich hat die abstoßende Wechselwirkung zwischen den Elektronen weitreichendere Konsequenzen, da sie zu starken Korrelationen (oder Anti-Korrelationen) im Festkörper führt. Dieses Gebiet der starken Korrelationen ist zur Zeit ein wichtiges Forschungsgebiet in der Festkörperphysik.

J.Hubbard (und zur gleichen Zeit unabhängig auch J. Kanamori und M.C. Gutzwiller) haben 1963 ein Modell zur Beschreibung von stark korrelierten elektronischen Systemen vorgeschlagen, das heute Hubbard-Modell genannt wird. Sie nehmen an, dass ein wesentlicher Effekt der Coulomb-Wechselwirkung in einer Abstossung von zwei Elektronen am gleichen Gitterplatz besteht. Sie fügen daher zu dem Einteilchen-tight-binding Hamilton-Operator

$$H_{\rm kin} = -\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,s} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} c_s^\dagger(\mathbf{R}_1) c_s(\mathbf{R}_2) \tag{21.1}$$

noch eine Abstoßung hinzu,

$$H_{\rm int} = U\sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R}) n_\downarrow(\mathbf{R}) \tag{21.2}$$

mit den Teilchenzahloperatoren

$$n_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}) = c^\dagger_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}) c_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}) \tag{21.3}$$

am Ort $\mathbf{R}$ hinzu.

21.a Mott-Metall-Isolator-Übergang

Dieses Modell wurde zunächst eingeführt, um zu verstehen, dass ein System mit einer ungeraden Anzahl von Leitungselektronen pro Elementarzelle ein Isolator sein kann. Man würde erwarten, dass solch ein System ein Metall ist, da die Bänder auf Grund der Kramers-Entartung jeweils zweifach entartet sind (siehe Abschnitt 12.d). Daher ist das oberste Band dann nur halb gefüllt und sollte daher metallisch sein. Der Grund für das isolierende Verhalten liegt in Folgendem: Wir nehmen an, das Band sei halb gefüllt. Dann werden sich bei starker Abstoßung U die Elektronen aus dem Weg gehen. Jeder Gitterplatz ist einfach besetzt. Nimmt man nun ein Elektron weg, so wird man eine typische Bandenergie der Größenordnung $\pm tz$ gewinnen, wobei z die Koordinationszahl, also die Anzahl der nächsten Nachbarn ist. Fügt man dagegen ein Elektron hinzu, so muss man nicht nur die Energie $\pm tz$ aufwenden, sondern zusätzlich noch die Energie U, da das Elektron sich nur auf an einem schon von einem Elektron besetzten Ort bewegen kann. Damit erhält man für die Valenz-Elektronen, grob gesagt, ein Band von $-tz$ bis $+tz$, für die Leitungselektronen dagegen von $U - tz$ bis $U + tz$. Falls $U > 2tz$, tritt eine Energielücke auf. Man spricht daher von dem unteren und dem oberen Hubbard-Band und spricht von einem Mott-Isolator.

21.b Pauli-Paramagnetismus und Stoner-Kriterium

Wir wollen uns nun ansehen, wie das System auf ein äußeres Magnetfeld reagiert. Dazu schreiben wir den Hamilton-Operator mit einem äußeren Feld

$$H - \mu\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{k}s}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} + U\sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R}) n_\downarrow(\mathbf{R}) - \mu_{\rm B} B \sum_{\mathbf{R},s} s n_s(\mathbf{R}). \tag{21.4}$$

Dabei haben wir den g-Faktor gleich 2 gesetzt. Wir erwarten, dass bei Anlegen des äußeren Feldes die Elektronen mit Spin nach oben und die mit Spin nach unten unterschiedliche Besetzung haben und setzen daher unterschiedliche Erwartungswerte $n_\uparrow$ und $n_\downarrow$ an. Für den Erwartungswert des Hamilton-Operators erhalten wir

$$\langle H - \mu\mathcal{N}\rangle = \sum_{\mathbf{k},s}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \mu_{\rm B} B s) n_{\mathbf{k}s} + U N_{\rm s} n_\uparrow n_\downarrow \tag{21.5}$$

mit

$$n_s = \frac{1}{N_\mathrm{s}} \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k}s}. \tag{21.6}$$

Durch Ableiten des großkanonischen Potentials erhalten wir

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}n_{\mathbf{k}s}} = \epsilon_\mathbf{k} - \mu - \mu_\mathrm{B} Bs + Un_{-s} - T\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}n_{\mathbf{k}s}} \tag{21.7}$$

woraus wieder

$$n_{\mathbf{k}s} = f(\epsilon_\mathbf{k} - \mu - \mu_\mathrm{B} Bs + Un_{-s}) \tag{21.8}$$

folgt. Wir betrachten nun die Magnetisierung

$$M = \mu_\mathrm{B} \frac{N_\mathrm{s}}{V_\mathrm{P}} (n_\uparrow - n_\downarrow) \tag{21.9}$$

und die Suszeptibilität

$$\chi = \frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}B} = \frac{\mu_\mathrm{B}}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\mathrm{d}sn_{\mathbf{k},s}}{\mathrm{d}B} = \frac{\mu_\mathrm{B}}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon_k} \left(-\mu_\mathrm{B} + Us\frac{\mathrm{d}n_{-s}}{\mathrm{d}B} \right). \tag{21.10}$$

Ausgehend vom nicht magnetisierten Zustand lässt sich das in

$$\left(1 + \frac{U}{N_\mathrm{s}} \sum_\mathbf{k} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon_\mathbf{k}} \right) \chi = \frac{2\mu_\mathrm{B}^2}{V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} \left(-\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon_\mathbf{k}} \right) \tag{21.11}$$

umformen. Man beobachtet, dass sich für niedrige Temperaturen die Summe

$$-\frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon_\mathbf{k}} = \frac{1}{2} D(\epsilon_\mathrm{F}) \tag{21.12}$$

durch die Zustandsdichte an der Fermikante ausdrücken lässt. Damit folgt für die Suszeptibilität mit $\hat{U} = V_\mathrm{P} U/N_\mathrm{s} = V_\mathrm{z} U$

$$\chi = \frac{\mu_\mathrm{B}^2 D(\epsilon_\mathrm{F})}{1 - \frac{1}{2}\hat{U} D(\epsilon_\mathrm{F})} \tag{21.13}$$

Siehe Hunklinger-Enss: Pauli-Paramagnetismus Abschnitt 7.2 S. 211-212 für $U = 0$. Solange

$$\frac{1}{2}\hat{U} D(\epsilon_\mathrm{F}) < 1, \tag{21.14}$$

ist das System paramagnetisch. Wenn dieses nach Stoner benannte Kriterium nicht erfüllt ist, das heißt bei größerem U oder größerer Zustandsdichte, ist die Lösung $M = 0$ bei $B = 0$ nicht stabil.Das System wird ferromagnetisch. Voraussetzung ist, dass es nicht noch leichter in einen anderen Ordnungszustand übergeht.

21.c Antiferromagnetismus

Tatsächlich zeigt das Hubbard-Modell eine Reihe weiterer interessanter Eigenschaften. Eine dieser Eigenschaften ist, dass es bei halber Füllung antiferromagnetische Ordnung aufweist, falls es sich um ein paares Gitter handelt, d.h. falls es sich in zwei Untergitter A und B aufteilen lässt, so dass alle nächsten Nachbarn von Gitterpunkten aus A Gitterpunkte in B sind und umgekehrt. Ein quadratisches Gitter hat solch eine Eigenschaft. Markieren wir die Gitterpunkte abwechselnd weiß und schwarz wie bei einem Schachbrett, so haben wir die beiden Untergitter gekennzeichnet. Auch ein einfach kubisches Gitter und ein kubisch-raumzentriertes Gitter haben diese Eigenschaft. Dagegen hat ein Dreiecksgitter und ein kubisch flächenzentriertes Gitter diese Eigenschaft nicht.

Wir wollen diesen Antiferromagnetismus jetzt betrachten. In diesem Antiferromagneten sind abwechselnd an den Gitterpunkten mehr Spins nach oben oder nach unten. Wir setzen daher an

$$\langle n_s(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{2}(n + ms\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}}), \tag{21.15}$$

wobei der Wellenvektor $\mathbf{q}_0$ so gewählt ist, dass

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}} = \begin{cases} 1 & \mathbf{R}\in A, \\ -1 & \mathbf{R}\in B \end{cases} \tag{21.16}$$

gilt. Für ein quadratisches Gitter mit Gitterkonstante a gilt $\mathbf{q}_0 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, für ein einfaches kubisches Gitter (sc) $\mathbf{q}_0 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ und für ein raumzentriertes kubisches Gitter (bcc) $\mathbf{q}_0 = (\frac{2\pi}{a}, 0, 0)$. Damit formen wir um

$$\begin{aligned} n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}) &= :(n_\uparrow(\mathbf{R}) + \frac{1}{2}(n + m\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}}))(n_\downarrow(\mathbf{R}) + \frac{1}{2}(n - m\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}})): \\ &= \frac{1}{4}(n^2 - m^2) + \frac{1}{2}\sum_s(n - ms\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}}) : n_s(\mathbf{R}) : + : n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}) : \end{aligned} \tag{21.17}$$

Beachten wir noch, dass

$$\sum_{\mathbf{R}} c^\dagger(\mathbf{R})c(\mathbf{R})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}} = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{k},\mathbf{k}'} c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}_0)\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}'}\delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}_0,\mathbf{0}} = \sum_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}, \tag{21.18}$$

dann erhalten wir für den Hamilton-Operator bei Vernachlässigung der $:nn:$-Terme

$$H - \mu\mathcal{N} = E_0 + \sum_{\mathbf{k},s}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \frac{Un}{2}) : c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s} : - \frac{Um}{2}\sum_{\mathbf{k},s} s : c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} :, \tag{21.19}$$

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k},s}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)n_{\mathbf{k}s} + \frac{UN_\mathrm{s}}{4}(n^2 - m^2) \tag{21.20}$$

mit

$$n = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{R},s}\langle n_s(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k},s}\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s}\rangle, \quad m = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{R},s} s\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}}\langle n_s(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k},s} s\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}\rangle. \tag{21.21}$$

Bevor wir diese Gleichungen lösen, beachten wir, dass wir nur Hüpf-Matrix-Elemente zwischen den Untergittern A und B haben. Daraus folgt für den Einteilchen-Hamilton-Operator

$$-\sum t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2}c^\dagger(\mathbf{R}_1)c(\mathbf{R}_2) = \sum \epsilon_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}} \tag{21.22}$$

mit

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{R}} t_{\mathbf{R}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tag{21.23}$$

Da zwischen verschiedenen Untergittern $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)} = -1$, folgt dann

$$\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0} = -\epsilon_{\mathbf{k}}. \tag{21.24}$$

Wir zerlegen nun die Brillouinzone in zwei Anteile, so dass in einem der Vektor $\mathbf{k}$, im anderen $\mathbf{k}+\mathbf{q}_0$ liegt und bezeichnen die Summe über einen Teil mit einem Strich. Tatsächlich haben wir beim Eintreten des Antiferromagnetismus eine Gitterzelle doppelter Größe, da jetzt in einer Gitterzelle sowohl ein Gitterpunkt des Untergitters A wie auch des Untergitters B liegt. Dieser Verdoppelung der Wigner-Seitz-Zelle entspricht eine Halbierung der Brillouinzone. Wir können dann den Hamilton-Operator in der Form

$$\begin{aligned} H-\mu\mathcal{N}=E_0 &+ (\frac{Un}{2}-\mu)\sum_{\mathbf{k},s}{}' : c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s}+c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}: \\ &+ \sum_{\mathbf{k},s}{}' \epsilon_{\mathbf{k}} : c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s}-c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}: \\ &- \frac{Um}{2}\sum_{\mathbf{k},s}{}' s : c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}+c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}c_{\mathbf{k}s}: \end{aligned} \tag{21.25}$$

schreiben. Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung bilden wir die Kommutatoren

$$[H-\mu\mathcal{N},c^\dagger_{\mathbf{k}s}] = (\frac{Un}{2}-\mu+\epsilon_{\mathbf{k}})c^\dagger_{\mathbf{k}s}-\frac{Ums}{2}c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}, \tag{21.26}$$

$$[H-\mu\mathcal{N},c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}] = -\frac{Ums}{2}c^\dagger_{\mathbf{k}s}+(\frac{Un}{2}-\mu-\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s})c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}. \tag{21.27}$$

Eigenlösungen

$$[H-\mu\mathcal{N},\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}]=(\frac{Un}{2}-\mu+\hat\epsilon_k)\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s} \tag{21.28}$$

kann man mit dem Ansatz

$$\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}=u_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}s}+sv_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s} \tag{21.29}$$

finden. Mit diesem Ansatz sind die beiden Gleichungen

$$\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}-\frac{Um}{2}v_{\mathbf{k}} = \hat\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}, \tag{21.30}$$

$$-\frac{Um}{2}u_{\mathbf{k}}-\epsilon_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \hat\epsilon_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \tag{21.31}$$

zu erfüllen. Multiplizieren wir die erste Gleichung mit $u_{\mathbf{k}}$, die zweite mit $v_{\mathbf{k}}$ und addieren und subtrahieren wir die Gleichungen, so erhalten wir, wenn wir auch noch die Normierung

$$u^2_{\mathbf{k}}+v^2_{\mathbf{k}}=1 \tag{21.32}$$

fordern,

$$\hat\epsilon_{\mathbf{k}} = (u^2_{\mathbf{k}}-v^2_{\mathbf{k}})\epsilon_{\mathbf{k}}-Umu_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}, \tag{21.33}$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = (u^2_{\mathbf{k}}-v^2_{\mathbf{k}})\hat\epsilon_{\mathbf{k}} \tag{21.34}$$

Multiplizieren wir die Gleichung (21.30) mit $v_{\mathbf{k}}$ und (21.31) mit $u_{\mathbf{k}}$, dann folgt

$$-\frac{Um}{2}=2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\hat\epsilon_{\mathbf{k}}. \tag{21.35}$$

Aus diesen drei Gleichungen erhält man dann

$$u^2_{\mathbf{k}}-v^2_{\mathbf{k}}=\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\hat\epsilon_{\mathbf{k}}},\quad 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}=-\frac{Um}{2\hat\epsilon_{\mathbf{k}}},\quad \hat\epsilon_{\mathbf{k}}=\sqrt{(\frac{Um}{2})^2+\epsilon^2_{\mathbf{k}}}. \tag{21.36}$$

Eine zweite Eigenlösung ergibt sich mit

$$\beta^\dagger_{\mathbf{k}s}=-sv_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}s}+u_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s} \tag{21.37}$$

zu

$$[H-\mu\mathcal{N},\beta^\dagger_{\mathbf{k}s}]=(\frac{Un}{2}-\mu-\hat\epsilon_k)\beta^\dagger_{\mathbf{k}s}. \tag{21.38}$$

Man hat also zwei Arten von Anregungen, die durch eine Lücke $U|m|$ von einander getrennt sind, da für die α-Anregungen die Einteilchenergien größer gleich $\frac{Un}{2} - \mu + \frac{U|m|}{2}$ sind, während sie für die β-Anregungen kleiner gleich $\frac{Un}{2} - \mu - \frac{U|m|}{2}$ sind. Man überzeugt sich leicht davon, dass die Operatoren $\alpha^\dagger$, α, $\beta^\dagger$, β den bekannten Anti-Kommutator-Beziehungen für Fermionen genügen. Den Hamilton-Operator können wir dann

$$H - \mu\mathcal{N} = E_0 + {\sum_{\mathbf{k}s}}'\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) : \alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}\alpha_{\mathbf{k}s} + {\sum_{\mathbf{k}s}}'\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) : \beta^\dagger_{\mathbf{k}s}\beta_{\mathbf{k}s} : . \tag{21.39}$$

schreiben. Man erhält für die Erwartungswerte

$$\langle\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}\alpha_{\mathbf{k}'s'}\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{s,s'}f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right), \quad \langle\beta^\dagger_{\mathbf{k}s}\beta_{\mathbf{k}'s'}\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{s,s'}f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right). \tag{21.40}$$

Es bleibt nun die Selbstkonsistenz-Gleichung (21.21) für m

$$m = \frac{1}{N_\mathrm{s}}{\sum_{\mathbf{k}s}}' s\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} + c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}c_{\mathbf{k}s}\rangle, \tag{21.41}$$

zu lösen. Zunächst drücken wir die Erzeuger $c^\dagger$ durch $\alpha^\dagger$ und $\beta^\dagger$ aus,

$$c^\dagger_{\mathbf{k}s} = u_{\mathbf{k}}\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s} - sv_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{\mathbf{k}}, \quad c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} = sv_{\mathbf{k}}\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s} + u_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{\mathbf{k}s}. \tag{21.42}$$

Damit folgt dann für die Erwartungswerte

$$\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s}\rangle = u^2_{\mathbf{k}}f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) + v^2_{\mathbf{k}}f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right), \tag{21.43}$$

$$\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}\rangle = v^2_{\mathbf{k}}f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) + u^2_{\mathbf{k}}f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right), \tag{21.44}$$

$$\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}\rangle = \langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}c_{\mathbf{k}s}\rangle = su_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\left(f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) - f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right)\right) \tag{21.45}$$

und

$$n = \frac{2}{N_\mathrm{s}}{\sum_{\mathbf{k}}}'\left(f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) + f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right)\right), \tag{21.46}$$

$$m = \frac{4}{N_\mathrm{s}}{\sum_{\mathbf{k}}}' u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\left(f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) - f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right)\right) \tag{21.47}$$

$$= \frac{Um}{N_\mathrm{s}}{\sum_{\mathbf{k}}}' \frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}\left(f\left(\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) - f\left(\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right)\right) \tag{21.48}$$

Man sieht, dass $m = 0$ immer eine Lösung ist. Für $\mu = Un/2$ erreicht man halbe Besetzung, das heißt im Mittel ist jeder Gitterplatz einfach besetzt. Dann ergibt sich für halbe Füllung

$$m = \frac{Um}{N_\mathrm{s}}{\sum_{\mathbf{k}}}' \frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}(f(-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}) - f(\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})) = \frac{Um}{N_\mathrm{s}}{\sum_{\mathbf{k}}}' \frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}\frac{1 - \mathrm{e}^{-\beta\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}}{1 + \mathrm{e}^{-\beta\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}}. \tag{21.49}$$

Dies ist die gleiche Gleichung wie für die Lücke in der Supraleitung (19.41), wobei m durch Δ und V durch U ersetzt ist. Man erhält also bei halber Füllung bei tiefen Temperaturen stets Antiferromagnetismus. An die Stelle von $\hbar\omega_\mathrm{D}$ tritt dann etwa die halbe Breite W des Elektronenbandes in (19.42). Unter der vereinfachten Annahme, dass die Zustandsdichte D im Band konstant ist, folgt aus

$$V_\mathrm{P}\int_{-W}^{W} D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon = 2N_\mathrm{s} \quad \rightarrow \quad V_\mathrm{z}WD = 1. \tag{21.50}$$

Damit ergibt sich aus (19.44) für die Übergangstemperatur zum Antiferromagnetismus unter Berücksichtigung, dass in (21.49) nur über die eine Hälfte der **k** summiert wir, während in (19.41) über alle summiert wird,

$$k_\mathrm{B}T_\mathrm{c} = 1.14W\mathrm{e}^{-2/(\hat{U}D)} = 1.14W\mathrm{e}^{-2W/U}. \tag{21.51}$$

Die Übergangs-Temperatur wächst also mit U an.

Allerdings ist die Situation anders, wenn man die halbe Füllung verlässt. In diesem Fall hat man für den Grundzustand, der gerade noch nicht antiferromagnetisch ist,

$$n = 1 + \delta V_\mathrm{z} D(0) \text{ mit } \mu = \frac{Un}{2} + \delta \tag{21.52}$$

wobei D die Zustandsdichte ohne Wechselwirkung ist. Im Grenzfall $m \to 0$ erhält man dann

$$1 = \frac{U}{4} V_\mathrm{z} \int_{|\delta|}^{W} \mathrm{d}\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\epsilon} = \frac{UV_\mathrm{z}D}{4} \ln \frac{W}{|\delta|}, \tag{21.53}$$

wobei W von der Größenordnung der halben Bandbreite ist. Aus diesen beiden Gleichungen ergibt sich dann, dass der Antiferromagnetismus bei

$$n = 1 \pm \mathrm{e}^{-4W/U} \tag{21.54}$$

verschwindet. Er ist also nur in der Umgebung halber Füllung zu erwarten.

22 Das t-J-Modell

Im Grenzfall großen Us wird die Anzahl der Doppelbesetzungen an einem Gitterplatz minimal sein. Daher wird für $n < 1$ keine Doppelbesetzung auftreten, bei $n > 1$ hat man Doppelbesetzung, aber kein Gitterplatz wird leer bleiben. Bei $n = 1$ wird jeder Gitterplatz genau einmal besetzt sein. Die zusätzlichen Elektronen werden sich dann auf dem Hintergrund dieser Einfachbesetzung bewegen. Tatsächlich gibt es natürlich virtuelle Anregungen, bei denen die Doppelbesetzung höher ist. Dabei springt ein Elektron auf einen bereits einfach besetzten Platz, unmittelbar danach springt dieses oder das andere Elektron zurück. Springt das andere zurück, so bedeutet das einen Austausch zwischen den Spins der benachbarten Elektronen und damit eine effektive Spin-Spin-Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins. Diese wollen wir nun berechnen. Dazu teilen wir den Hamilton-Operator in drei Anteile,

$$H = H_0 + H_+ + H_- + H_{\text{int}}. \tag{22.1}$$

Dabei ist H_0 der Anteil der kinetischen Energie, bei dem sich die Anzahl der Doppelbesetzungen nicht ändert, H_+ erhöht die Anzahl der Doppelbesetzungen um 1, H_- vermindert sie um 1. Hierzu zerlegen wir

$$c_s^\dagger(\mathbf{R}) = e_s^\dagger(\mathbf{R}) + d_s^\dagger(\mathbf{R}), \quad e_s^\dagger(\mathbf{R}) = (1 - n_{-s}(\mathbf{R}))c_s^\dagger(\mathbf{R}), \quad d_s^\dagger(\mathbf{R}) = n_{-s}(\mathbf{R})c_s^\dagger(\mathbf{R}). \tag{22.2}$$

$e^\dagger$ erzeugt ein Elektron an einem leeren Platz, während $d^\dagger$ ein Elektron an einem Platz erzeugt, der schon mit einem Elektron mit umgekehrter Sprinrichtung besetzt ist.

$$\begin{aligned}
H_0 &= \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} \left(e_s^\dagger(\mathbf{R})e_s(\mathbf{R}') + d_s^\dagger(\mathbf{R})d_s(\mathbf{R}')\right), && (22.3)\\
H_+ &= \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} d_s^\dagger(\mathbf{R})e_s(\mathbf{R}), && (22.4)\\
H_- &= \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',s} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} e_s^\dagger(\mathbf{R})d_s(\mathbf{R}'), && (22.5)\\
H_{\text{int}} &= U\sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}). && (22.6)
\end{aligned}$$

Nun wollen wir H_+ und H_- eliminieren. Wir führen wieder eine unitäre Transformation durch

$$H_{\text{eff}} = \mathrm{e}^{-S}H\mathrm{e}^{S} \tag{22.7}$$

mit

$$S = S_+ - S_-, \quad S_- = S_+^\dagger \tag{22.8}$$

Wir nehmen an, dass S von Ordnung t/U ist. Dann erhalten wir Beiträge in Ordnung U, t und t^2/U, wobei wir in letzterer Ordnung nur die Beiträge mitnehmen, die die Anzahl der Doppelbesetzungen erhalten,

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= H_{\text{int}} + H_0 + \big(H_+ + [H_{\text{int}}, S_+]\big) + \big(H_- - [H_{\text{int}}, S_-]\big)\\
&+ \Big([H_-, S_+] - \frac{1}{2}[[H_{\text{int}}, S_-], S_+] + (-[H_+, S_-] - \frac{1}{2}[[H_{\text{int}}, S_+], S_-]\Big). && (22.9)
\end{aligned}$$

Mit der Forderung

$$H_+ + [H_{\text{int}}, S_+] = 0, \quad H_- - [H_{\text{int}}, S_-] = 0 \tag{22.10}$$

reduziert sich H_{eff} auf

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{int}} + H_0 + \frac{1}{2}([H_-, S_+] - [H_+, S_-]). \tag{22.11}$$

Wir beobachten, dass

$$[H_{\text{int}}, H_+] = UH_+, \quad [H_{\text{int}}, H_-] = -UH_-, \tag{22.12}$$

da H_{int} gerade U mal der Doppelbesetzung ist. Daher wird (22.10) mit

$$S_+ = -\frac{1}{U}H_+, \quad S_- = -\frac{1}{U}H_- \tag{22.13}$$

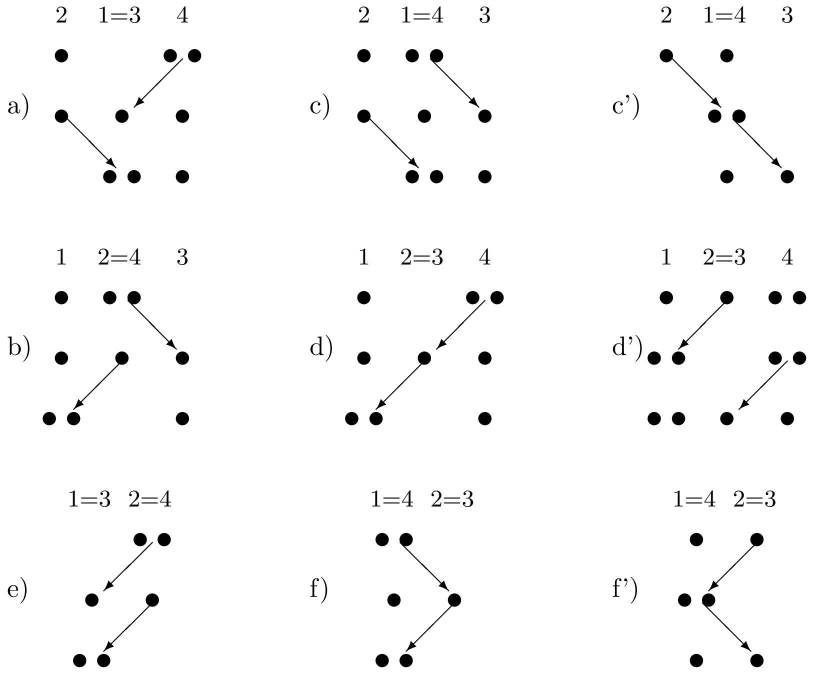
gelöst und wir erhalten

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{int}} + H_0 + \frac{1}{U}[H_+, H_-]. \tag{22.14}$$

Der Kommutator

$$[H_+, H_-] = \sum t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_4} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1)e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3)d_{s'}(\mathbf{R}_4)] \tag{22.15}$$

enthält verschiedene Beiträge. Wenn alle vier Orte von einander verschieden sind, verschwindet der Kommutator. Es bleiben Beiträge mit zwei verschiedenen Orten und drei verschiedenen Orten, wobei wir davon ausgehen, dass wir nur Beiträge mit $\mathbf{R}_2 \neq \mathbf{R}_1$ und $\mathbf{R}_4 \neq \mathbf{R}_3$ haben. Wir wollen diese kurz aufführen:



