

MITSCHRIEB ZU THEORIE DER KONDENSIERTEN MATERIE II:

Prof. Dr. Vojta

Vorlesung Sommersemester 2005

Letzte Aktualisierung und Verbesserung: 30. Juli 2005

Mitschrieb der Vorlesung THEORIE DER KONDENSIERTEN MATERIE II
von Herrn Prof. Dr. VOJTA im Sommersemester 2005
von MARCO SCHRECK.

Dieser Mitschrieb erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit und Korrektheit.
Kommentare, Fehler und Vorschläge und konstruktive Kritik bitte an Marco.Schreck@gmx.de.

Inhaltsverzeichnis

1	Feynman-Regeln	5
1.1	DYSON-Gleichung und Selbstenergie	5
1.1.1	FEYNMAN-Regeln im Impuls-Frequenz-Raum	5
1.2	MATSUBARA-Summen	6
1.3	Informationsgehalt der Einteilchen-GREENfunktion	7
1.4	HARTREE-FOCK-Näherung	8
1.5	Störungsentwicklung für thermodynamisches Potential	10
1.5.1	Einschub: Kummulantenentwicklung	10
2	Phononen und Elektron-Phonon-Wechselwirkung	13
2.1	Phononen	13
2.2	GREENSche Funktion für Phononen und DYSON-Gleichung	14
2.3	Elektron-Phonon-Wechselwirkung	15
2.3.1	Störungstheorie für Elektron-Phonon-Wechselwirkung	16
3	Fermi-Flüssigkeit, Potentialstreuung, Random-Phase-Approximation (RPA)	17
3.1	FERMI-Flüssigkeit	17
3.1.1	Einteilchen-GREENfunktion	17
3.1.2	Die FERMI-Flüssigkeitstheorie in der Nähe der FERMIKante	19
3.1.3	Konsequenzen des FERMI-Flüssigkeitsmodells	19
3.2	Störstellen-Potentialstreuung	20
3.3	Eine Störstelle	21
3.4	Viele Störstellen	22
3.4.1	Korrekturen zur Einteilchen-GREENfunktion	22
3.5	Störstellenleitfähigkeit	23
3.6	Dynamische Dichte-Suszeptibilität	24
3.6.1	Statische Suszeptibilität bei $T = 0$	27
3.6.2	Statische Suszeptibilität bei $q = 0$ und $T > 0$	27
3.7	Abschirmung und Random Phase Approximation	28
3.8	Kollektiven Anregungen	29
3.8.1	Kurzreichweitige Wechselwirkung	30
3.8.2	COULOMB-Wechselwirkung (Plasma-Oszillation)	31
4	Supraleitung	33
4.1	Attraktive Wechselwirkung	33
4.1.1	Effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung	33
4.2	COOPER-Instabilität der FERMI-Flüssigkeit	34
4.3	BCS-Theorie	36
4.3.1	Bewegungsgleichungen	37
4.3.2	BOGOLIUBOV-Transformation	38
4.3.3	Lösung der Selbstkonsistenzgleichung	38
4.4	Thermodynamik des konventionellen supraleitenden Zustands	40
4.5	Unkonventionelle Supraleiter	41
4.5.1	Paarung aus rein repulsiver Wechselwirkung	41

5	Symmetrien und Ward-Identitäten	43
5.1	Propagatoren und Vertizes	43
5.2	WARD-Identitäten	44
5.2.1	Erhaltungssatz	44
5.3	Supraleiter: Eichinvarianz	46
5.3.1	WARD-Identität für Supraleiter	46
5.3.2	Vertex-Funktion und kollektive Moden	47

Kapitel 1

Feynman-Regeln

1.1 Dyson-Gleichung und Selbstenergie

Diagrammatisch sieht die DYSON-Gleichung folgendermaßen aus:

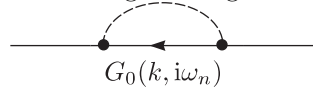


Durch FOURIER-Transformation ($\tau \mapsto i\omega_n$, $\tau \mapsto k$) erhält man:

$$G(k, i\omega_0) = G_0(k, i\omega_0) + G_0(k, i\omega_0)\Sigma(k, i\omega_n)G(k, i\omega_n)$$

$$G(k, i\omega_n) = \frac{1}{G_0^{-1}(k, i\omega_n) - \Sigma(k, i\omega_n)} = G_0 + G_0\Sigma G_0 + G_0\Sigma G_0\Sigma G_0 + \dots$$

Selbstenergiebeiträge sind gegeben durch:



Wir haben einen Fermionpropagator und eine COULOMB-Wechselwirkungslinie. Impulserhaltung an den Vertices ist eine Folge der FOURIER-Transformation.

1.1.1 Feynman-Regeln im Impuls-Frequenz-Raum

- * Zeichne alle topologisch verschiedenen verbundenen Graphen.
- * Jede interne Elektronlinie entspricht einem Faktor $G_0(p, i\nu_n)$.
- * Jede COULOMB-Linie entspricht einem Faktor $V_q = \frac{4\pi e^2}{q^2}$. Außerdem wird jeder Wechselwirkungslinie auch eine **Richtung** zugewiesen.
- * In jedem Vertex müssen Impuls und komplexe Frequenz erhalten sein (ergibt sich aus der Translationsinvarianz).
Achtung: Fermionische Frequenzen sind $(2n + 1)\pi kT$, dagegen sind bosonische Frequenzen $2n\pi kT$. In dieser Regel steckt, dass die Anzahl der Fermionen erhalten sein muss.
- * Summation/Integration über alle internen Variablen (Impuls, Frequenz, Spin)
- * Multipliziere den Ausdruck mit:

$$(-1)^n \cdot (-1)^F \cdot \left(\frac{1}{\beta}\right)^m \cdot \begin{cases} \left(\frac{1}{(2\pi)^3}\right)^m & \text{für kontinuierliche FOURIER-Transformation} \\ \left(\frac{1}{V}\right)^m & \text{für diskrete FOURIER-Transformation (Gitter)} \end{cases}$$

n ist die Ordnung des Graphen und F die Anzahl der geschlossenen Fermionlinien. (Bei der Ausführung des WICKSchen Theorems muss man Fermionoperatoren kommutieren, woher das Minuszeichen rührt.) Der zweite Faktor rührt von der Anzahl der Frequenzsummationen her. m ist die Anzahl der internen Summationen, die übrig bleiben, wenn Energie- und Impulsintegrationen ausgeführt sind.

Beispiel:

$$\begin{aligned}
 A(q, i\omega_n) &= \frac{q}{i\omega_n} \overset{\frac{4\pi e^2}{k^2}, i\bar{\nu}_n}{\curvearrowright} \frac{q}{i\omega_n} = \\
 &= \sum d^3p d^3k \sum_{i\nu_n, i\nu_n} G_0(p, i\nu_n) \cdot \frac{4\pi e^2}{k^2} (\delta(q-p-k)\delta_{\omega_n-\nu_n-\bar{\nu}_n} + \delta(k+q-p)\delta_{\omega_n-\nu_n+\bar{\nu}_n}) \cdot (-1)^1 \cdot \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} = \\
 &= - \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} G_0(p, i\nu_n) \frac{4\pi e^2}{(q-p)^2}
 \end{aligned}$$

Bei beiden Vertizes müssen die Impulse (kontinuierlich!) und Frequenzen (diskret!) erhalten sein.

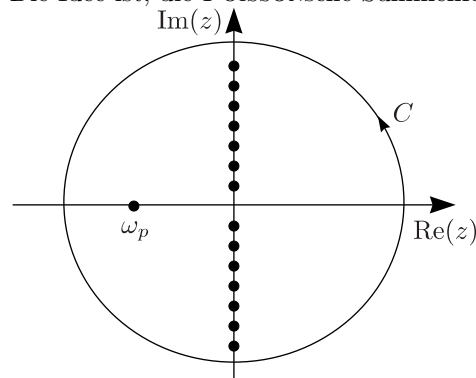
Beispiel:

$$B(q, i\omega_n) = \overset{q}{\text{---}} \overset{i\omega_n}{\bullet} \overset{G_0(p, i\nu_n)}{\curvearrowright} \overset{q}{\text{---}} \overset{i\omega_n}{\bullet} \overset{G_0(p-q, i\nu_n - i\omega_n)}{\curvearrowleft} = - \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} G_0(p, i\nu_n) G_0(p-q, i\nu_n - i\omega_n)$$

Hier ist $i\omega_n$ eine bosonische Frequenz. Die internen Frequenzen sind fermionische Frequenzen, da sie assoziiert sind mit den Fermion-Propagatoren. $i\nu_n - i\omega_n$ ist dann als ganzes wieder fermionisch, was auch so sein muss, da G_0 ein fermionischer Propagator ist (Leptonzahlerhaltung!).

1.2 Matsubara-Summen

Die Idee ist, die POISSONSche Summenformel anzuwenden.



$$\oint_C dz f(z)n(z) = 0 = 2\pi i \sum_{\text{alle Pole } z_i} \text{Res}(f \cdot n)|_{z_i}$$

$f(z)$ habe Pole bei ω_p und $n(z)$ Pole bei ω_n . Die konkrete Form von G_0 ist:

$$G_0(p, i\nu_n) = \frac{1}{i\nu_n - \varepsilon_p}$$

Wir müssen also folgendes berechnen:

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} G_0(p, i\nu_n) G_0(q, i\omega_m - i\nu_n) = \frac{1 - n_F(\varepsilon_p) - n_F(\varepsilon_q)}{i\omega_m - \varepsilon_p - \varepsilon_q}$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} G_0(p, i\nu_n) G_0(q, i\nu_n + i\omega_m) = \frac{n_F(\varepsilon_p) - n_F(\varepsilon_q)}{i\omega_n + \varepsilon_p - \varepsilon_q}$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} G_0(p, i\nu_n) = n_F(\varepsilon_p)$$

Wir wollen nun die erste der drei Formeln beweisen.

$$F = -\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} f(i\nu_n) = - \sum_{\substack{\text{Pole } z_j \\ \text{von } f}} \text{Res}(f|z_j) \cdot n_F(z_j)$$

$$f(i\nu_n) = \frac{1}{i\nu_n - \varepsilon_p} \frac{1}{i\omega_n - i\nu_n - \varepsilon_q}$$

Ein Pol liegt bei $z_1 = \varepsilon_p$ und ein zweiter Pol bei $z_2 = i\omega_n - \varepsilon_q$. Die Residuen sind gegeben durch:

$$\text{Res}(f|z_1) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_p - \varepsilon_q} \quad \text{und} \quad \text{Res}(f|z_2) = -\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_q - \varepsilon_p}$$

Die FERMI-Funktion ist gegeben durch:

$$n_F(i\omega_n - \varepsilon_q) = \frac{1}{\exp(\beta \cdot 2\pi i n k T) \exp(-\beta \varepsilon_q) + 1} = n_F(-\varepsilon_q) = 1 - n_F(\varepsilon_q)$$

Schlussendlich erhalten wir dann:

$$F = -\frac{1}{i\omega_1 - \varepsilon_p - \varepsilon_q} (n_F(\varepsilon_p) - 1 + n_F(\varepsilon_q)) = \frac{1 - n_F(\varepsilon_p) - n_F(\varepsilon_q)}{i\omega_n - \varepsilon_p - \varepsilon_q}$$

1.3 Informationsgehalt der Einteilchen-Greenfunktion

Mittels FOURIER-Transformation lässt sich

$$G(k, \tau) = -\langle T_\tau c_{k\sigma}(\tau) c_{k\sigma}^\dagger(0) \rangle$$

als Spektraldichte schreiben:

$$G(z) = \int \frac{d\Omega}{\pi} \frac{\varrho(\Omega)}{\Omega - z} \quad \text{mit} \quad G^R(\omega) = G(\omega + i\delta), \quad \varrho(\omega) = \text{Im}G^R(\omega)$$

Damit steckt die gesamte Information über die GREENSche Funktion in der Spektraldichte $\varrho(\omega)$. Wenn c Fermionen sind, dann folgt aus der LEHMANN-Darstellung $\varrho(\omega) < 0$. Sind es Bosonen, so wechselt die Spektraldichte bei $\omega = 0$ ihr Vorzeichen: $\omega \cdot \varrho(\omega) < 0$. Für die Besetzungszahl gilt:

$$\langle n_{k\sigma} \rangle = G(k, \tau = 0^-) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left(-\frac{\varrho(k, \omega)}{\pi} \right) n_{F/B}(\omega)$$

Damit kann man eine Zustandsdichte definieren:

$$D(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{k, \sigma} \left(-\frac{\varrho(k, \omega)}{\pi} \right)$$

Für freie Teilchen ist ϱ proportional zu einer δ -Funktion. Wir hatten gesehen, dass wir die GREENSche Funktion darstellen können über die DYSON-Gleichung:

$$G(k, z) = \frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma} = \frac{1}{H_0 = \sum_{k, \sigma} (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad z - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma(k, z)}$$

Das Konzept der Selbstenergie Σ basiert prinzipiell nicht auf Störungsentwicklung, sondern ist durch obige Gleichung definiert. Falls die Wechselwirkung „schwach“ (Σ klein) ist, dann ist es sinnvoll, die Lösungen der Gleichung $z = (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma(k, z)$ zu diskutieren. Wir zerlegen das ganze in Real- und Imaginärteil:

$$z = \underbrace{E'_k - iE''_k}_{E_k} \quad \text{mit} \quad E'_k, E''_k \in \mathbb{R}$$

Dann ist $E'_k = \varepsilon_k - \mu - \text{Re}(\Sigma)$ eine **renormierte** Einteilchen-Energie und E''_k spielt die Rolle einer Dämpfung (bzw. Zerfallsrate).

$$\exp(-i(E' - iE'')t) = \exp(-iE't) \exp(-E''t)$$

Eine analoge Interpretation ist folgende: Ein effektiver HAMILTON-Operator der Form

$$H = \sum_{k\sigma} E_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

führt auf:

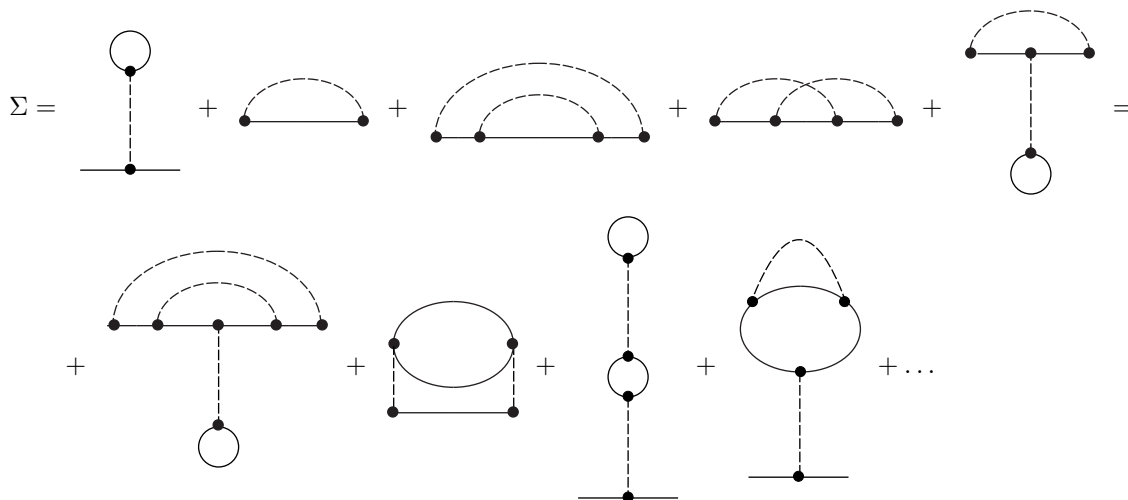
$$G(k, z) = \frac{1}{z - E_k}$$

Diese Interpretationen sind sinnvoll, wenn folgendes gilt:

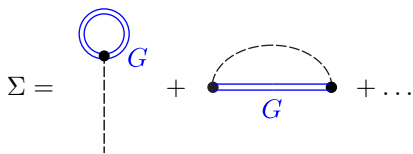
- * Die Frequenzabhängigkeit von $\Sigma(k, z)$ ist „schwach“. Was „schwach“ bedeutet, werden wir noch diskutieren.
- * Die Dämpfung soll schwach sein. Hier müssen wir also fordern, dass $|E''_k| \ll |E'_k|$.

