

Prof. Dr. Andreas Mielke  
Institut für Theoretische Physik  
Universität Heidelberg  
Philosophenweg 19  
69120 Heidelberg  
Germany

<http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~mielke/>  
e-mail: [mielke@tphys.uni-heidelberg.de](mailto:mielke@tphys.uni-heidelberg.de)

# **Advanced Condensed Matter Theory**

**Andreas Mielke**

Wintersemester 2014/2015  
Zeit: Dienstag, 9-11  
Philosophenweg 19 SR

Dieses Script ist im Aufbau.



---

## Abstract

Starke Korrelationen sind die Ursache für eine Vielzahl von Phänomenen in der modernen Festkörperphysik, z.B. Hochtemperatursupraleitung (Nobelpreis 1987 <http://www.nobel.se/physics/laureates/1987/index.html>) und gebrochenzahlig quantisierter Halleffekt (Nobelpreis 1998 <http://www.nobel.se/physics/laureates/1998/index.html>). In der Theorie benötigt man neue Konzepte und Methoden zur Behandlung dieser Phänomene. Ziel der Vorlesung ist es, in diese neuen Methoden einzuführen und zu einem theoretischen Verständnis der Phänomene zu gelangen, die durch starke Korrelationen entstehen. Das Hubbardmodell spielt für die moderne Vielteilchenphysik eine ähnliche Rolle wie das Isingmodell für die statistische Physik: Es dient als Standardmodell für fast alle Phänomene wechselwirkender Fermionen. Das Hubbardmodell wurde zuerst für die Beschreibung von Übergangsmetallen vorgeschlagen, es dient zur Beschreibung von magnetischen (Ferromagnetismus, Antiferromagnetismus, Ferrimagnetismus) und elektrischen Phänomenen (Metall-Isolator Übergang, Supraleitung), und es ist in einer Dimension eine Luttinger-Flüssigkeit. Gerade im Zusammenhang mit Hochtemperatursupraleitern ist es in der letzten Zeit intensiv untersucht worden. Obwohl das Modell sehr einfach ist, zeigt es je nach Dimension und Gitter sehr unterschiedliches Verhalten. In der Vorlesung werden diese verschiedenen Aspekte und Phänomene diskutiert, es werden exakte Resultate hergeleitet und unterschiedliche Näherungsverfahren behandelt. Das Ziel ist es, einen Überblick über die vielfältigen Anwendungen des Hubbardmodells zu geben.

Voraussetzung für die Vorlesung sind gute Kenntnisse in Quantenmechanik und statistischer Physik, Grundkenntnisse in Festkörperphysik. Theoretische Festkörperphysik wird nicht vorausgesetzt, kann aber nützlich sein.

## Hinweise zu diesem Text

Das Manuscript ist in unterschiedlichen Formaten verfügbar. Ich empfehle die Verwendung der pdf-Version und den Acrobat Reader, da an vielen Stellen von den zusätzlichen Möglichkeiten des pdf Gebrauch gemacht wird. Beispielsweise sind alle Verweise innerhalb des Textes aktive Verknüpfungen. Links für Zitate sind **dunkelrot**, Links auf Textstellen **dunkelblau**, Links auf http-Adressen **dunkelgrün** eingefärbt. Diese können sie nutzen, wenn Sie den Acrobat Reader so konfigurieren, daß bei Verweisen auf externe Quellen ein WWW-Browser die entsprechenden Seiten anzeigt.

Das Manuscript wird fortlaufend erweitert und ergänzt.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Wechselwirkende Fermionen und Bosonen</b>	<b>7</b>
1.1	Quantensysteme mit vielen Teilchen . . . . .	7
1.2	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen . . . . .	7
1.3	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Bosonen . . . . .	9
1.4	Einteilchenoperatoren . . . . .	10
1.5	Wechselwirkungen . . . . .	12
1.6	Kohärente Zustände . . . . .	13
1.6.1	Kohärente Zustände für Bosonen . . . . .	13
1.6.2	Grassmannalgebra . . . . .	15
1.6.3	Kohärente Zustände für Fermionen . . . . .	17
1.7	Gaußintegrale . . . . .	20
1.8	Funktional-Integral Darstellung . . . . .	21
1.9	Das freie System . . . . .	22
1.10	Störungstheorie . . . . .	26
1.11	Frequenz und Impulsdarstellung . . . . .	27
1.12	Berechnung von Greenschen Funktionen . . . . .	28
<b>2</b>	<b>Fermiflüssigkeiten</b>	<b>33</b>
2.1	Das Quasiteilchenkonzept . . . . .	33
2.2	Gleichgewichtseigenschaften der normalen Fermiflüssigkeit . . . . .	35
2.3	Mikroskopische Herleitung . . . . .	39
2.4	Renormierung . . . . .	43
2.4.1	Grundidee . . . . .	43
2.4.2	Effektive Wirkung . . . . .	44
2.4.3	Renormierungsgleichung für $G_{\text{eff}}$ . . . . .	45
2.4.4	Das Hubbardmodell I, Renormierung . . . . .	48
2.5	Ergänzung: Das Hubbardmodell II, Allgemeine Resultate . . . . .	51
2.5.1	Symmetrien des Hubbardmodells . . . . .	54
2.5.2	Das Hubbardmodell bei halber Füllung: Antiferromagnetismus . . . . .	55
2.5.3	Ferromagnetismus im Hubbardmodell . . . . .	57
<b>3</b>	<b>Hochtemperatursupraleitung: Dotierte Mottisolatoren</b>	<b>59</b>
3.1	Vorbemerkungen . . . . .	59
3.2	Modelle für Hochtemperatursupraleiter . . . . .	59
3.2.1	Einteilchen-Hamiltonoperator . . . . .	60
3.2.2	Wechselwirkungen . . . . .	60
3.2.3	Ein effektives Einbandmodell . . . . .	61
3.2.4	$t - J$ Modell . . . . .	62
3.3	Frustrierte Spinsysteme . . . . .	63
3.3.1	Grundlegende Ideen . . . . .	63
3.3.2	RVB-Zustände . . . . .	63
3.3.3	Der Néel-Zustand . . . . .	65
3.3.4	Kurzreichweitige Korrelationen . . . . .	66

3.3.5	Das zweidimensionale Heisenbergmodell . . . . .	66
3.4	Feldtheoretische Beschreibung . . . . .	67
3.4.1	Fermionen und Schwingerbosonen . . . . .	67
3.4.2	Feldtheoretische Formulierung . . . . .	68
3.5	Der verdünnte Antiferromagnet: Das $t - J$ Modell . . . . .	73
<b>4</b>	<b>Der Quantenhalfeffekt</b>	<b>77</b>
4.1	Einführung . . . . .	77
4.2	Der ganzzahlige Quantenhalfeffekt . . . . .	79
4.2.1	Störstellen . . . . .	79
4.2.2	Laughlins Eichargument . . . . .	80
4.3	Der gebrochenzahlige Quantenhalfeffekt . . . . .	82
4.3.1	Wellenfunktionen . . . . .	82
4.3.2	Elementare Anregungen . . . . .	86
4.3.3	Periodische Randbedingungen . . . . .	87
4.4	Universalität . . . . .	87
4.4.1	Klassische Elektrodynamik in Quantenhalssystemen. . . . .	87
4.4.2	Quantisierung . . . . .	88

# 1 Wechselwirkende Fermionen und Bosonen

## 1.1 Quantensysteme mit vielen Teilchen

In der Realität hat man häufig mit Quantensystemen zu tun, die aus vielen Teilchen bestehen. Jedes einzelne Teilchen kann durch eine Wellenfunktion beschrieben werden, die Element eines Hilbertraums ist. Der Hilbertraum für zwei verschiedene Teilchen ist einfach das Produkt der Hilberträume der beiden Teilchen. Für identische Teilchen gilt das nicht. Abhängig davon, ob es sich um *Bosonen* oder *Fermionen* handelt, müssen die gemeinsamen Wellenfunktionen *symmetrisch* oder *antisymmetrisch* sein. Entsprechendes gilt, wenn man Systeme mit vielen Teilchen betrachtet. Wir werden im folgenden eine kompakte Notation für die Beschreibung solcher Zustände entsprechender Operatoren einführen. Dies geschieht zunächst getrennt für Fermionen und Bosonen.

## 1.2 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen

Sei  $\{\phi_i(\vec{r}, \sigma)\}$  eine Orthonormalbasis von Einteilchenzuständen. Im folgenden sei  $q = (\vec{r}, \sigma)$ . Eine Basis von  $N$ -Teilchen Zuständen erhält man, wenn man im Fall von Fermionen aus den Einteilchenzuständen Slaterdeterminanten bildet:

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

Entwickelt man die Slaterdeterminante, so erhält man

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \prod_j \phi_{i_j}(q_{P(j)})$$

Wegen der Konstruktion als Slaterdeterminante sind diese Zustände antisymmetrisch bei Vertauschung zweier Indizes

$$|i_1, \dots, i_\alpha, \dots, i_\beta, \dots, i_N\rangle = -|i_1, \dots, i_\beta, \dots, i_\alpha, \dots, i_N\rangle$$

Normierung:

$$\langle i_1, i_2, \dots, i_N | i_1, i_2, \dots, i_N \rangle = 1$$

Orthogonalität:

$$\langle j_1, j_2, \dots, j_N | i_1, i_2, \dots, i_M \rangle = \begin{cases} \sum_P (-1)^P \prod_k \delta_{j_k, i_{P(k)}} & \text{falls } N = M \\ 0 & \text{falls } N \neq M. \end{cases}$$

Ich definiere einen Erzeugungsoperator für ein Teilchen im Zustand  $i$  durch

$$c_i^\dagger |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = |i, i_1, i_2, \dots, i_N\rangle$$

$c_i^\dagger$  bildet also Zustände mit  $N$  Teilchen auf solche mit  $N + 1$  Teilchen ab. Die rechte Seite kann aber auch verschwinden, und zwar für Fermionen genau dann, wenn einer der Indizes  $i_k = i$  ist. Es gilt

$$\begin{aligned} c_i^\dagger c_j^\dagger |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle &= |i, j, i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \\ &= -|j, i, i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \\ &= -c_j^\dagger c_i^\dagger |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \end{aligned}$$

Da diese Beziehung für alle Zustände gilt, gilt allgemein

$$c_i^\dagger c_j^\dagger = -c_j^\dagger c_i^\dagger$$

Damit gilt auch  $c_i^\dagger c_i^\dagger = 0$  für Fermionen. Zudem gilt

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger \dots c_{i_N}^\dagger |\text{vak.}\rangle$$

Man kann den zu  $c_i^\dagger$  hermitesch adjungierten Operator  $c_i$  einführen:

$$\begin{aligned} \langle j_1, \dots, j_M | c_i | i_1, \dots, i_N \rangle &= \langle i_1, \dots, i_N | c_i^\dagger | j_1, \dots, j_M \rangle^* \\ &= \langle i_1, \dots, i_N | i, j_1, \dots, j_M \rangle^* \\ &= \begin{cases} \delta_{i_1, i} \delta_{i_2, j_1} \dots - \delta_{i_1, j_1} \delta_{i_2, i} \pm \dots & \text{insgesamt } N! \text{ Permutationen, falls } N = M + 1 \\ 0 & \text{falls } N \neq M + 1. \end{cases} \\ &= \delta_{i_1, i} \langle i_2, \dots, i_N | j_1, \dots, j_M \rangle^* - \delta_{i_2, i} \langle i_1, i_3, \dots, i_N | j_1, \dots, j_M \rangle^* + \dots (N \text{ Terme}). \end{aligned}$$

Damit gilt

$$c_i |i_1, \dots, i_N\rangle = \delta_{i_1, i} |i_2, \dots, i_N\rangle - \delta_{i_2, i} |i_1, i_3, \dots, i_N\rangle + \dots (N \text{ Terme}).$$

und

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

Die Vertauschungsrelation der Erzeugungsoperatoren  $c_i^\dagger$  überträgt sich auf die Vernichtungsoperatoren  $c_i$ :

$$c_i c_j = -c_j c_i$$

Man führt den Antikommutator  $[A, B]_+ = AB + BA$  ein und schreibt

$$[c_i^\dagger, c_j^\dagger]_+ = 0, \quad [c_i, c_j]_+ = 0$$

Wegen

$$\begin{aligned} c_i^\dagger c_j |i_1, \dots, i_N\rangle &= \delta_{i_1, j} |i, i_2, \dots, i_N\rangle - \delta_{i_2, j} |i, i_1, i_3, \dots, i_N\rangle + \dots \\ c_j c_i^\dagger |i_1, \dots, i_N\rangle &= \delta_{i_1, j} |i_1, \dots, i_N\rangle - \delta_{i_1, j} |i, i_2, \dots, i_N\rangle + \delta_{i_2, j} |i, i_1, i_3, \dots, i_N\rangle + \dots \end{aligned}$$

gilt

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

und, da dies wieder für alle Zustände gilt

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

## 1.3 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Bosonen

Bosonische Vielteilchen-Wellenfunktionen sind symmetrisch. Man kann analog zu den Fermionen den Ansatz

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \prod_j \phi_{i_j}(q_{P(j)})$$

machen. Allerdings stimmt die Normierung noch nicht. Da diese Wellenfunktion symmetrisch gegenüber dem Vertauschen zweier Indizes  $i_j$  ist, verschwindet sie nicht, wenn zwei Indizes gleich sind. Sei  $n_i$  die Anzahl der Teilchen im Zustand  $i$ . Dann gilt

$$\langle i_1, i_2, \dots, i_N | i_1, i_2, \dots, i_N \rangle = \prod_{i \in \{i_1, \dots, i_N\}} n_i!$$

Mit der richtigen Normierung gilt also

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in \{i_1, \dots, i_N\}} n_i!}} \sum_P \prod_j \phi_{i_j}(q_{P(j)})$$

und damit

$$\langle j_1, j_2, \dots, j_N | i_1, i_2, \dots, i_M \rangle = \begin{cases} \frac{1}{\prod_{i \in \{i_1, \dots, i_M\}} n_i!} \sum_P \prod_k \delta_{j_k, i_{P(k)}} & \text{falls } N = M \\ 0 & \text{falls } N \neq M. \end{cases} \quad (1.1)$$

Für Bosonen werden Erzeugungsoperatoren gemäß

$$c_i^\dagger |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \sqrt{n_i + 1} |i, i_1, i_2, \dots, i_N\rangle$$

eingeführt. Dabei ist  $n_i$  die Anzahl der Teilchen im Einteilchenzustand  $i$  in  $|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle$ . Das ist ganz analog zu den Aufsteigeoperatoren im harmonischen Oszillator. Man kann den zu  $c_i^\dagger$  hermitesch adjungierten Operator  $c_i$  einführen:

$$\begin{aligned} \langle j_1, \dots, j_M | c_i | i_1, \dots, i_N \rangle &= \langle i_1, \dots, i_N | c_i^\dagger | j_1, \dots, j_M \rangle^* \\ &= \sqrt{n_i + 1} \langle i_1, \dots, i_N | i, j_1, \dots, j_M \rangle^* \\ &= \frac{\sqrt{n_i + 1}}{\prod_{i' \in \{i_1, \dots, i_N\}} n_{i'}!} \begin{cases} \delta_{i_1, i} \delta_{i_2, j_1} \dots + \delta_{i_1, j_1} \delta_{i_2, i} + \dots & \text{insgesamt } N! \text{ Permutationen, falls } N = M + 1 \\ 0 & \text{falls } N \neq M + 1. \end{cases} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_i + 1}} (\delta_{i_1, i} \langle i_2, \dots, i_N | j_1, \dots, j_M \rangle^* + \delta_{i_2, i} \langle i_1, i_3, \dots, i_N | j_1, \dots, j_M \rangle^* + \dots (N \text{ Terme})). \end{aligned}$$