Dabei erhalten wir auf Grund des Kommutators $[d^\dagger e, e^\dagger d] = d^\dagger e e^\dagger d - e^\dagger d d^\dagger e$ jeweils zwei Beiträge, wobei in drei Fällen aber einer davon verschwindet.
a) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1$ und die beiden anderen Orte verschieden davon beschreibt einen Prozess bei dem von dem einfach besetzten Ort $\mathbf{R}_2$ und dem doppelt besetzten Ort $\mathbf{R}_4$ je ein Elektron auf den bisher unbesetzten Ort $\mathbf{R}_1$ springen. Da es energetisch ungünstig ist, wenn unbesetzte Plätze simultan mit doppelt besetzten bestehen, ist dieser Prozess sehr unwahrscheinlich.
b) $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_2$. Dies ist der umgekehrte Prozess. Die Elektronen des doppelt-besetzten Punktes $\mathbf{R}_2$ springen auf den schon einfach besetzten Ort $\mathbf{R}_1$ und den unbesetzten Ort $\mathbf{R}_3$. Auch hier liegt ein leeerer Platz neben einem mit doppelter Besetzung, was ebenfalls unwahrscheinlich ist.
c) $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_1$ und $\mathbf{R}_2$ und $\mathbf{R}_3$ verschieden davon. Dieser Beitrag liefert

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1)e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3)d_{s'}(\mathbf{R}_1)] \\
= & -\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_3)e_s(\mathbf{R}_2)[d_s^\dagger(\mathbf{R}_1), d_{s'}(\mathbf{R}_1)]_+ \\
= & \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3,s} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} \Big(-e_s^\dagger(\mathbf{R}_3)e_s(\mathbf{R}_2)n_{-s}(\mathbf{R}_1) + e_{-s}^\dagger(\mathbf{R}_3)e_s(\mathbf{R}_2)c_s^\dagger(\mathbf{R}_1)c_{-s}(\mathbf{R}_1)\Big)
\end{aligned} \tag{22.16}$$

$$= \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} \left(\sum_{\alpha,s,s'} e_s^\dagger(\mathbf{R}_3)\sigma^\alpha_{s,s'} e_{s'}(\mathbf{R}_2) S^\alpha(\mathbf{R}_1) - \frac{1}{2}\sum_s e_s^\dagger(\mathbf{R}_3) e_s(\mathbf{R}_2) n(\mathbf{R}_1) \right). \tag{22.17}$$

mit

$$S^\alpha(\mathbf{R}) = \frac{1}{2}\sum_{s,s'} c_s^\dagger(\mathbf{R})\sigma^\alpha_{s,s'} c_{s'}(\mathbf{R}) \tag{22.18}$$

Bei der Umformung von (22.16) nach (22.17) wurde

$$2\delta_{s_1,s_4}\delta_{s_2,s_3} = \delta_{s_1,s_2}\delta_{s_3,s_4} + \sum_\alpha \sigma^\alpha_{s_1,s_2}\sigma^\alpha_{s_3,s_4} \tag{22.19}$$

verwendet. Dies ist ein Prozess, bei dem ein Elektron auf einen Platz des gleichen Untergitters springt. Dieser Prozess hängt vom Spin eines dritten Elektrons ab und kann diesen sogar verändern. Ist das System im antiferromagnetischen Zustand, so ist dieses dritte (benachbarte) Elektron meist in Gegenrichtung ausgerichtet, so dass man näherungsweise ein Hüpfmatrix-Element $t'_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_2} = \sum_{\mathbf{R}_1} t_{\mathbf{R}_3-\mathbf{R}_1} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} /U$ erhält.
d) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_2$ ergibt einen ähnlichen Beitrag

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_4,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) d_{s'}(\mathbf{R}_4)] \\
=& \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_4,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4} d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{s'}(\mathbf{R}_4) [e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2), e_s(\mathbf{R}_2)]_+ \\
=& \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_4,s} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4} \left(d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_s(\mathbf{R}_4)(1-n_{-s}(\mathbf{R}_2)) + d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{-s}(\mathbf{R}_4) c_{-s}^\dagger(\mathbf{R}_2) c_s(\mathbf{R}_2) \right) && (22.20) \\
=& \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_4} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4} \left(\sum_{\alpha,s,s'} d_s^\dagger(\mathbf{R}_1)\sigma^\alpha_{s,s'} d_{s'}(\mathbf{R}_4) S^\alpha(\mathbf{R}_2) + \frac{1}{2}\sum_s d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_s(\mathbf{R}_4)(2-n(\mathbf{R}_2)) \right). && (22.21)
\end{aligned}$$

Auch hier erhält man wie unter c) ein Hüpf-Matrix-Element zwischen zwei Plätzen auf dem gleichen Untergitter unter Mitwirkung eines dritten Elektrons bei $\mathbf{R}_2$. Im Antiferromagneten wird der Spin des zusätzlichen Elektrons, das zur Doppelbesetzung führt, in umgekehrter Richtung ausgerichtet sein wie die Spins des gleichen Untergitters. Daher ist der Spin des Elektrons bei $\mathbf{R}_2$ mit großer Wahrscheinlichkeit ausgerichtet wie dieses zusätzliche Elektron, so dass wir für dieses näherungsweise das Hüpfmatrixelement $t'_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_4} = -\sum_{\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_4}/U$ erhalten.
e) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1$, $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_2$: Dieser Beitrag beschreibt einen Prozess, bei dem zwei Elektronen von $\mathbf{R}_2$ nach $\mathbf{R}_1$ springen. Er setzt also voraus, dass ein doppelt besetzter Gitterplatz neben einem unbesetzten liegt. Auch dies ist für großes U ein unwahrscheinlicher Prozess.
f) $\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_2$, $\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_1$: Dieser Beitrag liefert

$$\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1} [d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2), e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) d_{s'}(\mathbf{R}_1)] \tag{22.22}$$

$$= \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,s,s'} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1} \left(d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) d_{s'}(\mathbf{R}_1) e_s(\mathbf{R}_2) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) - d_{s'}(\mathbf{R}_1) d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) e_s(\mathbf{R}_2) \right). \tag{22.23}$$

Wir bringen die explizite Auswertung.

$$\begin{aligned}
d_s^\dagger d_{s'} &= \delta_{s,s'} n_s n_{-s}, && (22.24) \\
e_s e_{s'}^\dagger &= \delta_{s,s'} (1-n_s)(1-n_{-s}), && (22.25) \\
d_{s'} d_s^\dagger &= \delta_{s,s'} (1-n_s) n_{-s} - \delta_{-s,s'} c_s^\dagger c_{-s}, && (22.26) \\
e_{s'}^\dagger e_s &= \delta_{s,s'} n_s (1-n_{-s}) + \delta_{-s,s'} c_{-s}^\dagger c_s. && (22.27)
\end{aligned}$$

Die $\delta_{-s,s'}$-Terme liefern

$$-\delta_{-s,s'} d_{s'}(\mathbf{R}_1) d_s^\dagger(\mathbf{R}_1) e_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) e_s(\mathbf{R}_2) = c_s^\dagger(\mathbf{R}_1) c_{s'}(\mathbf{R}_1) c_{s'}^\dagger(\mathbf{R}_2) c_s(\mathbf{R}_2) - \delta_{s,s'} n_s(\mathbf{R}_1) n_s(\mathbf{R}_2). \quad (22.28)$$

Nehmen wir diesen $\delta_{s,s'}$-Term mit den vorhergehenden zusammen, so folgt

$$\begin{aligned} & n_{s1} n_{-s1}(1-n_{s2})(1-n_{-s2}) - (1-n_{1s}) n_{-s1} n_{s2}(1-n_{-s2}) - n_{s1} n_{s2} & (22.29)\\ = \; & n_{-s1}(1-n_{-s2})(n_{s1}-n_{s2}) - n_{s1} n_{s2} & (22.30)\\ = \; & n_{-s1} n_{s1} - n_{-s1} n_{s2} - n_{-s1} n_{s1} n_{-s2} + n_{-s1} n_{s2} n_{-s2} - n_{s1} n_{s2}. & (22.31) \end{aligned}$$

Beachten wir, dass bei Vertauschung der Orte 1 und 2 noch mal der gleiche Beitrag entsteht, so sehen wir, dass sich $n_{-s1} n_{s1} n_{-s2}$ und $n_{-s1} n_{s2} n_{-s2}$ wegheben. Es bleibt dann

$$n_{-s1} n_{s1} - n_{-s1} n_{s2} - n_{s1} n_{s2} = n_{-s1} n_{s1} - n_1 n_{s2} \quad (22.32)$$

so dass wir schließlich mit (22.19) den Beitrag

$$\sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} t_{\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1} \sum_\alpha (2S^\alpha(\mathbf{R}_1) S^\alpha(\mathbf{R}_2) - \frac{1}{2} n(\mathbf{R}_1) n(\mathbf{R}_2) + 2 n_\uparrow(\mathbf{R}_1) n_\downarrow(\mathbf{R}_1)) \quad (22.33)$$

erhalten. Bei halber Besetzung (nur dann ist der Spin an den Gitterplätzen von 0 verschieden) erhält man also einen antiferromagnetische Wechselwirkungs-Beitrag

$$H_\mathrm{J} = \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2} \frac{J_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2}}{2} \mathbf{S}(\mathbf{R}_1) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{R}_2) \quad \text{mit} \quad J_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} = \frac{4 t^2_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2}}{U}. \quad (22.34)$$

Betrachtet man ein exakt halb gefülltes Band, so hat man einen Antiferromagneten beschrieben durch H_J (siehe Abschnitt 14.b). Man beobachtet, dass jetzt die kritische Temperatur für den Antiferromagnetismus proportional t^2/U ist, also mit wachsendem U abfällt. Das hier durchgeführte Verfahren ist für starkes U gut (strong-coupling limit), während das im vorhergehenden Abschnitt für kleine U gut ist (weak-coupling limit). Im Bereich mittlerer Kopplung ist das Hubbard-Modell nur schwer zu behandeln.

Hat man etwas weniger oder mehr als halbe Füllung, so nimmt man H_0 hinzu. Man spricht dann vom t-J-Modell. Man kann auch noch die t'-Terme, die wir unter c) und d) kennengelernt haben, mitnehmen. Nahe an der halben Füllung können wir die Operatoren $e^\dagger$ und e durch die entsprechenden Loch-Operatoren ersetzen

$$c_s^\dagger(\mathbf{R}) = s l_{-s}(\mathbf{R}), \quad c_s(\mathbf{R}) = s l_{-s}^\dagger(\mathbf{R}) \quad (22.35)$$

und erhalten dann den Beitrag

$$H_{\mathrm{t}'} = -\sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}',s} t'_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} \left(d_s^\dagger(\mathbf{R}) d_s(\mathbf{R}') + l_s^\dagger(\mathbf{R}) l_s(\mathbf{R}') \right) \quad (22.36)$$

mit

$$t'_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} = -\frac{1}{U} \sum_{\mathbf{R}''} t_{\mathbf{R}-\mathbf{R}''} t_{\mathbf{R}''-\mathbf{R}'} \quad (22.37)$$

zum Hamilton-Operator. Man bezeichnet dies dann als das t-t'-J-Modell.

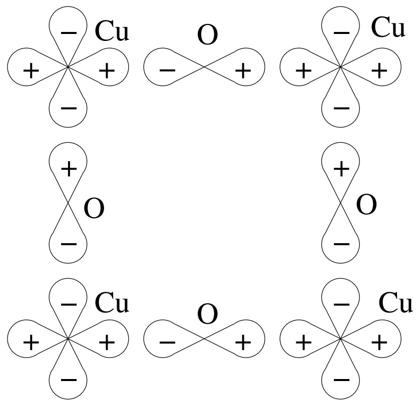
23 Hochtemperatur-Supraleiter I

23.a Cuprat-Schichten

Viele der Hochtemperatur-Supraleiter zeichnen sich dadurch aus, dass sie aus Cuprat-Schichten, CuO_2, bestehen, zwischen denen sich andere Schichten befinden. Man nimmt daher an, dass diese Schichten wesentlich für die Hochtemperatur-Supraleitung sind. Wir betrachten ein Beispiel, das $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, ein mit Strontium dotiertes Lanthan-Cuprat. In diesem wechseln sich jeweils zwei La0-Schichten und eine $Cu0_2$-Schicht ab. Wären die Schalen dieser Atome abgeschlossen, so hätte man es mit $La^{3+}_{2-x}Sr^{2+}Cu^{1+}O^{2-}_4$ zu tun, was pro Elementarzelle zu einer Ladung $-1-x$ führen würde. Tatsächlich sind die Schalen der Cu-Atome und der zwei O-Atome in den Cuprat-Schichten nicht voll aufgefüllt. Vielmehr bleiben Löcher mit einer Konzentration $c_{\rm Cu}$ in der 3d-Schale des Kupfers und Löcher der Konzentration $c_{\rm O}$ in der 2p-Schale dieser zwei Sauerstoff-Atome. Damit ergibt sich folgende Ladungs-Bilanz:

Ion	Anzahl	Ladung pro Atom	Gesamt-Ladung
La	$2-x$	3	$6-3x$
Sr	x	2	$2x$
Cu	1	$1+c_{\rm Cu}$	$1+c_{\rm Cu}$
O	2	$-2+c_{\rm O}$	$-4+2c_{\rm O}$
O	2	-2	-4
Summe			$-1-x+c_{\rm Cu}+2c_{\rm O}$

Es muss daher wegen der erforderlichen Neutralität $c_{\rm Cu}+2c_{\rm O}=1+x$ gelten. Eine Abschätzung (P. Fulde, Electron Correlations in Molecules and Solids, sect. 14.2) beläuft sich auf $c_{\rm Cu}=0.6+0.15x$, $c_{\rm O}=0.2+0.425x$. Wir haben es also mit Löcher-Leitung zu tun. Wegen der tetragonalen (bei nicht zu tiefen Temperaturen) Symmetrie sind die d-Zustände des Kupfers aufgespalten. Das höchste Niveau wird vom $d_{x^2-y^2}$-Zustand eingenommen. Hinzu kommen die p_x und p_y-Zustände der Sauerstoff-Atome. Dies führt dann zu einem 3-Band-Modell. Im einfachsten Fall ordnet man den Elektronen Energien ϵ_d und ϵ_p zu und führt Hüpf-Matrixelemente t_{pd} zwischen den einander überlappenden d-Orbitalen des Kupfers und den p-Orbitalen des Sauerstoffs ein.



Wir führen nun die Erzeugungs-Operatoren $d^\dagger_s(\mathbf{R}_n)$ für die d-Orbitale an den Gitterplätzen $\mathbf{R}_n$, und die Erzeugungs-Operatoren $p^\dagger_{xs}(\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_x/2)$ und $p^\dagger_{ys}(\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_y/2)$ mit $\mathbf{a}_x=a\mathbf{e}_x$ und $\mathbf{a}_y=a\mathbf{e}_y$ für die p-Orbitale ein. Dann können wir den Band-Hamilton-Operator schreiben als

$$\begin{aligned} H_0 &= \epsilon_{\rm d}\sum_n d^\dagger_s(\mathbf{R}_n)d_s(\mathbf{R}_n) \qquad (23.1)\\ &+ \epsilon_{\rm p}\sum_n(p^\dagger_{xs}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_x}{2})p_{xs}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_x}{2})+p^\dagger_{ys}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_y}{2})p_{ys}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_y}{2}))\\ &+ t_{pd}\sum_n d^\dagger_s(\mathbf{R}_n)\Big(-p_{xs}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_x}{2})+p_{xs}(\mathbf{R}_n-\frac{\mathbf{a}_x}{2})+p_{ys}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_y}{2})-p_{ys}(\mathbf{R}_n-\frac{\mathbf{a}_y}{2})\Big)\\ &+ t_{pd}\sum_n\Big(-p^\dagger_{xs}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_x}{2})+p^\dagger_{xs}(\mathbf{R}_n-\frac{\mathbf{a}_x}{2})+p^\dagger_{ys}(\mathbf{R}_n+\frac{\mathbf{a}_y}{2})-p^\dagger_{ys}(\mathbf{R}_n-\frac{\mathbf{a}_y}{2})\Big)d_s(\mathbf{R}_n) \end{aligned}$$

Mit den Fourier-Transformierten

$$d_s^\dagger(\mathbf{R}_n) = \frac{1}{\sqrt{N_\mathrm{s}}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} d_{\mathbf{k}s}^\dagger, \tag{23.2}$$

$$p_{x,ys}^\dagger(\mathbf{R}_n + \frac{\mathbf{a}_{x,y}}{2}) = \frac{1}{\sqrt{N_\mathrm{s}}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n + \mathrm{i}\frac{ak_{x,y}}{2}} p_{x,y\mathbf{k}s}^\dagger \tag{23.3}$$

folgt dann

$$\begin{aligned} H_0 &= \epsilon_\mathrm{d}\sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}s}^\dagger d_{\mathbf{k}s} + \epsilon_\mathrm{p}\sum_{\mathbf{k}}(p_{x\mathbf{k}s}^\dagger p_{x\mathbf{k}s} + p_{y\mathbf{k}s}^\dagger p_{y\mathbf{k}s}) \\ &+ 2\mathrm{i}t_{pd}\sum_{\mathbf{k}}\sin(\frac{k_x a}{2}) d_{\mathbf{k}s}^\dagger p_{x\mathbf{k}s} - 2\mathrm{i}t_{pd}\sum_{\mathbf{k}s}\sin(\frac{k_y a}{2}) d_{\mathbf{k}s}^\dagger p_{y\mathbf{k}s} \\ &- 2\mathrm{i}t_{pd}\sum_{\mathbf{k}}\sin(\frac{k_x a}{2}) p_{x\mathbf{k}s}^\dagger d_{\mathbf{k}s} + 2\mathrm{i}t_{pd}\sum_{\mathbf{k}s}\sin(\frac{k_y a}{2}) p_{y\mathbf{k}s}^\dagger d_{\mathbf{k}s}, \end{aligned} \tag{23.4}$$

so dass die Bandenergien durch die Eigenwerte der Matrix

$$\begin{pmatrix} \epsilon_\mathrm{d} & 2\mathrm{i}t_{pd}\sin(\frac{k_x a}{2}) & -2\mathrm{i}t_{pd}\sin(\frac{k_y a}{2}) \\ -2\mathrm{i}t_{pd}\sin(\frac{k_x a}{2}) & \epsilon_\mathrm{p} & 0 \\ 2\mathrm{i}t_{pd}\sin(\frac{k_y a}{2}) & 0 & \epsilon_\mathrm{p} \end{pmatrix} \tag{23.5}$$

gegeben sind. Diese sind

$$\epsilon_{1,2,\mathbf{k}} = \frac{\epsilon_\mathrm{d}+\epsilon_\mathrm{p}}{2} \pm \sqrt{(\frac{\epsilon_\mathrm{d}-\epsilon_\mathrm{p}}{2})^2 + 4t_{pd}^2(\sin^2\frac{k_x a}{2} + \sin^2\frac{k_y a}{2})}, \tag{23.6}$$

$$\epsilon_{3,\mathbf{k}} = \epsilon_\mathrm{p} \tag{23.7}$$

mit Eigen-Operatoren

$$c_{i\mathbf{k}s}^\dagger = \gamma_{d,i} d_{\mathbf{k}s}^\dagger + \sum_{\alpha=x,y}\gamma_{\alpha,i} p_{\alpha\mathbf{k}s}^\dagger, \tag{23.8}$$

die

$$[H, c_{i\mathbf{k}s}^\dagger] = \epsilon_i(\mathbf{k}) c_{i\mathbf{k}s}^\dagger \tag{23.9}$$

erfüllen, was auf

$$H_0 = \sum_{i,\mathbf{k},s}\epsilon_i(\mathbf{k}) c_{i\mathbf{k}s}^\dagger c_{i\mathbf{k}s} \tag{23.10}$$

führt.

Nun ist $\epsilon_\mathrm{d} > \epsilon_\mathrm{p}$. Die Bänder 1 und 2 haben die Breite $W = \sqrt{(\frac{\epsilon_\mathrm{d}-\epsilon_\mathrm{p}}{2})^2 + 8t_{pd}^2} - \frac{\epsilon_\mathrm{d}-\epsilon_\mathrm{p}}{2}$. Das unterste Band liegt zwischen $\epsilon_\mathrm{p} - W$ und ϵ_p. Das mittlere Band ist dispersionslos bei ϵ_p. Das oberste Band liegt zwischen ϵ_d und $\epsilon_\mathrm{d} + W$. Die beiden unteren Bänder sind besetzt. Die interessante Physik spielt sich im obersten Band ab, das teilweise besetzt ist.

Wir können davon ausgehen, dass die beiden unteren Bänder besetzt sind und interessieren uns daher nur für das oberste Band. Wir entwickeln

$$\begin{aligned} \epsilon_1(\mathbf{k}) &= \frac{\epsilon_\mathrm{d}+\epsilon_\mathrm{p}}{2} + \frac{\epsilon_\mathrm{d}-\epsilon_\mathrm{p}}{2} + \frac{4t_{pd}^2}{\epsilon_\mathrm{d}-\epsilon_\mathrm{p}}(\sin^2\frac{k_x a}{2} + \sin^2\frac{k_y a}{2}) \\ &= \epsilon_\mathrm{d} + 4t - 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \end{aligned} \tag{23.11}$$

mit

$$t = \frac{t_{pd}^2}{\epsilon_\mathrm{d}-\epsilon_\mathrm{p}}. \tag{23.12}$$

Lassen wir die Konstanten $\epsilon_\mathrm{d} + 4t$ weg und berücksichtigen wir nur noch das oberste Band, so bleibt schließlich der Einteilchen-Hamilton-Operator

$$H_0 = -t\sum_{\mathbf{R},s}\left(c_s^\dagger(\mathbf{R}+\mathbf{a}_x) + c_s^\dagger(\mathbf{R}-\mathbf{a}_x) + c_s^\dagger(\mathbf{R}+\mathbf{a}_y) + c_s^\dagger(\mathbf{R}-\mathbf{a}_y)\right) c_s(\mathbf{R}). \tag{23.13}$$

23.b Vom Dreiband- zum Einband-Hubbard-Modell

Bisher haben wir nur die Bänder ohne die abstoßende Wechselwirkung zwischen den Elektronen betrachtet. Wir müssen davon ausgehen, dass es einen Beitrag

$$H_{\rm int} = U_{\rm d} \sum_n d_\uparrow^\dagger(\mathbf{R}_n) d_\downarrow^\dagger(\mathbf{R}_n) d_\downarrow(\mathbf{R}_n) d_\uparrow(\mathbf{R}_n) = \frac{U_{\rm d}}{N_{\rm s}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger d_{\mathbf{k}'\downarrow} d_{\mathbf{k}\uparrow} \tag{23.14}$$

gibt. Kehren wir nun die unitäre Transformation (23.8) um

$$d_{\mathbf{k}s}^\dagger = \sum_i \gamma_{d,i}^* c_{i\mathbf{k}s}^\dagger, \quad p_{\alpha\mathbf{k}s}^\dagger = \sum_i \gamma_{\alpha,i}^* c_{i\mathbf{k}s}^\dagger \tag{23.15}$$

und ersetzen γ durch seinen Mittelwert, so erhalten wir näherungsweise, wobei wir nur die Beiträge des obersten Bandes berücksichtigt haben,

$$H_{\rm int} = U \sum_n c_\uparrow^\dagger(\mathbf{R}_n) c_\downarrow^\dagger(\mathbf{R}_n) c_\downarrow(\mathbf{R}_n) c_\uparrow(\mathbf{R}_n) \tag{23.16}$$

mit $U = U_{\rm d}\overline{\gamma_{d,1}}^4$. Dabei lassen sich aus (23.9) in erster Ordnung in

$$\tau = t_{pd}/(\epsilon_{\rm d} - \epsilon_{\rm p}) \tag{23.17}$$

die γ berechnen,

$$\gamma_{x,1} = -2{\rm i}\tau \sin(\frac{k_x a}{2})\gamma_{d,1}, \quad \gamma_{y,1} = -2{\rm i}\tau \sin(\frac{k_y a}{2})\gamma_{d,1} \tag{23.18}$$

und aus

$$|\gamma_{d,1}|^2 + |\gamma_{x,1}|^2 + |\gamma_{y,1}|^2 = 1 \tag{23.19}$$

schließlich auch

$$\gamma_{d,1} = 1 - 2\tau^2 \left(\sin^2(\frac{k_x a}{2}) + \sin^2(\frac{k_y a}{2}) \right), \tag{23.20}$$

was gemittelt

$$\overline{\gamma_{d,1}} = 1 - 2\tau^2 \tag{23.21}$$

ergibt. Die abstoßende Wechselwirkung wird durch diesen Faktor reduziert, ist aber immer noch recht groß.

Das Band, das hier die wesentliche Rolle spielt, ist das antibindende Band. Das bindende Band ist voll besetzt. In der Regel geht man von dieser Darstellung durch Elektronen über zur Darstellung durch Löcher ausgehend von einem Zustand, in dem alle Elektronen-Orbitale gefüllt sind. Um zu dieser Darstellung zu gelangen, muss man Erzeuger und Vernichter vertauschen. Dies ändert an der Abstossung (23.14) nichts, wenn man davon absieht, dass dann noch ein Anteil proportional zur Teilchenzahl entsteht. Bei den Hüpfmatrix-Elementen ändert sich dann das Vorzeichen. Dies lässt sich jedoch kompensieren, wenn man an jedem zweiten Gitterplatz $c^\dagger$ und c in $-c^\dagger$ und $-c$ abändert (Eichtransformation).

Wir haben also jetzt ein Ein-Band-Hubbard-Modell erhalten und es stellt sich die Frage: Führt dieses Modell und gegebenenfalls wie zu einem Supraleiter. Der genaue Mechanismus ist umstritten und die Situation ist noch immer ähnlich der in Physics Today June 1991 beschriebenen, wo R. Schrieffer und P.W. Anderson ihre unterschiedlichen Vorstellungen diskutieren. Beide greifen auf das Hubbard-Modell zurück. Beide weisen der Dotierung durch Löcher, manchmal auch durch Extra-Elektronen wesentliche Bedeutung zu. In der Tat sind viele der Supraleiter bei halber Füllung Antiferromagneten. Schrieffer argumentiert mit "Spin bags". Darunter versteht er ein Loch, das sich in einer antiferromagnetischen Umgebung bewegt. Dieses Loch reduziert in seiner Umgebung den Antiferromagnetismus. Kommen sich zwei solche Löcher nahe, so ergeben ihre Umgebungen eine effektive Wechselwirkung, die für die Supraleitung verantwortlich sind. Schrieffer und auch andere Autoren sehen den wesentlichen Mechanismus innerhalb der Schichten. Eine Kopplung zwischen verschiedenen Schichten halten sie nur insoweit für wesentlich, als in einem zweidimensionalen System mit kurzreichweitiger Wechselwirkung eine kontinuierliche Symmetrie nicht gebrochen werden kann. Diese kann erst in einem dreidimensionalen System gebrochen werden.