1.4 Hartree-Fock-Näherung

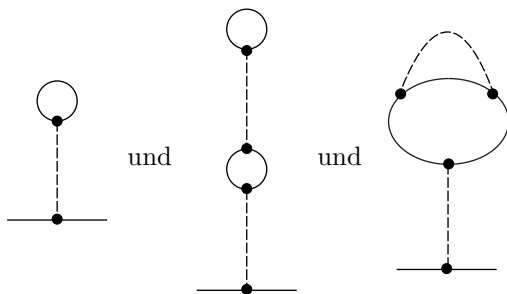
Es handelt sich dabei um eine Näherung für Elektronensysteme mit Zweiteilchen-Wechselwirkung. Man kann sie definieren anhand der Selbstenergiediagramme, die wir schon betrachtet hatten. Schauen wir uns also noch einmal die Störungsentwicklung für Σ an:



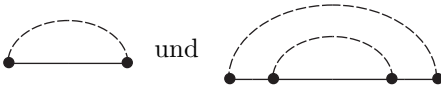
Selbstkonsistente Berechnung von Σ :



Im ersten Term sind beispielsweise die folgenden Diagramme enthalten:



Im zweiten Term sind es folgende:



Das vierte Diagramm mit den sich überkreuzenden Wechselwirkungslinien, also



ist jedoch **nicht** enthalten, da dieses eine völlig andere Topologie besitzt. Jetzt können wir definieren, was die HARTREE-FOCK-Methode ist. Sie ist also dadurch definiert, dass man die ersten beiden Diagramme mitnimmt und die restlichen vernachlässigt:

$$\Sigma_{HF} = \text{diagram with a loop} + \text{diagram with a semi-circular arc}$$

Der erste Term (HARTREE-Term) stellt eine Wechselwirkung zwischen Elektronendichten dar und der zweite Term (FOCK-Term) eine Austausch-Wechselwirkung. Wir betrachten die Näherung im Orts-Zeit-Raum:

$$\Sigma_{HF}(1, 2) = \delta(\tau_1 - \tau_2)\delta(x_1 - x_2)\delta_{\sigma_1\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \int d^3x_3 V(x_1 - x_3) \langle \psi_{\sigma_3}^\dagger(x_3) \psi_{\sigma_3}(x_3) \rangle - \\ + \delta(\tau_1 - \tau_2)\delta_{\sigma_1\sigma_2} V(x_1, x_2) \langle \psi_{\sigma_1}^\dagger(x_1) \psi_{\sigma_2}(x_2) \rangle$$

Der erste Term ist lokal im Raum. $V(x_1 - x_3)$ ist die Dichte-Dichte-Wechselwirkung und $\langle \psi_{\sigma_3}^\dagger(x_3) \psi_{\sigma_3}(x_3) \rangle$ die entsprechende Dichte. Das Minuszeichen beim zweiten Term kommt daher, dass dieser keine geschlossene Fermion-Schleife hat. Σ_{HF} wird frequenzunabhängig, weil die Wechselwirkung instantan ist.

$$\Sigma_{HF}(x_1, \sigma_1; x_2, \sigma_2; i\omega_n) = \delta(x_1 - x_2)\delta_{\sigma_1\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \int d^3x_3 V(x_1 - x_3) \langle \psi_{\sigma_3}^\dagger(x_3) \psi_{\sigma_3}(x_3) \rangle - \\ + \delta_{\sigma_1\sigma_2} V(x_1 - x_2) \langle \psi_{\sigma_1}^\dagger(x_1) \psi_{\sigma_2}(x_2) \rangle$$

Betrachten wir als Spezialfall ein translationsinvariantes System. Die guten Quantenzahlen sind Impulse, womit man alle Zustände durch Impulsquantenzahlen charakterisieren kann.

$$\Sigma_{HF}(k, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \sum_{\sigma'} \left(V(0) \langle c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle - V(k - k') \langle c_{k'\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} \rangle \delta_{\sigma\sigma'} \right)$$

Zur Überprüfung berechnen wir das erste Diagramm mittels der FEYNMAN-Regeln:

$$\sum_{i\omega_n} \sum_{k'} G(k' - i\omega_n) \dots$$

Die Wechselwirkungslinie kann keinen Impuls tragen, da \vec{k} einläuft und $-\vec{k}$ ausläuft.

$$V(\vec{k}) = \int d^3x V(\vec{x}) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \underset{V(x) \sim \frac{1}{x}}{\sim} \frac{1}{k^2}$$

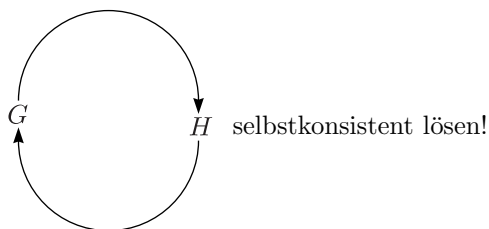
Bemerkung: Für nichtabgeschirmte COULOMB-Wechselwirkung divergiert der HARTREE-Term. Dieser Term wird kompensiert durch die Wechselwirkung mit positiv geladenem Hintergrund, was nur für streng ladungsneutrale Systeme gilt. Σ_{HF} ist frequenzunabhängig und reell, kann also als effektive Einteilchenenergie interpretiert werden. Für $H_0 = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ gilt:

$$G(k, z) = \frac{1}{z - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma_{HF}(k)}$$

Das System wird vollständig beschrieben durch:

$$H = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k - \mu - \Sigma_{HF}(k)) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

Achtung: Σ_{HF} enthält das volle G , also die Lösung unseres Problems. Σ_{HF} kann man als effektives Potential (selbstkonsistentes Feld, Molekularfeld) auffassen. Dies ist ein Feld, das von den anderen Teilchen erzeugt wird, in dem sich das Teilchen bewegt, das man anschaut. Praktisch bedeutet dies:



Es stellt sich heraus, dass die HARTREE-FOCK (im variationellen Sinne) die beste Näherung im Rahmen unabhängiger Teilchen ist.

1.5 Störungsentwicklung für thermodynamisches Potential

Im folgenden soll Ω das thermodynamische Potential sein definiert durch $\Omega = -kT \ln(Z)$.

$$\exp(-\beta\Omega) = \text{Sp}(\exp(-\beta\hat{K})) = \text{Sp}(\exp(-\beta\hat{K}_0)S(\beta)) = \langle S(\beta) \rangle_0 \text{ mit } \hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}, \hat{K}_0 = \hat{H}_0 - \mu\hat{N}$$

Das thermodynamische Potential ist dasselbe wie die Störungsentwicklung des Nenners der GREENSchen Funktion. Störungsentwicklung von $S(\beta)$ führt auf:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta\Omega) &= \exp(-\beta\Omega_0) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n \langle T_{\tau} \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \rangle_0 = \\ &= 1 + \text{diagramm} + \text{diagramm} + \text{diagramm} + \dots = \\ &= \exp(-\beta\Omega_0) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n W_n \text{ mit } W_n = \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\infty} d\tau_1 \dots d\tau_n \langle T_{\tau} \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \rangle_0 (*) \end{aligned}$$

Hier stecken wirklich alle Diagramme drin, insbesondere auch unverbundene.

1.5.1 Einschub: Kummulantenentwicklung

Wir stellen uns eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\varrho(X)$ vor. Der Mittelwert einer Funktion $f(x)$ soll folgendermaßen definiert sein:

$$\langle f(x) \rangle = \int dX \varrho(X) f(X)$$

Man kann nun die Momente der Verteilungsfunktion ϱ bestimmen:

$$M_n = \langle X^n \rangle = \int dX \varrho(X) X^n$$

Das nullte Element ist eins, das erste Element die Normierung, usw. Wir betrachten die FOURIER-Transformation von ϱ :

$$\phi(K) = \langle \exp(iKX) \rangle = \int dX \exp(iKX) \varrho(X)$$

Durch Entwicklung der Exponentialfunktion kann man die FOURIER-Transformation darstellen durch Momente:

$$\phi(K) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iK)^n}{n!} M_n$$

Man kann die FOURIER-Transformation also durch Kenntnis der Momente M_n rekonstruieren. Dies ist jedoch nicht praktikabel, da auch hohe Momente durchaus eine Rolle spielen können. Deshalb führt man die Kummulantenentwicklung von ϕ ein:

$$\phi(x) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(iK)^n}{n!} C_n\right)$$

Dies kann man als Definition der Kummulanten C_n auffassen, wobei $C_1 = M_1 = \langle X \rangle$ (Mittelwert), $C_2 = M_2 - M_1^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$ (Standardabweichung), usw. gilt. Für eine GAUSS-Verteilung sind alle $C_n = 0$ für $n > 2$. Die Kummulantenentwicklung hat also die Eigenschaft, dass die Kummulanten viel schneller abfallen; sie konvergiert also viel schneller.

Wir wollen nun (*) resumieren:

$$\exp(-\beta\Omega) = \exp\left(-\beta\Omega_0 + \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^l U_l\right)$$

U_l sind hier die Kummulanten. Wie sehen diese nun aus? U_l enthält nur noch verschiedene **verbundene** Diagramme.

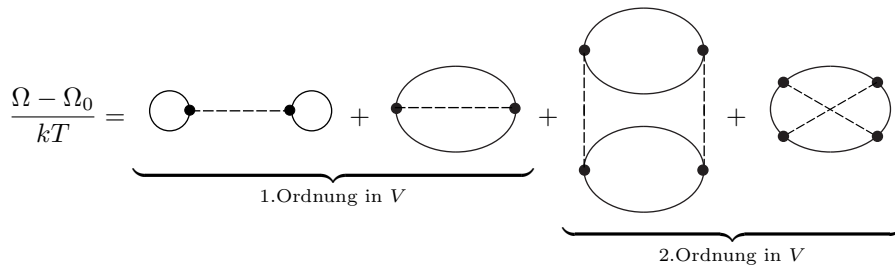
$$U_l = \frac{(-1)^l}{l} \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_l \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_l) \rangle_0 \Big|_{\substack{\text{verschiedene} \\ \text{verbundene}}}$$

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta} \sum_{l=1}^{\infty} U_l \text{ mit } \lambda = 1$$

Die Exponentialfunktion erzeugt unverbundene Diagramme.

Zum Beweis:

Wir stellen uns vor, wie haben ein Elektronengas mit Zwei-Teilchen-Wechselwirkung:



Der erste Term ist der „HARTREE-Term“ und der zweite Term der „FOCK-Term“. Achtung: HARTREE-FOCK ist selbstkonsistent. Dies sind nackte Propagatoren plus Korrekturen.

Kapitel 2

Phononen und Elektron-Phonon-Wechselwirkung

2.1 Phononen

Wir betrachten folgenden HAMILTON-Operator:

$$H^{Atome} = \sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{l,\kappa} \frac{p_{\alpha}^2(l,\kappa)}{2M_{\kappa}} + V(\dots u_{\alpha}(l,\kappa) \dots)$$

α sind die möglichen Auslenkungen. l ist Einheitszelle und κ das Atom in der jeweiligen Einheitszelle. $u(l,\kappa)$ ist die Auslenkung des Atoms (l,κ) aus der Ruhelage $R_{\alpha}(l,\kappa)$. In harmonischer Näherung lässt sich H^{Atome} entwickeln:

$$H_0 = \sum \frac{p_x^2(l,\kappa)}{2M_{\kappa}} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha,\alpha' \\ l,l' \\ \kappa,\kappa'}} \Phi_{\alpha,\alpha'}(l,\kappa;l',\kappa') u_{\alpha}(l,\kappa) u_{\alpha'}(l',\kappa')$$

Φ ist die dynamische Matrix:

$$\Phi_{\alpha\alpha'}(l,\kappa;l',\kappa') = \frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha}(l,\kappa) \partial u_{\alpha'}(l',\kappa')}$$

In Diagonalform sieht das ganze folgendermaßen aus:

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q},\lambda} (P^*(\vec{q},\lambda)P(\vec{q},\lambda) + \omega_{\vec{q},\lambda}^2 Q^*(\vec{q},\lambda)Q(\vec{q},\lambda))$$

q bezeichnet die Impulse und λ die Polarisationsrichtung. Wir verwenden nun die Eigenwerte und Eigenvektoren der dynamischen Matrix:

$$u_{\alpha}(l,\kappa) = \sqrt{\frac{1}{NM_{\kappa}}} \sum_{\vec{q},\lambda} \vec{e}_{\alpha}(\kappa|\vec{q},\lambda) \exp(i\vec{q}\vec{R}(l,\kappa)) Q(\vec{q},\lambda)$$

$$P_{\alpha}(l,\kappa) = \sqrt{\frac{M_{\kappa}}{N}} \sum_{\vec{q},\lambda} \vec{e}_{\alpha}(\kappa|\vec{q},\lambda) \exp(-i\vec{q}\vec{R}(l,\kappa)) P(\vec{q},\lambda)$$

$Q(\vec{q},\lambda)$ sind die Normalkoordinaten für die Schwingung mit Wellenvektor \vec{q} und Polarisationsrichtung λ . Außerdem gilt für den kanonischen Impuls $P(\vec{q},\lambda) = \dot{Q}^*(\vec{q},\lambda)$. $\vec{e}_{\alpha}(\kappa|\vec{q},\lambda)$ und $\omega_{\vec{q},\lambda}^2$ sind die Eigenvektoren bzw. Eigenwerte von Φ .

$$\sum \Phi_{\alpha\alpha'}(\vec{q},\kappa\kappa') \vec{e}_{\alpha'}(\kappa'|\vec{q}\lambda) = \omega_{\vec{q},\lambda}^2 \vec{e}_{\alpha}(\kappa|\vec{q},\lambda)$$

$$\Phi_{\alpha,\alpha'}(\vec{q},\kappa\kappa') = \frac{1}{N} \sum_{l,l'} \frac{1}{\sqrt{M_{\kappa}M_{\kappa'}}} \Phi_{\alpha\alpha'}(l,\kappa;l',\kappa') \exp(i\vec{q}(\vec{R}(l,\kappa) - \vec{R}(l',\kappa')))$$

Es gibt nun gewisse Relationen, die aus diesen Definitionen folgen, nämlich $Q(-\vec{q}, \lambda) = Q^*(\vec{q}, \lambda)$ und $\vec{e}_\alpha(\kappa | -\vec{q}, \lambda) = \vec{e}_\alpha^*(\kappa | \vec{q}, \lambda)$.

$$\sum_{\kappa, \alpha} \vec{e}_\alpha^*(\kappa | \vec{q}, \lambda) \vec{e}_\alpha(\kappa | \vec{q}, \lambda') = \delta_{\lambda\lambda'}$$

Wir führen nun die Quantisierung durch: $u, p \mapsto$ Operatoren mit $[u_\alpha(l, \kappa), p_{\alpha'}(l', \kappa')] = i\hbar\delta_{ll'}\delta_{\kappa\kappa'}\delta_{\alpha\alpha'}$. Damit erfüllen auch die Operatoren P und Q entsprechende Vertauschungsrelationen:

$$[P(\vec{q}, \lambda), Q(\vec{q}', \lambda')] = i\hbar\delta_{qq'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

Einführen von Phononen-Operatoren:

$$Q(\vec{q}, \lambda) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{q}}}}(b_{\vec{q}, \lambda} + b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger)$$

$$P(\vec{q}, \lambda) = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{2}}(b_{\vec{q}, \lambda} - b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger) \text{ mit } [b_{\vec{q}, \lambda}, b_{\vec{q}', \lambda'}^\dagger] = \delta_{qq'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

Einsetzen in H_0 :

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{q}, \lambda} \hbar\omega_{\vec{q}, \lambda} \left(b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger b_{\vec{q}, \lambda} + \frac{1}{2} \right)$$

Die niedrigsten anharmonischen Terme rühren von $\frac{\partial^3 V}{\partial u^3}$ her.

$$\hat{H}_3 = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sum_{\lambda} M_3(\vec{k}, \vec{q}) \left(b_{\vec{q}+\vec{k}, \lambda}^\dagger b_{\vec{q}, \lambda} b_{\vec{k}, \lambda} + b_{\vec{k}, \lambda}^\dagger b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger b_{\vec{q}+\vec{k}, \lambda} \right)$$

2.2 Greensche Funktion für Phononen und Dyson-Gleichung

Man könnte eine GREENSche Funktion für die b definieren:

$$G_b(z) = \langle \langle b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger, b_{\vec{q}, \lambda} \rangle \rangle \text{ mit } G_{b_0}(z, \vec{q}, \lambda) = \frac{1}{z - \omega_{\vec{q}, \lambda}}$$

Diese beschreibt ein einziges propagierendes Phonon. Aber in (fast) allen Situationen ist die Atom-Auslenkung (BORN-OPPENHEIMER-Näherung) entscheidend. Deswegen definieren wir eine GREENSche Funktion G_F für die Operation $\phi_{\vec{q}, \lambda} = b_{\vec{q}, \lambda} + b_{-\vec{q}, \lambda}^\dagger$.

$$D_{\lambda\lambda'}(\vec{q}, \tau) = -\langle T_\tau \phi_{\vec{q}, \lambda}(\tau) \phi_{\vec{q}, \lambda'}^\dagger \rangle \quad (\phi_{\vec{q}, \lambda}^\dagger = \phi_{-\vec{q}, \lambda})$$

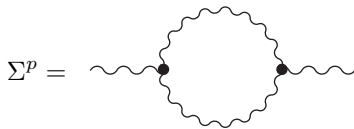
Es gilt $\langle bb \rangle = 0$ und $\langle b^\dagger b^\dagger \rangle = 0$. Mit $H_0 = \sum_{\vec{q}, \lambda} \omega_{\vec{q}, \lambda} b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger b_{\vec{q}, \lambda}$ folgt:

$$D_{\lambda\lambda'}^{(0)}(\vec{q}, \tau) = \delta_{\lambda\lambda'} \left(\frac{1}{z - \omega_{\vec{q}}} - \frac{1}{z + \omega_{\vec{q}}} \right) = \delta_{\lambda\lambda'} \frac{2\omega_{\vec{q}, \lambda}}{z^2 - \omega_{\vec{q}, \lambda}^2}$$

Der erste Summand korrespondiert mit der Erzeugung eines Phonons der Energie $\omega_{\vec{q}}$ (Vorwärtspropagation) und der zweite Summand mit der Vernichtung eines Phonons der Energie $\omega_{\vec{q}}$ (Rückwärtspropagation). Diagrammatisch stellen wir D als Wellenlinie mit den Indizes ω , q und λ dar. Sie besitzt keine Richtung, da Vorwärts- und Rückwärts-Propagation enthalten ist. Um die Energie- und Impulserhaltung richtig zu berücksichtigen, muss man der Linie eine beliebige Richtung zuweisen. Nun erhalten wir mit Phonon-Wechselwirkung eine Phonon-Selbstenergie Σ^P , welche die DYSON-Gleichung erfüllt:

$$D(\vec{q}, \omega) = \frac{D^{(0)}(\vec{q}, \omega)}{1 - D^{(0)}(\vec{q}, \omega)\Sigma^P(\vec{q}, \omega)}$$

Entwickelt man den Nenner, so enthält dieser alle Ordnungen Störungstheorie. Beispielsweise mit H_3 :



Die DYSON-Gleichung soll diagrammatisch folgende Form haben:

$$\text{~~~~~} \underset{D}{=} \text{~~~~~} \underset{D^{(0)}}{=} + \text{~~~~~} \text{(\Sigma^p)} \text{~~~~~}$$

$$D_\lambda(q, z) = \frac{D_\lambda^{(0)}(q, z)}{1 - D_\lambda^{(0)}(q, z)\Sigma_\lambda^p(q, z)} = \frac{2\omega_{q,\lambda}}{z^2 - \omega_{q,\lambda}^2 - 2\omega_{q,\lambda}\Sigma_\lambda^p(q, z)}$$

2.3 Elektron-Phonon-Wechselwirkung

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i,l} U(\vec{x}_i - \vec{X}_l) + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} + \sum_l \frac{p_l^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{m \neq l} V_{ion}(\vec{x}_m - \vec{x}_l)$$

Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung beschreiben wir durch die Differenz zwischen Auslenkung und Ruhelage:

$$\sum_{i,l} U(\vec{x}_i - \vec{X}_l) - U(\vec{x}_i - \vec{R}_l)$$

Dies wollen wir entwickeln:

$$H_{\text{ep}} = \sum_{i,l,\alpha} \left. \frac{\partial U(\vec{x}_i - \vec{X}_l)}{\partial u_{l\alpha}} \right|_{u=0} u_{l\alpha} + \dots = - \sum_{i,l} \vec{\nabla}_i U(\vec{x}_i - \vec{R}_l) \cdot \vec{u}_l$$

$$\hat{H}_{\text{ep}} = - \sum_{l,\sigma} \int d^3x \psi_\sigma^\dagger(x) \vec{\nabla} U(\vec{x} - \vec{R}_l) \vec{u}_l \psi_\sigma(x)$$

Wir machen nun die Übergänge $\psi_\sigma(x) \mapsto c_{k,\sigma}$ und $u_l \mapsto \varphi_{q,\lambda}$, was eine Entwicklung in BLOCH-Funktionen darstellt. Wir erhalten dann nach einiger Rechnung:

$$\hat{H}_{\text{ep}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,q,\lambda} M_{k,q,\lambda} \varphi_{q,\lambda} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}$$

Bemerkung: Die Teilchendichte ist gegeben durch:

$$n_i = \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$$

Durch FOURIER-Transformation folgt:

$$n_q = \sum_i \exp(iqR_i) n_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,\sigma} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \neq c_{q,\sigma}^\dagger c_{q,\sigma} \text{ (Achtung!)}$$