Hierbei ist  $n_i$  die Anzahl der Teilchen im Einteilchenzustand  $i$  in  $|j_1, \dots, j_M\rangle$ . Damit gilt

$$c_i |i_1, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_i}} (\delta_{i_1, i} |i_2, \dots, i_N\rangle + \delta_{i_2, i} |i_1, i_3, \dots, i_N\rangle + \dots (N \text{ Terme}))$$

wobei jetzt  $n_i$  die Anzahl der Teilchen im Einteilchenzustand  $i$  in  $|i_1, \dots, i_N\rangle$  ist (das ist ein Teilchen mehr als in  $|j_1, \dots, j_M\rangle$ ). Analog zum fermionischen Fall berechnet man

$$[c_i^\dagger, c_j^\dagger]_- = 0$$

$$[c_i, c_j]_- = 0$$

$$[c_i, c_j^\dagger]_- = \delta_{i, j}$$

wobei jetzt  $[\cdot, \cdot]_-$  der Kommutator ist. Die Erzeugungsoperatoren können genutzt werden, um alle Vielteilchenzustände zu erzeugen:

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_{i \in \{i_1, \dots, i_N\}} n_i!}} c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger \dots c_{i_N}^\dagger |\text{vak.}\rangle \quad (1.2)$$

## Zusammenfassung: Erzeuger und Vernichter

Führt man eine Variable  $\zeta$  ein, die für Fermionen  $-1$ , für Bosonen  $+1$  ist, dann lassen sich die Formeln für Fermionen und Bosonen in der kompakten Form

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{i \in \{i_1, \dots, i_N\}} n_i!}} \sum \zeta_P^P \prod_j \phi_{i_j}(q_{P(j)}) \quad (1.3)$$

$$\langle j_1, j_2, \dots, j_N | i_1, i_2, \dots, i_M \rangle = \begin{cases} \frac{1}{\prod_{i \in \{i_1, \dots, i_M\}} n_i!} \sum \zeta_P^P \prod_k \delta_{j_k, i_{P(k)}} & \text{falls } N = M \\ 0 & \text{falls } N \neq M. \end{cases} \quad (1.4)$$

$$c_i^\dagger |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \sqrt{n_i + 1} |i, i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \quad (1.5)$$

$$c_i |i_1, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_i}} (\delta_{i_1, i} |i_2, \dots, i_N\rangle + \zeta \delta_{i_2, i} |i_1, i_3, \dots, i_N\rangle + \dots (N \text{ Terme})) \quad (1.6)$$

$$[c_i^\dagger, c_j^\dagger]_{-\zeta} = 0 \quad (1.7)$$

$$[c_i, c_j]_{-\zeta} = 0 \quad (1.8)$$

$$[c_i, c_j^\dagger]_{-\zeta} = \delta_{i, j} \quad (1.9)$$

$$|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_{i \in \{i_1, \dots, i_N\}} n_i!}} c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger \dots c_{i_N}^\dagger |\text{vak.}\rangle \quad (1.10)$$

## 1.4 Einteilchenoperatoren

Betrachte den Operator

$$\hat{N} = \sum_i c_i^\dagger c_i$$

Es gilt

$$c_i^\dagger c_i |i_1, \dots, i_N\rangle = (\delta_{i_1, i} + \delta_{i_2, i} + \dots + \delta_{i_N, i}) |i_1, \dots, i_N\rangle$$

also

$$\hat{N} |i_1, \dots, i_N\rangle = N |i_1, \dots, i_N\rangle$$

$\hat{N}$  ist der Teilchenzahloperator. Er ist ein Einteilchenoperator, denn er kann auf Zustände mit einem Teilchen angewandt werden. Ein allgemeiner Einteilchenoperator  $T$  (zum Beispiel der Operator der kinetischen Energie oder ein Potential) kann natürlich auch in der bisher verwandten Einteilchenbasis verwendet werden. Es gilt

$$T |i\rangle = \sum_i t_{i, i} |i\rangle$$

Wir betrachten zunächst Operatoren, die in der gewählten Basis diagonal sind, d.h.

$$T |i\rangle = t_i |i\rangle$$

Für  $N$ -Teilchen Zustände gilt dann analog

$$T |i_1, \dots, i_N\rangle = \sum_j t_{i_j} |i_1, \dots, i_N\rangle$$

Der Operator wirkt auf alle Teilchen separat. Ich behaupte

$$T = \sum_i t_i c_i^\dagger c_i$$

Mit diesem  $T$  gilt

$$T|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = T \frac{1}{\sqrt{n_{i_1} + 1}} c_{i_1}^\dagger |i_2, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{i_1} + 1}} [T, c_{i_1}^\dagger] |i_2, \dots, i_N\rangle + \frac{1}{\sqrt{n_{i_1} + 1}} c_{i_1}^\dagger T |i_2, \dots, i_N\rangle$$

und ferner mit

$$[T, c_{i_1}^\dagger] = \sum_i t_i [c_i^\dagger c_i, c_{i_1}^\dagger] = t_{i_1} c_{i_1}^\dagger$$

$$\begin{aligned} T|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle &= t_{i_1} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle + c_{i_1}^\dagger T|i_2, \dots, i_N\rangle \\ &= \sum_j t_j |i_1, \dots, i_N\rangle \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck stimmt mit dem von oben für  $T$  überein.

Allgemeiner werden wir auch Einteilchenoperatoren betrachten, die nicht diagonal sind. Da sich jeder hermitesche Operator mit Hilfe einer unitären Transformation diagonalisieren läßt, müssen wir überlegen, wie eine solche unitäre Transformation der Basis auf die Einteilchenoperatoren wirkt. Führen wir also eine neue Basis  $|\alpha\rangle = \sum_i u_{\alpha i} |i\rangle$  ein, wobei  $U = (u_{\alpha i})$  eine unitäre Matrix ist. Die neuen Erzeugungsoperatoren bezeichnen wir mit  $c_\alpha^\dagger$ . Es gilt

$$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger |\text{vak.}\rangle &= |\alpha\rangle \\ &= \sum_i u_{\alpha i} |i\rangle \\ &= \sum_i u_{\alpha i} c_i^\dagger |\text{vak.}\rangle \\ &= \sum_i \langle \alpha | i \rangle c_i^\dagger |\text{vak.}\rangle \end{aligned}$$

Wir setzen also

$$c_\alpha^\dagger = \sum_i \langle \alpha | i \rangle c_i^\dagger$$

$$c_i^\dagger = \sum_\alpha \langle i | \alpha \rangle c_\alpha^\dagger$$

$$c_\alpha = \sum_i \langle i | \alpha \rangle c_i$$

$$c_i = \sum_\alpha \langle \alpha | i \rangle c_\alpha$$

Es gilt dann

$$\begin{aligned} T &= \sum_i t_i c_i^\dagger c_i \\ &= \sum_{i, \alpha, \beta} t_i \langle \alpha | i \rangle \langle i | \beta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta \\ &= \sum_{\alpha, \beta} t_{\alpha, \beta} c_\alpha^\dagger c_\beta \end{aligned}$$

Das ist die allgemeine Form für Einteilchenoperatoren.

**Beispiele:**

- Potential:  $V(\vec{r})$

$$t_{i,j} = \int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \phi_j(\vec{r})$$

- Kinetische Energie:

$$t_{i,j} = \int d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \phi_j(\vec{r})$$

In der Orthonormalbasis  $\phi_{\vec{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \chi_\sigma$  findet man

$$T = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma}$$

**1.5 Wechselwirkungen**

In dieser Vorlesung werden wir hauptsächlich wechselwirkende Systeme betrachten. Die meisten Wechselwirkungen sind Paar-Wechselwirkungen. Es sind also zwei Teilchen beteiligt. Solche Wechselwirkungen lassen sich durch Zweiteilchenoperatoren beschreiben. Im allgemeinen kann man nicht erwarten, daß Wechselwirkungen in einer Basis diagonal sind, die aus Einteilchenzuständen konstruiert ist. Der Einfachheit halber wollen wir aber zunächst von einem solchen Fall ausgehen. Bezeichnet man  $V$  den Operator der Wechselwirkung, dann gilt in dieser Basis

$$V|i, j\rangle = V_{ij}|i, j\rangle.$$

$|i, j\rangle$  ist ein Zwei-Teilchen-Zustand. Für Matrixelemente mit  $N$ -Teilchen-Zuständen erhält man

$$\begin{aligned} \langle j_1 \dots j_N | V | i_1 \dots i_N \rangle &= \sum_P \zeta^P \frac{1}{2} \sum_{k \neq k'} \langle j_{P_k}, j_{P_{k'}} | V | i_k, i_{k'} \rangle \prod_{l \neq k, k'} \langle j_{P_l} | i_l \rangle \\ &= \left( \frac{1}{2} \sum_{k \neq k'} V_{i_k, i_{k'}} \right) \langle j_1 \dots j_N | i_1 \dots i_N \rangle \end{aligned}$$

Die Summe  $\frac{1}{2} \sum_{k \neq k'}$  ist eine Summe über alle Paare von Teilchen im Zustand  $|i_1 \dots i_N\rangle$ . Ist  $i \neq i'$ , so ist die Anzahl von Paaren von Teilchen in den Zuständen  $i$  und  $i'$  durch  $n_i n_{i'}$  gegeben. Ist  $i = i'$ , so ist die Zahl der Paare  $n_i(n_i - 1)$ . Die Anzahl der Paare ist also

$$\begin{aligned} n_i n_j - \delta_{i,j} n_i &= c_i^\dagger c_i c_j^\dagger c_j - \delta_{i,j} c_i^\dagger c_i \\ &= \zeta c_i^\dagger c_j^\dagger c_i c_j \\ &= c_i^\dagger c_j^\dagger c_j c_i \end{aligned}$$

Daher gilt

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{i,j} c_i^\dagger c_j^\dagger c_j c_i = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle i, j | V | i, j \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_j c_i$$

Transformiert man auf eine beliebige Basis, so erhält man

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i, j | V | k, l \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

Dies ist schon die allgemeine Form eines Zweiteilchenoperators. Jede Zwei-Teilchen-Wechselwirkung wird in dieser Form geschrieben.

Die Darstellung eines Operators, zum Beispiel des Hamiltonoperators eines gegebenen Modells, mit Hilfe von Erzeugungoperatoren und Vernichtungsoperatoren ist letztlich eine sehr praktische Kurzschreibweise für die Matrixelemente dieses Operators in einer gegebenen Basis. Der entscheidende Vorteil dieser Schreibweise ist es, daß die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sehr einfache, algebraische Beziehungen erfüllen. Dadurch lassen sich viele Rechnungen sehr viel einfacher durchführen.

## 1.6 Kohärente Zustände

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind Operatoren, die Zustände von einem auf einen anderen Hilbertraum abbilden: Aus einem Zustand mit  $N$  Teilchen wird einer mit  $N \pm 1$  Teilchen. Durch sukzessives Anwenden von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren kommt man so in Hilberträume mit beliebiger Teilchenzahl. Die direkte Summe aller Hilberträume (mit  $N$  Teilchen,  $N = 0, \dots, \infty$ ) nennt man Fockraum. Mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wird der gesamte Fockraum aufgespannt. Für quantenmechanische Vielteilchensysteme ist es sinnvoll, im Fockraum zu arbeiten. Zum einen gibt es Systeme, bei denen die Teilchenzahl ohnehin keine gute Quantenzahl ist, zum anderen ist es vielfach bequem, mit einem großkanonischen Ensemble zu rechnen.

Bisher haben wir als Basis im Fockraum die aus den Einteilchenzuständen gebildeten  $N$ -Teilchenzustände gewählt. Es gibt aber eine andere Basis, die sich als nützlich erwiesen hat, die sogenannten kohärenten Zustände. Dies sind die Eigenzustände der Vernichtungsoperatoren.

Man kann sich zunächst klarmachen, daß ein Erzeugungsoperator keinen Eigenzustand haben kann. Nehmen wir an, es gäbe einen solchen Zustand. Dann wäre er eine Summe aus Zuständen mit unterschiedlichen Teilchenzahlen. In dieser Summe gäbe es einen Beitrag mit minimaler Teilchenzahl. Wendet man einen Erzeuger an, wird aber die Teilchenzahl erhöht. Es kann also keinen Beitrag mit kleinster Teilchenzahl, also auch keinen Eigenzustand geben.

Ein entsprechendes Argument kann man für einen Vernichtungsoperator nicht anführen, da es im Fockraum keinen Zustand mit maximaler Teilchenzahl gibt. Wir nehmen also an, wir hätten zu einem Vernichtungsoperator einen Eigenzustand gefunden, i.e.

$$c_i|\phi\rangle = \phi_i|\phi\rangle.$$

Da für Bosonen die verschiedenen Vernichtungsoperatoren vertauschen, gilt dies auch für die Eigenwerte. Für Bosonen können die Eigenwerte also normale, komplexe Zahlen sein. Für Fermionen erhält man beim Vertauschen zweier Vernichtungsoperatoren ein Vorzeichen. Für Fermionen können die  $\phi_i$  also keine komplexen Zahlen sein. Wir diskutieren daher zunächst kohärente Zustände für Bosonen und werden danach ein mathematisches Werkzeug einführen, mit Hilfe dessen sich auch kohärente Zustände für Fermionen erzeugen lassen.