Anderson hingegen hält eine inkohärente Kopplung zwischen den Schichten für den wesentlichen Mechanismus. Andersons Sichtweise hat sich, nach seinen eigenen Worten fokussiert "on a non-Fermi-liquid normal state with separate spin and charge excitations, and deconfinement by interlayer Josephson tunneling as the driving force for the superconductivity," während Schrieffer seinerseits "the interplay between antiferromagnetism and superconductivity, extending the pairing theory beyond the Fermi-liquid regime in terms of spin polarons and 'bags'" verfolgt hat.

Viele Autoren stehen dem Bild Schrieffers näher und betrachten antiferromagnetische Fluktuationen als wesentliche Grundlage der Hochtemperatur-Supraleitung. Dazu gehört zum Beispiel auch Scalapino (Physics Reports 250 (1995) 329). Es gibt jedoch auch gewichtige Stimmen, die der Elektron-Phonon-Wechselwirkung eine wesentliche Rolle zuweisen. Generell gehen diese Theorien davon aus, dass ein "intermediäres Boson" die effektive Wechselwirkung vermittelt.

Die meisten Rechnungen und inzwischen auch Experimente ergeben, dass es sich nicht um eine s-Wellensupraleitung handelt, sondern um eine d-Wellensupraleitung.

23.c Eine effektive Wechselwirkung

Wir (I. Grote, E. Körding und F.W.) haben zum Hubbard-Modell eine Rechnung mittels Flussgleichungen angestellt (cond-mat/0106604), die wir im Folgenden noch besprechen werden.

Prinzipiell will man mittels Flussgleichungen den Hamilton-Operator diagonalisieren. Haben aber der Grundzustand oder typische Eigen-Zustände des Hamilton-Operators eine erheblich andere Struktur als die anfänglichen Ausgangszustände, dann kann das nur mit einer sehr komplizierten unitären Transformation erreicht werden. Eine solche kann man aber nur schwer näherungsweise realisieren. Wir wollen uns daher mit einer einfacheren unitären Transformation begnügen, die aber die Eigenschaft hat, dass der so gewonnene Hamilton-Operator zur weiteren Behandlung sehr geeignet ist. Dies können wir erreichen, wenn wir den Hamilton-Operator auf eine Form bringen, die noch all die Formen möglicher Ordnungen enthält, mit denen wir rechnen müssen. Tatsächlich wollen wir aus der Zweiteilchen-Wechselwirkung

$$\frac{1}{2V_{\rm P}} \sum_{k_1,q_1,s_1,k_2,q_2,s_2} V(k_1,k_2,q_1,q_2) : c^\dagger_{k_1 s_1} c_{q_1 s_1} c^\dagger_{k_2 s_2} c_{q_2 s_2} : \delta_{k_1+k_2,q_1+q_2} \tag{23.22}$$

die folgende Wechselwirkungen erhalten, andere aber eliminieren:

$$\begin{aligned}
V_{\rm B}(k,q) &= V(k,-k,q,-q), && (23.23)\\
V_{\rm H}(k,q) &= V(k,q,k,q), && (23.24)\\
V_{\rm F}(k,q) &= V(k,q,q,k), && (23.25)\\
V_{\rm A}(k,q) &= V(k,q+q_0,q,k+q_0), && (23.26)\\
V_{\rm C}(k,q) &= V(k,q+q_0,k+q_0,q), && (23.27)\\
V_{\rm Y}(k,q) &= V(k,q_0-k,q,q_0-q). && (23.28)
\end{aligned}$$

Warum sind diese Wechselwirkungen interessant? Die erste, $V_{\rm B}$ haben wir bereits bei der Behandlung der Supraleitung kennengelernt. Wir benötigen sie natürlich auch hier, um den Phasenübergang zur Supraleitung beschreiben zu können. Auch $V_{\rm A}$ ist wichtig, denn es sind genau die Matrixelemente, die bei der Behandlung des Antiferromagnetismus wichtig sind. Dabei ist q_0 wieder der Wellenvektor, der die beiden Untergitter voneinander unterscheidet. $V_{\rm C}$ erlaubt nicht nur, dass die Magnetisierung von Gitterplatz zu Gitterplatz alterniert, sondern auch ein solches Alternieren für die Dichte der Elektronen.

Die Beiträge $V_{\rm H}$ und $V_{\rm F}$ sind die Beiträge, die in der Hartree-Fock-Näherung verwendet werden. $V_{\rm X}$ ist schließlich ein Beitrag, der eine alternierende Struktur für das Supraleitungskondensat zulässt.

24 Landau-Theorie

Beiträge vom Typ V_H und auch V_F wurden von Landau in der Fermiflüssigkeits-Theorie eingeführt. Man spricht auch von der Landautheorie.

Landau nahm an, dass man bei tiefen Temperaturen langlebige elektronische Anregungen nahe der Fermikante hat und führte den Ausdruck

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k},s} \epsilon^0_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}'s'} f(\mathbf{k}s,\mathbf{k}'s') \delta n_{\mathbf{k}s} \delta n_{\mathbf{k}'s'} \tag{24.1}$$

für die Energie des Systems ein. Dabei sind die $\delta n_{\mathbf{k}s}$ die Anzahl von Elektronen, die man dem Grundzustand oberhalb der Fermikante hinzufügt oder unterhalb der Fermikante wegnimmt (dies sind Quasiteilchen, das heisst sie können zum Beispiel Elektronen sein, die ihre Umgebung polarisiert haben. Sie enthalten also Abschirmungs- und ähnliche Effekte). Man erkennt, dass $\epsilon^0_{\mathbf{k}}$ die Einteilchenenergie ist, die man aufbringen muss, um dem Grundzustand ein Elektron hinzuzufügen oder die man erhält, wenn man ihm ein Teilchen entnimmt. Ist der Zustand bereits angeregt, dann ändert sich die Energie um

$$\epsilon_{\mathbf{k}s} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\delta n_{\mathbf{k}s}} = \epsilon^0_{\mathbf{k}} + \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}'s'} f(\mathbf{k}s,\mathbf{k}'s') \delta n_{\mathbf{k}'s'}. \tag{24.2}$$

Die Koeffizienten f geben die Wechselwirkung zwischen den Elektronen wieder.

Die Beiträge von V_H und V_F in (23.24,23.25) lauten

$$\frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V_\mathrm{H}(\mathbf{k},\mathbf{k}') : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} c^\dagger_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}'s'} := \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V_\mathrm{H}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \delta n_{\mathbf{k}s} \delta n_{\mathbf{k}'s'} \tag{24.3}$$

und

$$\frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},s,\mathbf{k}',s'} V_\mathrm{F}(\mathbf{k},\mathbf{k}') : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}'s} c^\dagger_{\mathbf{k}'s'} c_{\mathbf{k}s'} : \tag{24.4}$$

Hieraus nehmen wir die Beiträge mit $s = s'$. Die anderen kann man prinzipiell auch mitnehmen. Sie beschreiben die transversalen Fluktuationen im Spin. Wir wollen diese in diesem Abschnitt nicht berücksichtigen. Dann erhalten wir

$$-\frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',s} V_\mathrm{F}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \delta n_{\mathbf{k}s} \delta n_{\mathbf{k}'s}. \tag{24.5}$$

Aus beiden Beiträgen erhalten wir

$$f(\mathbf{k}s,\mathbf{k}'s') = V_\mathrm{H}(\mathbf{k},\mathbf{k}') - \frac{1+ss'}{2} V_\mathrm{F}(\mathbf{k},\mathbf{k}'). \tag{24.6}$$

Vielfach wird die Theorie für isotrope Systeme angewendet. Dann hängt natürlich ϵ nur vom Betrag von $\mathbf{k}$ ab. In der Umgebung der Fermikante gilt dann

$$\epsilon^0_k = \mu + \hbar v_\mathrm{F}(k - k_\mathrm{F}) \tag{24.7}$$

mit der Fermigeschwindigkeit v_F. Weiterhin erweist sich normalerweise nur die Besetzung nahe der Fermikante als wesentlich. Dann kann man in f die Abhängigkeit vom Betrag von $\mathbf{k}$ und $\mathbf{k}'$ vernachlässigen und muss lediglich die Richtung dieser Vektoren berücksichtigen. Auf Grund der Isotropie geht dann nur der Winkel zwischen $\mathbf{k}$ und $\mathbf{k}'$ in f ein, so dass man nur die Abhängigkeit von $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ und $\mathbf{n}' = \mathbf{k}'/k'$ berücksichtigen muss, so dass f nur eine Funktion von $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'$ ist. Weiterhin setzen wir voraus, dass keine Spinrichtung ausgezeichnet ist, also Invarianz gegen die Transformation $s \to -s$. $s' \to -s'$ besteht. Dann lässt sich f in der Form

$$f(\mathbf{k}s,\mathbf{k}'s') = f(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') + ss' g(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') \tag{24.8}$$

schreiben.

Wir wollen jetzt betrachten, wie das System auf eine äussere Störung beschrieben durch $-\sum_{\mathbf{k},s} h_s(\mathbf{k})\delta n_{\mathbf{k}s}$ reagiert. Wir erwarten, dass sich dann die Besetzung verändert. Im allgemeinen werden dann die Zustände bis $k_\mathrm{F}(\mathbf{n}) = k_{\mathrm{F}0} + \delta k_s(\mathbf{n})$ besetzt sein. Wir finden dann insgesamt

$$\epsilon_{\mathbf{k}s} = \epsilon^0(\mathbf{k}) - h_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k}'s'} f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}s')\delta n_{\mathbf{k}'s'} \tag{24.9}$$

Die letzte Summe formen wir um zum Integral

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\Omega_{n'} \int_{k_{\mathrm{F}0}}^{k_{\mathrm{F}0}+\delta k_s(\mathbf{n}')} \mathrm{d}k' k'^2 f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') = \frac{k_\mathrm{F}^2}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\Omega_{n'} f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s')\delta k_{s'}(\mathbf{n}') \tag{24.10}$$

An der Fermikante gilt dann

$$\mu = \epsilon_{k_\mathrm{F}(\mathbf{n}),s}, \tag{24.11}$$

also

$$0 = \hbar v_\mathrm{F} \delta k_s(\mathbf{n}) - h_s(\mathbf{k}) + \frac{k_\mathrm{F}^2}{(2\pi)^3} \sum_{s'} \int \mathrm{d}\Omega_{n'} f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s')\delta k_{s'}(\mathbf{n}'). \tag{24.12}$$

Nachdem f nur von dem Winkel zwischen $\mathbf{n}$ und $\mathbf{n}'$ abhängt, entwickeln wir in Legendre-Polynome

$$f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') = \sum_l (f_l + g_l ss') P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}') = \sum_l (f_l + g_l ss') \frac{4\pi}{2l+1} \sum_m Y_{lm}(\mathbf{n}) Y_{lm}^*(\mathbf{n}'). \tag{24.13}$$

Ebenso entwickeln wir die Störung h und die Veränderung der Fermifläche nach Kugelflächenfunktionen

$$h_s(\mathbf{n}) = \sum_{lm} h_{slm} Y_{lm}(\mathbf{n}), \quad \delta k_{\mathrm{F}s}(\mathbf{n}) = \sum_{lm} \delta k_{slm} Y_{lm}(\mathbf{n}) \tag{24.14}$$

und erhalten

$$0 = \hbar v_\mathrm{F} \delta k_{slm} - h_{slm} + \frac{k_\mathrm{F}^2}{2\pi^2} \sum_{s'} \frac{f_l + ss' g_l}{2l+1} \delta k_{s'lm} \tag{24.15}$$

mit den Lösungen

$$\begin{aligned} \delta k_{\uparrow lm} + \delta k_{\downarrow lm} &= \frac{h_{\uparrow lm} + h_{\downarrow lm}}{\hbar v_\mathrm{F} + \frac{k_\mathrm{F}^2}{(2l+1)\pi^2} f_l} = \frac{h_{\uparrow lm} + h_{\downarrow lm}}{\hbar v_\mathrm{F}(1 + \frac{D_\mathrm{F}}{2l+1} f_l)}, \\ \delta k_{\uparrow lm} - \delta k_{\downarrow lm} &= \frac{h_{\uparrow lm} - h_{\downarrow lm}}{\hbar v_\mathrm{F} + \frac{k_\mathrm{F}^2}{(2l+1)\pi^2} g_l} = \frac{h_{\uparrow lm} - h_{\downarrow lm}}{\hbar v_\mathrm{F}(1 + \frac{D_\mathrm{F}}{2l+1} g_l)}. \end{aligned} \tag{24.16}$$

Hierbei haben wir verwendet, dass aus $N = V_\mathrm{P} k_\mathrm{F}^3/(3\pi^2)$ unter Verwendung von $\mathrm{d}N = V_\mathrm{P} D \mathrm{d}\epsilon$ und $\mathrm{d}\epsilon = \hbar v_\mathrm{F} \mathrm{d}k_\mathrm{F}$ die Beziehung $D_\mathrm{F} \hbar v_\mathrm{F} = k_\mathrm{F}^2/\pi^2$ mit der Zustandsdichte D_F an der Fermikante folgt.

24.a Kompressibilität

Die Kompressibilität lässt sich ausdrücken

$$\kappa = -\frac{1}{V}\frac{\partial V}{\partial P} = \frac{1}{V_\mathrm{P}}\frac{\partial N}{\partial \mu} \tag{24.17}$$

Wir wollen daher $\mathrm{d}N/\mathrm{d}\mu$ bestimmen und führen die Störung $h_s = \delta\mu$ ein. Dann folgt

$$h_{s00} = \sqrt{4\pi}\delta\mu, \quad \delta k_{s00} = \frac{\sqrt{4\pi}\delta\mu}{\hbar v_\mathrm{F}(1 + D_\mathrm{F} f_0)}, \quad \delta k(\mathbf{n}) = \frac{\delta\mu}{\hbar v_\mathrm{F}(1 + D_\mathrm{F} f_0)}. \tag{24.18}$$

Damit ergibt sich

$$\frac{\partial N}{\partial \mu} = \frac{3N}{\hbar k_\mathrm{F} v_\mathrm{F}(1 + D_\mathrm{F} f_0)} = \frac{V_\mathrm{P} D_\mathrm{F}}{1 + D_\mathrm{F} f_0}. \tag{24.19}$$

24.b Suszeptibilität

Ähnlich wie die Kompressibilität können wir auch die magnetische Suszeptibilität aus der Magnetisierung $M = \mu_B(N_\uparrow - N_\downarrow)/V_P$ und der Störung $h_s = \mu_B s B$ berechnen. Man findet

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\mu_B^2 D_F}{1 + D_F g_0}. \tag{24.20}$$

24.c Galilei-Invarianz

Ersetzen wir im Hamilton-Operator die Impuls-Operatoren $\mathbf{p}_i$ durch $\mathbf{p}_i - m\mathbf{v}$, so bewegt sich der Grundzustand mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v}$. Man erhält ihn, wenn man die Wellenvektoren $\mathbf{k}$ durch $\mathbf{k} - m\mathbf{v}/\hbar$ ersetzt. Die Fermifläche wird dann durch

$$\delta k(\mathbf{n}) = m\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}/\hbar = m \sum_m v_m Y_{1m}/\hbar \tag{24.21}$$

beschrieben, während der Hamilton-Operator in erster Ordnung in $\mathbf{v}$ den zusätzlichen Beitrag

$$h_s(\mathbf{k}) = \hbar \mathbf{v} \cdot \mathbf{k} = \sum_m v_m \hbar k_F Y_{1m} \tag{24.22}$$

erhält. Daraus folgt dann

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} - \frac{k_F^2}{3\pi^2 \hbar} f_1. \tag{24.23}$$

Die Fermigeschwindigkeit ist also direkt mit dem Landau-Parameter f_1 verknüpft. Diese Überlegungen gelten nur für Flüssigkeiten ohne Substrat. Das Elektronengas hat zum Beispiel das Gitter als Substrat, daher gilt für dieses allein die Galilei-Invarianz nicht.

24.d Instabilitäten

Wir betrachten jetzt generell Instabilitäten des Systems gegen Deformationen der Fermikante. Wir setzen daher

$$\delta k_{Fs}(\mathbf{n}) = \sum_{lm} (\delta k_{lm}^0 + s \delta k_{lm}^1) Y_{lm}(\mathbf{n}) \tag{24.24}$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V_P}(E - \mu N) &= \frac{1}{V_P}(E_0 - \mu N_0) + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_s \int \mathrm{d}\Omega_n \int_{k_{F_0}}^{k_{F_0}+\delta k_s(\mathbf{n})} \mathrm{d}k k^2 (\epsilon_\mathbf{k} - \mu) \\
&+ \frac{1}{(2\pi)^6} \sum_{s,s'} \int \mathrm{d}\Omega_n \mathrm{d}\Omega_{n'} \int \mathrm{d}k \mathrm{d}k' f(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') \\
&= \frac{1}{V_P}(E_0 - \mu N_0) + \frac{\hbar k_F^2 v_F}{(2\pi)^3} \sum_{lm} \left(|\delta k_{lm}^0|^2 (1 + \frac{D_F f_l}{2l+1}) + |\delta k_{lm}^1|^2 (1 + \frac{D_F g_l}{2l+1}) \right).
\end{aligned} \tag{24.25}$$

Eine Stabilität ist also nur vorhanden, wenn alle Koeffizienten $1 + Df_l/(2l+1)$ und $1 + Dg_l/(2l+1)$ positiv sind. Man erkennt, dass dann auch die Kompressibilität und die Suszeptibilität positiv sind. Für $1 + Df_1/3$ erhält man aus der Galilei-Invarianz $\hbar k_F/(m v_F)$. Man zeige, dass dies die kinetische Energie pro Volumen, $Nmv^2/2V_p$ ist. Sind die $1 + Df_l/(2l+1)$ und $1 + Dg_l/(2l+1)$ nicht positiv, dann geht der rotations-invariante Zustand verloren. Die Symmetrie des Systems wird dann spontan gebrochen. Man spricht von einer Pomeranchuk-Instabilität.

25 Hochtemperatur-Supraleiter II

25.a Die Fluss-Gleichungen

Wir kommen nun auf die Behandlung der Hubbard-Wechselwirkung mittels Flussgleichungen zurück. Wir müssen natürlich wieder einen geeigneten Generator η, Gl. (18.25) für die Fluss-Gleichungen aufsuchen. Hierbei werden wir folgendermaßen vorgehen: Wir gehen aus von einer quadratischen Form des Hamilton-Operators

$$G(H) = \frac{1}{2}\sum g_{ij,kl} H_{ji} H_{lk}. \tag{25.1}$$

Diese soll so gewählt werden, dass sie durch die Fluss-Gleichungen ein Minimum wird. Man wählt also eine positiv semi-definite Form g und möchte, dass nach Anwendung der Fluss-Gleichungen nur die Beiträge mit Eigenwerten 0 übrig bleiben. Zunächst wird man g symmetrisch wählen

$$g_{ij,kl} = g_{kl,ij} \tag{25.2}$$

und verlangen, dass G reell ist. Da H hermitesch ist, folgt

$$G^*(H) = \frac{1}{2}\sum g^*_{ij,kl} H_{ij} H_{kl} \tag{25.3}$$

und damit

$$g_{ij,kl} = g^*_{ji,lk}. \tag{25.4}$$

Unter dem Fluss verändert sich G gemäß

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}l} = \sum g_{ij,kl}(\eta_{jm} H_{mi} - H_{jm}\eta_{mi}) H_{lk} = \sum \eta_{ji}(g_{mj,kl} H_{im} H_{lk} - g_{im,kl} H_{mj} H_{lk}). \tag{25.5}$$

Damit der Ausdruck semi-negativ ist, wählen wir

$$\eta_{ji} = -\sum (g_{mj,kl} H_{im} H_{lk} - g_{im,kl} H_{mj} H_{lk})^* = \sum(-g_{jm,lk} H_{mi} H_{kl} + g_{mi,lk} H_{jm} H_{kl}), \tag{25.6}$$

das man auch

$$\eta = [H, H^{\mathrm{r}}], \quad H^{\mathrm{r}}_{ij} = \sum g_{ij,lk} H_{kl} \tag{25.7}$$

schreiben kann. Da G unter dem Fluss abnehmen soll, wählt man eine quadratische Form, die für die gewünschte "diagonale" Form verschwindet, deren andere Eigenwerte aber positiv sind. Beispielsweise ist dies mit einem Doppelkommutator mit einem hermiteschen Operator v möglich,

$$H^{\mathrm{r}} = [v, [v, H]]. \tag{25.8}$$

Mit dieser Wahl betrachtet man die Anteile von H als diagonal, die mit v kommutieren. Nimmt man als v zum Beispiel den Operator der Anzahl der Quasiteilchen (Zahl der Löcher unterhalb der Fermikante plus Zahl der Elektronen oberhalb der Fermikante), so ergibt dies ein η, das eine Wechselwirkung liefert, die die Anzahl der Anregungen über die Fermikante erhält. In der Diagonal-Darstellung von v ergibt sich $H^{\mathrm{r}}_{ij} = (v_i - v_j)^2 H_{ij}$. Am einfachsten können wir v als Einteilchen-Operator einführen

$$v = \sum_k v_k c^\dagger_k c_k \tag{25.9}$$

Ein Beitrag der Form $H_{k_1,k_2,...k'_1,k'_2,...} c^\dagger_{k_1} c^\dagger_{k_2} ... c_{k'_1} c_{k'_2} ...$ erscheint dann in H^{r} mit der Eliminations-Funktion

$$r_{k_1,k_2,...k'_1,k'_2,...} = (v_{k_1} + v_{k_2} + ... - v_{k'_1} - v_{k'_2} - ...)^2 \tag{25.10}$$

multipliziert. Sie gibt an, wie dringend dieser Term eleiminiert werden soll. Im allgemeinen wird es zweckmäßig sein, die Beiträge mehrerer v zu addieren, damit nur speziell die gewünschten Beiträge in H übrig bleiben

$$r_{k_1,k_2,...k'_1,k'_2,...} = \sum_\alpha (v^\alpha_{k_1} + v^\alpha_{k_2} + ... - v^\alpha_{k'_1} - v^\alpha_{k'_2} - ...)^2. \tag{25.11}$$

Wir bemerken bei dieser Wahl: Falls der Impuls eines Erzeugungs- und eines Vernichtungs-Operators übereinstimmen, dann ist die Funktion r die gleiche wie wenn die beiden Operatoren entfernt wären. falls insbesondere die Impulse der Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren paarweise übereinstimmen, dann verschwindet r. Nun möchten wir haben, dass r auch für Paare $c^\dagger_{\mathbf{k}}$ und $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}$ verschwindet. Dann fordern wir $v_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}$. Ähnlich wollen wir, dass r auch für Paare $c^\dagger_{\mathbf{k}}$ und $c^\dagger_{-\mathbf{k}}$ verschwindet. Dazu wählen wir $v_{\mathbf{k}} + v_{-\mathbf{k}} = 0$.

25.b Störungs-Theorie

Wir wollen nun die Fluss-Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}l} = [\eta, H] = [[H, V^{\mathrm{r}}], H] = [[T + V, V^{\mathrm{r}}], T + V] \tag{25.12}$$

störungstheoretisch lösen. In erster Ordnung in der Wechselwirkung erhalten wir

$$\frac{\mathrm{d}V_1(l)}{\mathrm{d}l} = [[T, V_1^{\mathrm{r}}], T] \tag{25.13}$$

und damit

$$\frac{\mathrm{d}V_1(k_1, k_2; q_1, q_2; l)}{\mathrm{d}l} = -\Delta\epsilon(k_1, k_2, q_1, q_2)^2 r(k_1, k_2, q_1, q_2) V_1(k_1, k_2, q_1, q_2; l) \tag{25.14}$$

mit

$$\Delta\epsilon(k_1, k_2, q_1, q_2) = \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - \epsilon_{q_1} - \epsilon_{q_2}. \tag{25.15}$$

und

$$V_1(k_1, k_2, q_1, q_2; l) = \mathrm{e}^{-\Delta\epsilon(k_1,k_2,q_1,q_2)^2 r(k_1,k_2,q_1,q_2) l} V(k_1, k_2, q_1, q_2). \tag{25.16}$$

Daher wird der Zerfall von V_1 nicht nur durch die Differenz der Energien $\Delta\epsilon$, sondern auch durch den Eliminations-Faktor r bestimmt. Für die Beiträge in zweiter Ordnung der Wechselwirkung erhält man die Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}l} - [[T, V_2^{\mathrm{r}}], T] = [[T, V_1^{\mathrm{r}}], V_1] + [[V_1, V_1^{\mathrm{r}}], T]. \tag{25.17}$$

Auf der rechten Seite ist die Normal-Ordnung durchzuführen. Es bleiben dann Terme vom Typ $c^{\dagger m} c^m$ mit $m = 1, 2, 3$. Wir werden im wesentlichen Terme mit $m = 2$ betrachten. Für diese kann man die Differentialgleichung lösen. Zu berechnen sind die Beiträge V_2, für die $r = 0$ ist. Für diese verschwindet V_2^{r} auf der linken Seite der Gleichung. Auf der rechten Seite der Gleichung haben wir Beiträge der Form $V(\{a\})V(\{b\})$ mit geeigneten Faktoren r und $\Delta\epsilon$. Dabei stehen $\{a\}$ und $\{b\}$ jeweils für vier Impulse. Wir wollen sie nicht im einzelnen hinschreiben, bemerken aber, dass sie nach Integration auf Grund der l-Abhängigkeit (25.16) die Form

$$V(\{a\})V(\{b\}) \frac{r(\{a\})(2\Delta\epsilon(\{a\}) + \Delta\epsilon(\{b\})) - r(\{b\})(\Delta\epsilon(\{a\}) + 2\Delta\epsilon(\{b\}))}{r(\{a\})\Delta\epsilon(\{a\})^2 + r(\{b\}) 2\Delta\epsilon(\{b\})^2} \tag{25.18}$$

annehmen. Es stellt sich nun heraus, dass für die zu berechnenden Beiträge stets $r(\{a\}) = r(\{b\})$ gilt, so dass sich die Faktoren r herauskürzen und wir keine spezifische Wahl treffen müssen.

Auf diese Weise können wir in zweiter Ordnung in der Kopplung U die effektive Wechselwirkung der Form (23.22-23.28) berechnen.