Da man in der Festkörperphysik nur Quasiimpulse hat, sind diese nur bis auf einen reziproken Gittervektor erhalten. Sonst gäbe es nämlich auch keine Relaxation. Umklapp-Prozesse der Form $\varphi_q c_{k',\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}$ mit $k' - k - q = G \neq 0$, wobei G ein reziproker Gittervektor ist, können wichtig sein. Formel:

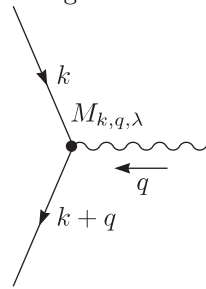
$$\sum_l \exp(iqR_l) \exp(i(k' - k)R_l) = N \Delta(q - k' + k)$$

Es ist $\Delta(q - k' + j) = 1$ für $q - k' - k = G$. Für das Matrixelement gilt:

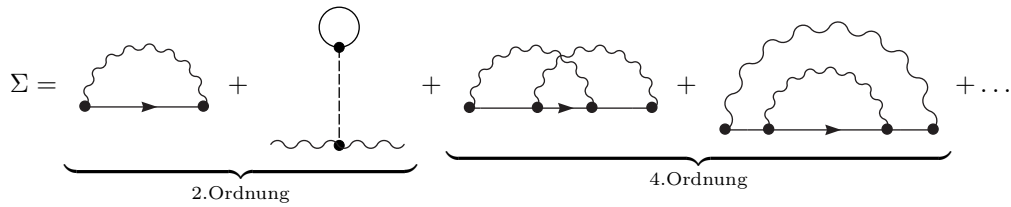
$$M_{k,q,\lambda} \sim \frac{1}{\sqrt{\omega_{q,\lambda}}}$$

2.3.1 Störungstheorie für Elektron-Phonon-Wechselwirkung

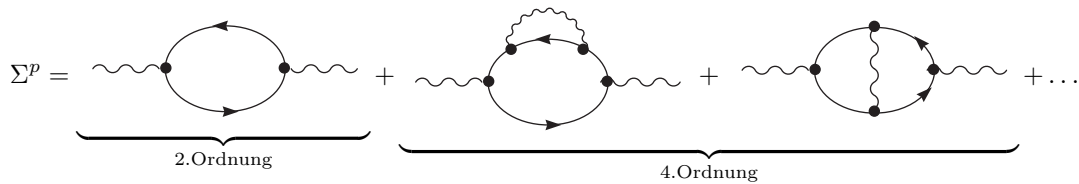
Wir gehen aus von folgendem Diagramm:



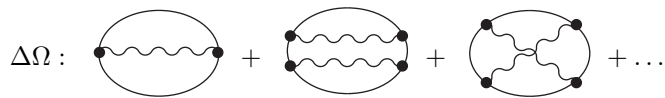
Betrachten wir nun Korrekturen zur elektronischen GREENSchen Funktion:



Kommen wir außerdem zu Korrekturen zur Phonon-GREENfunktion D :



Außerdem können wir Korrekturen zum thermodynamischen Potential ausrechnen. Dies sind geschlossene Diagramme:



Die akustischen Phononen sind eine Folge der gebrochenen Translationssymmetrie (siehe GOLDSTONE-Theorem). Daraus folgt die lineare Dispersionsrelation für kleine Frequenzen.

Kapitel 3

Fermi-Flüssigkeit, Potentialstreuung, Random-Phase-Approximation (RPA)

3.1 Fermi-Flüssigkeit

Dies ist eine phänomenologischen Theorie für ein System wechselwirkender Fermionen mit der Annahme, dass niederenergetische Anregungen die gleiche Struktur (Quantenzahlen, Ladung e , Spin $1/2$, Impuls k , Masse m^*) wie im FERMIGAS haben. Beste experimentelle Realisierung ist ^3He (neutral!).

3.1.1 Einteilchen-Greenfunktion

Wir gehen aus von der Definition $G(k, \tau) = -\langle T_\tau c_{k,\sigma}(\tau) c_{k,\sigma}^\dagger(0) \rangle$.

$$G(k, z) = \frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma} = \frac{1}{z - \varepsilon_0 - \Sigma(k, z)}$$

Wir haben ein Elektronensystem mit Wechselwirkung:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}$$

Wir hatten wir Spektraldichte folgendermaßen definiert:

$$\rho(k, \omega) = \text{Im}(G^R) = \frac{\text{Im}\Sigma^R(k, \omega)}{(\omega - \varepsilon_k - \text{Re}(\Sigma^R(k, \omega)))^2 + (\text{Im}(\Sigma^R(k, \omega)))^2}$$

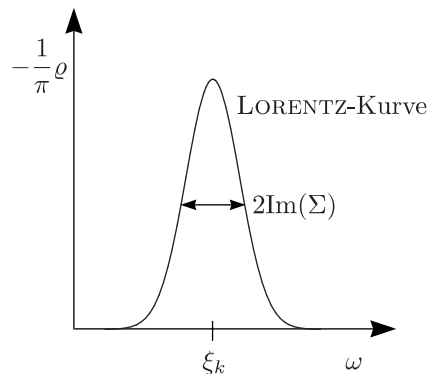
Für ein FERMIGAS ist $\Sigma = 0$ und damit $\rho(k, \omega) = -\pi\delta(\omega - \varepsilon_k)$. Schalten wir nun die Wechselwirkung ein. Falls $\text{Im}(\Sigma) \ll \varepsilon_k$ ist, dann gilt $\rho(k, \omega) = -\pi Z(k)\delta(\omega - \xi_k)$, wobei $Z(k)$ ein Renormierungsfaktor und ξ_k die renormierte Energie des Quasiteilchens ist, wobei $\xi_k = \varepsilon_k - \text{Re}(\Sigma^R(k, \xi_k))$. (Dies ist eine transzendente Gleichung.)

$$z(k) = \left(1 - \frac{\partial \Sigma^R(k, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\xi_k} \right)^{-1}$$

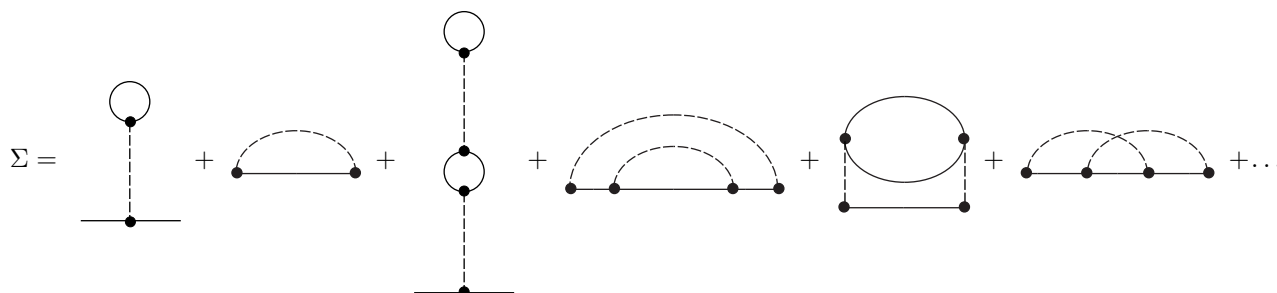
Man bezeichnet $Z(k)$ auch als Quasiteilchen-Gewicht (oder auch Polgewicht). Die δ -Funktion ist also verschoben und in ihrer Stärke modifiziert. Wir können ξ_k in der Nähe der FERMIGAS-Kante entwickeln:

$$\xi_k = v_F^*(k - k_F) + \sigma((k - k_F)^2) \quad \text{mit} \quad v_F^* = \frac{k_F}{m^*}$$

v_F^* ist die renormierte FERMIGAS-Geschwindigkeit. Dies ist der einzige Weg, die effektive Masse sauber zu definieren. $\text{Im}(\Sigma)$ entspricht einer Lebensdauer-Verbreiterung, also einer Dämpfung des Quasiteilchens (falls $\text{Im}(\Sigma^R)$ klein ist).

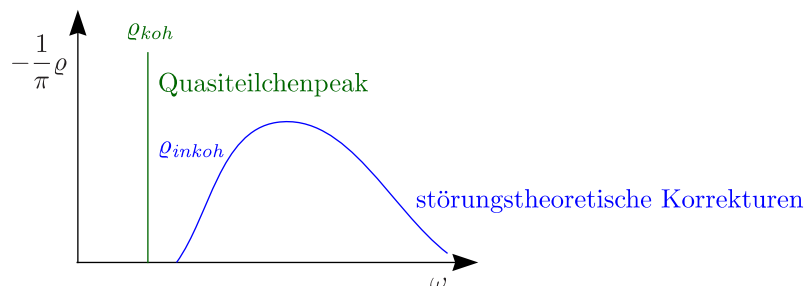


Diagrammatisch ergibt sich mit Elektron-Elektron-Wechselwirkung:

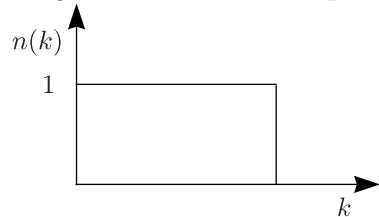


Das fünfte Diagramm ist das erste, das $\text{Im}(\Sigma)$ produziert. Allgemein gilt:

$$\varrho(k, \omega) = \varrho_{koh}(k, \omega) + \varrho_{inkoh}(k, \omega) = -\pi z(k)\delta(\omega - \xi_k) + \varrho_{inkoh}(k, \omega)$$

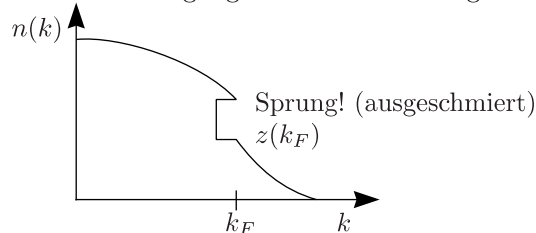


$\varrho(k, \omega)$ setzt sich also aus einem kohärenten und einem inkohärenten Anteil zusammen. Aus der Summenregel folgt $0 \leq z(k) \leq 1$. Die Impulsverteilung ist gegeben durch $n(k) = \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle$, was bei $T = 0$ ohne Wechselwirkung eine HEAVISIDESCHE Sprungfunktion ist: $n(k) = \theta(k_j - |k|)$.



$$n(k) = \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \varrho(k, \omega) n_F(\omega)$$

Mit Berücksichtigung der Wechselwirkung sieht dies bei $T = 0$ folgendermaßen aus:

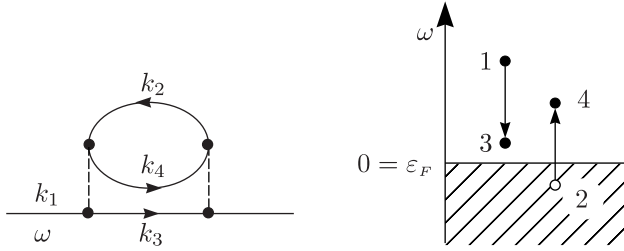


Maß für z an der FERMIKANTE

Signatur von FERMIFLÜSSIGKEITEN

3.1.2 Die Fermi-Flüssigkeitstheorie in der Nähe der Fermikante

$\text{Im}\Sigma^R$ ist ein Maß für die Lebensdauer/Streureate. Die niedrigste Ordnung für $\text{Im}(z)$ ist gegeben durch:



Der erste Vertex beschreibt einen Zerfallsprozess. Phasenraumabschätzung:

$$\text{Im}(\Sigma) \underset{\substack{\sim \\ \text{Energieerhaltung} \\ (E_3 < E_1)}}{\sim} \int_0^{E_1} dE_3 \int_0^{E_1 - E_3} dE_4 \text{Matrizelement} \sim E_1^2$$

Das heißt, dass in der Nähe der FERMIKante die Streureate verschwindet. An der FERMIKante ist also die Näherung exakt. Damit gilt bei $T = 0$:

$$\text{Im}(\Sigma(k, \omega)) \sim \omega^2 \sim (k - k_F)^2 \ll v_F(k - k_F) \text{ mit } E_{kin}(k_F) = v_F k$$

Damit ist die Anfangsannahme gerechtfertigt. Nahe der FERMIKante existieren wohldefinierte Quasiteilchen, deren Lebensdauer viel größer als eine Oszillation ist.

3.1.3 Konsequenzen des Fermi-Flüssigkeitsmodells

Die Hypothese ist, dass Streutheorie erster Ordnung möglich ist. (In drei Dimensionen ist dies oft möglich.)

- i.) Quasiteilchen mit Quantenzahlen der „nackten“, nicht wechselwirkenden Elektronen mit FERMI-Statistik (Ladung e , Spin $1/2$, Impuls k) mit renormierten Parametern (Masse, Geschwindigkeit, ...)
- ii.) Quasiteilchenenergie:

$$\varepsilon_k^* = v_F(k - k_F) + \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} f(k, k') \delta_{n(k')} \text{ mit } k^* = \frac{k_F}{v_F^*}$$

$\delta_n(k')$ ist die Abweichung der Impulsverteilung vom Grundzustand und $f(k, k')$ die LANDAU-Wechselwirkungsfunktion (Korrekturen).

Postulat: Es gibt Quasiteilchen, die sich wie Fermionen verhalten. Die Schwierigkeit wird umgangen, wie diese Quasiteilchen konkret aussehen. Für die Hochenergiephysik ($O(\varepsilon_F)$) ist dies jedoch nutzlos! Wir haben uns um die Schwierigkeit, wie der Grundzustand konkret aussieht, herumgedrückt. F_0^s (Spin symmetrisch), F_0^a (Spin antisymmetrisch), F_1^a, F_1^s , Entwicklung in sphärische Harmonische

- iii.) Für die Quasiteilchen-Lebensdauer $\tau(\omega)$ gilt $\frac{1}{\tau(\omega)} \sim \omega^2 \ll \omega$. Das Teilchen oszilliert stark, bis es zerfällt.
- iv.) Die FERMIfläche wird durch die Wechselwirkung deformiert. Das Volumen, das durch sie eingeschlossen wird, wird jedoch nicht durch die Wechselwirkung beeinflusst! (LUTTINGER-Theorem) Dieses Theorem ist mathematisch sauber beweisbar. Für isotrope Dispersion gilt:

$$n = \frac{N}{V} = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4}{3} \pi k_F^3$$

In drei Dimensionen ist die nichtdeformierte FERMIfläche eine Kugel. (Die Anzahl der Teilchen ist gleich der Anzahl der Quasiteilchen.)

- v.) Die Zustandsdichte an der FERMIKante ist gegeben durch $\mathcal{N}_F = \frac{m^* k_F}{\pi^2}$. Damit ergibt sich für die Wärmekapazität:

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} \mathcal{N}_F T \Rightarrow \frac{C_V}{T} = \gamma \sim m^*$$

Beispielsweise kann $\frac{m}{m^*}$ Werte im Bereich von 1000 annehmen. Damit funktioniert die LANDAU-Theorie. Die Suszeptibilität ist gegeben durch:

$$\chi = \mu_M^2 \mathcal{N}_F \frac{1}{1 + F_0^a}$$

μ_M ist das magnetische Moment, \mathcal{N}_F die Zustandsdichte freier Elektronen und $\frac{1}{1+F_0^a}$ eine Korrektur. F_0^a ist ein Zwei-Teilchen-Parameter (Ausmessen der LANDAU-Parameter). Aus $\chi > 0$ folgt $F_0^a > -1$. $F_0^a \mapsto -1$ entspricht der ferromagnetischen Instabilität und die Divergenz von χ entspricht der magnetischen Instabilität. Die Kompressibilität ist nun gegeben durch:

$$\kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} = \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial \mu} \text{ mit } \frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{1}{1 + F_0^s} \mathcal{N}_F \text{ wobei } \mathcal{N}_F = \mathcal{N}(\varepsilon_F)$$

Ist der LANDAU-Parameter < 0 so folgt daraus eine Anziehung (Energieabsenkung). Beispielsweise entspricht $F_0^s \mapsto -1$ einer Phasenseparation (zum Beispiel VAN-DER-WAALS). Gleiche Spins ziehen sich an (Ferromagnet).

3.2 Störstellen-Potentialstreuung

Jeder Festkörper hat Störstellen mit den Folgen:

- * Translationsinvarianz gebrochen
- * Streuung von Quasiteilchen an Störstellen
- * Metalle haben Restwiderstand bei $T = 0$

Wir betrachten ein freies Elektronengas. Vereinfachung durch:

- * Störstellenkonzentration klein
- * Streuung an Störstellen ist ein Einteilchen-Effekt (im Gegensatz zur COULOMB-Wechselwirkung (Elektron-Elektron-Streuung))
- * Störstellen haben keine (interne) Dynamik (im Gegensatz zu Phononen).

Der HAMILTONoperator ist gegeben durch:

$$H = H_0 + H_I \text{ mit } H_0 = \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}$$

$$H_I = \sum_i \int d^3r V(\vec{r} - \vec{R}_i) \varrho(\vec{r}) = \sum_i \int d^3r V(r - R_i) c_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) c_{\sigma}(\vec{r}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \varrho_I(q) V(-\vec{q}) \varrho(-\vec{q})$$

$$\text{mit } \varrho(\vec{q}) = \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} c_{k+q\sigma} c_{k\sigma}$$

\vec{R}_i bezeichnet die Störstellenposition und ϱ_I die Störstellendichte. Die Translationssymmetrie ist gebrochen außer für eine regelmäßige Anordnung der Störstellen.

$$\varrho_I(\vec{q}) = \sum_i \exp(i\vec{q} \cdot \vec{R}_i)$$

Dies ist der Formfaktor der Störstellen. Diagrammatisch:

$$G = \longrightarrow + \begin{array}{c} \times \\ | \\ \text{---} \\ \bullet \\ \text{---} \\ k \quad k' \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \bullet \quad \bullet \\ k \quad q_1 \quad k' \end{array} + \begin{array}{c} \times \quad \times \\ | \quad | \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \bullet \quad \bullet \\ k \quad k' \end{array} + \dots$$

Der dritte Term beschreibt eine zweifache Streuung an einer Störstelle.