### 1.6.1 Kohärente Zustände für Bosonen

Ein Zustand mit  $n_i$  Bosonen im Einteilchenzustand  $|i\rangle$ ,  $i = 1, \dots, N$  kann mit Hilfe von Erzeugern und Vernichtern in der Form

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = \prod_i \left( \frac{1}{\sqrt{n_i!}} (c_i^\dagger)^{n_i} \right) |\text{vak.}\rangle$$

geschrieben werden. Es gilt

$$c_i|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = \sqrt{n_i}|n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_N\rangle$$

Für den kohärenten Zustand  $|\phi\rangle$  setzen wir

$$|\phi\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} \phi_{n_1, n_2, \dots, n_N} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle$$

Die Bedingung  $c_i|\phi\rangle = \phi_i|\phi\rangle$  lautet dann

$$\phi_i \phi_{n_1, \dots, n_i, \dots, n_N} = \sqrt{n_i + 1} \phi_{n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_N}$$

Damit erhält man

$$\phi_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \prod_i \frac{\phi_i^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}$$

und somit

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} \prod_i \left( \frac{\phi_i^{n_i}}{n_i!} (c_i^\dagger)^{n_i} \right) |\text{vak.}\rangle \\ &= \exp\left(\sum_i \phi_i c_i^\dagger\right) |\text{vak.}\rangle \end{aligned}$$

Wendet man einen Erzeugungsoperator auf einen kohärenten Zustand an, so erhält man

$$\begin{aligned} c_i^\dagger |\phi\rangle &= c_i^\dagger \exp\left(\sum_i \phi_i c_i^\dagger\right) |\text{vak.}\rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial \phi_i} |\phi\rangle \end{aligned}$$

Als nächstes berechnen wir den Überlapp von zwei kohärenten Zuständen:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \sum_{n_1, \dots, n_N} \sum_{m_1, \dots, m_N} \prod_i \left( \frac{\psi_i^{*m_i} \phi_i^{n_i}}{\sqrt{m_i! n_i!}} \right) \langle m_1, \dots, m_N | n_1, \dots, n_N \rangle \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_N} \prod_i \left( \frac{\psi_i^{*n_i} \phi_i^{n_i}}{n_i!} \right) \\ &= \exp\left(\sum_i \psi_i^* \phi_i\right) \end{aligned}$$

Man kann zeigen, daß die kohärenten Zustände übervollständig sind. Diese Eigenschaft wird im folgenden sehr wichtig sein. Wir zeigen, daß die Beziehung

$$\int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) |\phi\rangle \langle \phi| = 1$$

gilt, wobei

$$D[\phi] = \prod_i \frac{d(\Re \phi_i) d(\Im \phi_i)}{\pi}$$

gilt. Um dies zu zeigen, berechnen wir den Kommutator

$$[c_i, |\phi\rangle \langle \phi|] = \left(\phi_i - \frac{\partial}{\partial \phi_i^*}\right) |\phi\rangle \langle \phi|$$

Damit gilt dann

$$[c_i, \int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) |\phi\rangle \langle \phi|] = \int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) \left(\phi_i - \frac{\partial}{\partial \phi_i^*}\right) |\phi\rangle \langle \phi|$$

Der Term mit der Ableitung kann partiell integriert werden, man sieht dann, daß die rechte Seite verschwindet. Also kommutieren alle Vernichter  $c_i$  mit dem Ausdruck  $\int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) |\phi\rangle \langle \phi|$ . Dieser Ausdruck muß also eine Zahl sein. Bildet man den Erwartungswert dieses Ausdrucks im Vakuum, so findet man

$$\int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) \langle \text{vak.} | |\phi\rangle \langle \phi| | \text{vak.}\rangle = \int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) = 1$$

Damit ist die Vollständigkeit gezeigt. Mit Hilfe der Vollständigkeit kann man leicht eine Formel für die Spur eines Operators angeben:

$$\text{Tr} A = \int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) \langle \phi | A | \phi \rangle$$

Ebenso läßt sich ein beliebiger Zustand  $|f\rangle$  nach den kohärenten Zuständen entwickeln:

$$|f\rangle = \int D[\phi] \exp(-\sum_i \phi_i^* \phi_i) \langle \phi | f \rangle | \phi \rangle$$

Den Ausdruck

$$f(\phi^*) := \langle \phi | f \rangle$$

bezeichnet man als die Darstellung von  $|f\rangle$  in kohärenten Zuständen, so wie man  $f(x) = \langle x | f \rangle$  als die Ortsdarstellung von  $|f\rangle$  bezeichnet. Es ist nützlich zu wissen, wie die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in dieser Darstellung wirken. Dazu berechnen wir

$$\langle \phi | c_i | f \rangle = \langle f | c_i^\dagger | \phi \rangle^* = \left( \frac{\partial}{\partial \phi_i} \langle f | \phi \rangle \right)^* = \frac{\partial f(\phi^*)}{\partial \phi_i^*}$$

und ebenso

$$\langle \phi | c_i^\dagger | f \rangle = \langle f | c_i | \phi \rangle^* = (\phi_i \langle f | \phi \rangle)^* = \phi_i^* f(\phi^*)$$

Man kann also symbolisch

$$c_i = \frac{\partial}{\partial \phi_i^*}, \quad c_i^\dagger = \phi_i^*$$

schreiben. Man erkennt sofort, daß die Vertauschungsrelationen damit erfüllt sind. Die Konsequenz ist, daß man einen Hamiltonoperator, der in der Teilchenzahldarstellung ausgedrückt durch Erzeuger und Vernichter in der Form  $H(\{c_i^\dagger, c_i\})$  geschrieben wird, in der Darstellung mit kohärenten Zuständen als  $H(\{\phi_i^*, \frac{\partial}{\partial \phi_i^*}\})$  geschrieben werden kann. Die Eigenwertgleichung lautet demnach

$$H(\{\phi_i^*, \frac{\partial}{\partial \phi_i^*}\}) f(\phi^*) = E f(\phi^*)$$

Damit erhält man auch sofort eine Formel für Matrixelemente eines Operators  $A(\{c_i^\dagger, c_i\})$ :

$$\langle \phi | A(\{c_i^\dagger, c_i\}) | \psi \rangle = A(\{\phi_i^*, \psi_i\}) \exp(\sum_i \phi_i^* \psi_i)$$

wobei man annehmen muß, daß alle Erzeuger links von den Vernichtern stehen. Diese Form der Ordnung heißt Normalordnung. Schon aus der Definition der kohärenten Zustände ist klar, daß sie keine Zustände mit fester Teilchenzahl sind. Der Erwartungswert von  $n_i = c_i^\dagger c_i$  ist durch  $\phi_i^* \phi_i$  gegeben, die Gesamtteilchenzahl ist also  $\bar{N} = \sum_i \phi_i^* \phi_i$ . Für die quadratische Abweichung erhält man

$$\frac{\langle \phi | (\hat{N} - \bar{N})^2 | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \sum_i \phi_i^* \phi_i = \bar{N}$$

Die relative Abweichung der Teilchenzahl von ihrem Mittelwert ist also  $\propto \bar{N}^{-1/2}$  und verschwindet im thermodynamischen Limes.

### 1.6.2 Grassmannalgebra

Wir haben gesehen, daß man mit den kohärenten Zuständen für Bosonen gut rechnen kann und werden von diesen Zuständen in Zukunft sehr viel Gebrauch machen. Es wäre also nützlich, ein entsprechendes Konzept auch für Fermionen zu haben. Wir haben schon gesehen, daß aufgrund der Vertauschungsrelationen für fermionische Vernichter deren Eigenwerte beim Vertauschen ein Vorzeichen erzeugen. Sie können also keine gewöhnlichen Zahlen sein. Man nennt solche Größen Grassmannvariable. Für sie lassen sich alle Rechenoperationen definieren, sie bilden eine Grassmannalgebra. Wir werden in diesem Unterabschnitt die wichtigsten Rechenregeln für diese Größen kennenlernen. Die Grassmannalgebra wird von einer Menge  $\{\xi_i, i = 1, \dots, N\}$  von Erzeugern aufgespannt. Die fundamentale Regel ist

$$\xi_i \xi_j + \xi_j \xi_i = 0$$

und damit

$$\xi_i^2 = 0$$

Wir werden im folgenden eine erweiterte Grassmannalgebra benutzen, die von den Erzeugern  $\{\xi_i, \xi_i^*, i = 1, \dots, N\}$  gebildet wird. Der  $*$  ist dabei eine symbolische Operation, für die die Regeln

$$(\xi_i)^* = \xi_i^*$$

$$(\xi_i^*)^* = \xi_i$$

$$(\xi_i \xi_j)^* = \xi_j^* \xi_i^*$$

gelten. Als nächstes betrachten wir Funktionen der  $\xi_i$  und  $\xi_i^*$ . Dies sind einfach Polynome der  $\xi_i$  und  $\xi_i^*$ , wobei in jedem Monom ein Faktor  $\xi_i$  natürlich nur einmal vorkommen kann, da sein Quadrat verschwindet. Bekannte analytische Funktionen definieren wir durch ihre Taylorentwicklung. So gilt zum Beispiel  $\exp(\xi_i) = 1 + \xi_i$ . Hat man Funktionen definiert, so kann man als nächstes Ableitungen dieser Funktionen definieren. Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \xi_i = 1$$

Hat man ein Produkt von mehreren Grassmannvariablen, so muß der Faktor, nach dem abgeleitet wird, zunächst bis zu der Ableitung nach vorne getauscht werden. Es gilt also zum Beispiel

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \xi_j^* \xi_k \xi_l \xi_i = \frac{\partial}{\partial \xi_i} (-\xi_i \xi_j^* \xi_k \xi_l) = -\xi_j^* \xi_k \xi_l$$

Wird ein Ausdruck abgelitten, in dem die Variable, nach der abgelitten wird, nicht vorkommt, dann verschwindet die Ableitung. Im übrigen gelten die gewohnten Produktregeln bis auf die Vorzeichen, die vom Vertauschen der Variablen herrühren. Ableitungen untereinander antivertauschen ebenso wie die Variablen selbst:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \frac{\partial}{\partial \xi_j} = - \frac{\partial}{\partial \xi_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i}$$

Als nächstes definieren wir Integrale über Grassmannfelder. Natürlich gibt es kein Integral, das einem Riemannintegral analog wäre. Das Integral über Grassmannfelder ist eine lineare Abbildung, die die gleichen Eigenschaften wie ein gewöhnliches Integral über Funktionen hat, die im Unendlichen verschwinden, wobei das Integral über ein totales Differential verschwindet. Das bedeutet, daß das Integral über 1 verschwindet, da 1 die Ableitung von  $\xi$  nach  $\xi$  ist.  $\xi$  selbst ist keine Ableitung. Das Integral über  $\xi$  kann frei definiert werden. Die übliche Konvention ist

$$\int d\xi 1 = 0$$

$$\int d\xi \xi = 1$$

Das gleiche gilt für die Größen  $\xi_i^*$ . Zu beachten ist, daß die Variable, über die integriert wird, immer vorne stehen muß. Betrachten wir als Beispiel eine Funktion

$$f(\xi_1, \xi_2) = a_0 + a_1 \xi_1 + a_2 \xi_2 + a_{12} \xi_1 \xi_2$$

Es gilt

$$\int d\xi_2 f(\xi_1, \xi_2) = a_2 - a_{12} \xi_1$$

und damit weiter

$$\int d\xi_1 d\xi_2 f(\xi_1, \xi_2) = -a_{12}$$

aber

$$\int d\xi_2 d\xi_1 f(\xi_1, \xi_2) = a_{12}$$

Die Ausdrücke  $d\xi_i$  antvertauschen also ebenso wie die Variablen  $\xi_i$  selbst. Mit diesen Definitionen kann man alle Integrale sofort berechnen. Es gilt zum Beispiel

$$\int d\xi d\xi^* \exp(-\xi \xi^*) = \int d\xi d\xi^* (1 - \xi \xi^*) = 1$$

Als letztes definieren wir ein Skalarprodukt für Funktionen von Grassmannvariablen. Seien  $f$  und  $g$  Funktionen von  $\xi_1, \dots, \xi_N$ , dann sei

$$\langle f | g \rangle = \int D[\xi] \exp(-\sum_i \xi_i^* \xi_i) f^*(\xi_1, \dots, \xi_N) g(\xi_1^*, \dots, \xi_N^*)$$

mit

$$D[\xi] = \prod_i (d\xi_i^* d\xi_i)$$

Mit Hilfe der Grassmannvariablen sind wir in der Lage, kohärente Zustände für Fermionen zu konstruieren.

### 1.6.3 Kohärente Zustände für Fermionen

Zunächst müssen wir erklären, wie die Grassmannvariablen mit den Erzeugern und Vernichtern für die Fermionen vertauschen. Es ist natürlich anzunehmen, daß

$$[c_i, \xi_j]_+ = [c_i^\dagger, \xi_j]_+ = [c_i, \xi_j^*]_+ = [c_i^\dagger, \xi_j^*]_+ = 0$$

für alle  $i, j$ . Als Ansatz für den kohärenten Zustand nehmen wir

$$|\xi\rangle = \exp(-\sum_i \xi_i c_i^\dagger) |\text{vak.}\rangle = \prod_i (1 - \xi_i c_i^\dagger) |\text{vak.}\rangle$$

Der zweite Ausdruck ergibt sich aus dem ersten, wenn man beachtet, daß alle Ausdrücke der Form  $\xi_i c_i^\dagger$  miteinander vertauschen, so daß man die Exponentialfunktion in ein Produkt einzelner Exponentialfunktionen zerlegen kann. Auch jeder Vernichter  $c_j$  vertauscht mit  $\xi_i c_i^\dagger$  sofern  $i \neq j$ . Für  $i = j$  gilt

$$c_i \xi_i c_i^\dagger = -\xi_i c_i c_i^\dagger = -\xi_i (1 - c_i^\dagger c_i)$$

Damit erhält man

$$c_i |\xi\rangle = \xi_i |\xi\rangle$$

Wendet man einen Erzeuger auf einen kohärenten Zustand an, so ergibt sich

$$\begin{aligned} c_i^\dagger |\xi\rangle &= c_i^\dagger (1 - \xi_i c_i^\dagger) \prod_{j \neq i} (1 - \xi_j c_j^\dagger) |\text{vak.}\rangle \\ &= c_i^\dagger \prod_{j \neq i} (1 - \xi_j c_j^\dagger) |\text{vak.}\rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \xi_i} (1 - \xi_i c_i^\dagger) \prod_{j \neq i} (1 - \xi_j c_j^\dagger) |\text{vak.}\rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \xi_i} |\xi\rangle \end{aligned}$$

Für das Skalarprodukt zweier kohärenter Zustände gilt

$$\langle \xi | \chi \rangle = \langle \text{vak.} | \prod_i (1 - c_i \xi_i^*) (1 - \xi_i c_i^\dagger) | \text{vak.} \rangle = \prod_i (1 + \xi_i^* \chi_i) = \exp\left(\sum_i \xi_i^* \chi_i\right)$$

Als nächstes wollen wir die Vollständigkeitsbeziehung

$$\int D[\xi] \exp\left(-\sum_i \xi_i^* \xi_i\right) |\xi\rangle \langle \xi| = 1$$

zeigen. Wir definieren dazu

$$E = \int D[\xi] \exp\left(-\sum_i \xi_i^* \xi_i\right) |\xi\rangle \langle \xi|$$

und zeigen, daß

$$\langle i_1, \dots, i_n | E | j_1, \dots, j_m \rangle = \langle i_1, \dots, i_n | j_1, \dots, j_m \rangle \quad (1.11)$$

gilt. Zunächst hat man

$$\langle i_1, \dots, i_n | \xi \rangle = \langle \text{vak.} | c_{i_n} \dots c_{i_1} | \xi \rangle = \xi_{i_n} \dots \xi_{i_1}$$

und damit

$$\langle i_1, \dots, i_n | E | j_1, \dots, j_m \rangle = \int D[\xi] \prod_i (1 - \xi_i^* \xi_i) \xi_{i_n} \dots \xi_{i_1} \xi_{j_1}^* \dots \xi_{j_m}^*$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} \int d\xi_i^* d\xi_i (1 - \xi_i^* \xi_i) \xi_i \xi_i^* &= 1 \\ \int d\xi_i^* d\xi_i (1 - \xi_i^* \xi_i) \xi_i &= 0 \\ \int d\xi_i^* d\xi_i (1 - \xi_i^* \xi_i) \xi_i^* &= 0 \\ \int d\xi_i^* d\xi_i (1 - \xi_i^* \xi_i) &= 1 \end{aligned}$$

Daher erhält man nur dann einen Beitrag, wenn  $n = m$  gilt und  $\{i_1, \dots, i_n\} = \{j_1, \dots, j_m\}$ . Wenn diese Bedingung erfüllt ist, muß man die  $\xi_{i_k}$  nur so permutieren, daß ihre Reihenfolge mit der der  $\xi_{j_k}^*$  übereinstimmt. Das Ergebnis ist gerade ein Vorzeichen, daß man auch bei der Berechnung des Skalarprodukts in (1.11) erhält. Damit ist die Vollständigkeit gezeigt. Aus der Vollständigkeit ergibt sich sofort

$$\text{Tr} A = \int D[\xi] \exp\left(-\sum_i \xi_i^* \xi_i\right) \langle -\xi | A | \xi \rangle$$

wobei das Vorzeichen in  $\langle -\xi |$  daher kommt, daß man beim Vertauschen von  $|\xi\rangle$  mit  $\langle \xi|$  für jede Grassmannvariable ein Vorzeichen bekommt. (Beispiele:  $\text{Tr} 1 = 2^N$ ,  $\text{Tr} c_i^\dagger c_i = 2^{N-1}$  für ein System mit  $N$  Einteilchenzuständen). Aus der Vollständigkeit ergibt sich weiter

$$|f\rangle = \int D[\xi] \exp\left(-\sum_i \xi_i^* \xi_i\right) \langle -\xi | f \rangle |\xi\rangle$$

und wir können den Ausdruck

$$f(\xi^*) := \langle -\xi | f \rangle$$

wie im bosonischen Fall als die kohärente Darstellung eines Zustands  $|f\rangle$  definieren. Man erhält

$$\begin{aligned} \langle -\xi | c_i | f \rangle &= (\langle f | c_i^\dagger | -\xi \rangle)^* \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi_i^*} \langle f | -\xi \rangle^* \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi_i^*} f(\xi^*) \end{aligned}$$

und analog

$$\langle -\xi | c_i^\dagger | f \rangle = \xi_i^* f(\xi^*)$$

Die Erzeuger  $c_i^\dagger$  und Vernichter  $c_i$  für Fermionen lauten in der kohärenten Darstellung also  $\xi_i^*$  und  $\frac{\partial}{\partial \xi_i}$ . Die Vertauschungsrelationen sind erfüllt. Wie im bosonischen Fall sind die Matrixelemente eines normalgeordneten Operators (Erzeuger stehen links von Vernichtern)  $A(\{c_i^\dagger, c_i\})$  durch

$$\langle \xi | A(\{c_i^\dagger, c_i\}) | \chi \rangle = A(\{\xi_i^*, \chi_i\}) \langle \xi | \chi \rangle$$

gegeben. Allerdings ist zu beachten, daß etwa der Erwartungswert der Teilchenzahl in einem kohärenten Zustand damit durch  $\sum_i \xi_i^* \xi_i$  gegeben ist und also keine reelle Zahl ist. Im Gegensatz zu den bosonischen kohärenten Zuständen, die Elemente des Fockraums sind, sind fermionische kohärente Zustände keine Elemente des Fockraums. Während man also zum Beispiel den Grundzustand eines Systems von Bosonen durch kohärente Zustände ausdrücken kann, ist dies für Fermionen nicht möglich. Trotzdem ist es nützlich, mit diesen Zuständen zu arbeiten.