25.c Freie Energie

Diese Wechselwirkung ist nun auf ihre Stabilität gegen Symmetriebrechung zu untersuchen. Das heißt, wir müssen das großkanonische Potential

$$G = \langle H - \mu\mathcal{N} \rangle - TS, \tag{25.19}$$

auf sein Verhalten bei Variation der Erwartungswerte

$$\langle c_k^\dagger c_l \rangle = n_k^0 \delta_{k,l} + \nu_{k,l}, \quad \nu_{k,l} = \nu_{l,k}^*, \tag{25.20}$$

$$\langle c_k^\dagger c_l^\dagger \rangle = \Delta_{k,l}^* = -\Delta_{l,k}^*, \quad \langle c_l c_k \rangle = \Delta_{k,l} \tag{25.21}$$

untersuchen. Die Wechselwirkung ist eine quadratische Form in den ν und Δ.

$$\begin{aligned}
E - \mu N &= E_0 - \mu N_0 + \sum_{\mathbf{k}s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \nu_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s} \\
&+ \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_\mathrm{B}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'}^* \Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} \\
&+ \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} \big(V_\mathrm{H}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s'} - V_\mathrm{F}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{k}s',\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} \big) \\
&+ \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_\mathrm{Y}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{k}s,\mathbf{q}_0-\mathbf{k}s'}^* \Delta_{\mathbf{q}s,\mathbf{q}_0-\mathbf{q}s'} \\
&+ \frac{1}{2V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} \big(V_\mathrm{C}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}s,\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{q}s',\mathbf{q}s'} - V_\mathrm{A}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}s',\mathbf{k}s}^* \nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} \big)
\end{aligned} \tag{25.22}$$

Es bleibt noch die zugehörige Entropie für kleine ν und Δ zu bestimmen. Wir gehen aus von der Matrix

$$R = \begin{pmatrix} \langle c_k^\dagger c_l \rangle & \langle c_k^\dagger c_l^\dagger \rangle \\ \langle c_k c_l \rangle & \langle c_k c_l^\dagger \rangle \end{pmatrix} = D + A \tag{25.23}$$

mit der Diagonal-Matrix D und der Matrix A

$$D = \begin{pmatrix} n_k^0 \delta_{k,l} & 0 \\ 0 & (1-n_k^0)\delta_{k,l} \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \nu_{k,l} & \Delta_{k,l}^* \\ -\Delta_{k,l} & -\nu_{l,k} \end{pmatrix}. \tag{25.24}$$

Nun kann man diese Matrix durch eine unitäre Transformation diagonalisieren, die der Einführung neuer Fermionen entspricht,

$$\begin{pmatrix} c^\dagger \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^\dagger \\ \alpha \end{pmatrix}. \tag{25.25}$$

Die Diagonalisierung bis zur zweiten Ordnung in den Außerdiagonal-Matrixelementen ergibt bekanntlich die Eigenwerte

$$\lambda_i = D_{ii} + A_{ii} + \sum_{j \neq i} \frac{A_{ij} A_{ji}}{D_{ii} - D_{jj}} \tag{25.26}$$

Hieraus lässt sich dann die Spur einer analytischen Funktion berechnen,

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr} \hat{f}(D+A) &= \sum_i \hat{f}(\lambda_i) = \sum_i \hat{f}(D_{ii}) + \sum_i (\lambda_i - D_{ii}) \hat{f}'(D_{ii}) + \ldots \\
&= \sum_i \hat{f}(D_{ii}) + \sum_i \hat{f}'(D_{ii}) A_{ii} + \frac{1}{2} \sum_i \hat{f}''(D_{ii}) A_{ii}^2 \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} A_{ij} A_{ji} \frac{\hat{f}'(D_{ii}) - \hat{f}'(D_{jj})}{D_{ii} - D_{jj}} + O(A^3).
\end{aligned} \tag{25.27}$$

Im vorliegenden Fall erhalten wir die Entropie als

$$S = -k_\mathrm{B} \mathrm{tr}(R \ln R). \tag{25.28}$$

Wir haben also $\hat{f}(n) = -k_\mathrm{B} n \ln n$ zu entwickeln und erhalten

$$\hat{f}(n^0) = -k_\mathrm{B} n^0 \ln n^0, \quad \hat{f}'(n^0) = -k_\mathrm{B}(1 + \ln n^0), \quad \hat{f}''(n^0) = -\frac{k_\mathrm{B}}{n^0}. \tag{25.29}$$

und damit

$$\begin{aligned} S &= S^0 + k_\mathrm{B}\beta\sum_k(\epsilon_k^0-\mu)\nu_{kk} \\ &- \frac{k_\mathrm{B}}{2}\sum_{kk'}|\nu_{kk'}|^2 f(\beta(\epsilon_k^0)-\mu),\beta(\epsilon_{k'}^0-\mu)) \\ &- \frac{k_\mathrm{B}}{2}\sum_{kk'}|\Delta_{kk'}|^2 f(\beta(\epsilon_k^0-\mu),\beta(\mu-\epsilon_{k'}^0)) \end{aligned} \tag{25.30}$$

bis zur zweiten Ordnung in ν und Δ mit

$$S^0 = -k_\mathrm{B}\sum_k\left(n_k^0\ln n_k^0+(1-n_k^0)\ln(1-n_k^0)\right), \tag{25.31}$$

$$f(x,y) = \frac{x-y}{\frac{1}{\mathrm{e}^y+1}-\frac{1}{\mathrm{e}^x+1}} = \frac{x-y}{\mathrm{e}^x-\mathrm{e}^y}(\mathrm{e}^x+1)(\mathrm{e}^y+1) \tag{25.32}$$

mit dem Limes

$$f(x,x) = \frac{(\mathrm{e}^x+1)^2}{\mathrm{e}^x} \tag{25.33}$$

und den Symmetrien

$$f(x,y) = f(y,x) = f(-x,-y). \tag{25.34}$$

Zur Berechnung des großkanonischen Potentials müssen wir damit von (25.22)

$$TS = -\frac{k_\mathrm{B}T}{2}\sum_{\mathbf{k},s,s'}\left(f_\mathrm{B}(\mathbf{k})|\Delta_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'}|^2+f_\mathrm{H}(\mathbf{k})|\nu_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s'}|^2+f_\mathrm{Y}(\mathbf{k})|\Delta_{\mathbf{k}s,\mathbf{q}_0-\mathbf{k}s'}|^2+f_\mathrm{C}(\mathbf{k})|\nu_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}s,\mathbf{k}s'}|^2\right) \tag{25.35}$$

mit

$$\begin{aligned} f_\mathrm{B}(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_\mathbf{k}-\mu),\beta(\mu-\epsilon_\mathbf{k})), & f_\mathrm{H}(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_\mathbf{k}-\mu),\beta(\epsilon_\mathbf{k}-\mu)), \\ f_\mathrm{Y}(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_\mathbf{k}-\mu),\beta(\mu-\epsilon_{\mathbf{q}_0-\mathbf{k}})), & f_\mathrm{C}(\mathbf{k}) &= f(\beta(\epsilon_\mathbf{k}-\mu),\beta(\epsilon_{\mathbf{q}_0+\mathbf{k}}-\mu)) \end{aligned} \tag{25.36}$$

abziehen.

Diese quadratische Form ist dann daraufhin zu untersuchen, ob sie positiv definit ist. Für die vier Kanäle, die durch die Indices $_\mathrm{B}$, $_\mathrm{H}$, $_\mathrm{Y}$ und $_\mathrm{C}$ gekennzeichnet sind, hat man jeweils eine quadratische Form

$$\begin{aligned} \beta F &= \frac{1}{2V_\mathrm{P}}\sum_{k,q}(\beta U)(1+\frac{U}{t}V_{k,q})\Delta_k^*\Delta_q+\frac{1}{2}\sum_k f_k\Delta_k^*\Delta_k \\ &= \frac{1}{2}\sum_{k,q}\left(\frac{U}{t}A_{k,q}+\left(\frac{U}{t}\right)^2 B_{k,q}+\delta_{k,q}\right)\sqrt{f_k}\Delta_k^*\sqrt{f_q}\Delta_q \end{aligned} \tag{25.37}$$

mit

$$A_{k,q} = \frac{\beta t}{V_\mathrm{P}\sqrt{f_kf_q}}, \quad B_{k,q} = \frac{\beta t V_{k,q}}{V_\mathrm{P}\sqrt{f_kf_q}} \tag{25.38}$$

auf ihre Positivität zu untersuchen, wobei natürlich bei zwei Kanälen ν statt Δ steht.

Im weiteren entwickeln wir das großkanonische Potential bis in zweiter Ordnung in ν und Δ. Der Beitrag in erster Ordnung in ν aus $E-\mu\langle\mathcal{N}\rangle$ und der Entropie heben sich weg. Die Beiträge in zweiter Ordnung werden dann einer Stabilitätsanalyse unterworfen. Solange die quadratische Form in ν und Δ positiv definit ist, ist das System stabil mit $\nu = 0$ und $\Delta = 0$. Sobald dieser Ausdruck nicht mehr positiv definit ist, ist dieser symmetrische Zustand instabil. Das System geht in einen Zustand über, in dem ν oder Δ von Null verschieden ist. Man lernt daraus, wann, das heißt bei vorgegebenem U und t bei welcher Temperatur T der Phasenübergang stattfindet.

25.d Symmetrien

25.d.α Gittersymmetrie

Wir betrachten Zustände auf einem quadratischen Gitter. Für dieses Gitter haben wir eine Gruppe von acht Symmetrie-Operationen, die das Gitter in sich überführen. Dies nützt man bei der Stabilitätsanalyse aus. Vier der Operationen sind Rotationen R^n, wobei R eine Rotation um 90^0 ist. Vier weitere sind Spiegelungen an den beiden Achsen und an den beiden Diagonalen. Zweckmäßig ist es, zunächst zwischen Zuständen gerader und ungerader Parität zu unterscheiden. Die Anwendung des Paritäts-Operators ist in der Ebene eine Rotation um 180^0, wird also durch R^2 beschrieben. Da eine Rotation um 360^0 den Zustand in sich überführt, ist $R^4 = 1$. Die Eigenwerte von R^2 sind also ± 1 (Parität). Die Zustände positiver Parität haben die Form $(\nu(\mathbf{k}) + \nu(-\mathbf{k}))/\sqrt{2}$, die negativer Parität $(\nu(\mathbf{k}) - \nu(-\mathbf{k}))/\sqrt{2}$. Lediglich in den Fällen, in denen $\nu(\mathbf{k})$ mit $\nu(-\mathbf{k})$ übereinstimmt, gibt es nur den Zustand positiver Parität $\nu(\mathbf{k})$. Dies passiert für $\mathbf{k} = (0,0)$, aber auch für $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{a}, 0)$, $(0, \frac{\pi}{a})$ und $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) = \mathbf{q}_0$, da sich dann $\mathbf{k}$ und $-\mathbf{k}$ durch einen reziproken Gittervektor unterscheiden.

Bei den Zuständen positiver Parität kann man nun vier Fälle unterscheiden. R hat wegen $R^2 = +1$ die Eigenwerte ± 1. Das Gleiche gilt für die Spiegelungen. Dabei ergeben sich für die Spiegelungen $M_{\rm a}$ an den Achsen die gleichen Eigenwerte, ebenso für die Spiegelungen $M_{\rm d}$ an den beiden Diagonalen. In der folgenden Tabelle führen wir erst die Notation für die entsprechende Symmetrie an, dann ein Beispiel, und dann die drei Eigenwerte.

		R	$M_{\rm a}$	$M_{\rm d}$
s_+	1	$+1$	$+1$	$+1$
$s_- = g$	$xy(x^2 - y^2)$	$+1$	-1	-1
d_+	$x^2 - y^2$	-1	$+1$	-1
d_-	xy	-1	-1	$+1$

(25.39)

Wenn $M_a = -1$, dann hat die Funktion für $k_x = 0$ und $k_y = 0$ einen Knoten, wie auch für $k_x = \frac{\pi}{a}$ und $k_y = \frac{\pi}{a}$. Falls $M_d = -1$ hat die Funktion für $k_y = \pm k_x$ Knoten.

Für die Zustände ungerader Parität ist es nicht möglich, für alle Operationen simultan einen bestimmten Eigenwert anzugeben. Man kann zum Beispiel $R = \pm \mathrm{i}$ verlangen. Dann führt aber jede Spiegelung den Zustand mit $R = +\mathrm{i}$ in den mit $R = -\mathrm{i}$ über oder umgekehrt. Oder wir suchen einen Zustand, der unter Spiegelung an der x-Achse in sein negatives und unter Spiegelung an der y-Achse in sich übergeht. Dann werden aber die Spiegelungen an einer Diagonalen oder die Rotation um 90^0 den Zustand in einen überführen, der unter Spiegelung an der y-Achse in sein negatives und unter Spiegelung an der x-Achse in sich übergeht. Da immer zwei Zustände derartig miteinander verknüpft sind, spricht man hier von einer zweidimensionellen Darstellung der Gruppe. Wegen ihrer negativen Parität und da die einfachsten Funktionen x und y sind, spricht man von p-Zuständen. Für die p-Zustände hat man stets zweifache Entartung.

Wir werden die Instabilitäten nach diesen fünf Darstellungen klassifizieren.

25.d.β Alternierende Ordnung

Bei den Wechselwirkung $V_{\rm A}$, $V_{\rm C}$ und $V_{\rm Y}$ tritt der Vektor $\mathbf{q}_0$ in Erscheinung, der ein alternierendes Verhalten beschreibt. Wir gehen davon aus, dass V reell ist, da in der symmetrischen Phase Zeitumkehrinvarianz und Paritäts-Erhaltung gilt. Dann erhält man unter Berücksichtigung der Hermitezität und der Symmetrie bei Vertauschung der Paare

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = V(\mathbf{k} + \mathbf{q}_0, \mathbf{q} + \mathbf{q}_0) \tag{25.40}$$

Dies hat zur Folge, dass man Eigenzustände mit $(\nu(\mathbf{k}) \pm \nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}_0))/\sqrt{2}$ bilden kann, die ich mit $Q = \pm 1$ kennzeichne.

25.d.γ Spin-Singulett und Spin-Triplett

Generell ist zwischen Spin-Singuletts und Spin-Tripletts zu unterscheiden. In dem supraleitenden Kanal haben wir $c^\dagger_{\mathbf{k}s_1} c^\dagger_{-\mathbf{k}s_2}$. Haben wir eine Funktion gerader Parität in $\mathbf{k}$, so muss die Spinwellen-Funktion antisymmetrisch sein: Spin-Singulett. Ist sie von ungerader Parität, so ist die Spinwellen-Funktion gerade: Spin-Triplett. Auch für $V_{\rm Y}$ ergeben sich die Spin-Wellenfunktionen aus den Symmetrien der Orts- (oder besser Impuls-) Wellenfunktionen.

Anders ist die Situation für die Teilchen-Loch-Anregungen, die durch $V_{\rm H}$, $V_{\rm F}$, $V_{\rm A}$ und $V_{\rm C}$ beschrieben werden. Wir zerlegen zum Beispiel

$$\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} = \nu^{\rm s}_{\mathbf{q}}\delta_{s,s'} + \sum_\alpha \nu^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{q}}\sigma^\alpha_{s,s'} \tag{25.41}$$

in die Singlett-Amplitude $\nu^{\rm s}$ und die Triplett-Amplituden $\nu^{{\rm t}\alpha}$. Damit ergibt sich dann für die Ausdrücke im Hartree- und im Fock-Anteil der Wechselwirkung

$$\sum_{s,s'} \nu^*_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s}\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s'} = \sum_{s,s'}(\nu^{*\rm s}_{\mathbf{k}}\delta_{s,s} + \sum_\alpha \nu^{*{\rm t}\alpha}_{\mathbf{k}}\sigma^{*\alpha}_{s,s})(\nu^{\rm s}_{\mathbf{q}}\delta_{s',s'} + \sum_\alpha \nu^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{q}}\sigma^\alpha_{s',s'}) = 4\nu^{*\rm s}_{\mathbf{k}}\nu^{\rm s}_{\mathbf{q}} \tag{25.42}$$

und

$$\sum_{s,s'} \nu^*_{\mathbf{k}s',\mathbf{k}s}\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} = \sum_{s,s'}(\nu^{*\rm s}_{\mathbf{k}}\delta_{s',s} + \sum_\alpha \nu^{*{\rm t}\alpha}_{\mathbf{k}}\sigma^{\alpha}_{s',s})(\nu^{\rm s}_{\mathbf{q}}\delta_{s,s'} + \sum_\beta \nu^{{\rm t}\beta}_{\mathbf{q}}\sigma^\beta_{s,s'}) = 2\nu^{*\rm s}_{\mathbf{k}}\nu^{\rm s}_{\mathbf{q}} + 2\sum_\alpha \nu^{*{\rm t}\alpha}_{\mathbf{k}}\nu^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{q}}, \tag{25.43}$$

was auf

$$\frac{1}{V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(2V_{\rm H}(\mathbf{k},\mathbf{q}) - V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q}))\nu^{*\rm s}_{\mathbf{k}}\nu^{\rm s}_{\mathbf{q}} - \frac{1}{V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\alpha} V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q}))\nu^{*{\rm t}\alpha}_{\mathbf{k}}\nu^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{q}} \tag{25.44}$$

führt, wobei hier allerdings $\nu_{\mathbf{k}}$ stets reell ist. Für die anomalen Erwartungswerte sieht die Zerlegung etwas anders aus

$$\Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} = \epsilon_{s,s'}\Delta^{\rm s}_{\mathbf{q}} + (\epsilon\sigma^\alpha)_{s,s'}\Delta^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{q}}. \tag{25.45}$$

mit $\epsilon = \sigma^y$ und der Symmetrie

$$\Delta^{\rm s}_{\mathbf{k}} = \Delta^{\rm s}_{-\mathbf{k}}, \quad \Delta^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{k}} = -\Delta^{{\rm t}\alpha}_{-\mathbf{k}}. \tag{25.46}$$

Dann folgt

$$\sum_{s,s'} \Delta^*_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'}\Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} = (\epsilon^*_{s,s'}\Delta^{*\rm s}_{\mathbf{k}} + (\epsilon^*\sigma^{*\alpha})_{s,s'}\Delta^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{k}})(\epsilon_{s,s'}\Delta^{\rm s}_{\mathbf{q}} + (\epsilon\sigma^\alpha)_{s,s'}\Delta^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{q}}) = 2\Delta^{*\rm s}_{\mathbf{k}}\Delta^{\rm s}_{\mathbf{q}} + 2\sum_\alpha \Delta^{*{\rm t}\alpha}_{\mathbf{k}}\Delta^{{\rm t}\alpha}_{\mathbf{q}}. \tag{25.47}$$

Für Singulett- und Triplett-Kanal erhalten wir also die gleichen Beiträge. Allerdings gehört das Singulett zu gerader, das Triplett zu ungerader Parität.

Berücksichtigen wir alle drei Symmetrien, so unterscheiden wir
a) gemäß der Gittersymmetrie s_+, s_-, d_+, d_- und p-Zustände,
b) homogene und alternierende Ordnungen, letztere mit $Q = +1$ und $Q = -1$,
c) Supraleitung und Teilchen-Loch-Ordnung letztere mit $S = 0$ und $S = 1$,
insgesamt also $5 \times 3 \times 3 = 45$ verschiedene Möglichkeiten der Symmetrie-Brechung.

25.e Diagonalisierung

Für diese 45 Möglichkeiten kann man sich numerisch die Matrizen $V_{k,q}$ und die Entropiefaktoren f_k berechnen und hat dann die Eigenwerte zu untersuchen, das heißt man bestimmt die Eigenwerte von $\frac{U}{t}A+(\frac{U}{t})^2B+1$. Sobald einer negativ wird, wird das System instabil. Man beachte, dass f, A und B nur von T/t abhängen. Daher bestimmt man für festes T/t den kritischen Eigenwert $(U/t)_{\rm c}$, für den erstmals ein Eigenwert 0 wird.

Falls die Gittersymmetrie nicht s_+ ist oder $Q=-1$, dann verschwindet der Beitrag aus A und man bestimmt dann den niedrigsten Eigenwert λ von B und erhält das zugehörige $(U/t)_{\rm c}=1/\sqrt{-\lambda}$.

Wir geben unten die berechneten Instabilitäten an. Wir müssen sie auch interpretieren. Das Auftreten der Instabilitäten bedeutet, dass das System in einen Zustand niedrigerer freier Energie kommt, indem es den symmetrischen Zustand verlässt und in einen übergeht, für den ν oder Δ verschieden von 0 ist. Gäbe es nur die betrachteten quadratischen Terme in der freien Energie, dann würden ν oder Δ beliebig groß werden. Tatsächlich gibt es Terme höherer Ordnung in der Entropie, die wir nicht berechnet haben, die aber dafür sorgen, dass ν und Δ endlich bleiben. Wir setzen nun die Erwartungswerte von ν und Δ ein und gehen zu der sich daraus ergebenden neuen Normal-Ordnung über. Dann erhalten wir zum Beispiel aus dem $V_{\rm B}$-Term von (23.23)

$$\frac{1}{2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_{\rm B}(\mathbf{k},\mathbf{q}) :(\Delta^*_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'}+c^\dagger_{\mathbf{k}s}c^\dagger_{-\mathbf{k}s'})(\Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'}+c_{-\mathbf{q}s'}c_{\mathbf{q}s}): \tag{25.48}$$

Summieren wir nun

$$\begin{aligned}\frac{1}{2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{q}} V_{\rm B}(\mathbf{k},\mathbf{q})\Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} &= \epsilon_{ss'}\frac{1}{2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{q}} V_{\rm B}(\mathbf{q},\mathbf{k})\Delta^{\rm s}_{\mathbf{q}}+\sum_\alpha e^\alpha(\epsilon\sigma^\alpha)_{s,s'}\frac{1}{2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{q}} V_{\rm B}(\mathbf{k},\mathbf{q})\Delta^{\rm t}_{\mathbf{q}} \\ &= \hat{V}^{\rm s}_{\rm B}(\mathbf{k})\epsilon_{ss'}+\hat{V}^{\rm t\alpha}_{\rm B}(\mathbf{k})(\epsilon\sigma)_{ss'}\end{aligned} \tag{25.49}$$

mit

$$\sigma=\sum_\alpha e^\alpha\sigma^\alpha. \tag{25.50}$$

Dabei ist $\mathbf{e}$ ein Einheitsvektor. Es kommt hier zum Ausdruck, dass alle Komponenten des Tripletts entartet sind, so dass man eine beliebige Überlagerung haben kann. Dann bleibt schließlich außer einer Konstanten, die die Energieabsenkung beschreibt und Termen $:c^\dagger c^\dagger cc:$ in der neuen Normal-Ordnung

$$\sum_{\mathbf{k},s,s'}(\hat{V}^{\rm s}_{\rm B}(\mathbf{k})\epsilon_{ss'}+\sum_\alpha\hat{V}^{\rm t\alpha}_{\rm B}(\mathbf{k})(\epsilon\sigma)_{ss'}):c^\dagger_{\mathbf{k}s}c^\dagger_{-\mathbf{k}s'}: \tag{25.51}$$

Ähnliches gilt für die anderen Kanäle. Wir geben das Verfahren noch explizit für $V_{\rm H}$ und $V_{\rm F}$ an. Aus

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_{\rm H}(\mathbf{k},\mathbf{q}) :(\nu^*_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s}+c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s})(\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s'}+c^\dagger_{\mathbf{q}s'}c_{\mathbf{q}s'}): \\ -&\frac{1}{2V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q}) :(\nu^*_{\mathbf{k}s',\mathbf{k}s}+c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s'})(\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s}+c^\dagger_{\mathbf{q}s'}c_{\mathbf{q}s}):\end{aligned} \tag{25.52}$$

erhalten wir die folgenden Beiträge $:c^\dagger c:$

$$\begin{aligned}&\frac{1}{V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s}(2V_{\rm H}(\mathbf{k},\mathbf{q})-V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q}))\nu^{\rm s}_{\mathbf{q}}c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s}-\frac{1}{V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s,s',\alpha} V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q})\nu^{\rm t\alpha}_{\mathbf{q}}c^\dagger_{\mathbf{k}s}\sigma^\alpha_{ss'}c_{\mathbf{k}s'} \\ =&\sum_{\mathbf{k},s}\hat{V}^{\rm s}(k)c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s}+\sum_{\mathbf{k},s}\hat{V}^{\rm t}(\mathbf{k})c^\dagger_{\mathbf{k}s}\sigma_{ss'}c_{\mathbf{k}s'}\end{aligned} \tag{25.53}$$

mit

$$\hat{V}^{\rm s}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{q}}(2V_{\rm H}(\mathbf{k},\mathbf{q})-V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q}))\nu^{\rm s}_{\mathbf{q}}, \tag{25.54}$$

$$\hat{V}^{\rm t}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{V_{\rm P}}\sum_{\mathbf{q}} V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q})\nu^{\rm t}_{\mathbf{q}}. \tag{25.55}$$

Auch hier verwenden wir die Entartung des Tripletts.

Betrachten wir jetzt noch die Gittersymmetrie. Die Funktionen ν und Δ sind danch klassifiziert. Wegen der Invarianz von $V(\mathbf{k},\mathbf{q})$ unter den Symmetrie-Operationen, sind auch die neuen Funktionen $\hat{V}_{\mathrm{B}}(\mathbf{k})$, $\hat{V}^{\mathrm{s}}(\mathbf{k})$ und $\hat{V}^{\mathrm{t}}(\mathbf{k})$ danach zu klassifizieren. Wir geben nun die Funktionen mit den niedrigsten Fourier-Komponenten an

$$\begin{array}{r|c} s_+ & 1,\ \cos(k_x a)+\cos(k_y a) \\ s_- = g & \sin(k_x a)\sin(k_y a)(\cos(k_x a)-\cos(k_y a)) \\ d_+ & \cos(k_x a)-\cos(k_y a) \\ d_- & \sin(k_x a)\sin(k_y a) \\ p & \sin(k_x a),\ \sin(k_y a) \end{array} \tag{25.56}$$

Bei halber Füllung ist an der Fermikante $\cos(k_x a) + \cos(k_y a) = 0$. Die zweite angegebene Funktion für s_+, die auch mit s^* bezeichnet wird, hat daher einen Knoten an der Fermikante. Sie ist aber nicht von der Abstoßung betroffen, das heißt der abstoßende Beitrag in erster Ordnung in U wirkt sich für diese Funktion nicht aus. Daher wurde auch sie als Kandidat für die Supraleitung diskutiert.

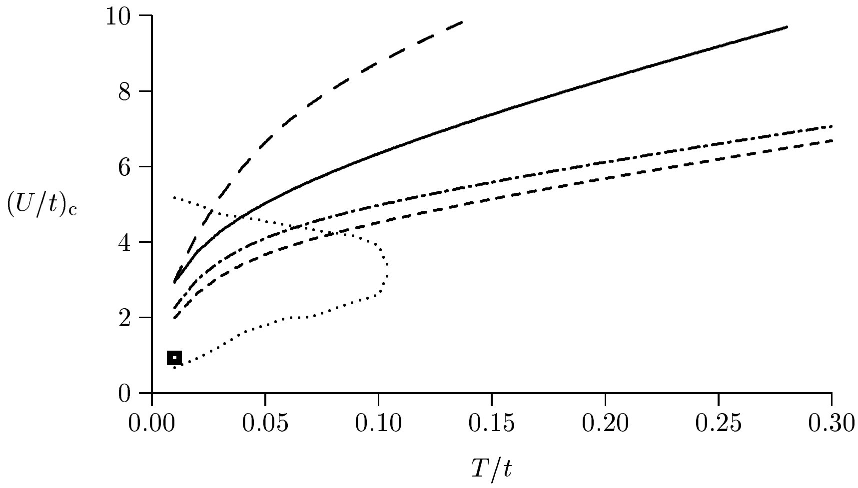
Für V_{A}, V_{C} und V_{Y} müssen wir noch zwischen $Q = +1$ und $Q = -1$ unterscheiden. Dann sind die Funktionen mit den niedrigsten Fourier-Komponenten

$$\begin{array}{r|cc} & Q=+1 & Q=-1 \\ \hline s_+ & 1 & \cos(k_x a)+\cos(k_y a) \\ s_- = g & \sin(k_x a)\sin(k_y a)(\cos(2k_x a)-\cos(2k_y a)) & \sin(k_x a)\sin(k_y a)(\cos(k_x a)-\cos(k_y a)) \\ d_+ & \cos(2k_x a)-\cos(2k_y a) & \cos(k_x a)-\cos(k_y a) \\ d_- & \sin(k_x a)\sin(k_y a) & \sin(2k_x a)\sin(k_y a)+\sin(k_x a)\sin(2k_y a) \\ p & \sin(2k_x a),\ \sin(2k_y a) & \sin(k_x a),\ \sin(k_y a) \end{array} \tag{25.57}$$

25.f Ergebnisse

	channel	line pattern
Antiferromagnetism	*ph tr* q_+ s_+	···············
Pomeranchuk instability	*ph si* 0 d_+	- - - - - - - -
Band splitting	*ph si* q_- *p*	-·-·-·-·-
Superconductivity	*pp si* 0 d_+	———
Flux phases	*ph si/tr* q_- d_+	· · · · · · · · ·
Pomeranchuk instability	*ph si* 0 $s_- = g$	— — — —

In den Figuren (auch farbig erhältlich) zeigen wir die kritischen Werte der niedrigsten $(U/t)_{\mathrm{c}}$ als Funktion von T/t für zwei verschiedene Werte von μ/t. Zunächst sind in der Tabelle die wichtigsten auftretenden Instabilitäten angegeben. In der zweiten Reihe charakterisieren wir die Instabilitäten: *ph* steht für Teilchen-Loch (particle-hole), *pp* für Teilchen-Teilchen (particle-particle) *si* für Singulett, *tr* für Triplett, $q_\pm$ für $Q = \pm 1$, sonst 0.