3.3 Eine Störstelle

Siehe Streutheorie (in Theorie E):

$$\psi_k(\vec{r}) = \psi_k^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3r' G_0(k, \vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}')$$

$$G_0(k, r) = \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{\exp(-ik'(\vec{r} - \vec{r}'))}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + i\delta} \sim \frac{\exp(ik|\vec{r}|)}{r}$$

Im allgemeinen Fall wird die GREENSche Funktion nicht mehr diagonal sein, also von k und k' abhängen. Diagrammatisch:

$$G_{kk'}(z) = \longrightarrow \delta(k - k') + \begin{array}{c} \times \\ | \\ \bullet \\ \longrightarrow \\ k \quad k' \end{array} V(k - k') + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ \bullet \quad \bullet \\ \longrightarrow \\ k \quad q_1 \quad k' \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \longrightarrow \\ k \quad q_1 \quad q_2 \quad k' \end{array} + \begin{array}{c} \times \quad \times \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ \longrightarrow \\ k \quad k' \end{array} + \dots =$$

$$= \longrightarrow \delta(k - k') + \begin{array}{c} \times \\ | \\ \bullet \\ \longrightarrow \\ k \quad k' \end{array} V(k - k') + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ \bullet \quad \blacktriangle \\ \longrightarrow \\ k \quad k' \end{array} + \dots$$

Das letzte Diagramm soll alle restlichen Diagramme beinhalten.

$$T_{kk'}(z) = \begin{array}{c} \times \\ | \\ \bullet \\ \longrightarrow \\ k \quad k' \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ \bullet \quad \blacktriangle \\ \longrightarrow \\ k \quad q \quad k' \end{array} = V(\vec{k} - \vec{k}') + \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} V(\vec{k} - \vec{q}) G_{0,q}(z) T_{qk'}(z)$$

Lösbar ist diese Integralgleichung beispielsweise für einen punktförmigen Streuer mit $V(\vec{r}) = V\delta(\vec{r})$ und $V(\vec{k}) = V_0$. Hieraus folgt:

$$T_{kk'}(z) = V_0 + V_0 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} G_{0,q}(z) T_{qk'}(z)$$

Offensichtlich ist T impulsunabhängig. Wenn wir nun alle Impulsindizes weglassen, hängt T nur noch von der Frequenz ab:

$$T(z) = V_0 \left[1 + T(z) \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} G_{0,q}(z) \right] = V_0 [1 + T(z)G(z, R=0)]$$

$G(z, R=0)$ ist die lokale GREENSche Funktion. Wir haben jetzt eine algebraische Gleichung für $T(z)$, welche wir auflösen können:

$$T(z) = \frac{V_0}{1 - V_0 G(z, R=0)}$$

Wenn die T -Matrix rein lokal ist (nicht vom Impuls abhängt) können wir die Diagramme im Ortsraum auswerten, wobei $G_0(0,0) = G(R=0)$ (lokale GREENfunktion) ist:

$$G(x_1, x_2, z) = \begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \longrightarrow \\ \bullet \\ 0 \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ | \\ \bullet \\ \longrightarrow \\ 0 \quad 2 \end{array} V(k - k') + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ \bullet \quad \bullet \\ \longrightarrow \\ 0 \quad 0 \quad 2 \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ / \quad \backslash \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \longrightarrow \\ 0 \quad 0 \quad 0 \quad 2 \end{array} + \dots =$$

$$= G_0(x_1, x_2) + G_0(x_1, 0) V G_0(0, x_2) + G_0(x_1, 0) V G_0(0, 0) V G_0(0, x_2) + \dots =$$

$$= G_0(x_1, x_2) + G_0(x, 0) T G_0(0, x_2)$$

mit $T = V + V G_0(R=0) V + V G_0(R=0) V G_0(R=0) V + \dots = \frac{V}{1 - V G_0(R=0)}$

3.4 Viele Störstellen

Dieses Problem lässt sich mikroskopisch nun nicht mehr exakt lösen. Für makroskopische Observable muss über Störstellenkonfigurationen geeignet gemittelt werden. Damit wird Translationsinvarianz wiederhergestellt. In der Störungsreihe treten Terme der Form $\varrho_I(q_1)\varrho_I(q_2)\dots\varrho_I(q_n)$ auf. Nach Mittelung erhält man:

$$f(q_1, \dots, q_n) = \overline{\varrho_I(q_1) \dots \varrho_I(q_n)}$$

Wir nehmen an, dass die Störstellenverteilung homogen ist.

$$\overline{\varrho_I(q)} = \sum_i \overline{\exp(iqR_i)} = N_I \delta(q)$$

Weiter:

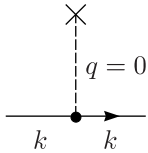
$$\sum_{i,j} \overline{\exp(i[q_1 R_i + q_2 R_j])} = \sum_i \overline{\exp(i(q_1 + q_2)R_i)} + \sum_{i \neq j} \overline{\exp(iq_1 R_i) \exp(iq_2 R_j)} \simeq N_I \delta(q_1 + q_2) + N_I(N_I - 1) \delta(q_1) \delta(q_2)$$

In der ersten Näherung führen wir die Mittelung getrennt durch. Wir vernachlässigen hier eine bestimmte Art von Interferenzprozessen. Wenn die Unordnung jedoch deltakorreliert ist (Störstellen existieren unabhängig voneinander), gilt das Gleichheitszeichen. Allgemein:

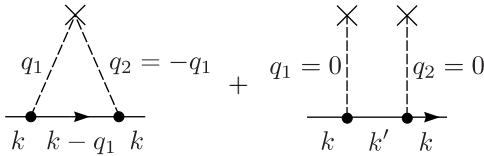
$$f(q_1, \dots, q_n) = N_I \delta\left(\sum q\right) + \underbrace{N_I(N_I - 1)}_{\simeq N_I^2} \delta\left(\sum q\right) \delta\left(\sum q\right) + \underbrace{N_I(N_I - 1)(N_I - 2)}_{\simeq N_I^3} \delta\left(\sum q\right) \delta\left(\sum q\right) \delta\left(\sum q\right)$$

Diagrammatisch:

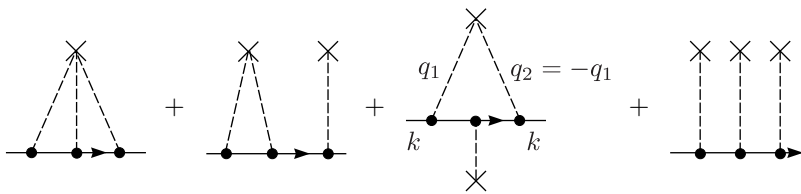
* $n = 1$:



* $n = 2$:



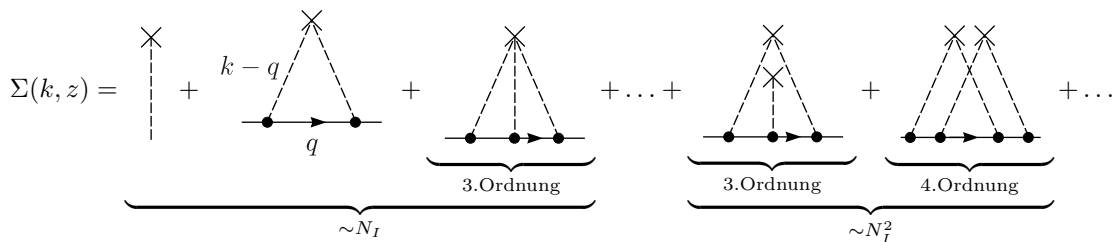
* $n = 3$:



3.4.1 Korrekturen zur Einteilchen-Greenfunktion

Translationsinvarianz $\mapsto \Sigma(k, z)$, DYSON-Gleichung

Σ enthält irreduzible Diagramme:



Die Diagramme $\sim N_I^2$ sind häufig vernachlässigbar.

* 1.Term: Das Teilchen wird nur einmal an der Störstelle gestreut.

$$\Sigma^{(1)}(k, z) = \frac{N_I}{N} \sum_q \delta_{q=0} V(-q) = c_I V(0) \text{ mit } c_I = \frac{N_I}{N}$$

$V(0)$ ist das räumlich gemittelte Potential einer Störstelle. Σ ist hier einfach nur eine konstante Energieverschiebung ($\Sigma^{(1)R} \in \mathbb{R}$).

* 2.Term:

$$\Sigma^{(2)}(k, z) = \frac{N_I}{N^2} \sum_{q_1, q_2} \delta_{q_1+q_2=0} V(-q_1) V(-q_2) G(k+q_1, z) = c_I \frac{1}{N} \sum_q V(k-q) V(q-k) G(q, z) \text{ mit } k+q_1 = q$$

Hieraus folgt:

$$\text{Im}(\Sigma^{(2)R}(k, \omega)) = c_I \frac{1}{N} \sum_q |V(k-q)|^2 \text{Im}(G(q, \omega))$$

Wenn wir jetzt hier $V(q) = V_0$ nähern, so folgt:

$$c_I V_0^2 (-\pi N(\omega)) \text{ mit } -\pi N(\omega) = \text{Im}G^R(R=0, \omega)$$

N ist die Zustandsdichte. $\Sigma^{(2)}$ führt zu einer **endlichen** Lebensdauer. Aufsummation aller Diagramme linear in N_I (bzw. c_I):

$$\Sigma(k, z) = c_I T_{kk}(z)$$

Hier taucht der impulsdiagonale Anteil der T -Matrix auf, den wir für einen punktförmigen Streuer exakt berechnen können, wie wir festgestellt haben. Man kann jetzt eine Lebensdauer einführen:

$$\frac{1}{\tau_k} =: \text{Im}\Sigma^R(k, \omega=0) \text{ mit } \tau_k \sim \frac{1}{c_I} \xrightarrow{c_I \rightarrow 0} \infty$$

$$\overline{\varrho_I(q_1) \dots \varrho_I(q_n)}$$

ϱ_I sind die Formfaktoren der Störstellen. Man mittelt über alle möglichen Positionen mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion (und zwar unabhängig über alle möglichen Störstellen):

$$\int dR_k w(R_k)$$

* $n = 1$:

$$\overline{\sum_i \exp(iqR_i)} = N_I \delta(q)$$

* $n = 2$:

$$\overline{\sum_{i,j} \exp(iq_1 R_i) \exp(iq_2 R_j)} = \sum_i \exp(i(q_1 + q_2) R_i) + \sum_{i \neq j} \exp(iq_1 R_i) \exp(iq_2 R_j)$$

Das ist also exakt unter der Annahme, dass die Störstellen unkorreliert sind.

3.5 Störstellenleitfähigkeit

Wir definieren eine Strom-Strom-Korrelationsfunktion (Suszeptibilität):

$$\Pi_{\alpha\beta}(\tau) = -\langle T_\tau j_\alpha(\tau) j_\beta(0) \rangle$$

Daraus erhalten wir die Leitfähigkeit:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\text{Im}_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Im}\Pi_{\alpha\beta}^R(\omega)}{\omega}$$

Hierbei ist j der Stromoperator. Diesen definieren wir sinnvollerweise durch:

$$\vec{j} = -e \sum_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \vec{v}_k \text{ mit } \vec{v}_k = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \varepsilon_k$$

Diagrammatisch:

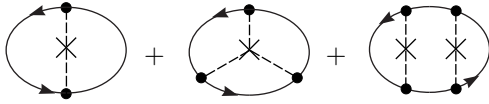
$$\Pi^{(0)}(i\nu_n) : \text{Diagramm mit einem Kreis, der oben links mit } i\nu_n \text{ beschriftet ist, oben rechts mit } i\omega_n, \text{ unten rechts mit } i\omega_n + i\nu_n \text{ und unten links mit } k \text{ beschriftet ist. Die Kreismitte ist mit } v_k \text{ beschriftet.} \Rightarrow \sigma = \infty$$

Korrekturen durch Unordnung haben keinen Effekt.

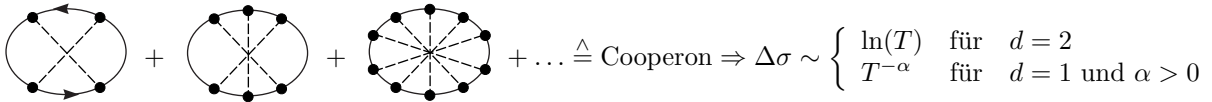
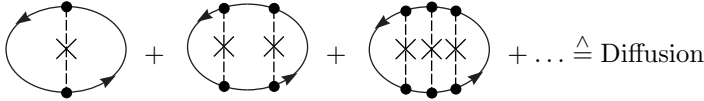
$$: \sigma = \frac{2\pi e^2}{3} \sum_k \frac{|v_k|^2 \tau_k^{-2}}{\pi^2 (\xi_k^2 + \tau_k^{-2})} = \frac{e^2}{3} |v_{k_F}|^2 \tau_{k_F} N(0) = \frac{n_e e^2}{m} \tau_{k_F}$$

$$\xi_k = \varepsilon_k + \text{Re}\Sigma^R(k, \omega = 0)$$

Dies ist das bekannte Ergebnis von DRUDE. Dieselbe Störstelle koppelt an zwei Propagatoren. Man bezeichnet dies als Vertexkorrektur. Diese kann man nicht mehr erfassen durch renormierte Propagatoren.



Diese Vertexkorrekturen sind wichtig für $d \leq 2$! Speziell gibt es folgende Diagramme:



Diese Prozesse machen ungeordnete Metalle in einer und zwei Dimensionen zum Isolator (schwache Lokalisierung) für $T \mapsto 0$, weil dann die Korrekturen divergieren! In $d = 3$ führen die Diagramme zu quantitativen Korrekturen, jedoch zu keinen qualitativen Effekten.

3.6 Dynamische Dichte-Suszeptibilität

Wir führen eine geeignete Korrelationsfunktion, nämlich die Dichte-Dichte-Suszeptibilität, ein:

$$\chi_{qq'}(\tau) = -\langle T_\tau n(q, \tau) n^\dagger(q', 0) \rangle \text{ mit } n(q) = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} c_{k+q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \text{ mit } n^\dagger(q) = n(-q)$$

Bei Inversionssymmetrie gilt $n^\dagger(q) = n(-q)$. Antwort auf Störung:

$$H_S(t) = - \sum_i V_s(i, t) n_i$$

Änderung der lokalen Dichte:

$$\delta\langle n(q) \rangle_t = \sum_{q'} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{qq'}(t-t') V_S(q', t')$$

Aufgrund der Translationsinvarianz muss $\chi_{qq'} \sim \delta_{q, q'+G}$ gelten. Der Quasiimpuls ist nämlich erhalten (\pm reziproker Gittervektor, Umklappprozesse). Damit folgt die dynamische Suszeptibilität für das Elektronengas:

a.) Bewegungsgleichung:

$$\chi_{qq'}(z) = \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} \langle\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k+q,\sigma}; c_{k'-q',\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle\rangle_z$$

$$z \langle\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k+q,\sigma}; c_{k'-q',\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle\rangle + \langle\langle \mathcal{L}(c_{k\sigma}^\dagger); c_{k'-q',\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle\rangle_z = \langle\langle [c_{k\sigma}^\dagger c_{k-q,\sigma}, c_{k'-q',\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'}] \rangle\rangle_z$$

\mathcal{L} ist der LIOUVILLE-Operator.

$$\mathcal{L}(c_{k\sigma}^\dagger c_{k-q,\sigma}) = (\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}) c_{k\sigma}^\dagger c_{k-q,\sigma}$$

Weiterhin berechnen wir den obigen Kommutator:

$$[c_{k\sigma}^\dagger c_{k-q,\sigma}, c_{k'-q',\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'}] = \delta_{\sigma\sigma'} (\delta_{k-q, k'-q'} c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'} - \delta_{kk'} c_{k'-q',\sigma'}^\dagger c_{k-q,\sigma})$$

Weiterhin gilt $\langle\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle\rangle = \delta_{kk'} n_F(\varepsilon_k)$. Daraus folgt:

$$(z + \varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}) \langle\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k-q,\sigma}; c_{k'-q',\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle\rangle_z = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} (n_F(\varepsilon_k) - n_F(\varepsilon_{k-q}))$$

$$\boxed{\chi_{qq'}^{(0)}(z) = \delta_{qq'} \frac{2}{N} \sum_k \frac{n_F(\varepsilon_{k-q}) - n_F(\varepsilon_k)}{z + \varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}}}$$

b.) Diagrammatisch:

$$\chi_{qq}(i\nu_n) = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \frac{1}{N\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_{k,\sigma} G_\sigma^{(0)}(k, i\nu_n) G_0^{(0)}(k-q, i\nu_n - i\nu_n)$$

Wir haben nun noch die MATSUBARA-Summen auszuwerten:

$$G^{(0)}(k, i\nu_n) = \frac{1}{i\nu_n - \varepsilon_k}$$

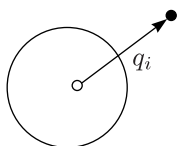
Damit folgt:

$$\chi_{qq}(i\nu_n) = \frac{2}{N} \sum_k \frac{n_F(\varepsilon_k)}{\varepsilon_k - i\nu_n - \varepsilon_{k-q}} + \frac{n_F(\varepsilon_{k-q} + i\nu_n)}{\varepsilon_{k-q} + i\nu_n - \varepsilon_k} = \frac{2}{N} \sum_k \frac{n_F(\varepsilon_k - q) - n_F(\varepsilon_k)}{i\nu_n - \varepsilon_k + \varepsilon_{k-q}}$$

c.) Imaginärteil:

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im}(\chi_{qq}^{(0)R}(\omega)) = \frac{2}{N} \sum_k [n_F(\varepsilon_{k+q}) - n_F(\varepsilon_k)] \delta(\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k-q})$$

Wir wollen uns nun auf den Fall $T = 0$ spezialisieren.



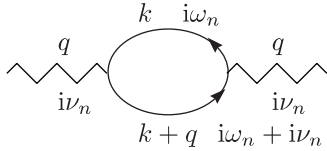
Diese Funktion misst, mit welcher Intensität man eine Teilchen-Loch-Anregung machen kann mit Gesamtenergie ω und Gesamtimpuls q .

$$n_q = \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k+q\sigma} = n_{-q}^\dagger$$

$$\chi_{qq}(z) = -\langle\langle n_q; n_q^\dagger \rangle\rangle(z)$$

Wir definieren $\Pi_{qq}(z) = \langle\langle n_q; n_q^\dagger \rangle\rangle(z)$, wobei $\Pi_{qq}(\tau) = -\langle T_\tau n_q(\tau) n_q^\dagger(0) \rangle$.

$$\chi_{qq}^{(0)}(z) = \delta_{qq'} \frac{2}{N} \sum_k \frac{n_F(\varepsilon_{k+q}) - n_F(\varepsilon_k)}{z + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}$$



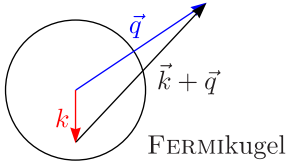
Mit $G^{(0)}(k, z) = 1/(z - \varepsilon_k)$ folgt:

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(q, i\nu_n) &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} G^{(0)}(k, i\omega_n) G^{(0)}(k+q, i\omega_n + i\nu_n) = \frac{2}{N} \sum_k \left(\frac{n_F(\varepsilon_k)}{\varepsilon_k + i\nu_n - \varepsilon_{k+q}} + \frac{n_F(\varepsilon_{k+q} - i\omega_n)}{\varepsilon_{k+q} - i\omega_n - \varepsilon_k} \right) = \\ &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{n_F(\varepsilon_k) - n_F(\varepsilon_{k+q})}{i\omega_n + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}} = -\chi_{qq}^{(0)}(i\omega_n) \end{aligned}$$

Imaginärteil $\chi_q''(\omega)$ bei $T = 0$:

$$\chi_q''^{(0)}(\omega) = -\frac{2\pi}{N} \sum_k (n_F(\varepsilon_{k+q}) - n_F(\varepsilon_k)) \delta(\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q})$$

Aufgrund der δ -Funktion ist $\omega = \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k$.