## Zusammenfassung: Kohärente Zustände

$|\phi\rangle$  bezeichnet im folgenden fermionische oder bosonische kohärente Zustände. Wie schon weiter oben gilt  $\zeta = 1$  für Bosonen und  $\zeta = -1$  für Fermionen.

$$c_i |\phi\rangle = \phi_i |\phi\rangle. \quad (1.12)$$

$$c_i^\dagger |\phi\rangle = \frac{\partial}{\partial \phi_i} |\phi\rangle \quad (1.13)$$

$$\langle \psi | \phi \rangle = \exp\left(\sum_i \psi_i^* \phi_i\right) \quad (1.14)$$

$$\int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) |\phi\rangle \langle \phi| = 1 \quad (1.15)$$

$$\text{Tr} A = \int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) \langle \zeta \phi | A | \phi \rangle \quad (1.16)$$

$$|f\rangle = \int D[\phi] \exp\left(-\sum_i \phi_i^* \phi_i\right) \langle \zeta \phi | f \rangle |\phi\rangle \quad (1.17)$$

$$f(\phi^*) := \langle \zeta \phi | f \rangle \quad (1.18)$$

$$c_i = \frac{\partial}{\partial \phi_i^*}, \quad c_i^\dagger = \phi_i^* \quad (1.19)$$

$$\langle \phi | A(\{c_i^\dagger, c_i\}) | \psi \rangle = A(\{\phi_i^*, \psi_i\}) \exp\left(\sum_i \phi_i^* \psi_i\right) \quad (1.20)$$

Die letzte Formel gilt für normalgeordnete Operatoren.

## 1.7 Gaußintegrale

Wir werden im folgende immer wieder Gaußintegrale mit komplexen Variablen und auch mit Grassmannvariablen benötigen. Für komplexe Variable gilt

$$\int D[\phi] \exp\left(-\sum_{i,j} \phi_i^* h_{ij} \phi_j + \sum_i z_i^* \phi_i + \sum_i z_i \phi_i^*\right) = [\det H]^{-1} \exp\left(\sum_{i,j} z_i^* (H^{-1})_{ij} z_j\right) \quad (1.21)$$

wobei  $H = (h_{ij})$  eine Matrix mit einem positiven hermiteschen Anteil ist. Für Grassmannvariable gilt analog

$$\int D[\xi] \exp\left(-\sum_{i,j} \xi_i^* h_{ij} \xi_j + \sum_i \chi_i^* \xi_i + \sum_i \chi_i \xi_i^*\right) = [\det H] \exp\left(\sum_{i,j} \chi_i^* (H^{-1})_{ij} \chi_j\right) \quad (1.22)$$

Diese beiden Beziehungen wollen wir kurz herleiten.

Zunächst für komplexe Variable: Wenn  $H$  einen positiven hermiteschen Anteil hat, ist die Inverse  $H^{-1}$  definiert. Man kann neue Integrationsvariable  $\psi_i = \phi_i - \sum_j (H^{-1})_{ij} z_j$  einführen. Das entspricht einer üblichen quadratischen Ergänzung. Die linke Seite von (1.21) wird

$$\int D[\psi] \exp\left(-\sum_{i,j} \psi_i^* h_{ij} \psi_j + \sum_{i,j} z_i^* (H^{-1})_{ij} z_j\right)$$

Als nächstes kann man  $H$  mit Hilfe einer unitären Transformation diagonalisieren. Sei  $U$  die unitäre Transformation, die das leistet. Dann sei  $\varphi_i = \sum_j (U^{-1})_{ij} \psi_j$ . Damit gilt

$$\sum_{i,j} \psi_i^* h_{ij} \psi_j = \sum_i h_i \varphi_i^* \varphi_i$$

wobei  $h_i$  die Eigenwerte von  $H$  sind. Nun gilt

$$\int \frac{d\Re \phi_i d\Im \phi_i}{\pi} \exp(-h_i \phi_i^* \phi_i) = \frac{1}{h_i}$$

Damit erhält man das gewünschte Resultat.

Für Grassmannvariable kann man ebenso vorgehen. Allerdings ist zu beachten, daß wir bisher noch nicht wissen, wie man für Grassmannvariable eine Variablentransformation in einem Integral durchführt. Betrachten wir also ein Integral der Form

$$\int D[\xi] f(\xi_1 \dots \xi_N, \xi_1^* \dots \xi_N^*)$$

und führen eine Transformation  $\xi_i = \sum_j u_{ij} \eta_j$ ,  $\xi_i^* = \sum_j u_{ij}^* \eta_j^*$  durch. In dem Integral über  $\xi$  trägt nur der Term von  $f$  bei, in dem jede Grassmannvariable genau einmal als Faktor vorkommt. Bezeichnen wir diesen Term mit  $f_0 \prod_i \xi_i \xi_i^*$ .  $f_0$  ist dann der Wert des Integrals. Als nächstes berechnen wir

$$\int D[\eta] f(\xi_1(\eta) \dots \xi_N(\eta), \xi_1^*(\eta^*) \dots \xi_N^*(\eta^*)) = f_0 \int D[\eta] \prod_i \left(\sum_j u_{ij} \eta_j \sum_j u_{ij}^* \eta_j^*\right)$$

Die rechte Seite kann ausmultipliziert werden. Das ergibt

$$f_0 \int D[\eta] \sum_{P,P'} \prod_i u_{iP_i} \eta_{P_i} u_{iP_i}^* \eta_{P_i}^*$$

Bringt man alle Faktoren in die richtige Reihenfolge, dann kann man das Integral ausrechnen und erhält

$$f_0 \sum_P (-1)^P \prod_i u_{iP_i} \sum_{P'} (-1)^{P'} \prod_i u_{iP_i}^* = f_0 \det U \det U^\dagger = f_0$$

Man sieht also, daß man die Variablentransformation wie im Fall der komplexen Variablen durchführen kann. Für das Gaußintegral erhält man am Ende

$$\int d\eta_i^* d\eta_i \exp(-h_i \eta_i^* \eta_i) = h_i$$

Damit ist (1.22) gezeigt.

## 1.8 Funktional-Integral Darstellung

Wir betrachten im folgenden ein System von Teilchen mit einer typischen Wechselwirkung. Der Hamiltonoperator hat die Form

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i,j,k,l} V_{i,j,k,l} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

Typischerweise wird der Einteilchenanteil die kinetische Energie und eventuell ein Potential enthalten. Wir haben angenommen, daß er diagonalisiert werden kann und haben als Basis diejenige gewählt, in der der Einteilchenanteil diagonal ist. Wir nehmen an, daß wir es mit einem endlichen (aber großen) System zu tun haben, so daß die Einteilchenenergien  $\varepsilon_i$  diskret sind. Typischerweise interessieren bei einem solchen System Erwartungswerte von Operatoren  $A = A(\{c_i^\dagger, c_i\})$ . Sie werden bei endlichen Temperaturen durch

$$\langle A(\{c_i^\dagger, c_i\}) \rangle = Z^{-1} \text{Tr}[A(\{c_i^\dagger, c_i\}) \exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}))]$$

berechnet, wobei  $\beta = 1/T$  die inverse Temperatur ist,  $\mu$  das chemische Potential und

$$Z = \text{Tr} \exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}))$$

die großkanonische Zustandssumme. Die Spuren werden über den gesamten Fockraum genommen. Wir werden solche Spuren jetzt mit Hilfe der kohärenten Zustände berechnen. Dabei berechnen wir zunächst nur die Zustandssumme, aus der man weitere thermodynamische Größen über die thermodynamischen Beziehungen erhält. Es gilt

$$Z = \int D[\phi] \exp(-\sum_i \phi_i^* \phi_i) \langle \zeta \phi | \exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})) | \phi \rangle$$

Das Problem besteht nun darin, daß zwar  $\hat{H}$  und  $\hat{N}$  normalgeordnet sind, nicht aber  $\exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}))$ . Für ein kleines  $\varepsilon$  gilt aber

$$\exp(-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})) =: \exp(-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})) : + O(\varepsilon^2)$$

Dabei bedeutet  $: \cdot :$ , daß dieser Ausdruck normalgeordnet ist. Um das zu sehen, entwickelt man die Exponentialfunktion auf beiden Seiten. Links tauchen in  $O(\varepsilon^2)$  Terme auf, die nicht normalgeordnet sind. Als nächstes schreiben wir

$$\exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})) = \left[ \exp(-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})) \right]^M$$

Wir werden im folgenden  $M$  hinreichend groß wählen, so daß  $\beta/M$  klein wird. Dann ist der Term in der Klammer bis auf einen kleinen Fehler normalgeordnet. Damit erhält man

$$Z = \int D[\phi] \exp(-\sum_i \phi_i^* \phi_i) \langle \zeta \phi | \exp(-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})) \dots \exp(-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})) | \phi \rangle$$

wobei in dem Erwartungswert jetzt  $M$  Faktoren auftreten. Wir können nun zwischen jede zwei Faktoren eine 1 schieben, die wir in der Form

$$\int D[\phi] \exp(-\sum_i \phi_i^* \phi_i) |\phi\rangle \langle \phi| = 1$$

schreiben. Um das zu tun, müssen wir unsere Notation etwas ändern. Da es insgesamt  $M$  Faktoren gibt, benötigen wir  $M$  kohärente Zustände. Wir bezeichnen sie mit  $|\phi_k\rangle$ ,  $k = 1, \dots, M$ . Die Variablen, von denen  $|\phi_k\rangle$  abhängt, bezeichnen wir mit  $\phi_{i,k}$ . Der vordere Index nummeriert die Einteilchenzustände, der hintere die kohärenten Zustände.  $D[\phi]$  bezeichnet das Integral über alle Variable  $\phi_{i,k}$  und  $\phi_{i,k}^*$ . Außerdem führe ich  $\phi_0 = \zeta \phi_M$  ein. Damit erhält man

$$Z = \int D[\phi] \exp(-\sum_{i,k} \phi_{i,k}^* \phi_{i,k}) \prod_{i=1}^M \langle \phi_{i-1} | \exp(-\frac{\beta}{M}(\hat{H} - \mu\hat{N})) | \phi_i \rangle$$

In diesem Ausdruck kann man jetzt bis auf einen Fehler der Ordnung  $O(M^{-2})$  die Formel (1.20) benutzen. Das liefert

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \int D[\phi] \exp(-S_M[\phi]) \quad (1.23)$$

$$S_M[\phi] = \varepsilon \sum_{k=1}^M \left[ \sum_i \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} - \mu \phi_{i,k} \right) + H(\{\phi_{i,k}^*, \phi_{i,k-1}\}) \right] \quad (1.24)$$

mit  $\varepsilon = \beta/M$ . Häufig führt man im Limes  $M \rightarrow \infty$  eine Funktion  $\phi_i(\tau)$  ein, wobei  $\phi_{i,k} = \phi_i(\varepsilon k)$  gilt. Damit

$$\frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} = \frac{\phi_i(\varepsilon k) - \phi_i(\varepsilon k - \varepsilon)}{\varepsilon} \rightarrow \frac{\partial \phi_i(\tau)}{\partial \tau}$$

$$\varepsilon \sum_{k=1}^M \rightarrow \int_0^\beta d\tau$$

und

$$S[\phi] = \int_0^\beta d\tau \left( \sum_i \phi_i^*(\tau) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_i(\tau) + H(\{\phi_i^*(\tau), \phi_i(\tau)\}) \right) \quad (1.25)$$

$$Z = \int_{\phi_i(\beta) = \zeta \phi_i(0)} D[\phi] \exp(-S[\phi]) \quad (1.26)$$

Diese Ausdrücke sind sogenannte Funktionalintegrale. Man kann mit ihnen zum Teil recht bequem rechnen, sollte sich aber darüber im klaren sein, daß mit (1.26), (1.25) immer die Limes der Ausdrücke in (1.23), (1.24) gemeint sind. Das Problem besteht jetzt also darin, die entsprechenden Integrale zu lösen. Wir betrachten zunächst ein einfaches Beispiel.

## 1.9 Das freie System

In einem System ohne Wechselwirkung ist

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i$$

Damit gilt

$$S[\phi] = \varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_i \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} + (\varepsilon_i - \mu) \phi_{i,k-1} \right)$$

und das Integral in (1.23) ist ein Gaußintegral. Es lautet

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int D[\phi] \exp \left( -\varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_i \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} + (\varepsilon_i - \mu) \phi_{i,k-1} \right) \right) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_i \int D[\phi_i] \exp \left( -\varepsilon \sum_{k=1}^M \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} + (\varepsilon_i - \mu) \phi_{i,k-1} \right) \right) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_i [\det S^{(i)}]^{-\zeta} \end{aligned}$$

wobei  $S^{(i)}$  die Matrix

$$S^{(i)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & -\zeta a \\ -a & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & -a & 1 & \ddots & \vdots \\ & 0 & -a & \ddots & 0 \\ \vdots & & 0 & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & & & \cdots & -a & 1 \end{pmatrix}$$

mit

$$a = 1 - \frac{\beta}{M}(\varepsilon_i - \mu)$$

Der Eintrag  $-\zeta a$  in der rechten oberen Ecke rührt von der Bedingung  $\phi_{i,0} = \zeta \phi_{i,M}$  her. Entwickelt man die Determinante von  $S^{(i)}$  nach der ersten Zeile, so erhält man

$$\begin{aligned} \lim_{M \rightarrow \infty} \det S^{(i)} &= \lim_{M \rightarrow \infty} [1 + (-1)^M \zeta (-a)^M] \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left[ 1 - \zeta \left( 1 - \frac{\beta(\varepsilon_i - \mu)}{M} \right)^M \right] \\ &= 1 - \zeta \exp(-\beta(\varepsilon_i - \mu)) \end{aligned}$$

Für die Zustandssumme erhält man damit

$$Z = \prod_i (1 - \zeta \exp(-\beta(\varepsilon_i - \mu)))^{-\zeta}$$

Das ist das bekannte Resultat für freie Fermionen oder Bosonen. Hieraus kann man sofort die Formeln für die entsprechenden Besetzungszahlen

$$\langle c_i^\dagger c_i \rangle = n_i = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \varepsilon_i} = \frac{1}{\exp(\beta(\varepsilon_i - \mu)) - \zeta}$$

und alle weiteren bekannten Resultate für das freie System herleiten (siehe z.B. L.D. Landau, E.M. Lifschitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik V, Statistische Physik, Kapitel V).