Antiferromagnetismus Bei $\mu = 0$ (halbe Füllung) ist die niedrigste Instabilität die antiferromagnetische. Es stellt sich allerdings heraus, dass der Beitrag in zweiter Ordnung in U den Antiferromagnetismus unterdrückt. Das ist im Einklang damit, dass für große U die antiferromagnetische Kopplung wieder abnimmt. Wenn wir die halbe Füllung verlassen, wird der Antiferromagnetismus schwächer und verschwindet schließlich.

Die nächste Instabilität ist eine Pomeranchuk-d_+-Wellen-Instabilität. Sie ergibt einen die tetragonale Symmetrie brechenden Beitrag

$$2m \sum_{\mathbf{k},s} (\cos(k_x a) - cos(k_y a)) c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} = m \sum_{\mathbf{R},s} (c^\dagger_s(\mathbf{R}+\mathbf{a}_x) + c^\dagger_s(\mathbf{R}-\mathbf{a}_x) - c^\dagger_s(\mathbf{R}+\mathbf{a}_y) - c^\dagger_s(\mathbf{R}-\mathbf{a}_y)) c_s(\mathbf{R}). \tag{25.58}$$

Pomeranchuk-Instabilität und Verzerrung Diese Instabilität führt dazu, dass die Fermikante ihre tetragonale Symmetrie verliert und in einer Richtung ausgebuchtet wird. m kann ein beliebiges Vorzeichen haben und wächst betragsmäßig von T_c ab mit fallender Temperatur an. Dem entspricht bei Kopplung an das Gitter eine rhomboedrische Verzerrung und zwar eine rechteckige, die auch tatsächlich in einer Reihe von Hochtemperatur-Supraleitern gefunden wird.

Die damit verknüpfte Verzerrung kann man folgendermaßen verstehen: Die Hüpfmatrix-Elemente hängen vom Abstand der Atome ab, verändern sich also bei Verzerrung. Das führt zu einer Kopplung

$$\begin{aligned} & -(t - \tilde{t}\frac{\partial u_x}{\partial x}) \sum_{\mathbf{R}} (c^\dagger(\mathbf{R}+\mathbf{a}_x) + c^\dagger(\mathbf{R}-\mathbf{a}_x)) c(\mathbf{R}) + (x \to y) \\ = \quad & -2(t - \tilde{t}\frac{\partial u_x}{\partial x}) \sum_{\mathbf{k}} \cos(k_x a) c^\dagger_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + (x \to y) \end{aligned} \tag{25.59}$$

Dabei beschreibt $\frac{\partial u_x}{\partial x}$ die verzerrung in x-Richtung. Mit dem Erwartungswert

$$A_x = \sum_{\mathbf{k}} \cos(k_x a) \langle c^\dagger_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \rangle \tag{25.60}$$

und analog für A_y erhält die freie Energie nun die Form

$$F = F_0(A_x, A_y) + 2\tilde{t}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} A_x + \frac{\partial u_y}{\partial y} A_y\right) + \frac{1}{2} C \left(\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)^2\right) \tag{25.61}$$

Dabei ist F_0 der Beitrag zur freien Energie des Hubbard-Modells ohne Ankopplung an die Verzerrungen. Der letzte Beitrag ist (in vereinfachter Form) die Elasitizitäts-Energie des Gitters. Wir müssen nun das Minimum der freien Energie aufsuchen. Bezüglich der Verzerrung führt das auf

$$\frac{\partial F}{\partial \frac{\partial u_x}{\partial x}} = 2\tilde{t} A_x + C \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \tag{25.62}$$

was auf die Verzerrung

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = -\frac{2\tilde{t}}{C} A_x, \tag{25.63}$$

analog für $\partial u_y / \partial y$ führt. Da die Instabilität von d_+-Symmetrie ist, folgt $A_y = -A_x$ und damit $\partial u_y / \partial y = -\partial u_x / \partial x$.

p-Wellen-Instabilität Als nächstes folgt eine Teilchen-Loch-Instabilität, die zu einem Beitrag

$$\sum_{\mathbf{k},s} \mathrm{i}(m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a)) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} c_{\mathbf{k}s} \tag{25.64}$$

führt. Das ergibt dann Einteilchen-Eigenwerte

$$\hat{\epsilon}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + (m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a))^2}, \tag{25.65}$$

was eine Aufspaltung in zwei Bänder beschreibt, die allerdings an den beiden Stellen $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$ und $m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a) = 0$ zusammenhängen.

Supraleitungs-Instabilität Dieser schließt sich dann erst die Supraleitungs-Instabilität mit $d_{x^2-y^2}$-Symmetrie an, die allerdings wesentlich stärker als die anderen supraleitenden Instabilitäten ist. Die zugehörigen größten und kleinsten Eigenwerte λ bei halber Füllung multipliziert mit 100 sind in der folgenden Tabelle angegeben.

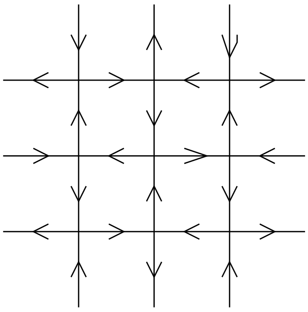
Symmetrie	$T = 0.1t$	$T = 0.03t$
s_+	12.51 ...-0.10	25.90 ...-0.39
$s_- = g$	0.00 ...-0.71	0.00 ...-1.75
d_+	0.01 ...-2.49	0.01 ...-5.49
d_-	0.69 ...-0.04	2.36 ...-0.06
p	1.35 ...-0.32	2.74 ...-0.97

Dabei ist nur der Beitrag zweiter Ordnung für s_+ berücksichtigt. Daraus ergeben sich kritische $(U/t)_\mathrm{c} = 6.34$ für $T = 0.1t$ und 4.27 für $T = 0.03t$.

Flussphasen-Instabilität Es folgt die sogenannte Flussphasen-Instabilität, die von verschiedenen Autoren (Kotliar, Affleck und Marston, Chakravarty) diskutiert wurde. (Für $\mu = 0$ ist sie mit der d_+-Supraleitungs-Instabilität entartet.) Für diese erhält man einen Beitrag zur Einteilchen-Energie

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{i}(\cos(k_x a) - \cos(k_y a)) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0} c_{\mathbf{k}} = -\frac{\mathrm{i}}{2} \sum_{\mathbf{R}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{R}} (c^\dagger_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_x} + c^\dagger_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_x} - c^\dagger_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_y} - c^\dagger_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_y}) c_{\mathbf{R}}. \tag{25.66}$$

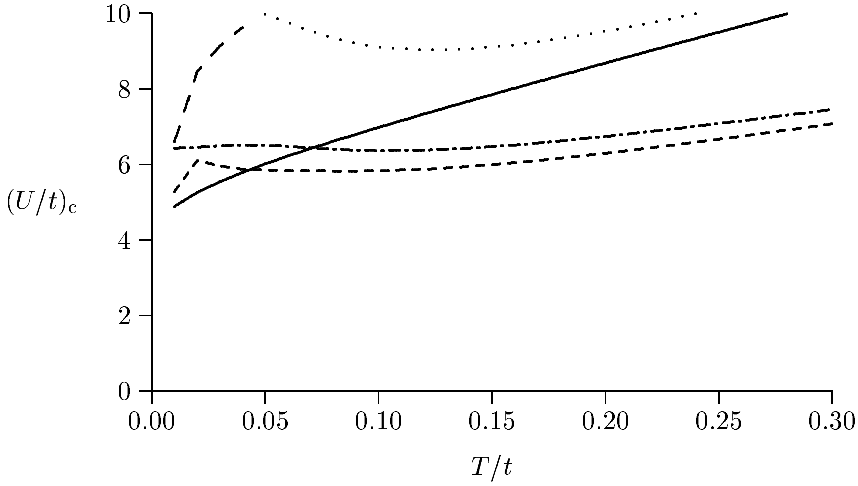
Wir können diesen imaginären Beitrag zum Hüpf-Matrix-Element dadurch veranschaulichen, dass wir jeweils einen Pfeil auf der Kante (link) zwischen den Nachbarpunkten in der Richtung einzeichnen, in der der Imaginärteil positiv ist. In Gegenrichtung ist er dann wegen der Hermitezität negativ.



Man sieht, dass auf dem Weg um eine Quadrat (Plaquette) alle Imaginärteile das gleiche Vorzeichen haben. Dies kann nicht weggeeicht werden. Vielmehr ist die Summe der Phasen invariant. Sie kann auch durch einen entsprechenden magnetischen Fluss durch das Quadrat erzeugt werden. Daher spricht man von einer Flussphase. Durch diese Störung entsteht ebenfalls eine Aufspaltung in zwei Bänder, die energetisch günstig ist.

Als nächstes kommt eine **g-Wellen-Pomeranchuk-Instabilität**.

Wir haben hier die Instabilitäten in der Reihenfolge ihrer Stärke aufgezählt. Zu beachten bleibt, dass eine Symmetriebrechung häufig andere unterdrückt, so dass sich die stärkste auswirkt. In wieweit die anderen ebenfalls auftreten, müsste separat untersucht werden.



Schließlich zeigen wir noch das Ergebnis für $\mu/t = 1/4$, was einer Dotierung $x = 0.1159$ bis $x = 0.1030$ entspricht. Die antiferromagnetische Instabilität ist völlig verschwunden. Es sei noch darauf hingewiesen, dass die Ergebnisse bei tiefen Temperaturen ($T/t < 0.05$) mit Unsicherheiten verbunden sind. Dies wird gegenwärtig verbessert.

26 Molekularfeld-Näherung

Es gibt viele Systeme, bei denen zwei Phasen bei Annäherung an den sogenannten kritischen Punkt einander immer ähnlicher werden. Das bekannteste Beispiel ist der kritische Endpunkt der Koexistenzlinie von Flüssigkeit und Dampf. An diesem Endpunkt und bei höheren Temperaturen kann man nicht mehr zwischen zwei Phasen unterscheiden: Man hat nur noch das Gas. Ein anderes Beispiel ist ein Ferromagnet. Unterhalb der Curie-Temperatur ist das System ferromagnetisch. Ob der Magnetismus in der einen oder anderen Richtung ausgerichtet ist, hängt von der Vorgeschichte ab. Erwärmt man den Ferromagneten, so nimmt die Magnetisierung ab, bis sie schließlich am Curie-Punkt kontinuierlich verschwindet. Es gibt weitere Arten kontinuierlicher Phasenübergänge. Ihnen allen ist gemeinsam, dass man sie durch einen Ordnungsparameter beschreibt. Im Falle des Ferromagneten ist das die Magnetisierung, im Falle des Gas-Flüssig-Übergangs die Differenz zwischen der Dichte und der kritischen Dichte. Dieser Abschnitt ist in erheblichem Umfang dem Abschnitt II des Überblicks-Artikels von L.P. Kadanoff et al. in Review of Modern Physics 39 (1967) p. 395 entnommen.

26.a Landau-Theorie für kritische Phänomene

Landau hat eine allgemeine Formulierung für diese Phasenübergänge gegeben. Er schreibt die freie Energie (wir werden später sehen, dass es sich um ein Zwischending zwischen Hamilton-Funktion und freier Energie handelt) als Integral über den Raum

$$\mathcal{F} = \int \mathrm{d}^3 r f(\mathbf{r}) \tag{26.1}$$

und entwickelt die Dichte $f(\mathbf{r})$ nach Potenzen des "Feldes" $S(\mathbf{r})$,

$$f(\mathbf{r}) = f_0(T) - h(\mathbf{r})S(\mathbf{r}) + a(T)S^2(\mathbf{r}) + b(T)S^4(\mathbf{r}) + c(T)(\nabla S(\mathbf{r}))^2. \tag{26.2}$$

Dabei sei $S(\mathbf{r})$ die Größe, deren Erwartungswert der Ordnungsparameter ist, den wir mit m bezeichnen, $m = \langle S(\mathbf{r})\rangle$. Wir nehmen an, dass die $S(\mathbf{r})$ klassische Größen sind. Die Größen h, a, b werden als Kopplungen bezeichnet, S, S^2, S^4 Operatoren. Daneben sind sowohl für die Kopplungen wie auch für S die Bezeichnung Feld üblich. Der erste Term $g_0(T)$ ergibt die freie Energie bei verschwindendem Ordnungsparameter. Der zweite Term beschreibt die Ankopplung eines äußeren symmetriebrechenden Felds (im magnetischen Fall eines Magnetfeldes $h = B$). Die weiteren Terme sind gerade in S, da vielfach eine Symmetrie $S \to -S$ besteht, die nur vom hS-Term gebrochen wird.
Wenn $\mathcal{F}$ die freie Energie ist, dann erhält man den wahrscheinlichsten Zustand als Minimum der freien Energie. Wir ersetzen also unter Vernachlässigung aller Fluktuationen S durch den Erwartungswert m, variieren $m(\mathbf{r}) \to m(\mathbf{r}) + \delta m(\mathbf{r})$ und erhalten in erster Ordnung in δm

$$\delta\mathcal{F} = \int \mathrm{d}^3 r \delta m(\mathbf{r})[-h(\mathbf{r}) + 2am(\mathbf{r}) + 4bm^3(\mathbf{r}) - 2c\triangle m(\mathbf{r})] \tag{26.3}$$

Da der Ausdruck für alle $\delta m(\mathbf{r})$ verschwinden muss, folgt

$$(2a + 4bm^2(\mathbf{r}) - 2c\triangle)m(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}). \tag{26.4}$$

Dann ergibt sich aus (26.4) der Ordnungsparameter. Ist die Lösung dieser Gleichung nicht eindeutig, so ist die mit der niedrigsten freien Energie zu wählen. Damit das Verfahren funktioniert, müssen b und c positiv sein. Falls b negativ ist, muss man einen S^6-Term in der freien Energie hinzunehmen. Falls c negativ ist, kann der Ordnungsparameter nicht homogen sein.
Im einfachsten Fall ist h konstant. Dann erhält man

$$(2a + 4bm^2)m = h. \tag{26.5}$$

Für $h = 0$ hat die Gleichung die Lösungen

$$m = 0, \tag{26.6}$$
$$m = \pm(-a/2b)^{1/2}. \tag{26.7}$$

Die erste Lösung ergibt das Minimum der freien Energie für $a > 0$, die zweite für $a < 0$. Landau macht nun die einfachste Annahme für die Temperatur-Abhängigkeit von a,

$$a(T) = a'(T - T_\mathrm{c}). \tag{26.8}$$

Oberhalb T_c verschwindet der Ordnungsparameter, unterhalb ist er von 0 verschieden. Sein Vorzeichen kann positiv oder negativ sein. Legt man ein schwaches symmetriebrechendes Feld an, so ergibt sich eine Änderung δm des Ordnungs-Parameters aus

$$2a(m + \delta m) + 4b(m^3 + 3m^2\delta m) = h, \tag{26.9}$$

woraus

$$\begin{array}{llll} \text{für } T > T_\mathrm{c} & a > 0, & m = 0 & \delta m = \frac{h}{2a} = \frac{h}{2a'(T-T_\mathrm{c})}, \\ \text{für } T < T_\mathrm{c} & a < 0, & m = (-a/2b)^{1/2}, & \delta m = \frac{h}{-4a} = \frac{h}{4a'(T_\mathrm{c}-T)} \end{array} \tag{26.10}$$

folgt. Die Suszeptibilität divergiert also mit $|T - T_\mathrm{c}|^{-1}$.
An der kritischen Temperatur ergibt sich aus (26.5) ein Anwachsen der Magnetisierung mit

$$m = \left(\frac{h}{4b}\right)^{1/3}. \tag{26.11}$$

Schließlich beobachten wir noch, dass die freie Energie bei $h = 0$ von der Form

$$\mathcal{F} = \left\{ \begin{array}{cl} V_\mathrm{P} f_0(T) & \text{für } T > T_\mathrm{c} \\ V_\mathrm{P}(f_0(T) - a(T)^2/4b) & \text{für } T < T_\mathrm{c} \end{array} \right. \tag{26.12}$$

ist. Dieser Extra-Beitrag in der freien Energie führt unter Berücksichtigung von

$$C_\mathrm{h} = -T\partial^2\mathcal{F}/\partial T^2/V_\mathrm{P} \tag{26.13}$$

auf einen Sprung in der spezifischen Wärme $\Delta C = T_\mathrm{c}a'^2/2b$ pro Volumen bei T_c, wobei angenommen wird, dass die zweite Ableitung von $f_0(T)$ stetig ist.
Wir geben eine anschauliche Argumentation für die Beziehung (26.8). Wir betrachten das System auf einer Skala, auf der wir zur Bestimmung der Dichte $S(\mathbf{r})$ bereits mehrere Spins eines Ising-Modells einbeziehen, das heißt wir mitteln über ein Volumen ΔV mit vielen Spins. Dann beschreibt ein $S(\mathbf{r})$ eine große Anzahl von Konfigurationen, die in dem Volumen ΔV die gleiche Gesamt-Magnetisierung haben. Unser $\mathcal{F}$ enthält sowohl die Energie wie auch die Entropie des Systems. Da die Wechselwirkung des Ising-Modells bilinear ist, erwarten wir Terme proportional $S(\mathbf{r})$, wenn ein Magnetfeld anliegt und proportional S^2 und $(\nabla S(\mathbf{r}))^2$. Da eine parallele Ausrichtung der Spins energetisch günstig ist, ist der Vorfaktor a_1 vor S^2 negativ und der Koeffizient c vor $(\nabla S(\mathbf{r}))^2$ positiv. Dazu kommt dann der Entropie-Beitrag. Man kann diesen nach Potenzen von S^2 entwickeln, $S_\mathrm{ent} = f_0 + a_2S^2 + b_2S^4 + ...$ Da die Entropie mit wachsender Ordnung, d.h. mit wachsendem S^2 abnimmt und zwar immer stärker, sind a_2 und b_2 negativ. Damit ergibt sich in der freien Energie $\mathcal{F} = E - TS_\mathrm{ent}$ ein positiver Koeffizient $b = -Tb_2$, aber $a = a_1 - Ta_2$, wobei sowohl a_1 als auch a_2 negativ ist. Man erkennt, dass a für hohe Temperaturen positiv ist, da der Entropie-Term überwiegt. Für tiefe Temperatur ist a negativ, da der Energie-Term überwiegt. Bei $T = T_\mathrm{c}$ heben sie sich im Rahmen der Molekularfeld-Näherung weg.

26.b Korrelationen

Wir betrachten nun die Fluktuationen des Ordnungs-Parameters. Genauer gesagt, wir interessieren uns für die Korrelationen

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle (S(\mathbf{r}) - m)(S(\mathbf{r}') - m)\rangle = \langle S(\mathbf{r})S(\mathbf{r}')\rangle - m^2. \tag{26.14}$$

Diese können wir dadurch erhalten, dass wir uns fragen, um wieviel sich der Ordnungs-Parameter am Ort $\mathbf{r}$ ändert, wenn wir am Ort $\mathbf{r}'$ das h-Feld ändern. Aus

$$\langle A\rangle_\Delta = \frac{\mathrm{tr}(A\exp[(-H + \Delta)/(k_\mathrm{B}T)])}{\mathrm{tr}(\exp[(-H + \Delta)/(k_\mathrm{B}T)])} = \langle A\rangle_0 + \frac{\langle A\Delta\rangle - \langle A\rangle\langle\Delta\rangle}{k_\mathrm{B}T} \tag{26.15}$$

folgt dann in erster Ordnung in δh für $A = S(\mathbf{r})$ und $\Delta = \int \mathrm{d}^d r' \delta h(\mathbf{r}') S(\mathbf{r}')$

$$\delta m(\mathbf{r}) = \delta \langle S(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{k_{\mathrm{B}} T} \int \mathrm{d}^3 r' g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta h(\mathbf{r}'). \tag{26.16}$$

Ersetzen wir nun in (26.4) $m(\mathbf{r}) \to m(\mathbf{r}) + \delta m(\mathbf{r})$ und $h(\mathbf{r}) \to h(\mathbf{r}) + \delta h(\mathbf{r})$, so folgt

$$(2a + 12bm^2 - 2c\triangle)\delta m(\mathbf{r}) = \delta h(\mathbf{r}). \tag{26.17}$$

Diese Gleichung wird in drei Dimensionen durch

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{8\pi c} \frac{\exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\xi)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tag{26.18}$$

mit

$$\xi = \sqrt{\frac{c}{a + 6bm^2}} = \begin{cases} (c/a')^{1/2}(T - T_{\mathrm{c}})^{-1/2} & \text{für} T > T_{\mathrm{c}}, h = 0, \\ (c/2a')^{1/2}(T_{\mathrm{c}} - T)^{-1/2} & \text{für} T < T_{\mathrm{c}}, h = 0 \end{cases} \tag{26.19}$$

gelöst. Wir sehen daraus, dass sich die Korrelation bei Annäherung an den kritischen Punkt über große Entfernungen, gegeben durch die Korrelationslänge ξ, erstreckt. In drei Dimensionen fällt die Korrelation am kritischen Punkt mit $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ ab. In d Dimensionen erfolgt der Abfall mit $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-(d-2)}$.

26.c Gültigkeits-Bereich der Landau-Theorie

Diese Theorie nimmt an, dass man die freie Energie nach Potenzen des Ordnungsparameters entwickeln kann. Dies gilt für viele Theorien (Näherungen) wie der van der Waals Gleichung für eine Flüssigkeit oder der Weissschen Molekularfeldtheorie. Wir haben auch die Supraleitung in dieser Form behandelt. Diese Theorien geben in der Regel korrekte Aussagen, so lange man nicht zu nahe am kritischen Punkt ist. In der unmittelbaren Umgebung des kritischen Punktes ergeben sie aber falsche Ergebnisse.
Ginzburg hat ein Kriterium angegeben, wann die Molekularfeld-Näherung gut ist. Dabei verwendet man folgendes Argument: Man hat erhebliche Fluktuationen des Ordnungsparameters. Jedoch kann man diese über ein Gebiet mitteln. Der größte Abstand, über den das sinnvoll ist, ist die Korrelationslänge. Man verlangt daher, dass die Korrelation klein ist gegen das Quadrat des Ordnungs-Parameters,

$$\langle \delta S(\mathbf{r}) \delta S(\mathbf{r}') \rangle_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|=\xi} \ll m^2. \tag{26.20}$$

Wir lassen nun der Einfachheit halber alle Zahlenfaktoren weg, betrachten das Problem aber für allgemeine Dimension d des Raums. Dann ergibt die Ungleichung zunächst

$$\frac{k_{\mathrm{B}} T_{\mathrm{c}}}{c\xi^{d-2}} \ll \frac{|a|}{b}. \tag{26.21}$$

Wir bezeichnen nun die Korrelationslänge bei Temperatur 0 mit ξ_0 und führen die relative Temperaturdifferenz $\tau = \frac{T-T_{\mathrm{c}}}{T_{\mathrm{c}}}$ ein. Dann können wir $\xi = \xi_0/|\tau|^{1/2}$ und $a = a' T_{\mathrm{c}} \tau$ schreiben, wodurch die Ungleichung die Form

$$\frac{k_{\mathrm{B}} T_{\mathrm{c}} |\tau|^{d/2-1}}{c\xi_0^{d-2}} \ll \frac{a' T_{\mathrm{c}} |\tau|}{b} \text{ oder } |\tau|^{2-d/2} \gg \frac{k_{\mathrm{B}} b}{ca'\xi_0^{d-2}} \tag{26.22}$$

annimmt. Wir können nun noch a', b und c eliminieren, indem wir die Korrelationslänge bei Temperatur 0 und den Sprung ΔC in der spezifischen Wärme durch diese Größen ausdrücken,

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{c}{a' T_{\mathrm{c}}}}, \quad \Delta C = T_{\mathrm{c}} \frac{a'^2}{b}. \tag{26.23}$$

Wir erhalten dann

$$|\tau|^{2-d/2} \gg \frac{k_{\mathrm{B}}}{\xi_0^d \Delta C}. \tag{26.24}$$

Tatsächlich ist noch ein numerischer Faktor einzufügen. Nach der vorhergehenden Rechnung wäre das $1/(16\pi e)$ für $d = 3$. Ginzburg und Levanyuk haben eine etwas sorgfältigere Argumentation durchgeführt und kommen zu dem Ergebnis, dass die Landau-Theorie für $|\tau|$ größer als

$$\tau_c = \frac{1}{32\pi^2} \left(\frac{k_B}{\Delta C \xi_0^3} \right)^2 \tag{26.25}$$

gut sein sollte. Der Faktor ξ_0^6 im Nenner von τ_c zeigt an, dass mit wachsender Reichweite der Kräfte, die zu einer größeren Korrelationslänge ξ_0 führt, der Bereich, in dem die Landau-Theorie nicht gilt, sehr klein werden kann. Dies gilt insbesondere für konventionelle Supraleiter. In Zinn findet man $\xi_0 = 2300$ Å und $\Delta C = 0.8 \times 10^4$ erg/cm^{3}K, woraus $\tau_c \approx 10^{-14}$ folgt. Im flüssigen Helium hat man ein ξ_0, das dem Abstand der Atome entspricht. Es folgt $\tau_c \approx 1$. In Eisen ist der Sprung in der spezifischen Wärme $\Delta C \approx 3 \times 10^7$ erg/cm^3 K und $\xi_0 = 2$ Å, woraus $\tau_c \approx 10^{-2}$ folgt. Im Antiferromagneten haben die Magnetfelder der Spins die Tendenz, sich gegenseitig wegzuheben. Daher ist dort die effektive Wechselwirkung kurzreichweitig und τ_c relativ groß. In Ferroelektrika hat Ginzburg $\tau_c \approx 10^{-4}$ abgeschätzt. Für Antiferroelektrika erwartet man wieder größere τ_c.