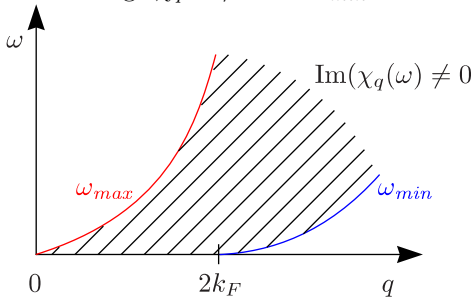
$$\omega_{kq} = \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k \underset{\text{freie Teilchen}}{=} \frac{1}{2m} [(k+q)^2 - k^2] = \frac{1}{2m} (2\vec{k} \cdot \vec{q} + q^2)$$

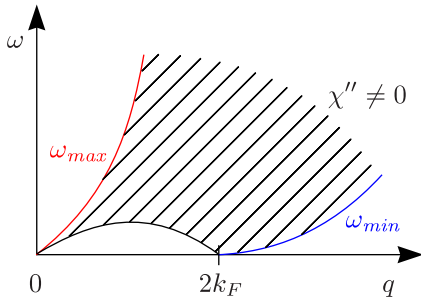
Es gibt maximale und minimale ω :

$$\omega_{max}(q) = \frac{qk_F}{m} + \frac{q^2}{2m}$$

$$\omega_{min}(q) = \begin{cases} 0 & \text{für } q < 2k_F \\ -\frac{qk_F}{m} + \frac{q^2}{2m} & \text{für } q > 2k_F \end{cases}$$

Daraus folgt $\chi_q''^{(0)} \neq 0$ für $\omega_{min} < \omega < \omega_{max}(q)$.





Man kann innerhalb des Bereichs Energie in das System pumpen.

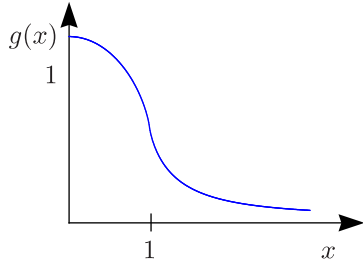
3.6.1 Statische Suszeptibilität bei $T = 0$

$$\chi_q^{(0)}(\omega) = \frac{2}{N} \sum_k \frac{n_F(\varepsilon_{k+q}) - n_F(\varepsilon_k)}{\omega + \varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}}$$

Für $\omega = 0$ und $\varepsilon_k = \frac{k^2}{2m}$ erhält man in drei Dimensionen:

$$\chi_q^{(0)}(\omega = 0) = 2N(0)g\left(\frac{g}{2k_F}\right) \text{ mit } N(0) = \frac{mk_F}{2\pi^2} \text{ und } g(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$

Es wird die Antwort des Systems gemessen, was besser für kleine Impulse funktioniert als für größere.



3.6.2 Statische Suszeptibilität bei $q = 0$ und $T > 0$

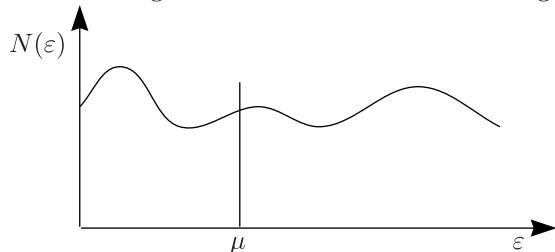
Wir nutzen die Definition des Differentialquotienten aus:

$$\chi_{q \rightarrow 0}^{(0)}(\omega = 0) = \frac{2}{N} \sum_k -\frac{\partial n_F(\varepsilon_k)}{\partial \varepsilon_k} = 2 \int d\varepsilon N(\varepsilon) \left(-\frac{\partial n_F(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)$$

Für $T \rightarrow 0$ gilt:

$$\chi_{q \rightarrow 0}^{(0)}(\omega = 0) = 2N(0)$$

χ' ist die Antwort der Teilchendichte auf eine Störung, die an die Teilchendichte koppelt. $\chi_{q \rightarrow 0}^{(0)}$ beschreibt also die Änderung der Teilchendichte bei Änderung des chemischen Potentials, nämlich $\Delta n = 2N(0)\Delta\mu$.



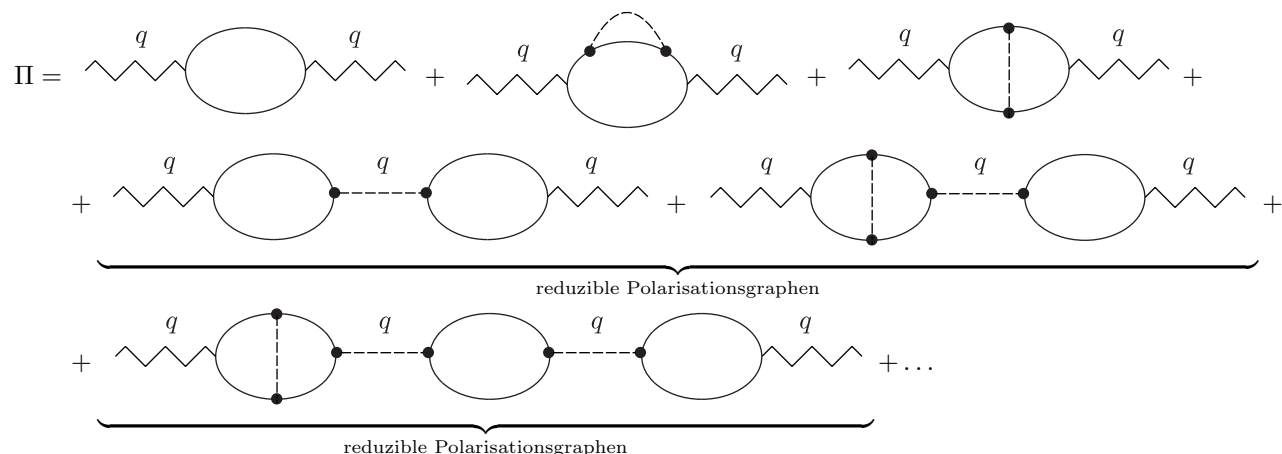
Achtung: Nichtkommutierende Limites

$$\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi^{(0)}(q, \omega) = 2N(0)$$

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi^{(0)}(q, \omega) = 0$$

3.7 Abschirmung und Random Phase Approximation

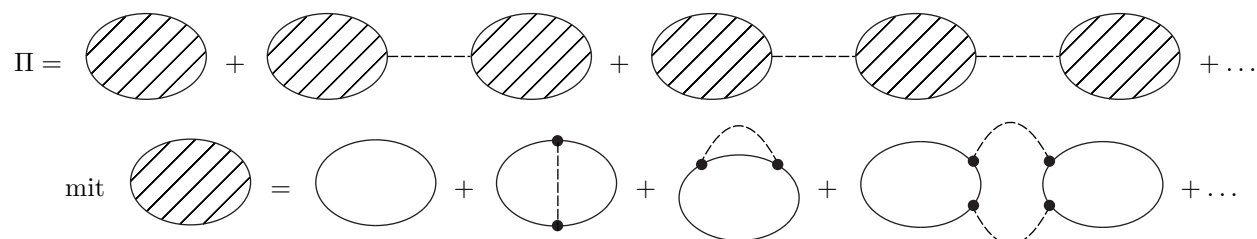
Wir betrachten nun ein Elektronengas mit Wechselwirkung. Was uns insbesondere interessiert, ist die COULOMB-Wechselwirkung.



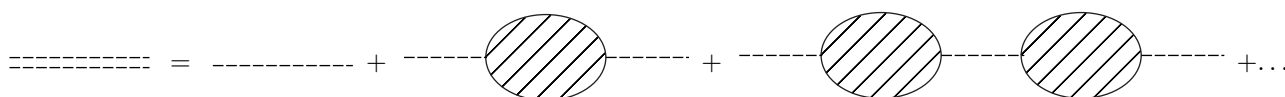
Die reduzierbaren Polarisationsgraphen zerfallen in zwei Teile beim Durchschneiden einer COULOMBLinie. Damit erhält man die DYSONGleichung:

$$\Pi_q(z) = \frac{\tilde{\Pi}_q(z)}{1 - V(q)\tilde{\Pi}_q(z)}$$

$\tilde{\Pi}$ ist die Summe der irreduziblen Polarisationsgraphen. RPA ist nun die Näherung, dass man $\tilde{\Pi}$ mit dem ungestörten $\Pi^{(0)}$ identifiziert, dass man also nur das erste Diagramm mitnimmt. Π ist gegeben durch eine geometrische Reihe:



Effektives Potential:



$$V_{eff}(\vec{q}, z) = \frac{V(\vec{q})}{1 - V(\vec{q})\tilde{\Pi}_q(z)}$$

Dielektrizitätsfunktion:

$$\frac{1}{\varepsilon(q, z)} = \frac{V_{eff}(q, z)}{V(q)}$$

Hieraus folgt $\varepsilon(q, z) = 1 - V(q)\tilde{\Pi}_q(z)$. Wertet man dies auf RPA-Level aus, so ergibt sich $\varepsilon_{RPA}(q, z) = 1 - V(q)\Pi_q^{(0)}(z) = 1 + V(q)\chi_{qq}^{(0)}(z)$. Elektrodynamik:

$$\vec{D}(k, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(k, \omega) \vec{E}(k, \omega)$$

Die POISSONGleichung mit φ_0 als äußerem Potential ist gegeben durch:

$$\varepsilon_0 k^2 \varphi_0(k, \omega) = -en_0(k, \omega)$$

$$i\vec{k}\vec{D}(k, \omega) = -en_0(k, \omega)$$

$$\vec{k}\varepsilon_0\vec{E}(k, \omega) = -en(k, \omega)$$

$en(k, \omega)$ ist die wahre Ladung, welche die Polarisation des Mediums verändert. n_0 ist die äußere Ladung. Die Änderung der Ladungsdichte, die von der Polarisation des Mediums herrührt, ist:

$$\Delta n(k, \omega) = n(k, \omega) - n_0(k, \omega) = \left(\frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} - 1 \right) n_0(k, \omega)$$

Kommen wir zur Linear-Response-Theorie:

$$\Delta n(k, \omega) = -\Pi_k(\omega)(-e)\varphi_0(k, \omega) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0 k^2} \Pi_k(\omega) n_0(k, \omega) \text{ mit } V(k) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 k^2}$$

Daraus folgt $\frac{1}{\varepsilon} = 1 - V(k)\pi$. Elektrodynamik:

$$\Delta n(q, \omega) = n - n_0 = \left(\frac{1}{\varepsilon} - 1 \right) n_0(q, \omega) = -\Pi_q(\omega) e\psi_0(q, \omega) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2} \Pi_q(\omega) n_0(q, \omega)$$

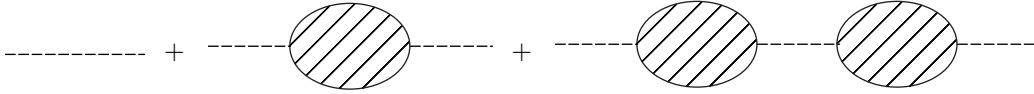
Hieraus folgt mittels der DYSONGLEICHUNG:

$$\boxed{\frac{1}{\varepsilon} = 1 + V\Pi = \frac{1}{1 - V\tilde{\Pi}} \text{ und } \varepsilon(q, z) = 1 - V(q)\tilde{\Pi}_q(z)}$$

Damit haben wir die Dielektrizitätsfunktion ausgedrückt durch den irreduziblen Polarisationsoperator.

$$V_{eff}(q, z) = \frac{V(q)}{1 - V(q)\tilde{\Pi}_q(z)}$$

Die COULOMBWECHSELWIRKUNG erzeugt ein Teilchen-Loch-Paar, welches rekombiniert. Dies korrespondiert zu Abschirmung der langreichweitigen COULOMBWECHSELWIRKUNG.



In der RPA-Näherung gilt $\tilde{\Pi} \simeq \Pi^{(0)}$. Wir berechnen nun die Abschirmung für kleine ω in dieser Näherung. Für kleine ω benötigen wir nur den Realteil der Suszeptibilität, also $2N(0)$. Machen wir außerdem die Näherung $q \ll 2k_F$, so gilt:

$$V_{eff}^{RPA}(q, 0) = \frac{V(q)}{1 + V(q) \cdot 2N(0)} = \frac{V(q)}{1 + V(q) \frac{m^* k_F}{\pi^2}} \text{ mit } V(q) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2}$$

Weiterhin gilt:

$$\frac{V(q)}{1 + V(q) \frac{m^* k_F}{\pi^2}} = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{1}{q^2 + k_0^2} \text{ mit } k_0^2 = \frac{m^* k_F}{\pi^2 \varepsilon_0}$$

Durch FOURIERTRANSFORMATION erhalten wir:

$$V_{eff}^{RPA}(r) \propto \frac{\exp(-k_0 r)}{r}$$

Wir erhalten damit einen exponentiellen Abfall. k_0^{-1} ist ein Maß für die Abschirmlänge.

3.8 Kollektiven Anregungen

Dabei handelt es sich um wohldefinierte Objekte, die propagieren können. Sie besitzen jedoch keinen Einzelteilchencharakter, sondern es handelt sich darum um kollektive Effekte mehrerer Teilchen. Eine kollektive Anregung produziert einen Pol in der Zweiteilchen-GREENfunktion.

$$\Pi_q^R(\omega) = \frac{\tilde{\Pi}_q^R(\omega)}{1 - V(q)\tilde{\Pi}_q^R(\omega)}$$

Der Pol liegt bei $V(q)\tilde{\Pi}_q^R(\omega) = 1$. Dies wollen wir nun im Limes kleiner Frequenzen und Wellenvektoren in der RPA-Näherung analysieren. Der Imaginärteil verschiebt die Lage des Pols nicht (aus δ -Funktion entsteht LORENTZfunktion), weshalb wir auch $V(q)\text{Re}(\tilde{\Pi}_q^R(\omega)) = 1$ schreiben können. Es gilt also $V(q)\chi_0'(q, \omega) = -1$. Unter Annahme einer dreidimensionalen FERMIfläche und $q \ll k_F$ gilt:

$$-\chi_0'(q, z) = \frac{k_F^2}{2\pi v_F} \left(\frac{1}{2} \frac{z}{v_F q} \ln \left(\frac{z + v_F q}{z - v_F q} \right) - 1 \right)$$

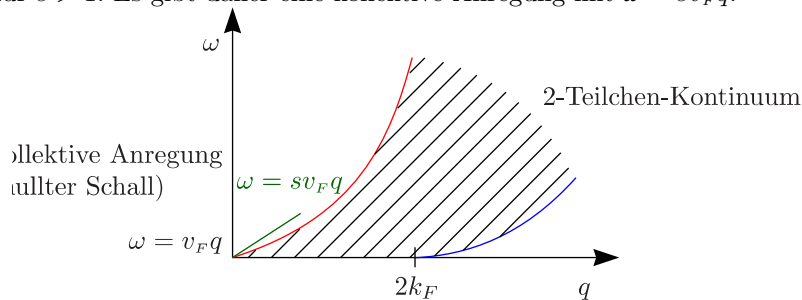
(³He ist das beste experimentelle Beispiel für eine FERMIflüssigkeit.)

3.8.1 Kurzreichweitige Wechselwirkung

Wir wollen nun eine kurzreichweitige Wechselwirkung ansetzen, nämlich $V(q) = V_0 \forall q$. Damit lautet unsere Polbedingung:

$$\frac{1}{V_0} = \frac{k_F^2}{2\pi^2 v_F} \left(\frac{1}{2} s \ln \left(\frac{s+1}{s-1} \right) - 1 \right) \quad \text{mit } s = \frac{\omega}{v_F q}$$

Dabei handelt es sich um eine Bestimmungsgleichung für die Größe s . Man sieht, dass eine Lösung existiert für $s > 1$. Es gibt daher eine kollektive Anregung mit $\omega = s v_F q$.



Diese Rechnung ist gut für eine neutrale FERMIflüssigkeit. Der entsprechende Wert für s , für den diese Lösung existiert, lautet:

$$s = 1 + 2 \exp \left(-\frac{2\pi^2}{m^* k_F V_0} \right) \quad \text{mit } c_0 = \frac{k_F}{m^*}$$

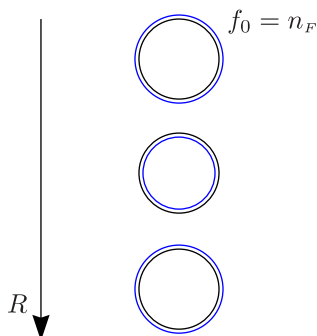
c_0 ist die Schallgeschwindigkeit vom nullten Schall. Betrachten wir zum Vergleich den thermodynamischen (ersten) Schall. Die Kompressionsmode, also die Teilchendichteänderung propagiert. Die Voraussetzung dafür ist ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht! Die Propagation dieses normalen thermodynamischen Schalls ist also nur möglich in einem kollisionsdominierten Regime! Zur Berechnung der Schallgeschwindigkeit benötigen wir die Kompressibilität:

$$c_1 = \left(\frac{1}{m^*} \frac{dP}{dn} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{d}} \frac{k_F}{m^*} \left(\simeq \frac{1}{\sqrt{3}} c_0 \right)$$

Thermodynamischer Schall in der FERMIflüssigkeit existiert nicht für $T \mapsto 0$. Der nullte Schall existiert dagegen im kollisionsarmen Regime, das heißt für $T \mapsto 0$.

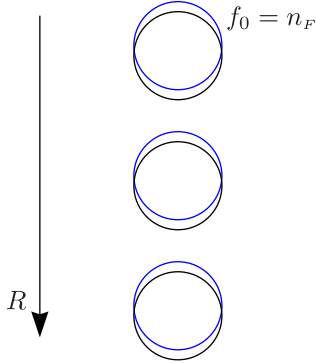
Wir betrachten eine lokale Verteilungsfunktion $f(k, R)$.

➤ Erster Schall:



Die FERMIKugel ändert ihre Größe (Änderung der Teilchendichte).

➤ Nullter Schall:



Hier ändert sich die Dichte lokal nicht. Dies funktioniert nur, wenn Teilchen-Loch-Anregungen auf der charakteristischen Skala erhalten bleiben, womit man hier wenig Kollisionen benötigt.