Für spätere Rechnungen ist es nützlich, das letzte Resultat noch einmal genauer anzusehen. Die Identität

$$\langle c_i^\dagger c_i \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \varepsilon_i}$$

erhält man durch das Ableiten der Zustandssumme  $\text{Tr} \exp(-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}))$ , wobei die Operatoren durch Erzeuger und Vernichter dargestellt werde. Man kann natürlich diese Ableitung auch in der Darstellung

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \int D[\phi] \exp \left( -\varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_i \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} + (\varepsilon_i - \mu) \phi_{i,k-1} \right) \right)$$

vornehmen. Das ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial \varepsilon_i} &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int D[\phi] \left[ -\varepsilon \sum_{k=1}^M \phi_{i,k}^* \phi_{i,k-1} \right] \exp \left( -\varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_i \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} + (\varepsilon_i - \mu) \phi_{i,k-1} \right) \right) \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \varepsilon_i} = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \langle \phi_i^*(\tau) \phi_i(\tau - 0^+) \rangle \end{aligned}$$

Dabei deutet  $-0^+$  im Argument von  $\phi$  an, daß das Argument von  $\phi$  infinitesimal kleiner ist als das Argument von  $\phi^*$ . Das wird später wichtig sein, da wir sehen werden, daß der Erwartungswert  $\langle \phi_i^*(\tau) \phi_i(\tau') \rangle$  bei  $\tau = \tau'$  eine Sprungstelle hat.

Wir sehen an dieser Stelle das folgende: Während der Erwartungswert der Teilchenzahl für Fermionen in einem kohärenten Zustand durch  $\phi_i^* \phi_i$  gegeben war und damit keine reelle Größe darstellt, können wir hier über die Darstellung der Zustandssumme durch kohärente Zustände sehr wohl Erwartungswerte berechnen.

Generell werden wir später auch Erwartungswerte von dem Typ

$$\langle \phi_i^*(\tau) \phi_j(\tau') \rangle$$

oder auch Ausdrücke mit mehr Feldern benötigen. Solche Größen können wir ausrechnen, indem wir eine erzeugende Funktion benutzen. Wir definieren

$$Z_M(J^*, J) = \int D[\phi] \exp \left( -\varepsilon \sum_{k=1}^M \sum_i \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} + (\varepsilon_i - \mu) \phi_{i,k-1} \right) + \sum_{k=1}^M \sum_i (J_{i,k}^* \phi_{i,k} + J_{i,k} \phi_{i,k}^*) \right)$$

Damit gilt dann

$$\langle \phi_{i,k}^* \phi_{j,l} \rangle = \left. \frac{\zeta_{k,l}}{Z_M} \frac{\partial^2 Z_M(J^*, J)}{\partial J_{j,l}^* \partial J_{i,k}} \right|_{J=J^*=0} \quad (1.27)$$

und im Limes  $M \rightarrow \infty$

$$\langle \phi_i^*(\tau) \phi_j(\tau') \rangle = \left. \frac{\zeta(\tau - \tau')}{Z} \frac{\delta^2 Z(J^*, J)}{\delta J_j^*(\tau) \delta J_i(\tau')} \right|_{J=J^*=0} = \left. \frac{\zeta(\tau - \tau') \delta^2 \ln Z(J^*, J)}{\delta J_j^*(\tau) \delta J_i(\tau')} \right|_{J=J^*=0}$$

$$Z(J^*, J) = \lim_{M \rightarrow \infty} Z_M(J^*, J)$$

An dieser Stelle sind einige Bemerkungen nötig. Zunächst ist klar, daß für Fermionen die  $J_{i,k}$  und  $J_{i,k}^*$  auch wieder Grassmannvariable sind. Zudem ist wichtig, in welcher Reihenfolge beim Ableiten die Variablen stehen. Der Ausdruck  $\exp(-\varepsilon \sum_{k=1}^M \dots)$  ist eigentlich ein Produkt, in dem die Faktoren mit kleinem  $k$  vorne stehen. Ist in (1.27)  $l < k$ , dann tritt beim Ableiten der Faktor  $\phi_{i,k}^*$  nach dem Faktor  $\phi_{j,l}$  auf. Die beiden Faktoren müssen vertauscht werden. Für Fermionen tritt dabei ein Vorzeichen auf. Ist dagegen  $l > k$  tritt dieser Faktor nicht auf.  $\zeta_{k,l}$  ist  $\zeta$  für  $k > l$  und 1 sonst. Entsprechend gilt  $\zeta(\tau - \tau') = \zeta$  für  $\tau > \tau'$  und  $\zeta(\tau - \tau') = 1$  sonst. Natürlich lassen sich auch Erwartungswerte mit mehr als zwei Feldern auf diese Weise berechnen. Für das freie System kann man  $Z_M(J^*, J)$  einfach berechnen, es handelt sich um ein Gaußintegral. Zunächst gilt

$$Z(J^*, J) = \prod_i Z^{(i)}(J_i^*, J_i)$$

mit

$$Z^{(i)}(J_i^*, J_i) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int D[\phi] \exp \left( -\varepsilon \sum_{k=1}^M \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} + (\varepsilon_i - \mu) \phi_{i,k-1} \right) + \sum_{k=1}^M (J_{i,k}^* \phi_{i,k} + J_{i,k} \phi_{i,k}^*) \right)$$

Dieses Integral hat die Form

$$\int D[\phi] \exp \left( - \sum_{k,l=1}^M \phi_{i,k}^* S_{k,l}^{(i)} \phi_{i,l} + \sum_{k=1}^M (J_{i,k}^* \phi_{i,k} + J_{i,k} \phi_{i,k}^*) \right)$$

Es ergibt

$$[\det S^{(i)}]^{-\zeta} \exp \left( \sum_{k,l=1}^M J_{i,k}^* (S^{(i)-1})_{k,l} J_{i,l} \right)$$

Man erhält also

$$Z_M(J^*, J) = Z_M \prod_i \exp \left( \sum_{k,l=1}^M J_{i,k}^* (S^{(i)-1})_{k,l} J_{i,l} \right)$$

und damit

$$\begin{aligned} \langle \phi_{i,k}^* \phi_{j,l} \rangle &= \left. \frac{\zeta_{k,l}}{Z_M} \frac{\partial^2 Z_M(J^*, J)}{\partial J_{j,l}^* \partial J_{i,k}} \right|_{J=J^*=0} \\ &= \zeta_{l,k} \delta_{i,j} (S^{(i)-1})_{l,k} \end{aligned}$$

In der zweiten Zeile steht  $\zeta_{l,k}$ . Der Grund dafür ist, daß erst nach  $J_{i,k}$ , dann nach  $J_{i,l}^*$  abgeleitet wird, die beiden Faktoren aber in der umgekehrten Reihenfolge in dem Produkt stehen. Daher tritt zusätzlich zu  $\zeta_{k,l}$  noch ein Faktor  $\zeta$  auf und es gilt  $\zeta_{k,l}\zeta = \zeta_{l,k}$ . Die inverse Matrix ist

$$S^{(i)-1} = \frac{1}{1 - \zeta a^M} \begin{pmatrix} 1 & \zeta a^{M-1} & \zeta a^{M-2} & \cdots & \zeta a \\ a & 1 & \zeta a^{M-1} & & \zeta a^2 \\ a^2 & a & 1 & & \zeta a^3 \\ \vdots & a^2 & a & & \vdots \\ & \vdots & a^2 & \ddots & \\ a^{M-3} & & \vdots & \ddots & \zeta a^{M-2} \\ a^{M-2} & a^{M-3} & & & 1 & \zeta a^{M-1} \\ a^{M-1} & a^{M-2} & a^{M-3} & \cdots & a & 1 \end{pmatrix}$$

mit  $a = 1 - \frac{\beta}{M}(\varepsilon_i - \mu)$ . Damit erhält man

$$\langle \phi_{i,k}^* \phi_{j,l} \rangle = \delta_{i,j} \frac{\zeta a^{l-k}}{1 - \zeta a^M}$$

für  $l \geq k$  und

$$\langle \phi_{i,k}^* \phi_{j,l} \rangle = \delta_{i,j} \frac{a^{M+l-k}}{1 - \zeta a^M}$$

für  $l < k$ . Bildet man den Limes  $M \rightarrow \infty$ , so ergibt sich

$$\langle \phi_i^*(\tau) \phi_j(\tau') \rangle = \delta_{i,j} \zeta \exp(-(\varepsilon_i - \mu)(\tau - \tau')) (\theta(\tau' - \tau) + \zeta n_i)$$

Oben hatten wir gesehen, daß

$$n_i = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \langle \phi_i^*(\tau) \phi_i(\tau - 0^+) \rangle$$

Das läßt sich sofort verifizieren, wenn man den Erwartungswert einsetzt.

$$g_i(\tau - \tau') = \zeta \exp(-(\varepsilon_i - \mu)(\tau - \tau')) (\theta(\tau' - \tau) + \zeta n_i)$$

wird Einteilchenpropagator genannt.

Erwartungswerte mit mehr als zwei Feldern lassen sich ebenso berechnen. Solche Erwartungswerte benötigen wir im nächsten Abschnitt. Um einen Ausdruck der Form

$$\langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{i_2}^*(\tau_2) \cdots \phi_{i_n}^*(\tau_n) \phi_{j_n}(\tau'_n) \phi_{j_{n-1}}(\tau'_{n-1}) \cdots \phi_{j_1}(\tau'_1) \rangle$$

zu berechnen, muß man die Ableitung

$$\left. \frac{\delta^{2n} \ln Z(J^*, J)}{\delta J_{i_1}^*(\tau_1) \cdots \delta J_{i_n}^*(\tau_n) \delta J_{j_n}(\tau'_n) \cdots \delta J_{j_1}(\tau'_1)} \right|_{J=J^*=0}$$

berechnen. Wie oben berechnen wir die Ableitungen für endliches  $M$  und bilden hinterher den Limes  $M \rightarrow \infty$ . Leitet man zuerst nach den  $J_{j,l}(\tau')$  ab, so bekommt man für jede dieser Ableitungen einen Faktor  $\sum_k J_{j,k}^* (S^{(j)-1})_{k,l}$ . Die Ableitungen nach  $J_{i,k}^*$  müssen auf diese Faktoren wirken, da alle anderen Beiträge verschwinden, wenn man am Ende  $J = J^* = 0$  setzt. Das bedeutet, daß man in diesen Ausdrücken immer ein  $J_{j,l}$  und ein  $J_{i,k}^*$  zusammenfassen kann und dafür einen entsprechenden Beitrag  $\delta_{i,j} (S^{(i)-1})_{k,l}$  erhält. Das gilt natürlich entsprechend auch für die  $\phi_{i,k}^*$  und  $\phi_{j,l}$ . Man findet also

$$\begin{aligned} & \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{i_2}^*(\tau_2) \cdots \phi_{i_n}^*(\tau_n) \phi_{j_n}(\tau'_n) \phi_{j_{n-1}}(\tau'_{n-1}) \cdots \phi_{j_1}(\tau'_1) \rangle \\ &= \sum_P \zeta^P \prod_k \langle \phi_{i_k}^*(\tau_k) \phi_{j_{P(k)}}(\tau'_{P(k)}) \rangle \end{aligned}$$

Dieser Zusammenhang wird häufig als Wicksches Theorem bezeichnet, er ergibt sich hier sofort aus der Form des Gaussintegrals für  $Z(J^*, J)$ .

## 1.10 Störungstheorie

Die Resultate für das nicht-wechselwirkende System lassen sich nun benützen, um recht übersichtliche Ausdrücke für die störungstheoretische Behandlung des wechselwirkenden Systems zu bekommen. Wir betrachten zunächst die Störungsentwicklung für die Zustandssumme. Störungsentwicklungen für Korrelationsfunktionen können mit Hilfe des Formalismus später leicht berechnet werden. Die Zustandssumme des wechselwirkenden Systems kann in der Form

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int D[\phi] \exp \left( -\varepsilon \sum_{k=1}^M \phi_{i,k}^* \left( \frac{\phi_{i,k} - \phi_{i,k-1}}{\varepsilon} + (\varepsilon_i - \mu) \phi_{i,k-1} \right) - \varepsilon \sum_{k=1}^M V(\{\phi_{i,k}^*, \phi_{i,k}\}) \right) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} Z_{0,M} \left\langle \exp \left( -\varepsilon \sum_{k=1}^M V(\{\phi_{i,k}^*, \phi_{i,k}\}) \right) \right\rangle_{0,M} \\ &= Z_0 \left\langle \exp \left( -\int_0^\beta d\tau V(\{\phi_i^*(\tau), \phi_i(\tau)\}) \right) \right\rangle_0 \end{aligned}$$

geschrieben werden, wobei sich der Index 0 bei  $Z_0$  und dem Erwartungswert auf das nicht-wechselwirkende System bezieht.  $V(\{\phi_i^*(\tau), \phi_i(\tau)\})$  ist eine allgemeine Wechselwirkung. Physikalisch sinnvolle Ansätze wären zum Beispiel eine Coulombwechselwirkung oder ähnliche zwei-Teilchen Wechselwirkungen. Eine Störungsentwicklung erhält man, indem man die Exponentialfunktion im Erwartungswert in einer Potenzreihe entwickelt.

$$\left\langle \exp \left( -\int_0^\beta d\tau V(\{\phi_i^*(\tau), \phi_i(\tau)\}) \right) \right\rangle_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \langle V(\{\phi_i^*(\tau_1), \phi_i(\tau_1)\}) \dots V(\{\phi_i^*(\tau_n), \phi_i(\tau_n)\}) \rangle_0$$

Für eine konkrete Form der Wechselwirkung hat man auf der rechten Seite Erwartungswerte von Produkten von Operatoren stehen, die man berechnen mit Hilfe des Wick'schen Theorems berechnen kann.

Obwohl man die Störungsentwicklung im Prinzip mit beliebigen Wechselwirkungen durchführen kann, beschränken wir uns im folgenden auf den wichtigsten Fall einer Zweiteilchenwechselwirkung

$$V(\{\phi_i^*(\tau), \phi_i(\tau)\}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} V_{i,j,k,l} \phi_i^*(\tau) \phi_j^*(\tau) \phi_l(\tau) \phi_k(\tau)$$

Ich nehme im folgenden an, daß  $V_{i,j,k,l}$  in den vorderen beiden und in den hinteren beiden Indizes entweder symmetrisch oder antisymmetrisch ist, je nachdem ob die Teilchen Bosonen oder Fermionen sind. Der  $n$ -te Term in der Entwicklung von der Form

$$\frac{(-1)^n}{2^n n!} \sum_{i_1 j_1 k_1 l_1} \dots \sum_{i_n j_n k_n l_n} \prod_m V_{i_m j_m k_m l_m} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{j_1}^*(\tau_1) \phi_{l_1}(\tau_1) \phi_{k_1}(\tau_1) \dots \phi_{i_n}^*(\tau_n) \phi_{j_n}^*(\tau_n) \phi_{l_n}(\tau_n) \phi_{k_n}(\tau_n) \rangle$$

Der Erwartungswert in der Summe zerfällt wieder in eine Summe von Produkten der Form  $\langle \phi^* \phi \rangle$ . Man faßt dabei in dem Erwartungswert jeweils ein  $\phi^*$  und ein  $\phi$  zu einem Paar zusammen. Dies wird eine Kontraktion genannt. Dann wird über alle vollständigen Sätze von Kontraktionen summiert. Jede Kontraktion  $\langle \phi_i^*(\tau) \phi_j(\tau') \rangle$  liefert einen Faktor  $\delta_{i,j} g_i(\tau - \tau')$ . Die gesamte Summe kann übersichtlicher in graphischer Form dargestellt werden. Diese Darstellung geht auf Feynman zurück, man bezeichnet solche Diagramme als Feynmandiagramme. Es gibt unterschiedliche Möglichkeiten, Feynmandiagramme einzuführen. Ich beschränke mich auf eine Variante, weitere findet man in den angegebenen Lehrbüchern.