Wir haben die obige Rechnung für allgemeine Dimension durchgeführt. Damit haben wir nicht nur eine Abschätzung für zweidimensionale Schichten. Wir sehen noch etwas anderes: Wenn nämlich $d > 4$, dann steht auf der linken Seite der Gleichung (26.24) $|\tau|$ hoch einem negativen Exponenten. Das heißt, dann ist die Umgebung des kritischen Punktes nicht mehr von der Landau-Theorie ausgeschlossen. In vier Raumdimensionen ist $|\tau|^{2-d/2} = 1$. Tatsächlich ist dies ein Grenzfall für die Landau-Theorie, auf den wir zurückkommen werden.

27 Homogenitäts- und Skalengesetze

27.a Potenzgesetze und kritische Exponenten

Bereits um die Jahrhundertwende 1900 war bekannt, dass das Molekularfeld-Verhalten etwa der van der Waals-Gleichung das Verhalten in der Umgebung des kritischen Punktes nicht korrekt beschreibt. (Zur Geschichte der kritischen Phänomene siehe J.M.H. Levelt-Sengers, Physica 73 (1974) 73.)
Beispielsweise hatte man experimentell gefunden, dass die Dichte des Gases bzw. der Flüssigkeit nicht durch $\rho - \rho_c \propto (T - T_c)^\beta$ mit $\beta = 1/2$ beschrieben wird, sondern mit $\beta = 0.3434$ (Verschaffelt 1900). Auch die anderen Größen, wie Suszeptibilität, spezifische Wärme, Korrelationen zeigten Gesetze mit anderen Potenzen,

$$\begin{array}{ll} \text{spezifische Wärme} & C \propto \tau^{-\alpha} \\ \text{Ordnungsparameter bei } h = 0 & m \propto \tau^{\beta} \\ \text{Suszeptibilität} & \chi \propto \tau^{-\gamma} \\ \text{Ordnungsparameter bei } T = T_c & m \propto h^{1/\delta} \\ \text{Korrelation bei } T_c & g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2-d-\eta} \\ \text{Korrelationslänge} & \xi \propto \tau^{-\nu}. \end{array} \tag{27.1}$$

Man bezeichnet die Größen α, β, γ, δ, η und ν als kritische Exponenten. In der folgenden Tabelle zeigen wir einige Werte von kritischen Exponenten

Exponent	Molekularfeld	Ising-M. $d = 2$	Ising-M. $d = 3$	Heisenberg-M. $d = 3$	sphärisches M. $d = 3$
α	0(Sprung)	0(ln)	0.109	-0.116	-1
β	1/2	1/8	0.325	0.365	1/2
γ	1	7/4	1.241	1.387	2
δ	3	(15)	4.82	4.80	5
η	0	1/4	0.031	0.033	0
ν	1/2	1	0.630	0.705	1

(27.2)

Zunächst haben wir die Molekularfeld-Werte angegeben. Als nächstes die des zweidimensionalen Ising-Modells. Onsager gelang 1944 die Lösung dieses Modells. Er fand, dass die spezifische Wärme eine logarithmische Singularität hat. Weitere Rechnungen, vor allem von Yang (1952), brachten auch die spontane Magnetisierung und die Suszeptibilität. Allerdings kennt man die exakte Lösung dieses Modells nur für $h = 0$. Man erkannte hieraus, wie auch aus Rechnungen für das sphärische Modell (Berlin und Kac 1952), dass die kritischen Exponenten sich durchaus von den Molekularfeld-Werten unterscheiden können. Auf die Werte des dreidimensionalen Ising- und Heisenberg-Modells werde ich später zurückkommen. Es sei aber bereits bemerkt, dass die Werte für das dreidimensionale Ising-Modell auch für Flüssigkeiten am kritischen Punkt zutreffen sollten. Man sieht, dass Verschaffelts Exponent $\beta = 0.3434$, der tatsächlich nicht so präzis gemessen wurde, gut mit dem $\beta = 0.325$ für das Ising-Modell übereinstimmt.
Das sphärische Modell ist ein Modell mit der Wechselwirkung

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} I_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} S(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}') - h \sum_{\mathbf{r}} S(\mathbf{r}), \tag{27.3}$$

wobei die Wechselwirkung kurzreichweitig ist und die Felder $S(\mathbf{r})$ kontinuierliche reelle Variable sind mit der einzigen Einschränkung $\sum_{\mathbf{r}} S^2(\mathbf{r}) = N$, wobei N die Anzahl der Gitterplätze ist.

27.b Skaleninvarianz und Skalengesetze

27.b.α Kritischer Punkt

Wir wollen jetzt die Idee der Skaleninvarianz einführen. Dazu betrachten wir etwa einen Ferromagneten oder ein Gas-Flüssigkeits-System am kritischen Punkt. Durch ein Mikroskop werden wir Domänen (oder Tröpfchen) unterschiedlicher Größe erkennen. Es wird Tröpfchen in Blasen und Bläschen in Tropfen geben, da der kritische Punkt durch starke Fluktuationen charakterisiert ist. Nun gehen wir zu einer geringeren Vergrößerung über und reduzieren den Kontrast in geeigneter Weise. Dann werden wir wesentlich das gleiche Bild vor uns haben, das heißt, auf der neuen Skala haben wir die gleiche Verteilung von Domänen (oder Tropfen) vor uns. Wir sagen: Das kritische System ist skaleninvariant. Nehmen wir an, die ursprüngliche Vergrößerung ergibt eine Korrelation des Ordnungsparameters

$$\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r})\rangle = g(r). \tag{27.4}$$

Eine Vergrößerung der Längenskala um den Faktor b

$$\mathbf{r} = b\mathbf{r}' \tag{27.5}$$

ändert die Dichte des Ordnungsparameters gemäß

$$S(\mathbf{r})\mathrm{d}^d r = \tilde{S}(\mathbf{r}')\mathrm{d}^d r' = b^{-d}\tilde{S}(\mathbf{r}')\mathrm{d}^d r, \tag{27.6}$$

wobei d die Dimension des Raumes ist. Die Änderung des Kontrasts bewirkt einen weiteren Faktor, den wir mit b^{y_h} bezeichnen. Dann gilt

$$S(\mathbf{r}) = b^{y_h - d}S'(\mathbf{r}') \tag{27.7}$$

und

$$\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r})\rangle = b^{2y_h-2d}\langle S'(\mathbf{0})S'(\mathbf{r}')\rangle. \tag{27.8}$$

Da sich das beobachtete Bild nicht geändert hat, haben wir

$$\langle S'(\mathbf{0})S'(\mathbf{r}')\rangle = g(r'), \tag{27.9}$$

woraus

$$g(r) = b^{2(y_h-d)}g(r/b) \tag{27.10}$$

folgt. Diese Gleichung gilt für eine Änderung der Längenskala um einen Faktor (Vergrößerung) b. Wir können dies p mal anwenden

$$g(r) = b^{2(y_h-d)p}g(r/b^p) \tag{27.11}$$

und können b sehr nahe an eins wählen. Dann erhalten wir mit $b^p = L$ und beliebigem L

$$g(r) = L^{2(y_h-d)}g(r/L). \tag{27.12}$$

Wählen wir schließlich $L = r$, so folgt

$$\langle S(0)S(\mathbf{r})\rangle_\mathrm{c} = \frac{g(1)}{r^{d-2+\eta}} \tag{27.13}$$

mit dem kritischen Exponent $\eta = d + 2 - 2y_h$.

27.b.β Kritisches Gebiet

Im kritischen Gebiet ist unser System durch die Temperaturdifferenz $\tau = (T - T_\mathrm{c})/T_\mathrm{c}$ und ein symmetriebrechendes Feld h charakterisiert. Wir beobachten das System wieder durch das Mikroskop. Wenn wir nun die Vergrößerung und den Kontrast wie vorher verändern, beobachten wir ein anderes Bild: Das System ist nicht mehr skaleninvariant. Bei einer geringeren Vergrößerung beobachten wir jedoch das Bild, das wir bei der ursprünglichen Vergrößerung bei einer anderen Temperaturdifferenz τ' und einem anderen symmetriebrechenden Feld h' beobachten. Daher ist die Änderung der Längenskala und der Skala des Ordnungsparameters äquivalent zu einer Abbildung von τ und h nach τ' und h'. Dann folgt für den Ordnungsparameter

$$m(\tau,h) = \langle\langle S(\mathbf{r})\rangle_{\tau,h} = b^{y_h-d} m(\tau',h'). \tag{27.14}$$

Für die Korrelation folgt

$$\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r})\rangle_{\tau,h} = b^{2(y_h-d)}\langle S'(\mathbf{0})S'(\mathbf{r}')\rangle_{\tau',h'} \tag{27.15}$$

und damit für die Korrelationsfunktion G

$$G(r,\tau,h) = \langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{r})\rangle_{\tau,h} - m^2(\tau,h) = b^{2(y_h-d)} G(\frac{r}{b},\tau',h'). \tag{27.16}$$

Auf große Entfernungen ist der Zerfall der Korrelationsfunktion näherungsweise exponentiell,

$$G(r,\tau,h) \propto \frac{\exp(-r/\xi(\tau,h))}{r^{2(d-y_h)}}. \tag{27.17}$$

Dann folgt für die Korrelationslänge

$$\xi(\tau,h) = b\xi(\tau',h'). \tag{27.18}$$

Eine ähnliche Beziehung erhält man für die Suszeptibilität (der Faktor $k_{\mathrm{B}}T$ ist hier weggelassen)

$$\begin{aligned}
\chi(\tau,h) &= \int \mathrm{d}^d r\langle (S(\mathbf{0})-m)(S(\mathbf{r})-m)\rangle_{\tau,h} \\
&= b^{2y_h-d}\int \mathrm{d}^d r\langle (S'(\mathbf{0})-m')(S'(\mathbf{r}')-m')\rangle_{\tau',h'} \\
&= b^{2y_h-d}\chi(\tau',h'). \qquad (27.19)
\end{aligned}$$

Wir werden später finden, dass τ' und h' nicht-singuläre Funktionen von τ und h sind. Da sich definitionsgemäß $\tau=0$, $h=0$ auf $\tau'=0$, $h'=0$ abbilden, können wir für kleine τ und h

$$\tau' = \lambda_E\tau + \lambda' h, \tag{27.20}$$
$$h' = \lambda''\tau + \lambda_h h \tag{27.21}$$

schreiben. Da ein Vorzeichenwechsel von h nur das Vorzeichen von h' ändern wird, aber nicht τ', sind $\lambda' = \lambda'' = 0$. Wir betrachten nun den Spezialfall $\tau = 0$. Dann gilt offensichtlich

$$m(0,h) = b^{y_h-d} m(0,\lambda_h h), \tag{27.22}$$
$$\chi(0,h) = b^{2y_h-d}\chi(0,\lambda_h h). \tag{27.23}$$

Differenzieren wir (27.22) nach h, so folgt

$$\chi(0,h) = b^{y_h-d}\lambda_h\chi(0,\lambda_h h). \tag{27.24}$$

Der Vergleich von (27.23) mit (27.24) ergibt

$$\lambda_h = b^{y_h}. \tag{27.25}$$

Ähnlich kann man durch Betrachtung des singulären Anteils der Energie und der spezifischen Wärme

$$\lambda_E = b^{y_E} \tag{27.26}$$

schreiben. Wenn wir nun $b^p = L$ wie früher setzen, dann erhalten wir die Homogenitätsgesetze

$$G(r,\tau,h) = L^{2(y_h-d)} G(\frac{r}{L},\tau L^{y_E},hL^{y_h}), \tag{27.27}$$
$$\xi(\tau,h) = L\xi(\tau L^{y_E},hL^{y_h}), \tag{27.28}$$
$$m(\tau,h) = L^{y_h-d} m(\tau L^{y_E},hL^{y_h}), \tag{27.29}$$
$$\chi(\tau,h) = L^{2y_h-d}\chi(\tau L^{y_E},hL^{y_h}). \tag{27.30}$$

Die Gleichung (27.29) kann nach h integriert werden. Dies ergibt die Dichte der freien Energie, die wir nun mit F bezeichnen (tatsächlich nur den singulären Anteil davon)

$$F_{\text{sing}}(\tau, h) = L^{-d} F_{\text{sing}}(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}). \tag{27.31}$$

Diese Beziehung gibt wieder, dass sich die Dichte der freien Energie mit dem Faktor L^d wie das inverse Volumen umskalt, so dass die freie Energie selbst erhalten bleibt. Genau genommen ziehen wir aus der freien Energie auch noch den Faktor $k_B T$ heraus,

$$F = \mathcal{F}/(V_P k_B T). \tag{27.32}$$

Tatsächlich ist F_{sing} nicht die komplette Dichte der freien Energie. Es gibt noch einen regulären Anteil, der nicht zum kritischen Verhalten beiträgt,

$$F = F_{\text{sing}} + F_{\text{reg}}. \tag{27.33}$$

Differenziert man (27.31) zweimal nach τ, so erhält man den singulären Anteil der spezifischen Wärme

$$C_{\text{sing}}(\tau, h) = L^{2y_E - d} C_{\text{sing}}(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}). \tag{27.34}$$

Aus diesen Ausdrücken können wir nun mit der Wahl $h = 0$ (manchmal auch $\tau = 0$) und $|\tau| L^{y_E} = 1$ ablesen, dass die kritischen Exponenten gegeben sind durch

$$\alpha = \frac{2y_E - d}{y_E}, \quad \beta = \frac{d - y_h}{y_E}, \quad \gamma = \frac{2y_h - d}{y_E}, \quad \delta = \frac{y_h}{d - y_h}, \quad \nu = \frac{1}{y_E}. \tag{27.35}$$

Da nur zwei Skalen-Exponenten y_h und y_E die kritischen Exponenten bestimmen, sind diese nicht unabhängig. Vielmehr gelten die Skalengesetze

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \tag{27.36}$$
$$2 - \alpha = d\nu, \tag{27.37}$$
$$\gamma = \nu(2 - \eta) \tag{27.38}$$
$$\delta\beta = \beta + \gamma = 2 - \alpha - \beta. \tag{27.39}$$

Der letzte Exponent wird auch mit Δ bezeichnet. Er verknüpft Größen, die sich jeweils in einer Ableitung nach h unterscheiden. Man prüfe diese Skalengesetze für die Daten in der Tabelle (27.1) nach. Für welche Dimension d sind die Skalengesetze für die Molekularfeld-Näherung erfüllt?
Die Homogenitätsgesetze lassen sich experimentell überprüfen. Wir gehen aus von Gleichung (27.29)

$$m(\tau, h) = L^{y_h - d} m(\tau L^{y_E}, h L^{y_h}) \tag{27.40}$$

und legen L durch $|\tau| L^{y_E} = 1$ fest. Dann folgt

$$\frac{m}{|\tau|^{(d-y_h)/y_E}} = m(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}) \quad \text{oder} \quad \frac{m}{|\tau|^{\beta}} = m(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{\Delta}}). \tag{27.41}$$

Für den Ferromagneten $CrBr_3$ wurde $h/|\tau|^\Delta$ gegen $m/|\tau|^\beta$ aufgetragen (Ho und Litster, Phys. Rev. Lett. 22 (1969) 603). Man erkennt, dass die Messpunkte auf zwei Kurven, die eine für $T > T_c$, die andere für $T < T_c$ fallen. Eine ähnliche Auftragung gibt es auch für Nickel (Kouvel und Comly, Phys. Rev. Lett. 20 (1968) 1237). Siehe auch Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Kapitel 11, §4.
Die dabei beobachteten Exponenten sind für $CrBr_3$ $\beta = 0.368$, $\gamma = 1.215$, für Nickel $\beta = 0.378$, $\gamma = 1.34$.

28 Renormierungsgruppe

28.a Grundidee

Wir haben im vorhergehenden Abschnitt ein intuitives Bild für die Homogenitätsgesetze entwickelt. In diesem Abschnitt wollen wir es mit Renormierungsgruppenideen begründen. Die Beobachtung, dass die Korrelationsfunktion am kritischen Punkt skaleninvariant ist, lässt vermuten, dass auch die effektive Wechselwirkung am kritischen Punkt diese Eigenschaft hat. Wir nennen die Prozedur, die die Skala der Wechselwirkung verändert, Renormierungsgruppe (RG). Wir bezeichnen die Hamilton-Funktion mit $\mathcal{H}$ und führen das dimensionslose

$$H = \mathcal{H}/(k_{\mathrm{B}}T), \tag{28.1}$$

das im Integral für die Zustandssumme auftritt, das wir in Zukunft als Hamilton-Funktion bezeichnen. Die Dichte der freien Energie ist definiert als

$$-F = \frac{1}{V_{\mathrm{P}}} \ln \operatorname{tr} \exp(-H). \tag{28.2}$$

Die Renormierungsgruppen-Transformation besteht nun aus zwei Schritten
a) einer Änderung der Längenskala um einen Faktor $b = \mathrm{e}^l$ in allen linearen Dimensionen. Wir lassen dabei die Zustandssumme $Z = \ln \operatorname{tr} \exp(-H)$ invariant. Da das Volumen um den Faktor e^{dl} schrumpft, gilt für die Dichten F

$$F_0 = \mathrm{e}^{-dl} F_l. \tag{28.3}$$

b) einer Elimination und/oder Transformation der Freiheitsgrade S, die die freie Energie invariant lässt.
Der zweite Schritt ist notwendig, um einen Hamilton-Operator zu erhalten, der mit dem ursprünglichen verglichen werden kann. Die Dichte der Freiheitsgrade S muss auf die ursprüngliche reduziert werden durch das Ausdünnen der Freiheitsgrade, die Fluktuationen kurzer Wellenlängen beschreiben (Fourier-Komponenten mit großen Wellenvektoren). Zum anderen muss das System erweitert werden auf eines mit dem Volumen des ursprünglichen. Dann gibt es eine eins-zu-eins-Entsprechung der ursprünglichen und der neuen Variablen. Wenn wir unser System unter dem Mikroskop betrachten, beobachten wir unter geringerer Vergrösserung weniger Details, was dem Eliminations-Prozess entspricht. Andererseits beobachten wir dann ein größeres Volumen, was der Erweiterung des Volumens entspricht.
Die vollständige RG-Transformation von H_0 nach H_l schreiben wir

$$H_l = R_l(H_0), \quad F(H_0) = \mathrm{e}^{-dl} F(H_l). \tag{28.4}$$

In vielen Fällen ist es möglich, die RG-Prozedur für infinitesimales l zu formulieren. Dann kann die erste Gleichung (28.4) in differentieller Form geschrieben werden

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}l} = \mathcal{G}H, \tag{28.5}$$

wobei $\mathcal{G}$ der Generator der Renormierungsgruppe ist. Im allgemeinen wirkt $\mathcal{G}$ nichtlinear auf H.

28.b Fixpunkt, Klassifizierung von Operatoren

Nun machen wir zwei Annahmen:
a) Wir nehmen an, dass es eine Fixpunkt-Hamilton-Funktion H^* gibt,

$$\mathcal{G}H^* = 0. \tag{28.6}$$

H^* ist eine Hamilton-Funktion, die sich auf sich selbst abbildet. b) Wir nehmen an, dass eine kritische Hamilton-Funktion gegen H^* konvergiert.

$$\lim_{l\to\infty} H_l = H^*. \tag{28.7}$$

Dies ist eine wesentlich schwächere Bedingung als die Forderung, die kritische Hamilton-Funktion H_0 sei H^*. Die Bedingung (28.7) verlangt nur, dass die effektive Wechselwirkung unter der Renormierungsgruppe gegen einen Fixpunkt konvergiert.
Um nun das kritische Verhalten zu untersuchen zerlegen wir den Generator $\mathcal{G}$ in den Anteil $\mathcal{L}$ linear in ΔH und den Beitrag $\mathcal{Q}$ in höherer Ordnung in ΔH,

$$\mathcal{G}(H^* + \Delta H) = \mathcal{L}\Delta H + \mathcal{Q}(\Delta H). \tag{28.8}$$

Es gilt also $\mathcal{Q}(\Delta H) = O(\Delta H)^2$. Wir definieren nun Eigen-Operatoren (Eigen-Funktionen)

$$\mathcal{L}O_i = y_i O_i \tag{28.9}$$

und nehmen im Folgenden an, dass die Eigen-Operatoren einen kompletten Satz von Operatoren bilden, so dass jede Hamilton-Funktion (jeder Hamilton-Operator) H_0 entwickelt werden kann als

$$H_0 = H^* + \sum_i \mu_i O_i. \tag{28.10}$$

Dann erhalten wir in linearer Ordnung in μ

$$H_l = H^* + \sum_i \mu_i \mathrm{e}^{y_i l} O_i. \tag{28.11}$$

Je nach Eigenwert y unterscheidet man

$$\begin{aligned} y &> 0 \qquad \text{relevante Operatoren} \\ y &= 0 \qquad \text{marginale Operatoren} \\ y &< 0 \qquad \text{irrelevante Operatoren.} \end{aligned} \tag{28.12}$$

Der Gleichung (28.11) entnimmt man unmittelbar, dass am kritischen Punkt die Felder (in der Feldtheorie Quellen) μ_i aller relevanten Operatoren verschwinden müssen.
Marginale Operatoren können als relevante oder irrelevante Operatoren agieren. Dies hängt davon ab, ob die nichtlinearen Terme μ_i nach Null oder von Null wegtreiben. Es gibt auch den seltenen Fall, dass ein marginaler Operator eine Linie von Fixpunkten erzeugt wie beim zweidimensionalen Acht-Vertex-Modell.
Es gibt einen speziellen Operator, den konstanten (das heißt den von S unabhängigen) Beitrag $\mu_0 V_{\mathrm{P}}$, für den formal

$$O_0 = V_{\mathrm{P}}, \quad y_0 = d \tag{28.13}$$

gilt, da das Volumen V_{P} um einen Faktor e^{-dl} schrumpft, was durch ein Anwachsen von μ_0 um einen Faktor e^{dl} kompensiert wird. Das Hinzufügen einer Konstanten ändert am kritischen Verhalten jedoch nichts. Er ist der Ursprung des regulären Anteils der freien Energie.
Die Art des kritischen Verhaltens hängt von der Anzahl der symmetrie-erhaltenden relevanten Operatoren ab. (Symmetrie-erhaltend bedeutet, dass die Symmetrie des Hamilton-Operators erhalten bleibt; eine spontan gebrochene Symmetrie des Systems wird dadurch nicht ausgeschlossen.) Entwickeln wir

$$\mathcal{H} = \sum_i \mu_i^0 O_i, \quad H^* = \sum \mu_i^* O_i, \tag{28.14}$$

so erhalten wir

$$\mu_i = \beta\mu_i^0 - \mu_i^*. \tag{28.15}$$

Für einen normalen kritischen Punkt hat man einen relevanten symmetrie-erhaltenden Operator (außer O_0) O_E, der die kritische Temperatur bestimmt

$$\mu_E \equiv \tau = \beta\mu_E^0 - \mu_E^* = (\beta - \beta_{\mathrm{c}})\mu_E^0, \quad \beta_{\mathrm{c}} = \frac{\mu_E^*}{\mu_E^0}. \tag{28.16}$$

Grob gesprochen ist O_E proportional zu H abzüglich Erwartungswert am kritischen Punkt. An einem trikritischen Punkt hat man zwei relevante symmetrie-erhaltende Operatoren (außer O_0) und folglich zwei Bedingungen für kritisches Verhalten.
Die RG-Prozedur ist nicht eindeutig definiert. Dies hat eine Anzahl von Folgerungen, die wir hier nur aufzählen (F.W., J. Physics C7 (1974) 2098): H^* hängt von der RG-Transformation ab. Variiert man die RG-Transformation infinitesimal, dann ändert sich H^* um Operatoren, die wir redundant nennen. Formal hängen die Exponenten y der redundanten Operatoren von der Wahl der RG ab, aber die redundanten Operatoren tragen nicht zur freien Energie bei. Daher haben die Exponenten der redundanten Operatoren keine physikalische Bedeutung. Die Exponenten der anderen Operatoren sind invariant gegen infinitesimale Variationen der RG-Gleichungen. Redundante Operatoren können in numerischen Rechnungen recht störend sein, wenn sie formal Eigenwerte $y > 0$ haben. Sie haben nur kurzreichweitige Korrelationen.

28.c Skalen der freien Energie

Nehmen wir an, es reiche aus, nur zwei Operatoren, O_E und den Operator des Ordnungs-Parameters O_h zu berücksichtigen,

$$H_0 = H^* + \tau O_E + h O_h, \tag{28.17}$$

was mit

$$H_l = H^* + \tau \mathrm{e}^{y_E l} O_E + h \mathrm{e}^{y_h l} O_h \tag{28.18}$$

dann

$$F(\tau, h) = \mathrm{e}^{-dl} F(\tau \mathrm{e}^{y_E l}, h \mathrm{e}^{y_h l}) \tag{28.19}$$

ergibt. Dies stimmt mit $L = \mathrm{e}^l$ mit der Gleichung für den singulären Anteil der freien Energie (27.31) unseres intuitiven Bilds überein.
Normalerweise hat man eine unendliche Anzahl von Störungen $\mu_i O_i$ in Gleichung (28.10). Um ihren Effekt auf das Homogenitätsgesetz zu betrachten, fügen wir wenigstens einen hinzu,

$$H_0 = H^* + \tau O_E + h O_h + \mu_i O_i \tag{28.20}$$

und erhalten

$$H_l = H^* + \tau \mathrm{e}^{y_E l} O_E + h \mathrm{e}^{y_h l} O_h + \mu_i \mathrm{e}^{y_i l} O_i, \tag{28.21}$$

$$F(\tau, h, \mu_i) = |\tau|^{d/y_E} F(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, \frac{\mu_i}{|\tau|^{y_i/y_E}}). \tag{28.22}$$

Wir interessieren uns für das kritische Verhalten, das heißt den Limes $\tau \to 0$

$$\lim \frac{\mu_i}{|\tau|^{y_i/y_E}} = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & y_i < 0 \text{ oder } \mu_i = 0 \\ \pm\infty & y_i > 0 \text{ und } \mu_i \neq 0. \end{array} \right. \tag{28.23}$$

Falls O_i relevant ist, ($y_i > 0$), dann muss μ_i explizit berücksichtigt werden. Für irrelevante Operatoren kann der Term $\mu_i/|\tau|^{y_i/y_E}$ vernachlässigt werden, wenn F nach Potenzen von μ_i entwickelt werden kann. Man beachte, dass die rechte Seite von (28.21) die freie Energie weit entfernt vom kritischen Punkt enthält. Der irrelevante Operator führt zu einer Korrektur zum Skalen-Verhalten

$$F = |\tau|^{d/y_E} F(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, 0) + \mu_i |\tau|^{(d-y_i)/y_E} F'(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, 0) + ... \tag{28.24}$$

Solch eine Korrektur wurde im superfluiden Helium gefunden (G. Ahlers, Phys. Rev. A8 (1973) 530).