3.8.2 Coulomb-Wechselwirkung (Plasma-Oszillation)

Der Pol liegt bei:

$$\frac{1}{V(q)} = \frac{k_F^2}{2\pi^2 v_F} \left(\frac{1}{2} \frac{\omega}{v_F q} \ln \left(\frac{\omega + v_F q}{\omega - v_F q} \right) - 1 \right)$$

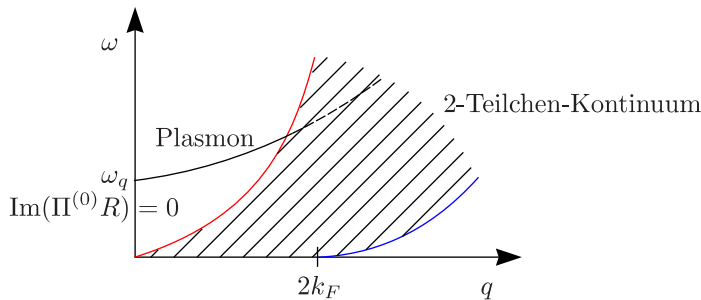
Für $q \mapsto 0$ und $v_F q \ll \omega$ können wir den Logarithmus entwickeln:

$$\frac{\varepsilon_0 q^2}{e^2} = \frac{k_F^2}{2\pi^2 v_F} \left[\frac{1}{2} \frac{\omega}{k_F q} \left(2 \frac{v_F q}{\omega} + \frac{2}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^3 + \dots \right) - 1 \right] = \frac{1}{3} \frac{k_F^2}{2\pi^2 v_F} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^2 + O(q^4)$$

$$\omega^2(q \mapsto 0) = \omega_{pl}^2 = \frac{e^2 v_F k_F^2}{\varepsilon_0 6\pi^2} = \frac{e^2 n}{\varepsilon_0 m^*}$$

Nimmt man weitere Terme mit, so erhält man die Dispersion für kleine q :

$$\omega(q) = \omega_{pl} + \frac{3}{10} \frac{k_F^2}{\omega_{pl} m^{*2}} q^2 + O(q^4)$$



Hier ist die Mode ungedämpft, da $\text{Im}(\Pi^{(0)}R) = 0$. Hier ist die Mode gedämpft durch Zerfälle in Teilchen-Loch-Paare.

Es gibt übrigens auch noch einen zweiten und dritten Schall.

Kapitel 4

Supraleitung

4.1 Attraktive Wechselwirkung

Die Ursache dafür ist die Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Betrachten wir folgenden HAMILTONoperator:

$$H_{el-ph} = \sum_{k,q,\sigma} M_{kq} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k\sigma} (b_q + b_{-q}^\dagger) \text{ mit } b_q + b_{-q}^\dagger = \varphi_q$$

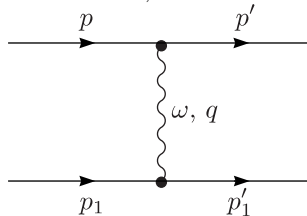
Den Propagator für dieses Objekt lautet $D(q, \tau) = -\langle T_\tau \varphi_q(\tau) \varphi_q^\dagger(0) \rangle$. Wir wissen, dass dieser Ausdruck durch FOURIER-Transformation von folgender Gestalt ist:

$$D^{(0)}(q, z) = \frac{2\omega_q}{z^2 - \omega_q^2}$$

Es gibt akustische Phononen mit kleinen Energien, für die $\omega_q = cq$ gilt.

4.1.1 Effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Der Prozess, der die Wechselwirkung in niedrigster Ordnung Störungstheorie beschreibt, ist:



$$V_{eff}(\omega, p) = \sum_q |M_{pq}|^2 \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2}$$

q ist der Impulsübertrag und ω_q die Frequenz des ausgetauschten Phonons. Wir machen nun folgende Näherungen:

$$\triangleright q = p - p' \sim \theta(k_F) \text{ (Fermi-Impuls)}$$

$$\triangleright \omega_q \sim \omega_D \text{ (DEBYE-Energie)}$$

$$\triangleright \omega \sim \Delta \ll \omega_D$$

Δ ist die supraleitende Energielücke.

ω ist charakteristisch für den Energietransfer bei einem solchen Prozess. Sie ist ein charakteristisches Maß für die Bindungsenergie zwischen den Elektronen. Unter diesen Umständen gilt:

$$V_{eff} \simeq \sum_q |M_{pq}|^2 \cdot \frac{1}{-\omega_q} \simeq -V_0 < 0$$

V_0 soll nicht von q abhängen. Da $V_{eff} < 0$ ist, liegt eine anziehende Wechselwirkung vor!

4.2 Cooper-Instabilität der Fermi-Flüssigkeit

Wir betrachten den FERMI-See plus zwei Elektronen in Anwesenheit einer attraktiven Elektron-Elektron-Wechselwirkung und beschreiben den Zustand des FERMI-Sees durch:

$$|\text{FS}\rangle = \prod_{\omega < k_F, \sigma} c_{k\sigma}^\dagger |0\rangle$$

Die Wellenfunktion für zwei Elektronen plus FERMISEE mit Gesamtimpuls Null ist gegeben durch:

$$|\psi\rangle = \sum_{k > k_F} g_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger |\text{FS}\rangle$$

Wir erzeugen also zwei Elektronen mit entgegengesetzten Impulsen und Spins. (Es gibt genau ein $g_k \neq 0$.) Der HAMILTONoperator ist gegeben durch:

$$H = \sum_{k, \sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\substack{k, k', q \\ \sigma, \sigma'}} V_{kq} c_{k+q, \sigma}^\dagger c_{k'-q, \sigma'} c_{k' \sigma'} c_{k\sigma}$$

Wir wählen außerdem den Energienullpunkt per Konvention so, dass $\langle \text{FS} | H | \text{FS} \rangle = 0$ ist. (Eigentlich ist $|\text{FS}\rangle$ kein Eigenzustand von H ; dies soll uns aber jetzt nicht weiter stören.) Betrachten wir nun die SCHRÖDINGERgleichung:

$$H|\psi\rangle = (0 + 2g_k \varepsilon_k) |\psi\rangle + \sum_q g_k V_{kq} c_{k+q, \uparrow}^\dagger c_{-(k+q), \downarrow}^\dagger |\text{FS}\rangle \stackrel{!}{=} E |\psi\rangle$$

$$(E - 2\varepsilon_k) g_k \stackrel{!}{=} \sum_{\substack{q \\ k-q > k_F}} V_{kq} g_{k+q}$$

Wir machen nun eine weitere Näherung und zwar:

$$V_{kq} = \begin{cases} -V & \text{für } \varepsilon_k, \varepsilon_{k+q} < \omega_D \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

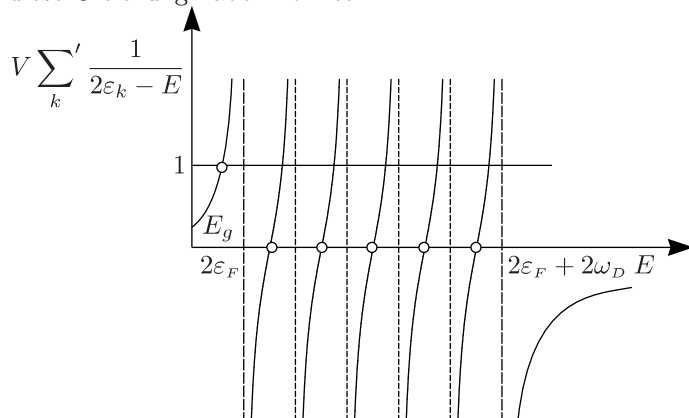
Mit der Bezeichnung $k + q = k'$ gilt also, wobei wir noch zusätzlich über k summieren:

$$\sum_k g_k = -V \sum_{k, k'}' \frac{g_{k'}}{E - 2\varepsilon_k}$$

Man summiert nur über die k von der Größe der DEBYE-Frequenz. Daraus ergibt sich:

$$1 = V \sum_k \frac{1}{2\varepsilon_k - E}$$

Ein gebundener Paar-Zustand ergibt sich bei $E < 2\varepsilon_F$. Wir versuchen, uns nur zu überlegen, was für Lösungen diese Gleichung haben könnte.



Es existiert eine Lösung mit $E_g < 2\varepsilon_F$. Wir schätzen die Bindungsenergie ab:

$$\sum'_k \mapsto N(0) \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \omega_D} d\varepsilon$$

$$\frac{1}{V} = N(0) \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \omega_D} \frac{1}{2\varepsilon - E} d\varepsilon$$

Lösen wir dieses Integral und Exponieren die Gleichung, so folgt:

$$\frac{2\varepsilon_F + 2\omega_D - E}{2\varepsilon_F - E} = \exp\left(\frac{2}{N(0)V}\right) \Rightarrow 2\varepsilon_F - E = \frac{2\omega_D}{\exp\left(\frac{2}{N(0)V}\right) - 1} \stackrel{N(0)V \ll 1}{\approx} 2\omega_D \exp\left(-\frac{2}{N(0)V}\right)$$

Die Näherung $N(0)V \ll 1$ dürfen wir hier machen, weil die Wechselwirkung sehr schwach ist. Die Bindungsenergie, also die Energie die das COOPER-Paar gewonnen hat gegenüber dem nichtwechselwirkenden Fall, ist damit gegeben durch:

$$\Delta E = 2\omega_D \exp\left(-\frac{2}{N(0)V}\right)$$

Nichtpertubativ in V !! Wegen der abfallenden Exponentialfunktion sind die Sprungtemperaturen sehr niedrig. Gebundener Zustand:

- * Die Energie relativ zur FERMI-Flüssigkeit ist < 0 . Damit ist die FERMI-Flüssigkeit generisch instabil.
- * $g_k \propto \frac{1}{2\varepsilon_k - E_g}$ ist eine Funktion von $|\vec{k}|$.
Der Verlust an kinetischer Energie ($g_k \neq 0$ für $k > k_F$) wird durch den Gewinn an potentieller Energie überkompensiert.
- * Ortswellenfunktion des COOPER-Paares

Wir können mittels der Unschärferelation die charakteristische Ausdehnung ξ_0 qualitativ abschätzen. Wir assoziieren ΔE mit der supraleitenden Sprungtemperatur T_c :

$$\xi_0 \lesssim \frac{\hbar}{\frac{\Delta E}{v_F}} \sim \frac{\hbar v_F}{k_B T_c} \sim 10^4 \text{ \AA} \gg a$$

COOPER-Paare sind im Realraum also ziemlich große Objekte. Oder über FOURIER-Transformation der Paar-Wellenfunktion:

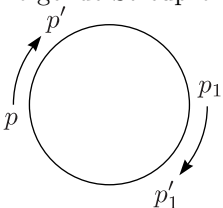
$$\psi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \sum'_k g_k \exp(ik(r_1 - r_2))$$

Wir definieren die Länge ξ_0 als Erwartungswert, nämlich $\xi_0^2 = \langle \psi(\vec{r}) | \vec{r}^2 | \psi(\vec{r}) \rangle$. Wir nehmen den Erwartungswert von \vec{r}^2 , da beide Vorzeichen vorkommen können.

$$\xi_0^2 = \frac{\langle \psi(\vec{r}) | \vec{r}^2 | \psi(\vec{r}) \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum'_k |\partial_k q_k|^2}{\sum'_k |q_k|^2} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\hbar v_F}{\Delta E}$$

Unsere Abschätzung nach der Unschärferelation war also in der richtigen Größenordnung.

Folgende Streuprozesse führen zur Paarbildung:

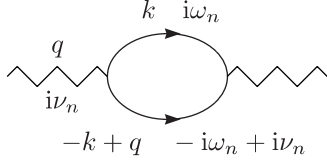


> Energieübertrag $< \omega_D$

> Impulsübertrag $\sim k_F$

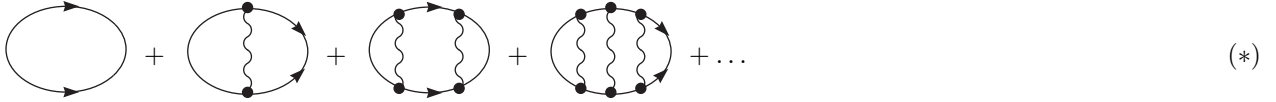
Wir definieren nun den Propagator für das Elektron-Paar:

$$C(q, \tau) = - \left\langle T_\tau \left(\sum_{k'} c_{-k'+q, \uparrow} c_{k' \downarrow} \right) (\tau) \left(\sum_k c_{k+q, \downarrow}^\dagger c_{k \uparrow}^\dagger \right) \right\rangle$$



$$C^{(0)}(q, i\nu_n) = \text{diagram} = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \sum_k \sigma^{(0)}(k, i\omega_n) G^{(0)}(-k+q, -i\omega_n + i\nu_n)$$

Den gebundenen Zustand erhält man durch Aufsummation von entsprechenden Leiterdiagrammen.



Wir machen folgende Näherung:

$$= \sum |M|^2 \frac{1}{\sim} = -V$$

Hieraus folgt:

$$(*) = \text{diagram} + \overset{-V}{\text{diagram}} + \overset{-V}{\text{diagram}} \overset{-V}{\text{diagram}} + \dots$$

$$\Rightarrow C(q, z) = \frac{C^{(0)}(q, z)}{1 + VC^{(0)}(q, z)}$$

Die Instabilität wird signalisiert durch einen Pol in $C(q, \omega)$ bei $\omega \sim \omega_D \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right)$.

4.3 BCS-Theorie

Wir gehen aus von folgendem HAMILTONoperator:

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{k, \sigma} (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k, l} V_{kl} c_{k \uparrow}^\dagger c_{-k \downarrow}^\dagger c_{-l \downarrow} c_{l \uparrow} \text{ mit } \xi_k = \varepsilon_k - \mu$$

Der zweite Term beschreibt den Teil der Wechselwirkung, der die COOPERpaare bildet. In der Molekularfeldnäherung ersetzen wir $c^\dagger c^\dagger cc$ durch $\langle c^\dagger c^\dagger \rangle cc + c^\dagger c^\dagger \langle cc \rangle - \langle c^\dagger c^\dagger \rangle \langle cc \rangle$. (Zum Vergleich: Beim HEISENBERG-Modell ersetzt man $J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ durch $J \langle \vec{S}_i \rangle \vec{S}_j + \dots$ Beim HARTREEterm hatten wir $U c^\dagger c^\dagger cc \mapsto U \langle c^\dagger c \rangle c^\dagger c + \dots$ gesetzt (Dichte-Dichte-Wechselwirkung).) Wir vernachlässigen Terme der Form $(cc - \langle cc \rangle)(c^\dagger c^\dagger - \langle c^\dagger c^\dagger \rangle)$. Hieraus folgt der HAMILTONoperator:

$$H_{MF} = \sum_{k, \sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k, l} V_{kl} (c_{k \uparrow}^\dagger c_{-k \downarrow}^\dagger b_l + b_l^\dagger c_{-l \downarrow} c_{l \uparrow}) \text{ mit } b_l = \langle c_{-l \downarrow} c_{l \uparrow} \rangle + \text{const.}$$

Mit $\Delta_k \equiv \sum_l V_{kl} b_l = \sum_l V_{kl} \langle c_{-l\downarrow} c_{l\uparrow} \rangle$ folgt:

$$H_{MF} = \sum_{k,\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_k \left(\Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + \text{h.c.} \right)$$

H_{MF} ist nicht teilchenzahlerhaltend. (Das großkanonische Ensemble für die BCS-Theorie ist nötig!) $b_l = \langle c_{-l\downarrow} c_{l\uparrow} \rangle$ ist im kanonischen Ensemble gleich Null. Solche Erwartungswerte werden auch als anomale Erwartungswerte bezeichnet, da sie die Teilchenzahl verletzen. Wir wollen nun H_{MF} lösen.

4.3.1 Bewegungsgleichungen

Wir führen eine Einteilchen-GREENfunktion ein durch $G(k, \tau) = -\langle T_\tau c_{k\uparrow}(\tau) c_{k\uparrow}^\dagger \rangle$ und gehen aus von:

$$z \langle \langle A; B \rangle \rangle + \langle \langle \mathcal{L}A; B \rangle \rangle = \langle [A, B]_+ \rangle$$

$$\mathcal{L}_{MF} c_{k\uparrow} = [H_{MF}, c_{k\uparrow}] = -\xi_k c_{k\uparrow} + \Delta_k c_{-k\downarrow}^\dagger$$

Hieraus folgt dann:

$$(z - \xi_k) \langle \langle c_{k\uparrow}; c_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle + \Delta_k \langle \langle c_{-k\downarrow}^\dagger; c_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle = 1$$

Analog gilt $\mathcal{L}_{MF} c_{-k\downarrow}^\dagger = \xi_k c_{-k\downarrow}^\dagger + \Delta_k c_{k\uparrow}$ und damit folgt:

$$(z + \xi_k) \langle \langle c_{-k\downarrow}^\dagger; c_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle + \Delta_k \langle \langle c_{k\uparrow}; c_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle = 0$$

Aus diesen beiden Gleichungen ergibt sich:

$$G(k, z) = \langle \langle c_{k\uparrow}; c_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle = \frac{z + \xi_k}{z^2 - \xi_k^2 - \Delta_k^2} \quad \text{und} \quad \langle \langle c_{-k\downarrow}^\dagger; c_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle = -\frac{\Delta_k}{z^2 - \xi_k^2 - \Delta_k^2} = \bar{F}(k, z)$$

Man kann diese beiden Funktionen kompakt in der Form eines NAMBU-Spinors schreiben:

$$\psi_k = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

Mit diesem zweikomponentigen Objekten ist es möglich, eine Matrix-GREENfunktion zu definieren:

$$\underline{\underline{G}}(k, \tau) = -\langle T_\tau \psi_k(\tau) \psi_k^\dagger \rangle = -\left\langle T_\tau \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}(\tau) c_{k\uparrow}^\dagger & c_{k\uparrow}(\tau) c_{-k\downarrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger(\tau) c_{k\uparrow}^\dagger & c_{-k\downarrow}^\dagger(\tau) c_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \right\rangle$$

Man kann nun den HAMILTONoperator H_{MF} mittels dieser Spinoren ψ_k folgendermaßen schreiben:

$$H_{MF} = \sum_k' \xi_k \psi_k^\dagger \tau_3 \psi_k - \sum_k \Delta_k \psi_k^\dagger \tau_1 \psi_k \quad \text{mit} \quad \tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die gestrichelte Summe soll nur über die halbe BRILLOUINzone laufen. (Man könnte auch einen Faktor $\frac{1}{2}$ davorschreiben.) Die Bewegungsgleichung für ψ sieht folgendermaßen aus:

$$(z\tau_0 - \xi_k \tau_3 + \Delta_k \tau_1) \underline{\underline{G}}(k, z) = \tau_0$$

Wollen wir dies nach $\underline{\underline{G}}$ auflösen, so müssen wir die Matrix $z\tau_0 - \xi_k \tau_3 + \Delta_k \tau_1$ invertieren:

$$\underline{\underline{G}}(k, z) = \frac{z\tau_0 + \xi_k \tau_3 - \Delta_k \tau_1}{z^2 - \xi_k^2 - \Delta_k^2} = \begin{pmatrix} G(k, z) & F(k, z) \\ \bar{F}(k, z) & -G(k, -z) \end{pmatrix}$$

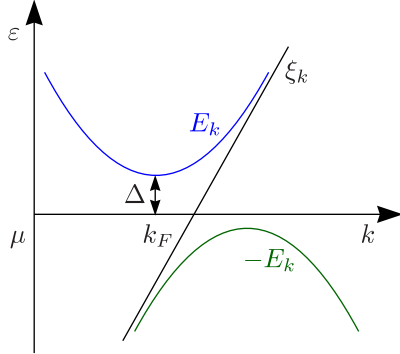
Man bezeichnet G als normale GREENsche Funktion und F als anomale GREENsche Funktion. Wir führen eine Partialbruchzerlegung von $G(k, z)$ durch:

$$G(k, z) \equiv \underline{\underline{G}}_{11} = \frac{z + \xi_k}{z^2 - \xi_k^2 - \Delta_k^2} = \frac{u_k^2}{z - E_k} + \frac{v_k^2}{z + E_k} \quad \text{mit} \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2} \quad \text{und} \quad u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right), \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right)$$

Analog können wir dies für $F(k, z)$ machen:

$$F(k, z) = \underline{G}_{12} = -u_k v_k \left(\frac{1}{z - E_k} - \frac{1}{z + E_k} \right)$$

Demnach gibt es Pole bei E_k , die wir als Quasiteilchenenergien interpretieren wollen. Ein konventioneller Supraleiter hat die Eigenschaft, dass $\Delta_k = \Delta = \text{const.}$ ist. Damit ist $\varepsilon = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2} \geq \Delta$.