Ein Matrixelement  $V_{i,j,k,l}$  wird als ein Punkt dargestellt, von dem vier Linien ausgehen. Jede Linie erhält einen Index  $i, j, k$ , oder  $l$ . Die Linien mit den Indizes  $i$  und  $j$ , die den Erzeugungsoperatoren entsprechen, werden mit einem Pfeil gekennzeichnet, der von dem Punkt weg zeigt (auslaufende Linie). Die anderen beiden

Linien erhalten einen Pfeil, der zu dem Punkt hin zeigt (einlaufende Linie). Ein Term  $n$ -ter Ordnung besteht aus  $n$  solchen Punkten. Die Linien werden nun verbunden, und zwar so, daß eine Linie immer von einem Punkt zu einem anderen läuft. Jeder Vertex erhält einen Index  $\tau$ . Jede Linie erhält einen Index  $i$ . Sie entspricht einem Faktor  $\langle \phi_i^*(\tau) \phi_i(\tau') \rangle = g_i(\tau - \tau')$ , wobei  $\tau$  und  $\tau'$  die Indizes an den beiden Vertices sind. Jetzt ist noch zu beachten, daß unterschiedliche vollständige Sätze von Kontraktionen zu dem gleichen Diagramm führen. Sie unterscheiden sich die Reihenfolge der  $\tau$  Indizes an den Vertices. Da über alle  $\tau$  integriert wird, ist die Reihenfolge aber unerheblich. Alle diese vollständigen Sätze von Kontraktionen liefern den gleichen Beitrag. Ihre Anzahl bezeichnet man als Symmetriefaktor des Diagramms. Damit erhält man die folgenden Regeln für das Zeichnen der Diagramme und das Berechnen der Beiträge:

1. Zeichne alle verschiedenen Diagramme aus  $n$  Vertices und Linien zwischen diesen Vertices, wobei die Linien mit einem Pfeil versehen werden, der von einem Vertex zum anderen zeigt. An jedem Vertex kommen zwei Linien an, von jedem Vertex gehen zwei Linien aus. Zwei Diagramme sind verschieden, wenn es keine Permutation der Vertices gibt, die das eine Diagramm in das andere überführt. (Die Diagramme sind mathematisch gesprochen verschiedene gerichtete Graphen, wobei zu beachten ist, das eine Linie auch einen Vertex mit sich selbst verbinden darf.)
2. Berechne den Symmetriefaktor  $S$  des Diagramms. Dazu erhält jeder Vertex einen Index  $\tau$ .  $S$  ist die Anzahl der Permutationen der Indizes  $\tau$ , die das Diagramm in sich selbst überführt.
3. Jede Linie erhält einen Index  $i$ . Für jede Linie wird ein Faktor  $g_i(\tau - \tau')$  hingeschrieben, wobei  $\tau$  der Index des Vertex ist, zu dem die Linie läuft, und  $\tau'$  der, von dem sie ausgeht.
4. Für jeden Vertex erhält man einen Faktor  $V_{i,j,k,l}$ , wobei  $i$  und  $j$  die Indizes der einlaufenden,  $k$  und  $l$  die Indizes der auslaufenden Linien sind.
5. Summiere über alle Indizes der Linien, integriere über alle Indizes  $\tau$  der Vertices von 0 bis  $\beta$ .
6. Multipliziere das Resultat mit einem Faktor

$$\frac{(-1)^n \zeta^{n_L}}{2^{n_e} S}$$

Dabei ist  $S$  der Symmetriefaktor.  $n_e$  ist die Anzahl von Paaren äquivalenter Linien. Zwei Linien sind äquivalent, wenn die vom gleichen Vertex ausgehen und zum gleichen Vertex hinlaufen.  $n_L$  ist die Anzahl der Schleifen in dem Diagramm.

7. Addition aller dieser Beiträge liefert den Beitrag  $n$ -ter Ordnung zu  $Z/Z_0$ .

Es ist instruktiv, sich diese Regeln an einer Reihe von Beispielen zu verdeutlichen. Bei der Durchführung fällt auf, daß sich die Rechnung vereinfachen läßt, wenn man  $\ln(Z/Z_0)$  berechnet. Hierbei treten dann nur noch zusammenhängende Diagramme auf. Dieses Faktum wird meist als *Linked Cluster Theorem* bezeichnet. Es kann auf unterschiedliche Weisen hergeleitet werden. Die direkte Herleitung besteht darin, den Ausdruck  $\exp(\text{Summe aller zusammenhängenden Diagramme})$  zu entwickeln und zu zeigen, daß dies gerade die Summe aller Diagramme liefert, also  $Z/Z_0$ .

## 1.11 Frequenz und Impulsdarstellung

In den meisten Fällen ist es möglich, die oben angegebenen Summen und Integrale im Impulsraum und im Frequenzraum durchzuführen. Dies funktioniert immer dann, wenn das System translationsinvariant ist. Für ein translationsinvariantes System sind ebene Wellen  $V^{-1/2} \exp(ikx)$  eine geeignete Einteilchenbasis. Dabei ist  $V$  das Volumen des Systems. Der Einfachheit halber sind periodische Randbedingungen angenommen. Die Einteilchenenergien sind  $\epsilon_k$ . Für ein System, bei dem der Einteilchenanteil nur die kinetische Energie enthält,

ist  $\varepsilon_k = k^2/(2m)$ . Für einen Festkörper kann man zum Beispiel ein Gittermodell zugrunde legen, dann ist  $\varepsilon_k$  durch die Dispersionsrelation des Gitters gegeben. Wegen der Impulserhaltung gilt

$$V_{k_1 k_2 k_3 k_4} \propto V^{-1} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4}$$

In der Variablen  $\tau$  sind die Funktionen  $\phi$  und  $\phi^*$  entweder periodisch (Bosonen) oder antiperiodisch (Fermionen). Daher gilt

$$g_k(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \exp(-i\omega_n(\tau - \tau')) \tilde{g}_k(\omega_n)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{g}_k(\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau \exp(i(\omega_n - (\varepsilon_k - \mu))\tau) [\theta(\tau)(1 + \zeta n_k) + \zeta \theta(-\tau)n_k] \\ &= \frac{1}{(\varepsilon_k - \mu) - i\omega_n} \end{aligned}$$

Für Bosonen gilt  $\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}$ , für Fermionen  $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ . Es gilt  $\exp(i\beta\omega_n) = \zeta$ . Analog zur Impulserhaltung hat man an jedem Vertex einen Faktor  $\delta_{\omega_{n_1}+\omega_{n_2}, \omega_{n_3}+\omega_{n_4}}$ , wobei  $\omega_{n_1}$  und  $\omega_{n_2}$  zu den  $\phi^*$  gehören,  $\omega_{n_3}$  und  $\omega_{n_4}$  zu den  $\phi$ . Die Regeln für die Diagramme lauten in dieser Darstellung wie folgt:

1. wie oben.
2. wie oben.
3. Jeder Linie wird ein Index  $k$  zugeordnet. Dabei ist die Impulserhaltung zu berücksichtigen. In einem Diagramm mit  $m$  Vertices kann man  $m+1$  Werte  $k$  für die Linien unabhängig wählen, die anderen sind über die Impulserhaltung fixiert. Ebenso wird jeder Linie ein Frequenzindex zugeordnet. Auch hier können für Diagramme mit  $m$  Vertices  $m+1$  Werte für  $\omega$  frei gewählt werden, die anderen sind wegen der Faktoren  $\delta_{\omega_{n_1}+\omega_{n_2}, \omega_{n_3}+\omega_{n_4}}$  an den Vertices fixiert. Für jede Linie erhält man einen Faktor  $\tilde{g}_k(\omega_n)$ . Für Linien, die an dem gleichen Vertex beginnen und enden, wird ein zusätzlicher Faktor  $\exp(i\omega_n\eta)$  hinzugefügt.
4. Für jeden Vertex wird ein Faktor  $V_{k_1 k_2 k_3 k_4}$  hinzugefügt. Da die Impulserhaltung schon berücksichtigt ist, kann der Faktor  $\delta_{k_1+k_2, k_3+k_4}$  weggelassen werden.
5. Summiere über alle  $k$  (oder  $V(2\pi)^{-d} \int d^d k$ ) und summiere über alle  $\omega_n$ .
6. Multipliziere zusätzlich mit einem Faktor  $\beta^{-m}$ , wobei  $m$  die Zahl der Vertices ist.

Da jeder Vertex einen Faktor  $1/V$  und jede  $k$ -Summe einen Faktor  $V$ , enthält ein Diagramm einen Faktor  $V^{n_c}$ , wobei  $n_c$  die Anzahl der verbundenen Komponenten des Diagramms ist. Wegen des Linked Cluster Theorems ist also  $\ln(Z/Z_0)$  als Summe aller verbundenen Diagramme  $\propto V$ . Da der Logarithmus der großkanonische Zustandssumme (bis auf einen Faktor  $-1/\beta$ ) das großkanonische Potential liefert, muß diese Größe auch extensiv sein.

## 1.12 Berechnung von Greenschen Funktionen

Generell kann man Greensche Funktionen mit Hilfe einer Erzeugenden berechnen. Wir hatten dies schon ausführlich am Beispiel des nicht-wechselwirkenden Systems gesehen. Für das wechselwirkende System kann die Erzeugende ganz genauso definiert werden

$$G(J^*, J) = \frac{1}{Z} \int D[\phi] \exp \left( - \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_i \phi_i^*(\tau) \left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) \phi_i(\tau) + H(\{\phi_i^*(\tau), \phi_i(\tau)\}) \right] \right)$$

$$\begin{aligned} & \times \exp \left( - \int_0^\beta d\tau \sum_i [J_i^*(\tau) \phi_i(\tau) + \phi_i^*(\tau) J_i(\tau)] \right) \\ & = \left\langle \exp \left( - \int_0^\beta d\tau \sum_i [J_i^*(\tau) \phi_i(\tau) + \phi_i^*(\tau) J_i(\tau)] \right) \right\rangle \end{aligned}$$

Hierbei ist  $\langle A \rangle$  der Erwartungswert von  $A$  im wechselwirkenden System. Die Greenschen Funktionen können nun durch Ableitungen von  $G(J^*, J)$  berechnet werden. Dies gilt natürlich noch ganz allgemein. Wir wollen im folgenden die Rechnung wie im Fall der Zustandsumme störungstheoretisch durchführen. Wir beginnen mit dem einfachsten Fall:

## Einteilchen-Propagatoren

Wir wollen jetzt störungstheoretisch für das wechselwirkende System die Größen

$$\langle \phi_i^*(\tau) \phi_j(\tau') \rangle$$

berechnen. Da bei der Berechnung des Erwartungswertes durch  $Z$  dividiert wird, treten in einer diagrammatischen Darstellung nur verbundene Diagramme auf. Analog zu oben erhält man die folgenden Regeln:

1. Zeichne alle verschiedenen, verbundenen Diagramme mit 2 äußeren Linien und  $m$  Vertices. Eine der äußeren Linien entspricht  $\phi^*$ , sie endet an einem Vertex, die andere entspricht  $\phi$ , sie beginnt an einem Vertex. Zwei Diagramme sind verschieden, wenn sie nicht durch eine Permutation von inneren Linien und Vertices ineinander deformiert werden können. Für jedes dieser Diagramme wird der Beitrag wie folgt berechnet:
2. Jeder Vertex erhält einen inneren Index  $\tau_i$ . Jede innere Linie erhält einen Index  $l$ . Analog zu oben schreibt man für jede innere Linie einen Faktor  $g_l(\tau_i - \tau'_i)$ , wenn sie von dem Vertex mit Index  $\tau_i$  zu dem Vertex mit Index  $\tau'_i$  läuft. Für die einlaufende Linie hat man einen Faktor  $g_i(\tau - \tau_i)$ , für die auslaufende einen Faktor  $g_j(\tau_i - \tau')$ , wobei  $\tau_i$  jeweils der Index des Vertex ist, an dem diese Linie hängt. Für  $m = 0$  hat man nur einen Faktor  $g_j(\tau - \tau')$ .
3. Für jeden Vertex schreibt man einen Faktor  $V_{l_1 l_2 l_3 l_4}$ , wobei  $l_1$  und  $l_2$  die Indizes der einlaufenden Linien,  $l_3$  und  $l_4$  die Indizes der auslaufenden Linien sind.
4. Summiere über alle inneren Indizes  $l$ , integriere über alle inneren Indizes  $\tau_i$ .
5. Multipliziere das Resultat mit einem Faktor  $(-1)^m \zeta^{n_L}$  wobei  $n_L$  die Zahl der Schleifen ist.

Im Gegensatz zu vorher tritt kein Symmetriefaktor  $S$  auf. Das liegt daran, daß die äußeren Linien fest sind.

## Erzeugende Funktion für verbundene Greensche Funktionen

Im nächsten Schritt werden wir Regeln zur Berechnung von höheren Greenschen Funktionen aufstellen. Betrachten wir zunächst als Beispiel einen Term der Form

$$\langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_2}(\tau'_2) \phi_{j_1}(\tau'_1) \rangle$$

In 0-ter Ordnung erhält man

$$\begin{aligned} \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_2}(\tau'_2) \phi_{j_1}(\tau'_1) \rangle_0 &= \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{j_1}(\tau'_1) \rangle_0 \langle \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_2}(\tau'_2) \rangle_0 \\ &- \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{j_2}(\tau'_2) \rangle_0 \langle \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_1}(\tau'_1) \rangle_0 \end{aligned}$$

Entwickelt man den ursprünglichen Ausdruck störungstheoretisch, so gibt es in dieser Entwicklung Terme, in denen die Beiträge von der Wechselwirkung ausschließlich in einem der Faktoren  $\langle \phi^* \phi \rangle$  auftreten. Es treten

aber auch Terme auf, in denen Beiträge der Wechselwirkung in beiden Faktoren vorkommen. Die unterschiedlichen Beiträge lassen sich leicht auseinanderhalten, wenn man sie sich mit Hilfe der Feynmandiagramme aufteilt. Die ersten Beiträge entsprechen Feynmandiagrammen, die in zwei Komponenten zerfallen, die zweiten Beiträge entsprechen verbundenen Diagrammen. Es gilt

$$\begin{aligned} \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_2}(\tau_2') \phi_{j_1}(\tau_1') \rangle &= \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{j_1}(\tau_1') \rangle \langle \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_2}(\tau_2') \rangle \\ &- \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{j_2}(\tau_2') \rangle \langle \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_1}(\tau_1') \rangle \\ &+ \langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_2}(\tau_2') \phi_{j_1}(\tau_1') \rangle_c \end{aligned}$$

Der Anteil  $\langle \phi_{i_1}^*(\tau_1) \phi_{i_2}^*(\tau_2) \phi_{j_2}(\tau_2') \phi_{j_1}(\tau_1') \rangle_c$  ist störungstheoretisch als Summe von allen verbundenen Diagrammen gegeben, die anderen beiden Teile haben wir schon berechnet.