28.d Korrelationen

Bisher haben wir nur translationsinvariante Operatoren betrachtet. Wir können auch die Eigenwertgleichung für einen lokalen Operator $\tilde{O}_i$ betrachten

$$\mathcal{L} \tilde{O}_i = -x_i \tilde{O}_i. \tag{28.25}$$

Dann ergibt sich in linearer Näherung aus

$$H_0 = H^* + \lambda_i \tilde{O}_i \tag{28.26}$$

die Hamilton-Funktion

$$H_l = H^* + \lambda_i \mathrm{e}^{-x_i l} \tilde{O}_i. \tag{28.27}$$

An Stelle von $\tilde{O}_i$, das eine Funktion der $S(\mathbf{r}')$ ist, können wir $\tilde{O}_i(\mathbf{r})$ betrachten, das wir erhalten, indem wir $S(\mathbf{r}')$ durch $S(\mathbf{r}' + \mathbf{r})$ ersetzen. Dieser Operator $\tilde{O}_i(\mathbf{r})$ wirkt in der Umgebung von $\mathbf{r}$. Aus

$$H_0 = H^* + \lambda_i \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \tag{28.28}$$

folgt dann

$$H_l = H^* + \lambda_i \mathrm{e}^{-x_i l} \tilde{O}_i(\mathbf{r}\mathrm{e}^{-l}), \tag{28.29}$$

da die Längenskala unter der RG-Transformation um den Faktor e^{-l} schrumpft.
Wir können nun die Exponenten x_i und y_i durch Einführen des translationsinvarianten Operators

$$O_i = \int \mathrm{d}^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \tag{28.30}$$

miteinander verknüpfen. Wir erhalten dann aus

$$H_0 = H^* + \mu_i O_i = H^* + \mu_i \int \mathrm{d}^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \tag{28.31}$$

die Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H_l &= H^* + \mu_i \mathrm{e}^{-x_i l} \int \mathrm{d}^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}\mathrm{e}^{-l}) \\ &= H^* + \mu_i \mathrm{e}^{(d-x_i)l} \int \mathrm{d}^d (r\mathrm{e}^{-l}) \tilde{O}_i(\mathbf{r}\mathrm{e}^{-l}) \\ &= H^* + \mu_i \mathrm{e}^{(d-x_i)l} O_i. \end{aligned} \tag{28.32}$$

Der Vergleich mit (28.11) ergibt

$$y_i = d - x_i, \tag{28.33}$$

es sei denn das Integral verschwindet, was passiert, wenn man den Gradienten eines Operators $\tilde{O}_i$ betrachtet. Man überzeugt sich in diesem Fall leicht, dass aus (28.29)

$$\mathcal{L}\nabla\tilde{O}_i = -(x_i + 1)\nabla\tilde{O}_i \tag{28.34}$$

folgt.
Aus einem Hamilton-Operator

$$H_0 = H^* + \tau O_E + h O_h + \lambda_1 \tilde{O}_h(\mathbf{0}) + \lambda_2 \tilde{O}_h(\mathbf{r}) \tag{28.35}$$

folgt dann

$$H_l = H^* + \tau \mathrm{e}^{y_E l} O_E + h \mathrm{e}^{y_h l} O_h + \lambda_1 \mathrm{e}^{(y_h - d)l} \tilde{O}_h(\mathbf{0}) + \lambda_2 \mathrm{e}^{(y_h - d)l} \tilde{O}_h(\mathbf{r}\mathrm{e}^{-l}). \tag{28.36}$$

Differenzieren wir die zugehörige freie Energie (diesmal nicht die Dichte), so erhalten wir die Korrelationsfunktion

$$G(\mathbf{r}, \tau, h) = -\frac{\partial^2}{\partial\lambda_1 \partial\lambda_2} (V_0 F(H_0))|_{\lambda_1=\lambda_2=0} \tag{28.37}$$

Da die freie Energie unter der Renormierungsgruppe erhalten bleibt, $V_0 F(H_0) = V_l F(H_l)$, folgt

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \tau, h) &= -\frac{\partial^2}{\partial\lambda_1 \partial\lambda_2} (V_l F(H_l))|_{\lambda_1=\lambda_2=0} \\ &= \mathrm{e}^{2(y_h - d)l} G(r\mathrm{e}^{-l}, \tau \mathrm{e}^{y_E l}, h \mathrm{e}^{y_h l}), \end{aligned} \tag{28.38}$$

womit dann auch (27.27) hergeleitet ist.

28.e Nichtlineare Beiträge

Bisher haben wir angenommen, dass wir nur den linearen Term $\mathcal{L}$ des Generators $\mathcal{G}$ zu berücksichtigen brauchen. Wir wollen nun betrachten, was nicht-lineare Terme bewirken. Dazu nehmen wir auch Beiträge zweiter Ordnung in $\mathcal{G}$ mit und erhalten die Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}\mu_i}{\mathrm{d}l} = y_i\mu_i + \frac{1}{2}\sum_{j,k} a_{i,j,k}\mu_j\mu_k + O(\mu^3) \tag{28.39}$$

28.e.α Nichtlineare Skalenfelder

Wir können nun nicht-lineare Skalenfelder g_i einführen, die exakt

$$\frac{\mathrm{d}g_i}{\mathrm{d}l} = y_i g_i \tag{28.40}$$

genügen sollen, wobei auch diese nach den μ entwickelt werden,

$$g_i = \mu_i + \frac{1}{2}\sum_{j,k} b_{i,j,k}\mu_j\mu_k + O(\mu^3). \tag{28.41}$$

Setzen wir nun (28.41) in (28.40) ein, so folgt

$$y_i\mu_i + \frac{1}{2}\sum_{j,k} a_{i,j,k}\mu_j\mu_k + \frac{1}{2}\sum_{j,k}(y_j+y_k)b_{i,j,k}\mu_j\mu_k = y_i\mu_i + \frac{1}{2}\sum_{j,k} y_i b_{i,j,k}\mu_j\mu_k + O(\mu^3), \tag{28.42}$$

was mit

$$b_{i,j,k} = \frac{a_{i,j,k}}{y_i - y_j - y_k} \tag{28.43}$$

gelöst wird. Solange also jeweils $y_i \neq y_j + y_k$ (und entsprechende Ungleichungen für Terme in höherer Ordnung in μ), kann man diese Skalenfelder g einführen. Für diese gilt exakt

$$F(\ldots g_i \ldots) = \mathrm{e}^{-dl}F(\ldots g_i\mathrm{e}^{y_i l}\ldots). \tag{28.44}$$

28.e.β Regulärer Anteil der freien Energie

Addiert man eine Konstante zur Wechselwirkung, so ändert diese nur μ_0 im Beitrag $\mu_0 V_{\mathrm{P}}$ in Gleichung (28.13). Sie wirkt sich aber nicht auf die anderen μ aus. Daher gilt

$$F(g_0 \ldots g_i \ldots) = g_0 + F(0 \ldots g_i \ldots). \tag{28.45}$$

Der reguläre Term der freien Energie ist nun

$$F_{\mathrm{reg}} = g_0 = \mu_0 + \frac{1}{2}\sum_{j,k}\frac{a_{0,j,k}}{d - y_j - y_k}\mu_j\mu_k + O(\mu^3), \tag{28.46}$$

während der zweite Beitrag in (28.45) der singuläre Beitrag ist. Der reguläre Beitrag wird in der Regel einen Beitrag proportional τ^2 enthalten, der dann einen Untergrund zur spezifischen Wärme liefert.

28.e.γ Logarithmische spezifische Wärme

Falls der kritische Exponent der spezifischen Wärme verschwindet, $\alpha = 0$, folgt aus (27.35) $2y_E = d$. In diesem Fall kann das Skalenfeld g_0 nicht so einen einfachen Term proportional τ^2 haben, da der Nenner in (28.43) verschwindet. Beschränken wir uns auf das Gleichungssystem

$$\frac{\mathrm{d}\mu_0}{\mathrm{d}l} = d\mu_0 + \frac{1}{2}a_{0,E,E}\tau^2, \quad \frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}l} = y_E\tau, \tag{28.47}$$

so folgt

$$g_0 = \mu_0 - \frac{1}{2} a_{0,E,E}(l - l_0)\tau^2, \quad g_E = \tau. \tag{28.48}$$

Dabei ist l_0 eine Integrationskonstante. Wir können nun, da g_E mit $\mathrm{e}^{dl/2}$ anwächst, $l - l_0 = \frac{2}{d} \ln |g_E| = \frac{2}{d} \ln |\tau|$ schreiben und finden schließlich

$$g_0 = \mu_0 - \frac{1}{d} a_{0,E,E}\tau^2 \ln |\tau|, \quad g_E = \tau. \tag{28.49}$$

Jetzt steckt in dem bisher regulären g_0 die logarithmische Singularität, während der singuläre Anteil $\tau^2 F_{\mathrm{sing}}(\tau = \pm 1)$ einen Sprung in der spezifischen Wärme enthalten kann. Eine logarithmische Singularität der spezifischen Wärme tritt im zweidimensionalen Ising-Modell auf (Onsager). Im Acht-Vertex-Modell (Baxter) findet man logarithmische Singularitäten der Form $(T - T_{\mathrm{c}})^n \ln |T - T_{\mathrm{c}}|$ für gerade n. Die hier gegebene Erklärung findet sich bereits bei Widom und bei Kadanoff.

28.e.δ Marginaler Operator

Interessantes Verhalten ergibt sich auch, wenn ein marginaler Operator O_m auftritt, $y_m = 0$. Dann folgt aus

$$\frac{\mathrm{d}\mu_m}{\mathrm{d}l} = \frac{1}{2} a_{mmm}\mu_m^2 \tag{28.50}$$

die Lösung

$$\mu_m(l) = -\frac{2}{a_{mmm}(l + l_0)} = \frac{2\mu_m(0)}{2 - a_{mmm} l \mu_m(0)}. \tag{28.51}$$

Falls $a_{mmm}\mu_m(0)$ und damit $l_0 = 2/(a\mu_m(0))$ negativ ist, konvergiert $\mu_m(l)$ (sehr) langsam gegen 0, ist es dagegen positiv, so divergiert es. Hat man nun für τ die Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}l} = y_E\tau + a_{EmE}\mu_m\tau, \tag{28.52}$$

so folgt

$$\tau(l) = \mathrm{e}^{y_E l} \left(\frac{l + l_0}{l_0} \right)^{-2a_{EmE}/a_{mmm}} \tau(0). \tag{28.53}$$

Dies führt dazu, dass man für Erwartungswerte nicht nur Potenzen von τ, sondern auch Potenzen von τ multipliziert mit nicht ganzzahligen Potenzen von $|\ln|\tau||$ erhalten kann. Solche Singularitäten wurden zuerst für das sphärische Modell gefunden, später generell für die S^4-Theorie in $d = 4$ Dimensionen (Larkin und Khmelnitskii), wie auch für die S^6-Theorie in $d = 3$ Dimensionen (Riedel und F.W.). Dies gilt auch in $d = 3$ für bestimmte Systeme mit Dipol-Wechselwirkung.
Literaturangaben in F.W., The Critical State, General Aspects, in C. Domb and M.S. Green (eds.) Phase Transitons and Critical Phenomena, Academic Press, 6 (1976) p.7-124

29 Renormierungs-Gruppe mit scharfem Abschneide-Impuls

29.a Ursprung der Renormierung

Das Problem der Renormierung trat zunächst in der Teilchenphysik auf. Es besteht darin, dass bei der störungstheoretischen Berechnung von Größen Integrale auftreten, die divergieren, und zwar um so stärker, je höher die Ordnung der Entwicklung ist. Was tun? Die Integrale divergieren meist bei großen Wellenvektoren. Führt man einen maximalen Wellenvektor ein, bis zu dem man integriert, so bleiben die Integrale endlich. Man weiß aber nicht, welchen maximalen Wellenvektor Λ man verwenden soll. Man verglich daher die Ergebnisse für verschiedene große Λ und fand, dass man bei geeignetem Umskalen verschiedener Größen und geeignetem Verändern von Kopplungen einen Limes $\Lambda \to \infty$ definieren kann, der endliche Ergebnisse für Größen von festen Wellenvektoren ergibt. Das Verfahren, das einem den Zusammenhang der Kopplungen und Skalen mit der Änderung des Abschneide-Impulses Λ ergibt, nennt man Renormierungsgruppe.
In der Festkörperphysik hat man dieses Problem in der Regel nicht. Man geht zum Beispiel von einem periodischen Gitter aus. Dann sind die Integrationen nur innerhalb der Brillouinzone auszuführen. Man hat einen natürlichen Abschneide-Impuls Λ. Trotzdem ist auch hier die Renormierungsgruppe bei den kritischen Phänomenen eingezogen. Der Grund liegt darin, dass sich dort das wesentliche Verhalten auf sehr großen Abständen abspielt oder entsprechen für Wellenvektoren $\mu \to 0$. Kritische Phänomene und die Teilchenphysik haben gemeinsam, dass man das Verhältnis Λ/μ gegen unendlich untersuchen muss. Daher müssen wir auch hier die Längenskala ändern und sind (zumindest bei einem scharfen Abschneiden) gezwungen, die Freiheitsgrade, die nach dem Umskalen Wellenvektoren größer Λ haben, auszuintegrieren und zu verfolgen, wie sich dadurch die effektive Wechselwirkung bei kleinen Wellenvektoren entwickelt.

29.b Renormierung der Landau-Wechselwirkung

Wir wollen nun eine explizite Rechnung mit der Renormierungs-Gruppe durchführen. Wir gehen aus von einer Wechselwirkung der Form vom Landau-Typ (26.2)

$$H = \int \mathrm{d}^d r \left(\frac{1}{2}(\nabla \mathbf{S}(\mathbf{r}))^2 + \frac{a_1}{2}\mathbf{S}(\mathbf{r})^2 - \mathbf{h}\mathbf{S}(\mathbf{r}) + \frac{a_2}{4}(\mathbf{S}(\mathbf{r})^2)^2 \right). \tag{29.1}$$

Diese Wechselwirkung haben wir gleich für das isotrope n-Vektormodell hingeschrieben. Das Feld unseres Ordnungsparameters hat also n Komponenten und die Wechselwirkung ist isotrop (bis auf den Term $\mathbf{hS}$, der für $\mathbf{h} \neq \mathbf{0}$ eine Richtung auszeichnet).
Wir führen zunächst die Skalentransformationen durch. Dies ergibt mit $\eta = 0$

$$H' = \int \mathrm{d}^d r' \left(\frac{1}{2}(\nabla' \mathbf{S}'(\mathbf{r}'))^2 + \frac{a_1}{2} b^2 \mathbf{S}'(\mathbf{r}')^2 - \mathbf{h} b^{d/2+1}\mathbf{S}'(\mathbf{r}') + \frac{a_2}{4} b^{4-d}(\mathbf{S}'(\mathbf{r}')^2)^2 \right), \tag{29.2}$$

wobei wir $\mathbf{r} = b\mathbf{r}'$, $\mathbf{S}(\mathbf{r}) = b^{1-d/2}\mathbf{S}'(\mathbf{r}')$ substituiert haben. Wir lassen im Folgenden die Striche $'$ weg. Wir drücken die Wechselwirkung nun durch die Fourier-Komponenten

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_\mathrm{P}}} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tag{29.3}$$

aus und erhalten

$$H' = \sum_{\mathbf{q}} \frac{q^2 + a_1 b^2}{2} \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} - \sqrt{V_\mathrm{P}} \mathbf{h} b^{d/2+1} \mathbf{S}_{\mathbf{0}} + \frac{a_2 b^{4-d}}{4 V_\mathrm{P}} \sum (\mathbf{S}_{\mathbf{q}_1} \mathbf{S}_{\mathbf{q}_2})(\mathbf{S}_{\mathbf{q}_3} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3}). \tag{29.4}$$

Wir gehen davon aus, dass die ursprüngliche Wechselwirkung H Fourier-Komponenten bis Λ enthielt. Auf Grund der Skalentransformation enthält die Wechselwirkung H' Fourier-Komponenten bis Λb. Wir müssen daher die Fourier-Komponenten zwischen Λ und Λb eliminieren. Wir müssen daher

$$\mathrm{e}^{-H_l} = \prod_{|\mathbf{q}|>\Lambda,\alpha} \left(\int \mathrm{d}S_{\mathbf{q}\alpha} \right) \mathrm{e}^{-H'} \tag{29.5}$$

ausintegrieren. Dabei numeriert der Index $_\alpha$ die n Komponenten von $\mathbf{S}$. Wir werten dieses Integral aus, indem wir uns fragen: Wie ändern sich die Koeffizienten a_1 und a_2 vor $\mathbf{S}_\mathbf{0}^2$ und $(\mathbf{S}_\mathbf{0}^2)^2$? Diese Beiträge rühren her von

$$\Delta H' = \frac{1}{2}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}(q^2+b^2a_1)\mathbf{S_q S_{-q}} + \frac{a_2 b^{4-d}}{2V_\mathrm{P}}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}(\mathbf{S_q S_{-q}})(\mathbf{S}_\mathbf{0}^2) + \frac{a_2 b^{4-d}}{V_\mathrm{P}}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}(\mathbf{S_q S_0})(\mathbf{S_{-q} S_0}). \quad (29.6)$$

Mit der Wahl $b = \mathrm{e}^l$, l infinitesimal, sind alle anderen Beiträge vernachlässigbar. Wir schreiben diese Wechselwirkung in der Form

$$\Delta H' = \frac{1}{2}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}(q^2+b^2a_1)S_{\mathbf{q}\alpha}S_{-\mathbf{q}\beta}(\delta_{\alpha,\beta}+f_{\alpha,\beta}), \quad (29.7)$$

wobei

$$f_{\alpha\beta} = c'(\delta_{\alpha,\beta}\mathbf{S}_\mathbf{0}^2 + 2S_{\mathbf{0}\alpha}S_{\mathbf{0}\beta}), \quad c' = \frac{a_2 b^{4-d}}{V_\mathrm{P}(q^2+b^2a_1)}. \quad (29.8)$$

Nun ist

$$\int \mathrm{d}S_{\mathbf{q},1}\mathrm{d}S_{\mathbf{q},2}...\mathrm{d}S_{\mathbf{q},n}\mathrm{d}S_{-\mathbf{q},1}\mathrm{d}S_{-\mathbf{q},2}...\mathrm{d}S_{-\mathbf{q},n}\exp\left(-\sum_{\alpha\beta}(q^2+b^2a_1)S_{\mathbf{q}\alpha}S_{-\mathbf{q}\beta}(\delta_{\alpha,\beta}+f_{\alpha,\beta})\right)$$
$$= \frac{\mathrm{const}}{(q^2+b^2a_1)^n \det(1+f)}, \quad (29.9)$$

was

$$\prod_{|\mathbf{q}|>\Lambda,\alpha}\left(\int \mathrm{d}S_{\mathbf{q}\alpha}\right)\exp(-\Delta H') = \mathrm{const}\exp(-\frac{1}{2}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}\ln\det(1+f)) \quad (29.10)$$

ergibt. Wir entwickeln nun nach Potenzen von f

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}\ln\det(1+f) &= \frac{1}{2}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}\ln(1+\sum_\alpha f_{\alpha\alpha}+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}(f_{\alpha\alpha}f_{\beta\beta}-f_{\alpha\beta}f_{\beta\alpha})+...)\\ &= \frac{1}{2}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}(\sum_\alpha f_{\alpha\alpha}-\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}f_{\alpha\beta}f_{\beta\alpha}+...) \quad (29.11)\end{aligned}$$

Für infinitesimales l ergibt die Summe

$$\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda} g(q) = V_\mathrm{P} lcg(\Lambda), \quad (29.12)$$

wobei c eine Konstante ist und sich c' auf

$$c' = \frac{a_2}{V_\mathrm{P}(a_1+\Lambda^2)} \quad (29.13)$$

reduziert. Damit haben wir dann

$$\begin{aligned}\sum_\alpha f_{\alpha\alpha} &= (n+2)\frac{a_2}{V_\mathrm{P}(a_1+\Lambda^2)}\mathbf{S}_\mathbf{0}^2, \quad (29.14)\\ \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta}f_{\beta\alpha} &= (n+8)\frac{a_2^2}{V_\mathrm{P}^2(a_1+\Lambda^2)^2}(\mathbf{S}_\mathbf{0}^2)^2 \quad (29.15)\end{aligned}$$

und damit schließlich den Beitrag der Eliminations-Prozedur

$$\frac{1}{2}\sum_{|\mathbf{q}|>\Lambda}\ln\det(1+f) = \frac{1}{2}(n+2)\frac{lca_2}{a_1+\Lambda^2}\mathbf{S}_\mathbf{0}^2 - \frac{1}{4}(n+8)\frac{lca_2^2}{V_\mathrm{P}(a_1+\Lambda^2)^2}(\mathbf{S}_\mathbf{0}^2)^2. \quad (29.16)$$

Berücksichtigen wir die Änderung von a_1, a_2 und h nach (29.4) und (29.16), so erhalten wir die Differentialgleichungen

$$\frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}l} = 2a_1 + \frac{a_2 c(n+2)}{a_1+\Lambda^2}, \tag{29.17}$$

$$\frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}l} = (4-d)a_2 - \frac{a_2^2 c(n+8)}{(a_1+\Lambda^2)^2}, \tag{29.18}$$

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}l} = (\frac{d}{2}+1)h. \tag{29.19}$$

29.c ϵ-Entwicklung

Für den Fixpunkt muss nun gelten

$$\frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}l} = \frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}l} = \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}l} = 0. \tag{29.20}$$

Da die soeben durchgeführte Rechnung exakt ist für $a_2 = 0$, erwarten wir, dass sie eine gute Näherung für kleine a_2 darstellt. Auf Grund der Landau-Theorie erwarten wir, dass a_1 im kritischen Gebiet klein ist. Wir entwickeln daher die Gleichungen bis zur quadratischen Ordnung in den as,

$$\frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}l} = 2a_1 + \frac{c}{\Lambda^2}(n+2)a_2 - \frac{c}{\Lambda^4}(n+2)a_1 a_2, \tag{29.21}$$

$$\frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}l} = \epsilon a_2 - \frac{c}{\Lambda^4}(n+8)a_2^2, \tag{29.22}$$

wobei wir die Abkürzung

$$\epsilon = 4-d \tag{29.23}$$

eingeführt haben.
Wir finden dann
a) den trivialen Fixpunkt mit

$$a_1^* = 0, \quad a_2^* = 0, \quad h^* = 0, \tag{29.24}$$

b) den nicht-trivialen Fixpunkt

$$a_1^* = -\frac{\epsilon(n+2)\Lambda^2}{2(n+8)}, \quad a_2^* = \frac{\epsilon\Lambda^4}{c(n+8)}, \quad h^* = 0. \tag{29.25}$$

Diese Größen sind also für kleines ϵ tatsächlich klein. Linearisieren wir jetzt die Gleichungen um den Fixpunkt, so finden wir

$$\frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}l} = (2 - \frac{c}{\Lambda^4}(n+2)a_2^*)(a_1 - a_1^*) + ...(a_2 - a_2^*), \tag{29.26}$$

$$\frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}l} = (\epsilon - \frac{2c}{\Lambda^4}(n+2)a_2^*)(a_2 - a_2^*). \tag{29.27}$$

Daraus ergeben sich dann die Skalenexponenten für den trivialen Fixpunkt

$$y_E = 2, \quad y_2 = \epsilon, \quad y_h = 3 - \frac{\epsilon}{2} \tag{29.28}$$

und für den nicht-trivialen Fixpunkt zu

$$y_E = 2 - \frac{n+2}{n+8}\epsilon, \quad y_2 = -\epsilon, \quad y_h = 3 - \frac{\epsilon}{2}. \tag{29.29}$$

Für $d < 4$ hat der nicht-triviale Fixpunkt einen, der triviale Fixpunkt zwei relevante symmetrieerhaltende Operatoren. Daher erwartet man für $d < 4$, dass der nicht-triviale Fixpunkt das Verhalten in der Umgebung eines normalen kritischen Punktes beschreibt. Der triviale Fixpunkt beschreibt das trikritische Verhalten in drei Dimensionen.

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{4}, \quad \gamma = 1. \tag{29.30}$$

Wir hatten anfangs $\eta = 0$ gesetzt. Natürlich ist diese Größe zunächst unbestimmt. Zu bestimmen ist sie aus dem Vorfaktor von $(\nabla \mathbf{S}(\mathbf{r}))^2$. In der Tat ist dieser Term der Hamilton-Funktion der einzige, der nicht klein ist. Er muss erhalten bleiben. Es stellt sich heraus, ohne dass wir das näher untersucht haben, dass η in erster Ordnung in ϵ gleich Null bleibt. Es sei erwähnt, dass man bei der obigen Rechnung zum Beispiel eine kubische Anisotropie $\sum_\alpha S_\alpha^4(\mathbf{r})$ hinzufügen kann. Es ergibt sich dann ein interessantes Flussdiagram für a_2 und die neue Kopplung.

29.d Ergebnisse für das isotrope n-Vektormodell

Was wir soeben betrachtet haben, ist der Anfang der ϵ-Entwicklung, das heißt einer Entwicklung der Exponenten in Potenzen von $\epsilon = 4 - d$. Die Terme in Ordnung ϵ haben wir gerade berechnet. Wir geben noch die Terme in Ordnung ϵ^2 an. Aus η und γ kann man die anderen Exponenten α, β, δ und ν aus (27.36) bis (27.39) berechnen. Der Exponent ω beschreibt die führende Korrektur zum Skalen, $\omega = (d - y_i)/y_E$ in (28.24)

$$\eta = \frac{n+2}{2(n+8)^2}\epsilon^2 + O(\epsilon^3), \tag{29.31}$$

$$\gamma = 1 + \frac{n+2}{2(n+8)}\epsilon + \frac{(n+2)(n^2+22n+52)}{4(n+8)^3}\epsilon^2 + O(\epsilon^3), \tag{29.32}$$

$$\omega = \epsilon - \frac{3(3n+14)}{(n+8)^2}\epsilon^2 + O(\epsilon^3). \tag{29.33}$$

Wir beobachten, dass die Exponenten sowohl von der Dimension $4 - \epsilon$ als auch von der Anzahl n der Komponenten des Ordnungsparameters $\mathbf{m} = \langle \mathbf{S} \rangle$ abhängen. Systeme, die durch ein und denselben Fixpunkt beschrieben werden, haben gleiche kritische Exponenten. Man sagt, sie gehören zur gleichen Universalitätsklasse. Konventionelle kritische und trikritische Phasenübergänge gehören zu verschiedenen Universalitätsklassen. Systeme mit der langreichweitigen Dipol-Wechselwirkung werden durch eine weitere Universalitätsklasse beschrieben. Stanley hat gezeigt, dass das n-Vektormodell im Limes $n \to \infty$ durch das sphärische Modell beschrieben wird. Für dieses erhält man im Bereich $2 < d \leq= 4$ die Exponenten $\eta = 0$, $\gamma = 2/(d-2)$. Ausgehend von diesem Limes gibt es eine $1/n$-Entwicklung. Für $d = 3$ Raumdimensionen ergibt diese

$$\eta = \frac{8}{3\pi^2 n} + O(\frac{1}{n^2}), \tag{29.34}$$

$$\gamma = 2 - \frac{24}{\pi^2 n} + O(\frac{1}{n^2}). \tag{29.35}$$

Schließlich haben Mermin und Wagner gezeigt, dass es für $n \geq 2$ keine spontane Magnetisierung bei endlichen Temperaturen in $d = 2$ Dimensionen gibt. Für $n > 2$ gibt es die folgende Entwicklung in $\epsilon' = d - 2$

$$\eta = \frac{\epsilon'}{n-2} + O(\epsilon'^2), \tag{29.36}$$

$$\nu = \frac{1}{\epsilon'} - \frac{1}{n-2} + \frac{4-n}{2(n-2)^2}\epsilon' + O(\epsilon'^2). \tag{29.37}$$

Man kann auch zeigen, dass sich das System mit $n = -2$ formal weitgehend wechselwirkungsfrei verhält, woraus $\eta = 0$, $\gamma = 1$ unabhängig von der Dimension folgt. Jedoch ist keine Entwicklung in $n + 2$ bekannt. Man kann ein n, d-Diagramm mit Höhenlinien für Exponenten zeichnen. Für α und γ finden sie sich in F.W., Lecture Notes in Physics 54 (1976) 1-29 (Springer). Viele Daten sind in J. Zinn-Justin, Quantum Field Theory and Critical Phenomena, Oxford Science Publications zu finden.