Die Pole, die den Elementaranregungen des Systems entsprechen, treten nicht mehr bei beliebig kleinen Energien auf. Die Anregungen besitzen damit eine Energielücke Δ .

4.3.2 Bogoliubov-Transformation

Man kann den HAMILTONoperator diagonalisieren, indem man die Erzeuger und Vernichter mittels neuer Fermionen γ_{k0}, γ_{k1} aus.

$$c_{k\uparrow} = u_k^* \gamma_{k0} + v_k \gamma_{k1}^\dagger$$

$$c_{-k\downarrow}^\dagger = -v_k^* \gamma_{k0} + u_k \gamma_{k1}^\dagger$$

Durch die entsprechende Umkehrtransformation werden die γ_k definiert:

$$\gamma_{k0} = u_k c_{k\uparrow} - v_k c_{-k\downarrow}^\dagger$$

$$\gamma_{k1}^\dagger = v_k^* c_{k\uparrow} + u_k^* c_{-k\downarrow}^\dagger$$

Die so definierten γ erfüllen fermionische Vertauschungsrelationen, wenn $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$ ist. Es gilt dann $[\gamma_{k0}, \gamma_{k0}^\dagger]_+ = 1$ usw. Wir setzen nun γ_{k0}, γ_{k1} in H_{HF} ein. Man kann dann die u_k und v_k so wählen, dass die Vorfaktoren von $\gamma\gamma$ bzw. $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$ verschwinden. Man erhält:

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right) \quad \text{und} \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k} \right) \quad \text{mit} \quad u, v \in \mathbb{R} \quad \text{falls} \quad \Delta \in \mathbb{R}$$

So ergibt sich folgender HAMILTONoperator:

$$H_{MF} = \sum_k E_k \left(\gamma_{k0}^\dagger \gamma_{k0} + \gamma_{k1}^\dagger \gamma_{k1} \right) + \sum_k (\xi_k - E_k)$$

Die zweite Summe ist eine Konstante. H_{MF} beschreibt also freie Fermionen! Der Grundzustand ist das Vakuum bezüglich γ ; $\gamma_0^\dagger, \gamma_1^\dagger$ beschreiben Anregungen aus dem Grundzustand heraus. (Diese Anregungen werden als BOGOLIUBOV-Quasiteilchen bezeichnet.) Die γ_0 und γ_1 tragen einen wohldefinierten Spin, nämlich Spin 1/2, aber keine wohldefinierte Ladung. Die elementaren Anregungen haben also noch den Spin als gute Quantenzahl, aber nicht die Ladung.

4.3.3 Lösung der Selbstkonsistenzgleichung

$$\Delta_k = \sum_l V_{kl} \langle c_{-l\downarrow} c_{l\uparrow} \rangle = - \sum_k V_{kl} u_k^* v_l \langle 1 - \gamma_{l0}^\dagger \gamma_{l0} - \gamma_{l1}^\dagger \gamma_{l1} \rangle$$

Im Grundzustand für $T = 0$ verschwinden die γ , womit sich ergibt:

$$\Delta_l = - \sum_l V_{kl} u_l^* v_l = - \frac{1}{2} \sum_l V_{kl} \frac{\Delta_l}{E_l}$$

Eine Verallgemeinerung auf endliche Temperaturen ist gegeben durch:

$$\Delta_k = - \sum_l V_{kl} \frac{\Delta_l}{2E_l} \tanh\left(\frac{E_l}{2k_B T}\right)$$

Eine Gleichung dieser Form hat die Lösung $\Delta = 0$; es liegt dann ein Metall vor. Wir machen nun die Näherung, dass Δ nicht von k abhängig ist. Dies gilt für einen konventionellen Supraleiter:

$$\Delta_k = \Delta \text{ und } V_{kl} = \begin{cases} -V & \text{für } |\xi_{k,l}| < \omega_D \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

ω_D ist der Cut-Off für die attraktive Wechselwirkung. Hieraus ergibt sich folgende Gleichung:

$$1 = \frac{V}{2} \sum_{|\xi_l| < \omega_D} \frac{1}{E_l}$$

Für $T \neq 0$ gilt:

$$1 = VN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right)$$

Unter Benutzung der Zustandsdichte erhalten wir:

$$1 = \frac{V}{2} N(0) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}}$$

Dieses Integral können wir analytisch auswerten:

$$\int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} = \operatorname{arsinh}\left(\frac{\omega_D}{\Delta}\right)$$

Damit ergibt sich:

$$\Delta(T=0) = \frac{\omega_D}{\sinh\left(\frac{1}{N(0)V}\right)} \underset{N(0)V \ll 1}{\approx} 2\omega_D \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right)$$

Die Energielücke entspricht bei $T = 0$ bis auf einem Faktor 2 der Energielücke, die wir bei Berechnung der COOPER-Instabilität erhalten haben.

$$b(\tau) = \exp(\tau H) b \exp(-\tau H)$$

$$b^\dagger(\tau) = \exp(-\tau H) b^\dagger \exp(\tau H) = b^\dagger(-\tau)$$

Wir wollen nun im folgenden diskutieren, was passiert, wenn $T \mapsto T_c$ und damit $\Delta \mapsto 0$. Bilden wir in der obigen Gleichung den Grenzwert $\Delta \mapsto 0$, so erhalten wir:

$$1 = VN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \tanh\left(\frac{\xi}{2k_B T_C}\right)$$

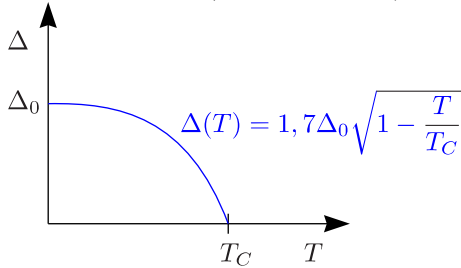
Für $\hbar\omega_D \gg k_B T_C$ können wir das Integral exakt berechnen, womit sich ergibt:

$$1 = VN(0) \ln\left(\frac{2\gamma}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{k_B T_C}\right)$$

γ ist hierbei die EULERSche Konstante.

$$k_B T_C = 1,13 \hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right)$$

Hieraus folgt $2\Delta_0/k_B T_C = 3,54$ (unabhängig von Materialparametern). Temperaturabhängigkeit von Δ :



Wie sieht nun der BCS-Grundzustand aus?

$$|\psi_0\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger) |\text{vac}\rangle$$

* Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Zustand bei $(k, -k)$ besetzt ist, beträgt $|v_k|^2$. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Zustand leer ist, hat den Wert $|u_k|^2$. (Nach der BOGOLIUBOV-Transformation gilt $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$, was auch so sein muss.)

* $|\psi_0\rangle$ ist kein Eigenzustand zur Gesamtteilchenzahl!

$$|\psi_0\rangle = \sum_N \lambda_N |\psi_N\rangle$$

$|\psi_N\rangle$ ist ein Zustand mit fester Teilchenzahl N . Für die Teilchenzahlfuktuationen gilt $\sqrt{\langle \Delta N^2 \rangle} \sim \sqrt{N}$. $|\psi_0\rangle$ ist der FERMI-See für $v_k = 1$ für $k < k_F$ und $v_k = 0$ sonst. Bisher haben wir Δ als reell angenommen. Man kann jedoch das ganze auch mit einem komplexen Δ durchführen in Form einer Parametrisierung der Form $\Delta = |\Delta| \exp(i\varphi)$. Dabei stellt sich heraus, dass die physikalischen Eigenschaften unabhängig von der Phase φ sind:

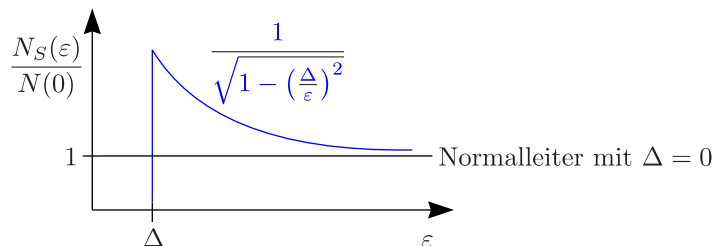
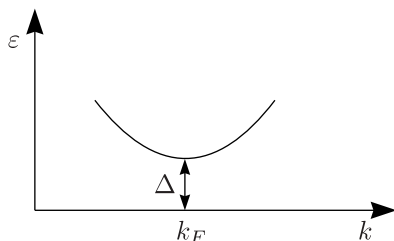
$$|\psi_0\rangle = \prod_k (u_k + v_k \exp(i\varphi) c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |\text{vac}\rangle \text{ mit } u, v \in \mathbb{R}$$

φ ist hier eine relative Phase zwischen besetzten und unbesetzten Paarzuständen. Die Tatsache, dass das φ für den geordneten Zustand beliebig ist, ist der Ausdruck einer spontan gebrochenen U(1)-Symmetrie. Zu einer spontan gebrochenen Symmetrie gehört eine niederenergetische Mode (GOLDSTONE-Theorem) für einen neutralen „Supraleiter“ (Supraflüssigkeit, beispielsweise ^3He). φ kann man als „Phase des COOPER-Paar-Kondensats interpretiert werden“. (COOPER-Paare sind jedoch keine „richtigen“ Bosonen im konventionellen Sinn.) Im „geladenen“ Supraleiter wird diese Mode zu einer endlichen Energie verschoben. (Es gibt einen HIGGS-Mechanismus, der dafür sorgt, dass die Photonen eine Masse bekommen und damit die Eindringtiefe eines Magnetfelds exponentiell abfällt.)

4.4 Thermodynamik des konventionellen supraleitenden Zustands

Konventionell bedeutet wieder, dass Δ von k unabhängig, also konstant ist. Die Anregungsenergien sind gegeben durch $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}$. Für die Zustandsdichte ergibt sich:

$$N_s(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - E_k) = N(0) \begin{cases} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}} & \text{für } \varepsilon > \Delta \\ 0 & \text{für } \varepsilon < \Delta \end{cases}$$



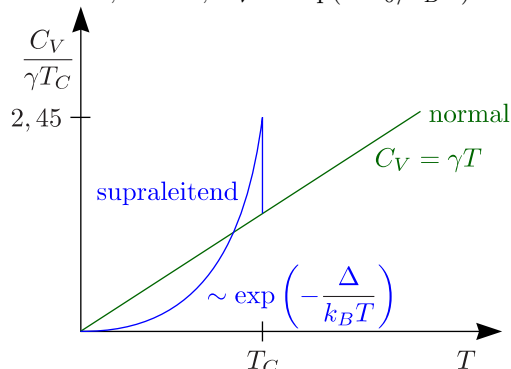
Für die Entropie ergibt sich:

$$S = -k_B \text{Sp}(\varrho \ln(\varrho)) = -2k_B \sum_k [(1 - n_F(E_k)) \ln(1 - n_F(E_k)) + n_F(E_k) \ln(n_F(E_k))]$$

Dies ist allgemein für Fermionen (siehe Theorie F). Für die spezifische Wärme folgt:

$$C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} = 2\beta k_B \sum_k -\frac{\partial n_F(E_k)}{\partial E_k} \left(E_k^2 + \frac{\beta}{2} \frac{d\Delta^2}{d\beta} \right)$$

Entscheidend ist, dass für tiefe Temperaturen $k_B T \ll \Delta_0$ alle diese Beiträge exponentiell klein sind. Dies bedeutet, dass $S, C_V \sim \exp(-\Delta_0/k_B T)$. In der Nähe des Phasenübergangs bei T_C hat C_V eine Singularität.



Da der supraleitende Zustand eine Energielücke besitzt, folgt eine exponentiell kleine spezifische Wärme.

4.5 Unkonventionelle Supraleiter

Unter „konventionell“ versteht man $\Delta_k = \text{const.}$ Außerdem sind die COOPER-Paare Spin-Singulets. Im Gegensatz dazu fallen unter den Begriff des „unkonventionellen Supraleiters“ alle Supraleiter, welche die zuvor genannten Eigenschaften nicht besitzen.

Die Spin-Struktur der COOPER-Paare ist so, dass man entweder Singulets oder Triplets hat. (Mischzustände wollen wir außen vorlassen.) Dann muss die Ortswellenfunktion der COOPER-Paare symmetrisch bzw. antisymmetrisch sein. (Dies ist jedoch nur die halbe Wahrheit, wenn man zeitabhängige Zustände betrachtet.) Da Δ mit der inneren Definition des COOPER-Paars zusammenhängt, würde man erwarten, dass im Falle von Singulets $\Delta_k = \Delta_{-k}$ gilt und im Falle von Triplets $\Delta_k = -\Delta_{-k}$. Parametrisieren der Richtungsabhängigkeit von Δ_k :

$$\Delta_k = \Delta_{\vec{e}_k} = \sum_{l,m} a_{lm} Y_{lm}(\vec{e}_k) \text{ mit } \vec{e}_k = \frac{\vec{k}}{k}$$

Haben wir ein System in einem isotropen Raum, so können wir nach Kugelflächenfunktionen entwickeln. Ist $a_{lm} \neq 0$ für $l = 0$ und sonst aber $= 0$, so ist Δ konstant und man spricht von einem s-Wellen-Supraleiter. Je nachdem, welche Koeffizienten verschieden von Null sind, kann man sich p-Wellen-Supraleiter, d-Wellen-Supraleiter, usw. ausdenken:

- * $l = 1$: p-Wellen-Triplett-Supraleiter (realisiert in ^3He)
- * $l = 2$: d-Wellen-Singulett-Supraleiter (beispielsweise Hochtemperatursupraleiter)
- * $l = 3$: f-Wellen-Triplett-Supraleiter (experimentell noch nicht etabliert)

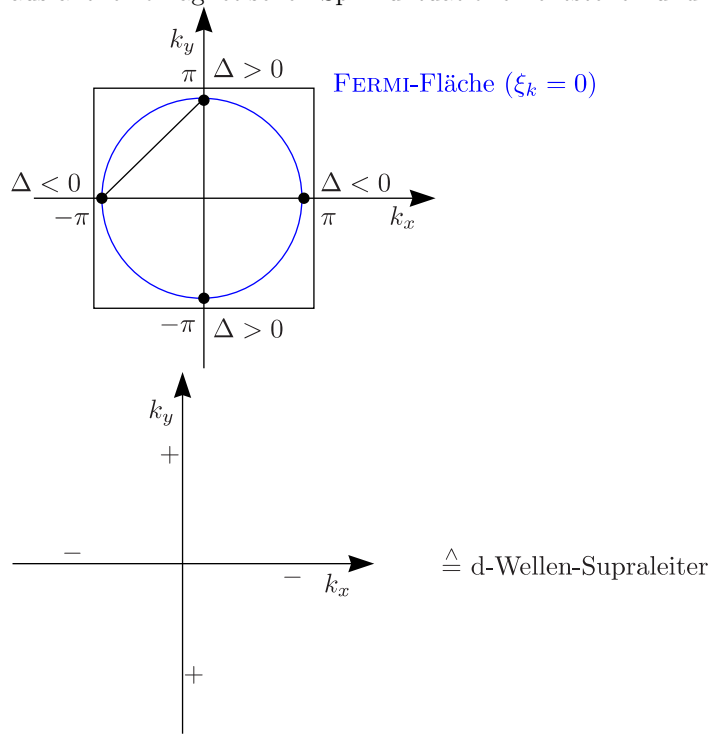
Supraleitende Zustände mit $l \gg 1$: Δ_k wechselt das Vorzeichen und es gilt $\Delta_k = 0$ für gewisse k (Dies können Flächen, Linien oder auch Punkte im dreidimensionalen Impulsraum sein.) Damit hat der Supraleiter keine „echte“ Energielücke. (Es gibt keine Anregungen nahe der FERMIKANTE.) Dies bedeutet, dass die zuvor diskutierten thermodynamischen Größen (wie beispielsweise die spezifische Wärme) **nicht** exponentiell unterdrückt bei tiefen Temperaturen sind. (Sie folgen Potenzgesetzen wie T^2, T^3, T^5, \dots)

4.5.1 Paarung aus rein repulsiver Wechselwirkung

Wir erinnern uns an die Selbstkonsistenzgleichung bei $T = 0$:

$$\Delta_k = - \sum_l V_{kl} \frac{\Delta_l}{2E_l}$$

Für s-Wellen-Supraleitung muss $V < 0$ sein (attraktive Wechselwirkung). Für d-Wellen-Supraleiter ist nun $V > 0$. Wir müssen V_{kl} außerdem so wählen, dass V_{kl} maximal wird für $\vec{k} - \vec{l} = (\pm\pi, \pm\pi)$. (Dies gilt, falls V_{kl} aus antiferromagnetischen Spinfuktuationen entstehen und nicht durch Phononen.)

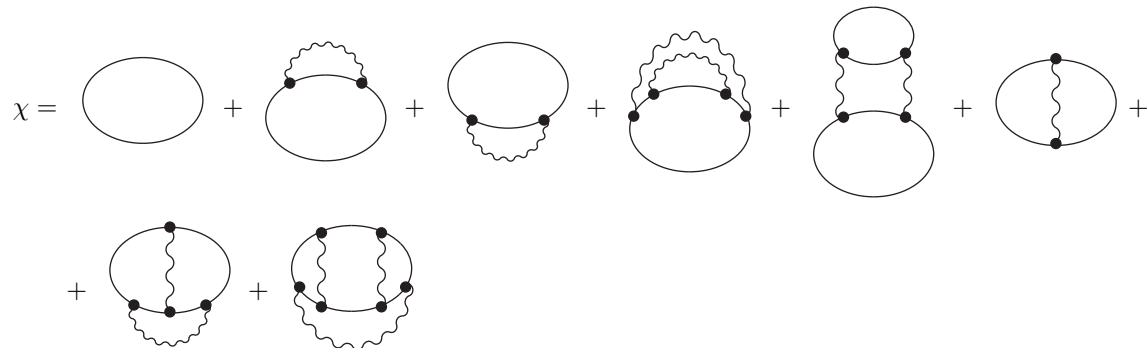


Kapitel 5

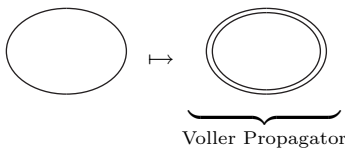
Symmetrien und Ward-Identitäten

5.1 Propagatoren und Vertizes

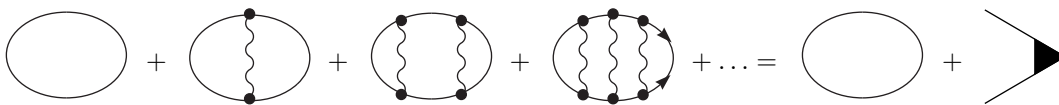
Wir wollen Zweiteilchen-Größen wie beispielsweise Spin- oder Ladungssuszeptibilität berechnen. Wir betrachten ein Elektronensystem mit Elektron-Phonon-Wechselwirkung diagrammatisch:



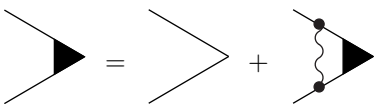
Gewisse Beiträge erhält man durch:



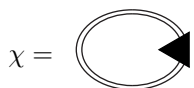
Aber es existieren Beiträge, die man NICHT durch renormierte Propagatoren allein ausdrücken kann („Vertexkorrekturen“). Zusammenfassen:



Dies ist der renormierte Vertex. Integralgleichung für Vertex (Leiternäherung):



Häufig lässt sich die Suszeptibilität dann schreiben als:



Nur einer der Vertizes ist ein voller Vertex, der andere ist nackt, da man sonst Diagramme doppelt generieren würde. Wenn man willkürlich Diagramme auswählt, kann man Erhaltungssätze berücksichtigen. Der Vertex muss eine bestimmte Form haben, damit der Erhaltungssatz gilt. WARD-Identitäten sind Relationen zwischen Ein-Teilchen- und Zwei-Teilchen-Propagatoren (bzw. zwischen Ein-Teilchen-Selbstenergie und Vertizes), welche die Erhaltungssätze gewährleisten.