Genauso lassen sich Greensche Funktionen mit mehr als 4 Feldern berechnen. Man erhält jeweils den zusammenhängenden Anteil und Anteile, die sich als Produkte von Greenschen Funktionen mit weniger Feldern schreiben lassen. Um die zusammenhängenden Greenschen Funktionen zu berechnen, ist es sinnvoll, eine erzeugende Funktion für diese Funktionen direkt herzuleiten. Ähnlich wie im Fall der Zustandsumme die Entwicklung von  $\ln(Z/Z_0)$  nur verbundene Diagramme enthält, kann man zeigen, daß

$$W(J^*, J) = \ln G(J^*, J)$$

nur verbundene Diagramme liefert. Die Herleitung kann man wieder direkt durchführen, indem man wie im Fall der Zustandsumme zeigt, daß  $\exp(\text{Summe aller zusammenhängenden Diagramme})$  die Summe aller Diagramme liefert. Einfacher ist die Verwendung des Replikatricks. Hier wird zunächst überlegt, welche Diagramme die Funktion  $G(J^*, J)^n$  für natürliche Zahlen  $n$  liefert. Dazu führt man einfach von jedem Feld  $\phi$  und  $\phi^*$  gerade  $n$  Kopien  $\phi_\alpha$  und  $\phi_\alpha^*$  ein. Da in einer zusammenhängenden Komponente immer Felder mit dem gleichen Index  $\alpha$  vorkommen können, da es ja keine Wechselwirkungen zwischen Feldern mit unterschiedlichen  $\alpha$  gibt, wird jedes Diagramm mit einem Faktor  $n^{n_c}$  multipliziert, wobei  $n_c$  die Anzahl der Komponenten ist. In dieser Entwicklung kann man von natürlichen  $n$  auf reelle  $n$  fortsetzen und

$$W(J^*, J) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial n} G(J^*, J)^n$$

berechnen. Durch den Limes  $n \rightarrow 0$  fallen alle Terme weg, in denen  $n$  in einer Potenz größer als 1 vorkommt, also alle Terme mit  $n_c > 1$ . Daher liefert  $W(J^*, J)$  gerade die Diagramme mit  $n_c = 1$ , das sind die verbundenen Diagramme.

## Effektives Potential, effektive Wirkung, ...

Es gibt außer  $W(J^*, J)$  eine ganze Reihe von weiteren erzeugenden Funktionen, die in etlichen Fällen nützlich sind. Sie alle hier zu erwähnen wäre an dieser Stelle wenig hilfreich. Ich erwähne hier kurz zwei weitere Funktionen, die in der Literatur häufig verwendet werden, und versuche zu erläutern, wofür diese wichtig sind. Zum Teil werden wir später in konkreten Anwendungen den Nutzen dieser Funktionen kennenlernen.

$W(J^*, J)$  spielt die Rolle eines thermodynamischen Potentials in Gegenwart von äußeren Quellen  $J^*$  und  $J$ . Eine solche Größe ist vergleichbar mit der freien Energie eines Spinsystems in Gegenwart von einem äußeren magnetischen Feld. Für ein Spinsystem definiert man

$$F(H) = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \exp(-\beta H(\{S_i\}) - H \cdot \sum_i S_i)$$

Die Magnetisierung ist durch

$$M = -\frac{\partial F(H)}{\partial H}$$

gegeben. In der klassischen statistischen Physik betrachtet man häufig statt der freien Energie  $F(H)$  dessen Legendretransformierte

$$G(M) = \inf_H (F(H) + MH)$$

Häufig berechnet man  $G$ , indem man aus  $M(H)$  durch Inversion  $H(M)$  berechnet und dann  $G(M) = F(H(M)) + MH(M)$  erhält. Aus  $G(M)$  läßt sich  $F(H)$  wieder zurückerhalten, indem man die Legendretransformation von  $M$  nach  $H$  ausführt. Der Vorteil von  $G(M)$  gegenüber  $F(H)$  ist das bessere analytische Verhalten.  $M(H)$  hat im Fall eines ferromagnetischen Phasenübergangs beispielsweise einen Sprung als Funktion von  $H$  bei  $H = 0$ .  $F(H)$  hat also einen Knick bei  $H = 0$ . Dagegen ist  $G(M)$  eine glatte Funktion von  $M$ , für den Ferromagneten einfach ein Doppelmuldenpotential.

Ganz analog kann man auch für  $W(J^*, J)$  eine Legendretransformierte einführen. Für endliche Felder  $J, J^*$  sind die Erwartungswerte

$$\varphi_j(\tau) = \langle \phi_j(\tau) \rangle_{J, J^*}, \quad \varphi_j^*(\tau) = \langle \phi_j^*(\tau) \rangle_{J, J^*}$$

endlich. Man kann damit eine Legendretransformierte

$$\Gamma(\varphi^*, \varphi) = -W(J^*, J) - \sum_j \int d\tau [\varphi_j^*(\tau) J_j(\tau) + J_j^*(\tau) \varphi_j(\tau)]$$

die häufig als effektives Potential bezeichnet wird. Auf der rechten Seite sind dabei  $J$  und  $J^*$  als Funktionen von  $\varphi$  und  $\varphi^*$  einzusetzen.

Eine zweite Funktion ist die effektive Wirkung, die durch

$$G_{\text{eff}}(\psi^*, \psi) = \ln \langle \exp(-V(\phi^* + \psi^*, \phi + \psi)) \rangle_0$$

definiert ist. Sie spielt eine wichtige Rolle bei der Renormierung von Fermisystemen, wir werden sie in diesem Zusammenhang näher untersuchen.



## 2 Fermiflüssigkeiten

Die Theorie der Fermiflüssigkeiten geht auf Landau zurück. Diese Theorie basiert zunächst nicht auf den feldtheoretischen Methoden, die wir bisher kennengelernt haben, sondern auf einem Konzept, das Quasiteilchen benutzt und sich in der Theorie von Vielteilchensystemen als nützlich erwiesen hat. In diesem Kapitel wird zuerst dieses Konzept kurz vorgestellt und einige physikalische Eigenschaften von Fermiflüssigkeiten hergeleitet. Anschließend werden wir sehen, wie man die im vorangegangenen Kapitel kennengelernten Methoden nutzen kann, um die Fermiflüssigkeitstheorie auf eine mikroskopische Grundlage zu stellen. Wir werden weiter sehen, welche Instabilitäten zum Zusammenbruch der Fermiflüssigkeit führen können.

### 2.1 Das Quasiteilchenkonzept

Als Ausgangspunkt wählen wir ein nichtwechselwirkendes Gas von Spin- $\frac{1}{2}$ Fermionen mit  $N$  Teilchen in einem Volumen  $V$ . Die kinetische Energie der Teilchen ist  $\frac{\vec{k}^2}{2m}$ . Da immer nur zwei Fermionen in einem Zustand zu gleichem  $\vec{k}$  Platz finden, werden wir für den Grundzustand beginnend mit  $\vec{k} = 0$  die Zustände der Reihe nach auffüllen. Da das System isotrop ist, werden alle Zustände mit  $|\vec{k}| < k_F$  aufgefüllt, wobei der Fermiimpuls  $k_F$  durch

$$N = \sum_{|\vec{k}| < k_F} 2$$

gegeben ist. Die Energie ist

$$E = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\vec{k}^2}{2m} n(\vec{k}, \sigma)$$

mit

$$n(\vec{k}, \sigma) = \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

Wir nehmen nun an, daß das System durch eine sehr schwach äußere Störung etwas gestört wird. Wenn die Störung hinreichend klein ist, führt sie einfach zu einer kleinen Änderung  $\delta n(\vec{k})$  der Besetzungszahlen und damit zu einer kleinen Änderung

$$\delta E = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\vec{k}^2}{2m} \delta n(\vec{k}, \sigma)$$

der Energie. Da es umso mehr Energie kostet, die Besetzungszahlen zu ändern, je weiter  $|\vec{k}|$  von  $k_F$  entfernt ist, kann man erwarten, daß  $\delta n(\vec{k})$  nahe  $k_F$  groß ist und sonst verschwindet.

Jetzt soll die Wechselwirkung der Fermionen adiabatisch eingeschaltet werden. Eine normale Fermiflüssigkeit ist als ein wechselwirkendes Fermisystem definiert, bei dem sich die niedrig liegenden Anregungen des Systems adiabatisch aus den Anregungen des nichtwechselwirkenden Systems entwickeln. Das ist natürlich eine Annahme. Es besteht die Möglichkeit, daß schon eine beliebig kleine Wechselwirkung ausreicht, um das System vollständig zu ändern und vollständig andere Eigenschaften zu liefern. Beispielsweise ist der BCS-Grundzustand eines Supraleiters ein Zustand, der mit dem nichtwechselwirkenden System nichts zu tun hat. Wir werden später sehen, daß solche Probleme tatsächlich in wechselwirkenden Fermisystemen auftreten. Im folgenden soll die obige Annahme aber gelten.

Typische Anregungen in einem nicht-wechselwirkenden Fermisystem sind Teilchen- oder Lochanregungen sowie Teilchen-Loch-Anregungen. Für die ersten beiden wird zu dem System ein Teilchen hinzugefügt oder es wird eines entfernt, für die dritte wird ein Teilchen aus einem Zustand entfernt und in einen anderen gesetzt.

Generell können Anregungen durch  $\delta n(\vec{k}, \sigma)$  beschrieben werden. Dies soll für das wechselwirkende System nach Annahme auch gelten. Aus den Teilchen werden somit Quasiteilchen. Nun ist aber klar, daß die Wechselwirkung selber dazu führen wird, daß Teilchen aneinander gestreut werden. Die Quasiteilchen werden also durch die Wechselwirkung eine endliche Lebensdauer haben. Je höher ihre Anregungsenergie ist, je weiter weg sich  $\vec{k}$  von dem Fermiimpuls befindet, desto kleiner wird die Lebensdauer sein. Die obige Annahme wird also nur für niedrig liegende Anregungen gelten können.

Die grundlegende Annahme von Landau besteht darin, daß sich eine kleine Störung des Systems wie im Fall von nicht-wechselwirkenden Fermionen als eine kleine Änderung  $\delta n(\vec{k}, \sigma)$  der Besetzungszahlen beschreiben läßt. Wir machen also den Ansatz

$$\delta E = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}}^0 \delta n(\vec{k}, \sigma) + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma, \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') \delta n(\vec{k}, \sigma) \delta n(\vec{k}', \sigma')$$

Wir nehmen an, daß kein äußeres Magnetfeld anliegt, so daß die Energien  $\varepsilon_{\vec{k}}^0$  nicht vom Spin abhängen. Die Wechselwirkung soll ebenso symmetrisch sein, sie kann damit nur von  $\sigma \cdot \sigma'$  abhängen. Betrachten wir zunächst die Einteilchenanregungen, die nicht von  $\sigma$  abhängen. Die Energie einer Einteilchenanregung ist

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\delta E}{\delta n(\vec{k})} = \varepsilon_{\vec{k}}^0 + \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') \delta n(\vec{k}')$$

$\sum_{\sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma')$  hängt nicht von  $\sigma$  ab. Da die Quasiteilchen adiabatisch aus den Teilchen entstehen, wenn die Wechselwirkung eingeschaltet wird, hat ihre Verteilung wie die Fermiverteilung eines Sprung bei  $|\vec{k}| = k_F$ . Für endliche Temperaturen gilt

$$n(\vec{k}) = \frac{1}{\exp(\beta(\varepsilon(\vec{k}) - \mu)) + 1}$$

Diese Gleichung ist jetzt aber eine Selbstkonsistenzgleichung für die Besetzungszahlen  $n(\vec{k})$ , da  $\varepsilon(\vec{k})$  von  $n(\vec{k})$  abhängt.

Da die Wechselwirkung nur von  $\sigma \cdot \sigma'$  abhängt, kann sie in der Form

$$f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') = f(\vec{k}, \vec{k}') + 4\sigma\sigma'\phi(\vec{k}, \vec{k}')$$

oder

$$f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') = f_o(\vec{k}, \vec{k}') + \delta_{\sigma, \sigma'} f_e(\vec{k}, \vec{k}')$$

geschrieben werden, wobei

$$f_o = f - \phi$$

$$f_e = 2\phi$$

gilt.  $\sigma$  und  $\sigma'$  nehmen die Werte  $\pm \frac{1}{2}$  an. Weiter genügt es, die Wechselwirkung für Werte von  $\vec{k}$  und  $\vec{k}'$  zu kennen, die in der Nähe der Fermifläche liegen. Im isotropen Fall hängt die Wechselwirkung dann nur noch von dem Winkel  $\theta$  zwischen  $\vec{k}$  und  $\vec{k}'$  ab. Es gilt dann

$$\begin{aligned} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') \Big|_{|\vec{k}|=|\vec{k}'|=k_F} &= f(\theta, \sigma, \sigma') \\ &= f(\theta) + 4\sigma\sigma'\phi(\theta) \\ &= \sum_{L=0}^{\infty} (f_L + 4\sigma\sigma'\phi_L) P_L(\cos \theta) \end{aligned}$$

Aus der Orthogonalität der Legendrepolynome

$$\frac{2L+1}{2} \int_{-1}^1 P_L(\cos \theta) P_{L'}(\cos \theta) d(\cos \theta) = \delta_{L, L'}$$

folgt

$$\left\{ \begin{array}{l} f_L \\ \phi_L \end{array} \right\} = \frac{2L+1}{4\pi} \int d\Omega_{P_L}(\cos\theta) \left\{ \begin{array}{l} f(\vec{k}, \vec{k}') \\ \phi(\vec{k}, \vec{k}') \end{array} \right\} \Big|_{|\vec{k}|=|\vec{k}'|=k_F}$$

In vielen Anwendungen genügt es, die ersten paar Koeffizienten  $f_L$  und  $\phi_L$  zu kennen. In diesen Fällen kann die Theorie auf wenige Parameter zurückgeführt werden und ist sehr gut zu verwenden. In Metallen hat man dagegen in der Regel keine Rotationssymmetrie und damit einen sehr großen Satz von Parametern. Man muß dann  $f(\vec{k}, \vec{k}')$  und  $\phi(\vec{k}, \vec{k}')$  an der Fermifläche kennen. Die Theorie wird damit deutlich weniger gut handhabbar.

## 2.2 Gleichgewichtseigenschaften der normalen Fermiflüssigkeit

Ein fundamentaler Parameter der Theorie ist die effektive Masse. Sie ist wie üblich über

$$\frac{k_F}{m^*} \equiv \left| \nabla_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}^0 \right|_{|\vec{k}|=k_F} = v_F$$

definiert. In der Nähe der Fermifläche gilt also

$$\varepsilon_{\vec{k}}^0 = \mu + (k - k_F) \frac{k_F}{m^*}$$

wobei Isotropie angenommen wurde. Die effektive Masse kann experimentell über die Messung der spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen bestimmt werden.