30 Pfadintegrale für klassische Felder

30.a Pfadintegrale

Wir wollen uns nun mit Pfadintegral-Darstellungen befassen und zwar sowohl für klassische Systeme als auch für quantenmechanische. Wir beginnen mit einem klassischen System, das von einem reellen Feld $\phi(\mathbf{r})$ abhängt. Wir betrachten also die Zustandssumme

$$Z = \int \mathrm{D}\phi \exp(-S(\phi)). \tag{30.1}$$

Dabei bedeutet $\mathrm{D}\phi$, dass wir über ϕ an allen Orten integrieren. Wie das im Einzelnen zu verstehen ist, stellen wir im Weiteren dar. Es sei nur bemerkt, dass der Grenzübergang zum kontinuierlichen $\mathbf{r}$ nicht ohne Probleme ist. Da wir an Erwartungswerten und Korrelationen interessiert sind, fügen wir einen Quellterm hinzu

$$Z(J) = \int \mathrm{D}\phi \exp(-S(\phi) + J \cdot \phi) \text{ mit } J \cdot \phi = \int \mathrm{d}^d r J(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}). \tag{30.2}$$

Durch Differentiation nach J erhalten wir

$$\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})} Z(J)|_{J=0} = Z(0)\langle\phi(\mathbf{r})\rangle \tag{30.3}$$

und entsprechend für höhere Ableitungen

$$\frac{\delta^n}{\delta J(\mathbf{r}_1)\delta J(\mathbf{r}_2)...\delta J(\mathbf{r}_n)} Z(J)|_{J=0} = Z(0)\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)...\phi(\mathbf{r}_n)\rangle. \tag{30.4}$$

Wir wollen zu einer störungstheoretischen Beschreibung übergehen. Dazu betrachten wir zunächst das Gauss-Integral

$$Z_0(J) = \int \mathrm{D}\phi \exp(-\frac{1}{2}\phi K\phi + J \cdot \phi) \text{ mit } \phi K \phi = \int \mathrm{d}^d\mathbf{r} \int \mathrm{d}^d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r})K(\mathbf{r},\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}'). \tag{30.5}$$

Dabei verlangen wir an, dass der Kern K symmetrisch und positiv ist. Wir führen nun das Inverse G_0 zu K ein,

$$\int \mathrm{d}^d\mathbf{r}'' G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}'')K(\mathbf{r}'',\mathbf{r}') = \delta^d(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{30.6}$$

Dann kann man das Integral (30.5) auswerten, indem man quadratisch ergänzt zu

$$Z_0(J) = \int \mathrm{D}\phi \exp(-\frac{1}{2}(\phi - G_0 J)K(\phi - G_0 J) + \frac{1}{2}JG_0J) = Z_0(0)\exp(\frac{1}{2}JG_0J). \tag{30.7}$$

Unter Verwendung dieser Gleichung überzeuge man sich, dass für die Gauss-Verteilung

$$\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\rangle_0 = G_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2), \tag{30.8}$$

$$\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3)\phi(\mathbf{r}_4)\rangle_0 = G_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)G_0(\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_4) + G_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_3)G_0(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_4) + G_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_4)G_0(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3) \tag{30.9}$$

gilt. Hat man ein Produkt von $2n$ Faktoren ϕ, so hat man die Orte $\mathbf{r}_i$ auf alle Arten zu Paaren zusammenzufügen und das Produkt der jeweiligen G_0 aufzusummieren. Es gibt dann insgesamt $(2n-1)!! = (2n-1)\cdot(2n-3)...3\cdot 1$ Beiträge.

Wir haben das Feld durch die lokalen Amplituden $\phi(\mathbf{r})$ dargestellt. Man kann auch von einer anderen Basis ausgehen. Da K und die Wechselwirkung V, die wir unten einführen, in der Regel translationsinvariant sind, ist es häufig zweckmäßig, die Fouriertransformierte

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_\mathrm{P}}\sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int \mathrm{d}^d k \phi_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{30.10}$$

$$\phi_{\mathbf{k}} = \int \mathrm{d}^d r \phi(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{30.11}$$

einzuführen. Dann transformiert sich

$$\phi K \phi = \int \mathrm{d}^d\mathbf{r} \int \mathrm{d}^d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) K(\mathbf{r},\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') = \frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum K_\mathbf{k} \phi_\mathbf{k} \phi_{-\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \mathrm{d}^d k K_\mathbf{k} \phi_\mathbf{k} \phi_{-\mathbf{k}} \tag{30.12}$$

mit

$$K_\mathbf{k} = \int \mathrm{d}^d r K(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{30.13}$$

Speziell für

$$\phi K \phi = \int \mathrm{d}^d r (m^2 \phi^2(\mathbf{r}) + (\nabla\phi(\mathbf{r}))^2) \tag{30.14}$$

folgt

$$K_\mathbf{k} = m^2 + k^2, \quad G_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{m^2+k^2}, \quad G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \mathrm{d}^d k \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\dot{(}\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{m^2+k^2}. \tag{30.15}$$

Wir kommen nun zur Störungstheorie. Es sei

$$S(\phi) = \frac{1}{2}\phi K \phi + V(\phi). \tag{30.16}$$

Beachten wir, dass

$$\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})} \mathrm{e}^{J\cdot\phi} = \phi(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{J\cdot\phi}, \tag{30.17}$$

dann können wir das Funktional-Integral

$$Z(J) = \int \mathrm{D}\phi \exp(-S(\phi) + J\cdot\phi) \tag{30.18}$$

ausdrücken als

$$Z(J) = \exp\left(-V\left(\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})}\right)\right) . \exp(\frac{1}{2} J G_0 J) \tag{30.19}$$

und erhalten damit für die Zustandssumme

$$Z(0) = \exp\left(-V\left(\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})}\right)\right) . \exp(\frac{1}{2} J G_0 J)\bigg|_{J=0}. \tag{30.20}$$

Für die Korrelationen können wir nach wie vor die Gleichung (30.4) verwenden und erhalten

$$Z(0)\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)...\phi(\mathbf{r}_n)\rangle = \frac{\delta^n}{\delta J(\mathbf{r}_1)\delta J(\mathbf{r}_2)...\delta J(\mathbf{r}_n)} \exp\left(-V\left(\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{r})}\right)\right) . \exp(\frac{1}{2} J G_0 J)\bigg|_{J=0}. \tag{30.21}$$

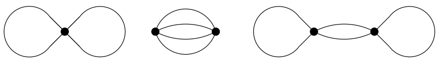
Die Ausdrücke (30.20) und (30.21) erlauben uns eine störungstheoretische Entwicklung nach Potenzen des Potentials V durchzuführen.

30.b Störungstheorie und Diagramme

Man zeichne alle möglichen Diagramme, indem man zunächst Vertices für die Kopplungen $V_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ...\mathbf{r}_k)$ in

$$V(\phi) = \sum_k \frac{1}{k!} \int \mathrm{d}^d r_1 \mathrm{d}^d r_2 ... \mathrm{d}^d r_k V_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ...\mathbf{r}_k) \phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)...\phi(\mathbf{r}_k) \tag{30.22}$$

in vorgegebener Anzahl zeichnet. Dabei erhalten diese je k äußere Beine, die mit Orten $\mathbf{r}$ versehen werden. Weiter zeichnet man Orte mit Beinen für die Faktoren $\phi(\mathbf{r})$, die in der Korrelation auftreten. Dann verbindet man die verschiedenen Beine die von den ϕs der Korrelationen und den ϕs der Vertices herrühren, durch Linien, denen man die Propagatoren $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ mit den jeweiligen Orten zuordnet. Die Propagatoren und die Kopplungen V_k sind miteinander zu multiplizieren und über die Orte der Vertices ist aufzuintegrieren. Dies ergibt einen diagrammatischen Beitrag. Dieser ist allerdings noch mit einem kombinatorischen Faktor zu multiplizieren. Dazu stellen wir folgende Überlegung an. Wir nummerieren die Enden der Propagatoren der Reihe nach durch. Zunächst wählen wir einen ersten Punkt willkürlich, als zweiten das andere Ende des Propagators. Dann einen dritten Punkt nach Belieben, dann den vierten als anderes Ende des von drei ausgehenden Propagators. Haben wir in unserem Diagramm n_k Faktoren V_k, so haben wir anfangs einen Faktor $\prod_k(1/n_k!k!^{n_k})$. Dabei stecken die Faktoren $1/k!$ bereits in der Definition der Wechselwirkung. Der Faktor $1/n_k!$ rührt von der Entwicklung der Exponentialfunktion $\exp(-V_k)$ her. Wir fragen nun, wieviele Möglichkeiten es gibt, dieses Diagramm herzustellen. Hängt der Punkt eins an einem V_k, so hat man die Wahl zwischen n_k solcher Vertices, dazu noch die Wahl aus k Linien, die von diesem Vertex weggehen; insgesamt also eine $n_k \cdot k$-fache Wahl. Beim Punkt zwei besteht, falls er am gleichen Vertex liegt, die Wahl zwischen $k-1$ äußeren Enden, falls er an einem anderen Vertex V_k liegt, hat man eine $(n_k-1)k$ fache Wahl. Liegt er an einem Vertex $V_{k'}$ mit $k' \neq k$, so bleibt der Faktor $n_{k'}k'$. Lediglich, wenn man an einen äußeren Punkt gelangt, hat man keine Wahl andere Wahl. Insgesamt stellt man fest, dass durch diese Faktoren der Anfangsfaktor $\prod_k(1/n_k!k!^{n_k})$ kompensiert wird. Allerdings kann es sein, dass mehrere dieser Wahlmöglichkeiten das gleiche Diagramm liefern. Dann hat man zuviel gezählt. Gibt es also insgesamt s verschiedene Abbildungen des Diagramms auf sich selbst, so ist es mit dem Faktor $1/s$ zu multiplizieren. So gilt schon, wenn ein Propagator von einem Vertex auf diesen zurückkehrt, dass allein dafür ein Faktor $1/2$ anzusetzen ist, da gewissermaßen der Propagator in beide Richtungen durchlaufen werden kann. Weiterhin ist noch das Vorzeichen $(-)^{\sum_k n_k}$ zu berücksichtigen.



v_1 v_2 v_3

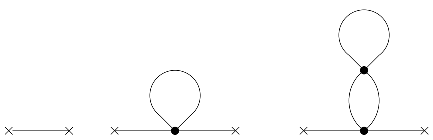
In dieser Figur bringen wir zunächst die Diagramme für die Zustandssumme bis zur zweiten Ordnung in V_4,

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 - \frac{1}{8}v_1 + \frac{1}{48}v_2 + \frac{1}{16}v_3 + \frac{1}{128}v_1^2 + ... \tag{30.23}$$

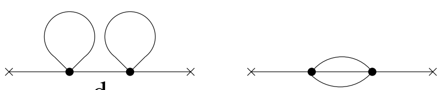
Der Faktor $1/8$ bei v_1 kommt zum Beispiel dadurch zustande, dass man in jedem der beiden Propagatoren die beiden Enden austauschen kann, ohne dass sich dadurch das Diagramm verändert. Schließlich kann man auch die beiden Propagatoren miteinander vertauschen und das Diagramm geht in sich über. Daher drei Faktoren $1/2$. Eine andere Betrachtung ist die, dass man zur Berechnung dieses Diagramms den Erwartungswert eines Produktes von vier Faktoren ϕ an dem Vertex $V_1/24$ zu berechnen hat. Das Ergebnis ist die Summe der drei Beiträge in (30.9). Daher erhält man den Faktor $3/4! = 1/8$. Wir bilden nun den Logarithmus von Z,

$$-\frac{F}{k_B T} = \ln Z = \ln Z_0 - \frac{1}{8}v_1 + \frac{1}{48}v_2 + \frac{1}{16}v_3 + ... \tag{30.24}$$

Hat ein zusammenhängendes Diagramm v_i einen Symmetriefaktor $1/s_i$, so gilt für ein Produkt $\prod_i v_i^{n_i}$ der Symmetriefaktor $\prod_i(1/n_i!s_i^{n_i})$, da man die n_i Diagramme in $n_i!$ Permutationen herstellen kann. Daher gilt für die freie Energie, dass man sie als Summe aller in sich geschlossenen zusammenhängenden Diagramme erhält.



d_0 d_1 d_2



d_3 d_4

Bei der Berechnung der Korrelationen erhält man nach (30.21) zunächst $Z(0)$ multipliziert mit der Korrelation. Man bemerkt, dass sowohl Diagramme auftreten, bei denen alle Teile über Propagatoren mit äußeren Enden zusammenhängen, wie auch solche, die Vakuum-Beiträge enthalten. Bezeichnen wir die Diagramme ohne Vakuum-Diagramme mit d_i, so sieht man, dass sich $Z(0)\langle\prod_i \phi(\mathbf{r}_i)\rangle = Z_0 \sum_i(\pm d_i/s_i)\times$ Vakuum-Diagramme schreiben lässt, so dass man

$$\langle\prod_i \phi(\mathbf{r}_i)\rangle = \sum_i(\pm d_i/s_i) \tag{30.25}$$

hat. Die Korrelationen ergeben sich als Summe der zusammenhängenden Diagramme. Im konkreten Fall der Zweipunkt-Korrelation folgt

$$\langle\phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}')\rangle = d_0 - \frac{d_1}{2} + \frac{d_2}{4} + \frac{d_3}{4} + \frac{d_4}{6} + ... \tag{30.26}$$

Beachte, dass man die beiden Enden $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ nicht miteinander vertauschen kann. Für $d_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ hat man $G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')$.

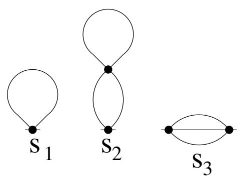
30.c Dyson-Gleichung

Betrachten wir die Diagramme d_i zur Zweipunkt-Funktion, so sehen wir, dass sich in d_3 die Schleife aus d_1 wiederholt. Allgemein haben die Beiträge zur Zweipunkt-Funktion eine Anzahl von Propagatoren, bei deren durchschneiden das Diagramm in zwei Teile zerfällt. Zwischen diesen Propagatoren sind jeweils Beiträge, die man als Selbstenergie Σ bezeichnet, so dass man schreiben kann

$$G = G_0 + G_0\Sigma G_0 + G_0\Sigma G_0\Sigma G_0 + ... = G_0 + G_0\Sigma G \text{ oder } G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma. \tag{30.27}$$

Diese letztere Beziehung ist die Dyson-Gleichung. Die Beiträge erster und zweiter Ordnung finden sich in der nächsten Figur.

$$\Sigma = -\frac{s_1}{2} + \frac{s_2}{4} + \frac{s_3}{6} + ... \tag{30.28}$$

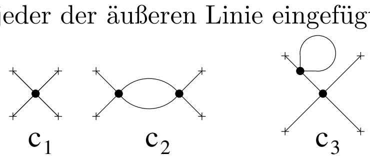


30.d Vierer-Korrelation

Wir betrachten noch die Vierer-Korrelation $\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3)\phi(\mathbf{r}_4)\rangle$. Wir beobachten dass wir alle Beiträge aus GG erhalten und zusätzlich noch Beiträge C, bei denen alle vier Orte $\mathbf{r}_1$, ... $\mathbf{r}_4$ miteinander verbunden sind,

$$\langle\phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)\phi(\mathbf{r}_3)\phi(\mathbf{r}_4)\rangle = G(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)G(\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_4) + G(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_3)G(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_4) + G(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_4)G(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3) + C(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_4). \tag{30.29}$$

Die Beiträge zu C bis zur zweiten Ordnung sind in der nächsten Figur gezeigt. Dabei treten allerdings die Beiträge c_2 in drei Varianten auf, da es drei Möglichkeiten gibt, die äußeren Orten $\mathbf{r}_1$ ... $\mathbf{r}_4$ zu Paaren zusammenzufügen. Die Beiträge c_3 treten in vier Varianten auf, da der Selbstenergiebeitrag s_1 in jeder der äußeren Linie eingefügt werden kann.



Man erhält damit

$$C = -c_1 + \frac{c_2 + \text{ 2 Permutationen}}{2} + \frac{c_3 + \text{ 3 Permutationen}}{2} + ... \tag{30.30}$$

Man kann aus C die vier äußeren Beine herausziehen und erhält

$$C(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_4) = \int \mathrm{d}^d r'_1 \mathrm{d}^d r'_2 \mathrm{d}^d r'_3 \mathrm{d}^d r'_4 G(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}'_1) G(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}'_2) G(\mathbf{r}_3,\mathbf{r}'_3) G(\mathbf{r}_4,\mathbf{r}'_4) \Gamma(\mathbf{r}'_1,\mathbf{r}'_2,\mathbf{r}'_3,\mathbf{r}'_4). \quad (30.31)$$

Γ enthält dann bis in zweiter Ordnung in V_4 nur die Beiträge aus c_1 und c_2, nicht aber aus c_3, aus denen man die äußeren Propagatoren entfernt hat.

30.e Komplexe Felder

Man hat bei manchen Problemen auch mit komplexen Feldern ϕ zu tun. Häufig startet man von

$$\begin{aligned} Z_0(J) &= \int \mathrm{D}\phi \exp(-\phi^\dagger K \phi + J^\dagger \phi + \phi^\dagger J), & (30.32)\\ \phi^\dagger K \phi &= \int \mathrm{d}^d \mathbf{r} \int \mathrm{d}^d \mathbf{r}' \phi^*(\mathbf{r}) K(\mathbf{r},\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}'), & (30.33)\\ J^\dagger \phi &= \int \mathrm{d}^d r J^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) & (30.34) \end{aligned}$$

mit $K^\dagger = K$ und erhält

$$Z_0(J) = Z_0(0) \exp(J^\dagger G_0 J). \quad (30.35)$$

Man beachte, dass man jetzt die Kopplungen V in der Form

$$V = \sum_{k,l} \frac{1}{k!l!} \int \mathrm{d}^d r_1 ... \mathrm{d}^d r_k \mathrm{d}^d r'_1 .. \mathrm{d}^d r'_l V_{k,l}(\mathbf{r}_1, ... \mathbf{r}_k, \mathbf{r}'_1, ... \mathbf{r}_l) \phi^*(\mathbf{r}_1) ... \phi^*(\mathbf{r}_k) \phi(\mathbf{r}'_1) ... \phi(\mathbf{r}'_l) \quad (30.36)$$

schreibt. Es gibt jetzt die Permutations-Symmetrie nur noch bezüglich der k Faktoren ϕ^* untereinander und der l Faktoren ϕ untereinander. Dementsprechend kann man jetzt die beiden Enden eines Propagators nicht mehr miteinander vertauschen. Um das klar darzustellen, ist es zweckmäßig, die Propagatoren mit einem Pfeil vom Ort mit $\phi(\mathbf{r})$ nach dem mit dem Faktor ϕ^* zu versehen. Damit ergeben sich andere Symmetriefaktoren und man erhält für die Korrelationen jetzt

$$\langle \phi^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle = d_0 - d_1 + d_2 + d_3 + \frac{d_4}{2} + ... \quad (30.37)$$

und für den Logarithmus der Zustandssumme

$$\ln Z = \ln Z_0 - \frac{v_1}{2} + \frac{v_2}{8} + \frac{v_3}{2} + ... \quad (30.38)$$

Treten in V nur Beiträge mit $k = l$ auf, so ist S gegen Transformationen $\phi(\mathbf{r}) \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \phi(\mathbf{r})$ mit beliebigem Winkel α invariant. Solange diese Symmetrie nicht gebrochen ist, können nur Korrelationen $\langle \phi^{*k} \phi^l \rangle$ von Null verschieden sein, wenn $k = l$. Welcher Beitrag in (30.29) verschwindet dann? Wie ändern sich die Symmetriefaktoren für die drei Beiträge c_2?

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

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

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

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

schreiben.

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

$$H_0 = (\epsilon - \mu) b^\dagger b. \qquad (31.12)$$

Dann folgt für die Zustandssumme

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

Mit

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

erhalten wir

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

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

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

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

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

Wir transformieren bezüglich der imaginären Zeit in den Frequenz-Raum

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

mit

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

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

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

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

$$\frac{\delta Z}{\delta J^*(\tau)} = \int \mathrm{D}^2c\, c(\tau)\exp(-S+J^\dagger c+c^\dagger J), \tag{31.29}$$
$$\frac{\delta Z}{\delta J(\tau)} = \int \mathrm{D}^2c\, c^*(\tau)\exp(-S+J^\dagger c+c^\dagger J). \tag{31.30}$$

und insbesondere

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

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

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

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

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

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

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

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

$i\omega_j$, 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.

32 Pfadintegrale: Ausblick

32.a Fermionen

Wir haben bisher nur die Feldtheorie für Bosonen aufgestellt. Dabei waren wir erst von dem klassischen Feld für Bosonen, einem komplexen Feld ausgegangen, und haben für solch ein Feld die Pfadintegrale entwickelt. Daran anschließend wurde die Pfadintegral-Formulierung für Bosonen entwickelt. Es ergibt sich, dass die Vertauschungs-Regeln zwischen Erzeugern und Vernichtern dazu führen, dass man eine zusätzliche Zeitvariable (letzendlich neben Orts- oder Impuls-Koordinaten) einführen muss. Wir haben die Theorie für endliche Temperaturen entwickelt, in der die Zeit imaginär war und von 0 bis $\mathrm{i}\beta$ lief. Es gibt auch eine Theorie für den Grundzustand. Dort rechnet man mit reellen Zeiten. Schließlich kann man für endliche Temperaturen auch neben den imaginären noch reelle Zeiten einführen. Dann multipliziert sich die Anzahl der Felder mit zwei.

Ähnlich kann man für Fermionen vorgehen. Man braucht dort zunächst das äquivalente klassische Feld. Da die Erzeuger antikommutieren, müssen auch die klassischen Felder antikommutieren. Dies leisten Grassmann-Variable. Sie können das zum Beispiel unter
http://www.tphys.uni-heidelberg.de/ wegner/grassmann.ps nachlesen. Formal findet man viel Ähnlichkeit mit der Herleitung für Bosonen.

Auf einen Punkt möchte ich hier noch eingehen. Man definiert die Korrelations-Funktion ähnlich wie für die Bosonen,

$$-G(\tau,\tau') = \langle T_\tau(\tilde{f}(\tau')f(\tau))\rangle = \begin{cases} \langle \tilde{f}(\tau')f(\tau)\rangle & \tau < \tau' \\ -\langle f(\tau)\tilde{f}(\tau')\rangle & \tau > \tau'. \end{cases} \tag{32.1}$$

mit der Zeitentwicklung

$$\tilde{f}(\tau) = \mathrm{e}^{\tau H} f^\dagger \mathrm{e}^{-\tau H}, \quad f(\tau) = \mathrm{e}^{\tau H} f \mathrm{e}^{-\tau H} \tag{32.2}$$

für die fermionischen Erzeuger und Vernichter $f^\dagger$ und f. Dabei vertauscht der Zeitordnungs-Operator nicht nur die beiden Operatoren $\tilde{f}$ und f, sondern ändert auch noch das Vorzeichen beim Vertauschen. Es gilt wieder $G(\tau,\tau') = G(\tau-\tau')$. Man erhält $G(+0) = -1+n$, $G(-0) = n$, woraus wieder der Sprung $G(+0) - G(-0) = -1$ folgt. Die zyklische Invarianz liefert jedoch

$$G(\tau) = -G(\tau+\beta), \quad -\beta < \tau < 0. \tag{32.3}$$

Die Folge ist, dass bei der Entwicklung

$$G(\tau) = k_{\mathrm{B}}T \sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_j\tau} G(\omega_j) \tag{32.4}$$

jetzt nicht mehr $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_j\beta} = 1$ gilt, was bei den Bosonen auf die Matsubara-Frequenzen $\omega_j = 2j\pi k_{\mathrm{B}}T$ führte, sondern $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_j\beta} = -1$, was die fermionischen Matsubara-Frequenzen $\omega_j = (2j+1)\pi k_{\mathrm{B}}T$ ergibt. Insbesondere ist $\omega = 0$ keine Matsubara-Frequenz für Fermionen.

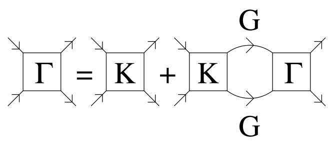
32.b Summation von Diagrammen

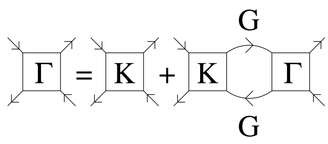
Ein gängiges Verfahren bei der Auswertung von Korrelationen ist es, bestimmte Klassen von Diagrammen aufzusummieren. Wir hatten im Abschnitt 30.c die Dyson-Gleichung und die Selbstenergie betrachtet. Ein Näherungs-Verfahren besteht darin, bestimmte Beiträge der Selbstenergie mitzunehmen, im einfachsten Fall etwa das Diagramm s_1. Etwas besser rechnet man, wenn man in s_1 den Propagator G_0 durch G selbst-konsistent ersetzt. Dann hat man zum Beispiel auch s_2 und viele andere Beiträge berücksichtigt. Man kann sich davon überzeugen, dass dies bei den Fermionen der Hartree-Fock-Näherung entspricht.

Ähnlich wie wir bei der Dyson-Gleichung die Beiträge betrachtet haben, die die Einteilchen-irreduziblen Einschübe Σ sind, kann man bei dem Korrelations-Anteil C zunächst die äußeren Propagatoren G herausziehen, schematisch $C = GG\Gamma GG$ (30.31) und dann betrachten, welche Zweiteilchen-irreduziblen Anteile K verbleiben, die durch Durchschneiden von zwei Propagatoren nicht zerfallen. Dies führt auf die Bethe-Salpeter-Gleichung, schematisch

$$\Gamma = K + KGG\Gamma. \tag{32.5}$$

Dies kann auf zwei Arten und Weisen geschehen. Entweder die beiden Propagatoren laufen in die gleiche Richtung, dann betrachtet man Zwei-Teilchen-Anregungen, oder sie laufen in Gegenrichtung, dann betrachtet man Teilchen-Loch-Paare. Approximiert man $K = V$, so erhält man für Teilchen-Loch-Paare die RPA-Näherung. Im allgemeinen sind die K für diese beiden Bethe-Salpeter-Gleichungen verschieden.





Man kann also bekannte Näherungen durch Klassen von Diagrammen darstellen. Es wird auch offensichtlich, wie man diese Näherungen verbessern kann, indem man zum Beispiel zu Σ oder K weitere Beiträge hinzunimmt.

Mehr kann man in Büchern wie Fetter/Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems,
Abrikosov, Gorkov, Dzyaloshinski, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics,
Nozieres, The Theory of Interacting Fermi Systems (nur T=0),
Zinn-Justin, Quantum Field Theory and Critical Phenomena finden.