5.2 Ward-Identitäten

Zuerst führen wir ganz allgemein einen Zwei-Teilchen-Propagator ein. Dies ist konsequenterweise ein Objekt mit vier Linien.

$$G_2(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2; x_3, \tau_3; x_4, \tau_4) = -\langle T\psi(x_1, \tau_1)\psi^\dagger(x_2, \tau_2)\psi^\dagger(x_3, \tau_3)\psi(x_4, \tau_4) \rangle$$

Betrachten wir nun ein nicht-wechselwirkendes System:

$$G_2^{(0)} = \begin{array}{c} \xrightarrow{k} \\ \xleftarrow{k+q} \end{array} = G(k)G(k+q) \text{ mit } k = (\vec{k}, i\omega_n), q = (\vec{k}, i\nu_n)$$

Polarisationspropagator mit $x_1 = x_2, x_3 = x_4$:

$$\Pi^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{i\omega_n} G(k)G(k+q)$$

Allgemein gilt:

$$G_2 = \begin{array}{c} \xrightarrow{k} \\ \xleftarrow{k+q} \end{array} \delta_{kk'} + \begin{array}{c} \xrightarrow{k} \\ \xleftarrow{k+q} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{k'} \\ \xleftarrow{k'+q} \end{array} + \dots$$

Dies soll alle möglichen Prozesse, die sich zwischen den zwei Teilchen abspielen, beinhalten. Innerhalb dieses Objekts muss der Impuls erhalten sein. Weitere Beiträge, die von Korrekturen von Propagatoren kommen, wollen wir außer acht lassen. Mit diesem Objekt wollen wir eine Vertexfunktion Γ definieren:

$$\begin{array}{c} k+q \\ \diagdown \\ \blacktriangle \\ \diagup \\ k \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{k} \\ \xleftarrow{k+q} \end{array} = \Gamma(k, k+q) = \frac{1}{G(k)G(k'+q)} \frac{1}{N\beta} \sum_{k'} \alpha_{k'} G_2(k, k+q, k', k'+q)$$

$\alpha_{k'}$ beschreibt den Charakter des Vertex und hängt von dem jeweiligen Problem ab, das man betrachtet.

5.2.1 Erhaltungssatz

Wir gehen von Ladungserhaltung aus und formulieren die Kontinuitätsgleichung für eine Ladungsdichte d und ihre zugehörige Stromdichte \vec{j}_d (FOURIER-transformiert):

$$\frac{\partial d(\vec{q}, t)}{\partial t} - i\vec{q} \cdot \vec{j}_d(\vec{q}, t) = 0$$

Wir nehmen an, dass wir die Dichte ausdrücken können, durch:

$$d(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{q}} \text{ und } \vec{j}_d(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} \vec{\gamma}_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{q}}$$

$$T_\tau \left(c_{\vec{k}_1}(\tau_1) c_{\vec{k}_2}^\dagger(\tau_2) \frac{\partial d(\vec{q}, \tau)}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} T_\tau \left(c_{\vec{k}_1}(\tau_1) c_{\vec{k}_2}^\dagger(\tau_2) d(\vec{q}, \tau) \right) + \delta(\tau - \tau_1) \left([d(\vec{q}, \tau), c_{\vec{k}_1}(\tau_1)] c_{\vec{k}_2}^\dagger(\tau_2) \right) + \delta(\tau - \tau_2) \left(c_{\vec{k}_1}(\tau_1) [d(\vec{q}, \tau), c_{\vec{k}_2}^\dagger(\tau_2)] \right)$$

(Wir erinnern uns an $T_\tau a(\tau)b(\tau') = \theta(\tau - \tau')a(\tau)b(\tau') - \theta(\tau' - \tau)b(\tau')a(\tau)$.) Auf diese Weise konstruiert man immer WARD-Identitäten. Mit $[d(\vec{q}), c_{\vec{k}_1}] = -\alpha_{\vec{k}_1} c_{\vec{k}_1+\vec{q}}, \dots$, dem Erhaltungssatz und Mittelung ergibt sich:

$$-\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left(\alpha_{\vec{k}} \frac{\partial}{\partial \tau} - \vec{q} \cdot \vec{\gamma}_{\vec{k}} \right) G_2(\vec{k}_1, \tau_1; \vec{k}_2, \tau_2; \vec{k} + \vec{q}, \tau; \vec{k}, \tau) = \alpha_{\vec{k}_1} \delta(\tau - \tau_1) G(\vec{k}_1 + \vec{q}, \vec{k}_2; \tau - \tau_2) - \alpha_{\vec{k}_2 + \vec{q}} \delta(\tau - \tau_2) G(\vec{k}_1, \vec{k}_2 - \vec{q}; \tau - \tau_1)$$

Nutzen wir außerdem die Translationsinvarianz aus und führen eine FOURIER-Transformation $\tau \mapsto \omega$ durch, so folgt die WARD-Identität für den Zwei-Teilchen-Propagator.

$$-\frac{1}{N} \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}' + i\omega_n'} (i\nu \alpha_{\vec{k}} - \vec{q} \cdot \vec{\gamma}_{\vec{k}'}) G_2(k - q, k, k' + q, k') = \alpha_{\vec{k} - \vec{q}} G(k) - \alpha_{\vec{k} + \vec{q}} G(k - q)$$

Für Vertexfunktionen:

$$\Gamma(k - q, k) = \frac{1}{G(k)G(k - q)} \frac{1}{N\beta} \sum_{\vec{k}'} \alpha_{\vec{k}'} G_2(k - q, k, k' + q, k')$$

Genauso können wir die Vektor-Vertexfunktion einführen:

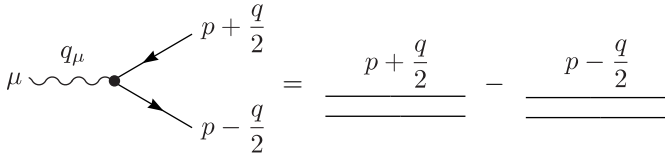
$$\vec{\Lambda}(k - q, k) = \frac{1}{G(k)G(k - q)} \frac{1}{N\beta} \sum_{\vec{k}'} \vec{\gamma}_{\vec{k}'} G_2(k - q, k, k' + q, k')$$

Hieraus folgt unter Ausnutzung der WARD-Identität:

$$i\nu \Gamma(k - q, k) - \vec{q} \cdot \vec{\Lambda}(k - q, k) = \frac{\alpha_{\vec{k} + \vec{q}}}{G(k)} - \frac{\alpha_{\vec{k} - \vec{q}}}{G(k - q)}$$

Dies ist nun die WARD-Identität für Vertexfunktionen. Leider treten in dieser Gleichung beide Vertexfunktionen auf. Alternative Ableitung: Wir gehen aus von der Vierer-Strom-Erhaltung $\partial_\mu j^\mu = 0$. Dies ist äquivalent zu $q_\mu j^\mu(q) = 0$. Da die Ableitung auch auf die θ -Funktion wirkt, folgt unter Ausnutzung des Erhaltungssatzes:

$$q_\mu \langle j^\mu \psi_{p - \frac{q}{2}} \psi_{p + \frac{q}{2}}^\dagger \rangle = 0 + \langle \psi_{p - \frac{q}{2}} \psi_{p - \frac{q}{2}}^\dagger \rangle - \langle \psi_{p + \frac{q}{2}} \psi_{p + \frac{q}{2}}^\dagger \rangle = G\left(p + \frac{q}{2}\right) - G\left(p - \frac{q}{2}\right)$$



Anwendung für Ladungserhaltung ($\alpha_{\vec{k}} = 1$, $\gamma_{\vec{k}} = \partial_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}$), wobei d die Teilchendichte und \vec{j}_d der Teilchenstrom ist:

a.) Statischer Grenzfall: Die externe Frequenz $i\nu$ verschwindet.

$$\vec{q} \cdot \vec{\Lambda}(\vec{k} - \vec{q}, i\omega_n, \vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{G(k - q, i\omega_n)} - \frac{1}{G(k, i\omega_n)}$$

Die Frequenzen der fermionischen Operatoren sind gleich, da $i\nu = 0$ ist. Mit $1/G(k, i\omega_n) = i\omega_n - \varepsilon_k - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)$ und $q \mapsto 0$ folgt:

$$\vec{\Lambda}(\vec{k}, i\omega_n, \vec{k}, i\omega_n) = \partial_{\vec{k}} (\varepsilon_k + \Sigma(k, i\omega_n)) = \boxed{\vec{v}_k + \partial_{\vec{k}} \Sigma(k, i\omega_n)}$$

$$\vec{\Lambda}(\vec{k}, \omega + i\delta, \vec{k}, \omega + i\delta) = \vec{v}_k + \vec{\nabla}_{\vec{k}} \Sigma(k, \omega + i\delta)$$

Störungstheoretische Korrekturen schlagen sich in Korrekturen der Vertexfunktion über. Diese ist nützlich, wenn man Leitfähigkeitsschleifen berechnen möchte.

b.) Langwelliger Grenzfall: $q = 0$

Wir erhalten hier eine Relation für die skalare Vertexfunktion:

$$i\nu \Gamma(\vec{k}, i\omega_n - i\nu, \vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{G(k, i\omega_n)} - \frac{1}{G(k, i\omega_n - i\nu)} = i\nu - (\Sigma(k, i\omega_n) - \Sigma(k, i\omega_n - i\nu))$$

Jetzt lassen wir ν gegen Null gehen und machen danach eine analytische Fortsetzung $\omega_n \mapsto \omega + i\delta$:

$$\Gamma(\vec{k}, \omega + i\delta, \vec{k}, \omega + i\delta) = 1 - \frac{\partial \Sigma(k, \omega + i\delta)}{\partial \omega}$$

$\partial \Sigma / \partial \omega$ ist die Renormierung der Dispersion von einer FERMI-Flüssigkeit. Für $k \hat{=} k_F$ und $\omega \approx 0$ folgt:

$$\Gamma(k_F, i\delta, k_F, i\delta) = \frac{m^*}{m_0}$$

m^* ist die effektive Masse. Die skalare Vertexfunktion ist renormiert um den Faktor der effektiven Masse.

5.3 Supraleiter: Eichinvarianz

Das Ziel ist die elektromagnetische Response von Supraleitern. Wir betrachten die Kontinuitätsgleichung in der Viererschreibweise:

$$\sum_{\mu} g_{\mu} j^{\mu} = 0 \text{ mit } J^{\mu} = \langle \hat{j}^{\mu} \rangle$$

Die Response-Funktion definieren wir im Sinne des COOPER-Formalismus als Proportionalitätsfaktor zwischen der Stromdichte und dem Viererpotential:

$$J_{\mu}(q) = -\frac{c}{4\pi} \sum_{\nu} K_{\mu\nu}(q) A^{\nu}(q)$$

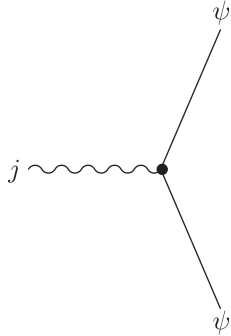
Daraus folgt mit der Kontinuitätsgleichung:

$$\sum_{\mu} g^{\mu} K_{\mu\nu}(q) = 0$$

5.3.1 Ward-Identität für Supraleiter

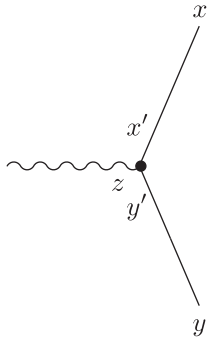
Wir definieren:

$$\underline{\underline{\Lambda}}_{\mu}(x, y, z) = \langle T_{\tau} j_{\mu}(z) \psi(x) \psi^{\dagger}(y) \rangle \text{ mit } \psi(k) = (c_{k\uparrow}, c_{-k\downarrow}^{\dagger}) \quad (**)$$



Die beiden äußeren Fermionlinien können wir abschneiden und damit eine Vertex-Funktion $\underline{\underline{\Gamma}}$ definieren:

$$\underline{\underline{\Lambda}}_{\mu}(x, y, z) = e \int d^4 x' d^4 y' \underline{\underline{G}}(x, x') \underline{\underline{\Gamma}}_{\mu}(x', y', z) \underline{\underline{G}}(y', y) \text{ mit } \underline{\underline{G}}(x, x') = -\langle T_{\tau} \psi(x) \psi^{\dagger}(x') \rangle$$



Wir bilden $\partial_{\mu}(**)$:

$$\sum_{\mu} q^{\mu} \underline{\underline{\Gamma}}_{\mu}(p+q, p) = \tau_3 \underline{\underline{G}}^{-1}(p) - \underline{\underline{G}}^{-1}(p+q) \tau_3$$

Dies ist die verallgemeinerte WARD-Identität (Matrix-Form im NAMBU-Formalismus). Strom-Operator:

$$\hat{j}_{\mu}(q) = \begin{cases} \sum_p \psi_p^{\dagger} \left(-\frac{e}{m} \left(p + \frac{q}{2} \right)_{\mu} \mathbf{1}_2 \right) & \text{für } \mu = 1, 2, 3 \\ \sum_p \psi_p^{\dagger} \psi_p^{\dagger} (-e\tau_3) \psi_{p+q} & \text{für } \mu = 0 \end{cases}$$

Wir führen eine freie Vertexfunktion ein:

$$\gamma_\mu(p+q, p) = \begin{cases} \frac{1}{m} \left(p + \frac{q}{2}\right)_\mu \mathbf{1}_2 & \text{für } \mu = 1, 2, 3 \\ \tau_3 & \text{für } \mu = 0 \end{cases}$$

Damit können wir den Stromoperator $\hat{j}(q)$ ausdrücken als:

$$\hat{j}_\mu(q) = -e \sum_p \psi_p^\dagger \gamma_\mu(p+q, p) \psi_{p+q}$$

Man kann zeigen: Wenn der Kernel $K_{\mu\nu}$ mit der Vertexfunktion $\underline{\Gamma}$ berechnet wird, dann ist $\sum q^\mu K_{\mu\nu} = 0$ erfüllt.

$$K \sim \gamma \circlearrowleft \Gamma$$

5.3.2 Vertex-Funktion und kollektive Moden

Wir wollen dies zunächst an einer neutralen Supraflüssigkeit durchführen. Ein Pol in einer Zweiteilchenfunktion (oder Vertexfunktion) korrespondiert zu einer kollektiven Anregung. Wir betrachten einen Supraleiter mit „pairing-approximation“ (Aufsummierung einer gewissen Klasse von Diagrammen). Wir haben also ein Elektronengas und eine Wechselwirkung $V(p-p')$. Dann wird die Näherung durch folgende DYSONgleichung definiert:

$$\underline{\underline{G}}^{-1}(p) = p_0 \mathbf{1}_2 - \varepsilon_p \tau_3 - \underline{\underline{\Sigma}}(p) \quad \text{mit} \quad \underline{\underline{\Sigma}}(p) = \int \frac{d^4 p'}{(2\pi)^4} \underline{\underline{G}}(p') \tau_3 V(p-p')$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\Sigma}}(p) &= \int \frac{d^4 p'}{(2\pi)^4} \underline{\underline{G}}(p') \tau_3 V(p-p') = \\ &= \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \end{aligned}$$

Die WARD-Identität wird erfüllt durch die Vertex-Funktion:

$$\underline{\underline{\Gamma}}_\mu(p+q, p) = \mathbf{1}_2 \gamma_\mu(p+q, p) + \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \tau_3 \underline{\underline{G}}(k+q) \underline{\underline{\Gamma}}_\mu \underline{\underline{G}}(k) \tau_3 V(p-k)$$

$$\text{Diagram 1} = \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3}$$

Wir machen die Annahme, dass sich $V(k-p)$ faktorisieren lässt: $V(k-p) = \lambda w^*(k)w(p)$. Damit vereinfacht sich die Integralgleichung. Man kann zeigen, dass sich $\underline{\underline{\Gamma}}_\mu$ schreiben lässt als:

$$\underline{\underline{\Gamma}}_\mu(p+q, p) = \gamma_\mu(p+q, p) + (\mathbf{1}_2 - \lambda \underline{\underline{\phi}})^{-1} \chi_\mu(q) w^*(p)$$

$(\mathbf{1}_2 - \lambda \underline{\underline{\phi}}(q))^{-1}$ rührt von der Aufsummation der geometrischen Reihe her.

$$\underline{\underline{\phi}}(q) = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \tau_3 \underline{\underline{G}}(k+q) \tau_3 \underline{\underline{G}}(k) |w(k)|^2$$

$$\underline{\underline{\chi}}_\mu(q) = \lambda \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \tau_3 \underline{\underline{G}}(k+q) \tau_3 \underline{\underline{G}}(k) \gamma_\mu(k+q, k) w(k)$$

Wenn $\det(\mathbf{1}_2 - \lambda \underline{\underline{\phi}}(q)) = 0$ wird, dann haben wir einen Pol und damit eine kollektive Mode. Mit

$$\omega(k) = \begin{cases} 1 & \text{für } |\varepsilon_k| < \omega_D \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

folgt aus der Gleichung der Pol bei:

$$\boxed{\Omega_q = \frac{v_F}{\sqrt{3}}|q| + O(q^2)}$$

Dies ist die GOLDSTONE-Mode der neutralen Supraflüssigkeit (BOGOLIUBOV). Achtung: Bei geladenem Supraleiter ist langreichweitige COULOMB-Wechselwirkung wichtig! Dann wird die kollektive Mode zu einer endlichen Energie verschoben (BOGOLIUBOV, ANDERSON, HIGGS).