### Spezifische Wärme

Es gilt

$$c_V = \frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial T} \Big|_V$$

Eine Änderung der Temperatur führt zu einer Änderung der Besetzungszahlen, so daß

$$\begin{aligned} c_V &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\delta E}{\delta n(\vec{k}, \sigma)} \frac{\delta n(\vec{k}, \sigma)}{\delta T} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \frac{\delta n(\vec{k}, \sigma)}{\delta T} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \frac{\partial n(\vec{k}, \sigma)}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \left( -\frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu}{T} + \frac{\partial(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)}{\partial T} \right) \end{aligned}$$

Der Term  $\sum_{\vec{k}, \sigma} f(\vec{k}, \vec{k}') \delta n(\vec{k})$  in  $\varepsilon_{\vec{k}}$  ist  $O(T^2)$  und kann hier für tiefe Temperaturen vernachlässigt werden. Wir können also  $\varepsilon_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}}^0$  setzen. Man erhält dann wie auch im Fall von nicht-wechselwirkenden Fermisystemen

$$c_V = \frac{1}{3} m^* k_F k_B^2 T$$

Typischerweise ist  $m^*$  größer als  $m$ . Für flüssiges  $^3\text{He}$  bei Normaldruck ist  $m^* = 3m$ . Es gibt aber sogenannte Schwere Fermionen, das sind Elektronen in Systemen wie  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ ,  $\text{UPt}_3$ ,  $\text{CeAl}_3$ , hier wird  $m^*/m$  von der Größenordnung  $10^2$  bis  $10^3$ .

## Effektive Masse und Wechselwirkung

Daß die effektive Masse nicht gleich  $m$  ist, liegt natürlich daran, daß wir es mit wechselwirkenden Fermionen zu tun haben.  $m^*$  muß also mit der Wechselwirkung zu tun haben. Dieser Zusammenhang kann auf unterschiedliche Weise hergeleitet werden. Ich benutze hier eine Herleitung, die die Gallilei-Invarianz benutzt. Wir betrachten das System in einem Bezugssystem, daß sich mit der (kleinen) Geschwindigkeit  $\delta\vec{v} = \delta\vec{k}/m$  relativ zum ursprünglichen System bewegt. Der Schwerpunkt bewegt sich also mit  $\delta\vec{v}$ . Die Energie ist also um  $\delta E = (Nm)\vec{v}^2/2$  erhöht. Diese Energieänderung kann man auch berechnen, indem man die Ausgangsformel

$$\delta E = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_k^0 \delta n(\vec{k}, \sigma) + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma, \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') \delta n(\vec{k}, \sigma) \delta n(\vec{k}', \sigma')$$

benutzt und  $\delta n(\vec{k}, \sigma) = n(\vec{k} + \delta\vec{k}, \sigma) - n(\vec{k}, \sigma)$  setzt. Der erste Term ist dann

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_k^0 \delta n(\vec{k}, \sigma) &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_k^0 (n(\vec{k} + \delta\vec{k}, \sigma) - n(\vec{k}, \sigma)) \\ &= \sum_{\vec{k}, \sigma} (\varepsilon_{\vec{k} + \delta\vec{k}}^0 - \varepsilon_{\vec{k}}^0) n(\vec{k}, \sigma) \\ &= \frac{\delta k^2}{2m^*} \sum_{\vec{k}, \sigma} n(\vec{k}, \sigma) \\ &= N_e \frac{\delta k^2}{2m^*} \end{aligned}$$

Für den zweiten Term erhält man

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma, \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') \delta n(\vec{k}, \sigma) \delta n(\vec{k}', \sigma') \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma, \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') (n(\vec{k} + \delta\vec{k}, \sigma) - n(\vec{k}, \sigma)) (n(\vec{k}' + \delta\vec{k}', \sigma') - n(\vec{k}', \sigma')) \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma, \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') (\delta\vec{k} \cdot \hat{k}) (\delta\vec{k}' \cdot \hat{k}') \delta(k - k_F) \delta(k' - k_F) \\ &= \frac{V}{2(2\pi)^6} 4 \int k^2 dk d\Omega \int d^3 k'^2 dk' f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') (\delta\vec{k} \cdot \hat{k}) (\delta\vec{k}' \cdot \hat{k}') \delta(k - k_F) \delta(k' - k_F) \\ &= \frac{V \delta k^2}{8\pi^4} k_F^4 \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_{-1}^1 d(\cos \theta') f(\theta - \theta') \cos \theta \cos \theta' \\ &= \frac{V k_F^4}{8\pi^4} \delta k^2 \frac{4}{9} f_1 \end{aligned}$$

Benutzt man, daß  $\rho = k_F^3/(3\pi^2)$ , dann erhält man für den zweiten Term

$$\frac{k_F}{3\pi^2} N_e \frac{\delta k^2}{2}$$

Setzt man die Ausdrücke, die man für  $\delta E$  erhält, gleich, so ergibt sich

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m^*} + \frac{k_F}{3\pi^2} f_1$$

Häufig führt man normierte Entwicklungskoeffizienten

$$\begin{aligned} F_L &= \rho_F f_L \\ Z_L &= \rho_F \phi_L \end{aligned}$$

ein, wobei  $\rho_F$  die Zustandsdichte an der Fermikante ist. Es gilt

$$\begin{aligned}\rho_F &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \sigma} \delta(\varepsilon_{\vec{k}}^0 - \mu) \\ &= \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi \int k^2 dk \delta(\varepsilon_{\vec{k}}^0 - \mu) \\ &= \frac{m^* k_F}{\pi^2}\end{aligned}$$

Damit erhält man jetzt

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{F_1}{3}$$

### Kompressibilität

Die Kompressibilität einer Flüssigkeit gibt die Änderung des Druckes mit dem Volumen an. Für feste Teilchenzahl gilt

$$\frac{1}{\chi} = -V \frac{\partial P}{\partial V} = \rho \frac{\partial P}{\partial \rho}$$

Die Kompressibilität ist mit der Schallgeschwindigkeit über die Beziehung

$$c^2 = \frac{1}{m\rho\chi}$$

verknüpft. Anschaulich ist klar, daß die Kompressibilität in einer homogenen Fermiflüssigkeit nur von kugelsymmetrischen Mittelwert von  $f(\vec{k}\sigma, \vec{k}'\sigma')$  abhängen kann, also nur von  $F_0$ .

Da die freie Energie extensiv ist, gilt

$$F(T, V, N) = V f(T, \rho)$$

und damit

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = f - \rho \frac{\partial f}{\partial \rho}$$

$$\frac{1}{\chi} = \rho^2 \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} f(T, \rho)$$

Mit

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N} = \frac{\partial f(T, \rho)}{\partial \rho}$$

erhält man

$$\frac{1}{\chi} = \rho^2 \frac{\partial \mu}{\partial \rho}$$

Die linke Seite läßt sich berechnen, indem man die Beziehung

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\delta E}{\delta n(\vec{k})} = \varepsilon_{\vec{k}}^0 + \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') \delta n(\vec{k}')$$

benutzt für  $k = k_F$ , da  $\mu = \varepsilon(k_F)$ . Für die Kompressibilität genügt es, isotrope  $\delta n(\vec{k}) = \delta n(k)$  zu betrachten.

$$\frac{\partial \mu}{\partial \rho} = \frac{\partial \varepsilon_{k_F}^0}{\partial k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \rho} + \sum_{\sigma'} \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} f(k_F, \vec{k}') \frac{\delta n(k')}{\delta k_F} \frac{\partial k_F}{\partial \rho}$$

Es gilt  $\rho = k_F^3/(3\pi^2)$  und damit  $\rho \frac{\partial k_F}{\partial \rho} = \frac{k_F}{3}$ , weiter  $\frac{\partial \varepsilon_{k_F}^0}{\partial k_F} = \frac{k_F}{m^*}$ ,  $\frac{\partial n(k')}{\partial k_F} = \delta(k' - k_F)$  und damit

$$\rho \frac{\partial \mu}{\partial \rho} = \frac{k_F^2}{3m^*} + \frac{k_F^2}{(2\pi)^3} \frac{k_F}{3} \sum_{\sigma'} \int d\Omega f(\theta, \sigma \sigma') = \frac{k_F^2}{3m^*} (1 + F_0)$$

Man erhält also schließlich

$$\frac{1}{\chi} = \frac{\rho k_F^2}{3m^*} (1 + F_0) = \frac{\rho k_F^2}{m} \frac{1 + F_0}{3 + F_1}$$

$\chi$  hängt also von  $F_0$  ab wie erwartet und außerdem über die effektive Masse auch von  $F_1$ . Die Kompressibilität wird unendlich, wenn  $F_0 = -1$  wird. Das System ist dann instabil. Es muß also  $F_0 > -1$  gelten. Das ist ein Spezialfall des Stabilitätskriteriums  $F_L > -(2L + 1)$ ,  $Z_L > -(2L + 1)$ , das sich generell zeigen läßt.

## Magnetische Suszeptibilität

Bisher haben wir nur spinunabhängige Störungen betrachtet. Diese lassen sich mit den Parametern  $F_L$  in Verbindung bringen. Als nächstes wollen wir eine spinabhängige Störung betrachten. Das einfachste ist ein kleines magnetisches Feld  $\delta H$ , das zu einer Magnetisierung  $\delta M$  führt. Die magnetische Suszeptibilität ist  $\chi_M = \frac{\delta M}{\delta H}$ . Die Magnetisierung ist durch

$$\delta M = \rho \left( +\frac{1}{2} \right) - \rho \left( -\frac{1}{2} \right) = 2 \sum_{\sigma} \sigma \rho(\sigma)$$

gegeben. Wir können sie berechnen, indem wir benutzen, daß das chemische Potential nicht von  $\sigma$  abhängen darf. Bezeichnet man trotzdem mit  $\mu(\sigma)$  das chemische Potential für Fermionen mit Spin  $\sigma$ , dann gilt in erster Ordnung

$$\mu(\sigma) = \mu_0 - \sigma \delta H + 2 \sum_{\sigma'} \frac{\partial \mu(\sigma)}{\partial \rho(\sigma')} \sigma' \delta M$$

und damit wegen  $\mu(+)=\mu(-)$

$$\delta H = 2 \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{\partial \mu}{\partial \rho(\sigma')} \sigma \sigma' \delta M$$

$$\frac{1}{\chi_M} = 2 \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{\partial \mu}{\partial \rho(\sigma')} \sigma \sigma'$$

Das Vorgehen ist ähnlich wie im Fall der Suszeptibilität. Ausgangspunkt ist die Formel für die Energien

$$\varepsilon(\vec{k}, \sigma) = \varepsilon_{\vec{k}, \sigma}^0 - \sigma \delta h + \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}', \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') \delta n(\vec{k}', \sigma')$$

Für  $k = k_F$  muß die linke Seite gleich  $\mu$  sein. Man erhält also

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu}{\partial \rho(\sigma')} &= \frac{\partial k_F}{\partial \rho(\sigma')} \left[ \frac{\partial \varepsilon_{k_F}^0}{\partial k_F} \delta_{\sigma, \sigma'} + \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} f(k_F, \sigma, \vec{k}', \sigma') \frac{\partial n(\vec{k}', \sigma')}{\partial k_F} \right] \\ &= \frac{2\pi^2}{k_F^2} \left[ \frac{k_F}{m^*} \delta_{\sigma, \sigma'} + \frac{k_F}{2m^*} (F_0 + 4\sigma \sigma' Z_0) \right] \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\chi_M} = \frac{4\pi^2}{k_F m^*} + \frac{4\pi^2}{k_F m^*} Z_0$$

$$\chi_M = \frac{k_F m^*}{4\pi^2 (1 + Z_0)}$$

Auch hier erkennt man wieder die Stabilitätsbedingung  $Z_0 > -1$ . Für flüssiges  $^3\text{He}$  liegen typische Werte von  $Z_0$  zwischen -0.67 bei Normaldruck und -0.76 bei 27 atm. Das System ist also nahe an einer ferromagnetischen Instabilität.

## Stabilität

Wir haben schon erwähnt, daß die Fermiflüssigkeit stabil ist, falls  $F_L, Z_L > -2L - 1$  gilt. Das soll jetzt noch gezeigt werden. Die Fermiflüssigkeit ist stabil, falls  $E - \mu N$  ein Minimum annimmt. Wir berechnen also

$$\delta(E - \mu N) = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}}^0 - \mu) \delta n(\vec{k}, \sigma) + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma'} f(\vec{k}, \sigma, \vec{k}', \sigma') \delta n(\vec{k}, \sigma) \delta n(\vec{k}', \sigma')$$

für allgemeine  $\delta n(\vec{k}, \sigma)$ . Wir betrachten speziell ein isotropes System bei tiefen Temperaturen, lassen also nur Fluktuationen an der Fermikante zu. Solche Fluktuationen können in der Form

$$\delta n(\vec{k}, \sigma) = \delta(k_F - k) \delta k_F(\theta, \sigma) - \frac{1}{2} \frac{\partial \delta(k_F - k)}{\partial k} \delta k_F(\theta, \sigma)^2$$

parametrisiert werden. In erster Ordnung in  $\delta k_F(\theta, \sigma)$  verschwindet  $\delta(E - \mu N)$ . In zweiter Ordnung erhält man

$$\begin{aligned} \delta(E - \mu N) &= \frac{V}{8} \rho_F v_F^2 \left[ \sum_{\sigma} \int d\cos\theta \delta k_F(\theta, \sigma)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\cos\theta \int d\cos\theta' (f(\theta - \theta') + 4\sigma\sigma'\phi(\theta - \theta')) \delta k_F(\theta, \sigma) \delta k_F(\theta', \sigma') \right] \end{aligned}$$

Entwickelt man

$$\delta k_F(\theta, \sigma) = \sum_L \delta k_L(\sigma) P_L(\cos\theta)$$

so ergibt sich

$$\begin{aligned} \delta(E - \mu N) &= \frac{V}{8} \rho_F v_F^2 \sum_L \left[ \left( \delta k_L\left(+\frac{1}{2}\right) + \delta k_L\left(-\frac{1}{2}\right) \right)^2 \left( 1 + \frac{F_L}{2L+1} \right) \right. \\ &\quad \left. \left( \delta k_L\left(+\frac{1}{2}\right) - \delta k_L\left(-\frac{1}{2}\right) \right)^2 \left( 1 + \frac{Z_L}{2L+1} \right) \right] \end{aligned}$$

Die rechte Seite muß positiv definit sein, daraus folgt  $F_L, Z_L > -2L - 1$ .

## 2.3 Mikroskopische Herleitung

### konventionelle Störungsrechnung

Betrachten wie zunächst ein konventionelles, generisches Modell für wechselwirkende Fermionen

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4, \sigma_1 \dots \sigma_4} V_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4} c_{\vec{k}_1, \sigma_1}^{\dagger} c_{\vec{k}_2, \sigma_2}^{\dagger} c_{\vec{k}_4, \sigma_4} c_{\vec{k}_3, \sigma_3}$$

Berechnet man in konventioneller Störungsrechnung die Energie bis in zweite Ordnung, so erhält man

$$\begin{aligned} E &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\vec{k}} n(\vec{k}, \sigma) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \sigma_1, \vec{k}_2, \sigma_2} V_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \vec{k}_2} n(\vec{k}_1, \sigma_1) n(\vec{k}_2, \sigma_2) \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{k_1 \dots k_4, \sigma_1 \dots \sigma_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \frac{|V_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4}|^2}{2m(k_1^2 + k_2^2 - k_3^2 - k_4^2)} n(\vec{k}_1, \sigma_1) n(\vec{k}_2, \sigma_2) (1 - n(\vec{k}_3, \sigma_3)) (1 - n(\vec{k}_4, \sigma_4)) \\ &\quad + O(V^3) \end{aligned}$$

Führt man in diesem Ausdruck kleine Variationen der  $n(\vec{k}, \sigma)$  durch, so erhält man

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\vec{k}, \sigma}^0 &= \varepsilon_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}_1, \sigma_1} V_{\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}, \vec{k}_1} n(\vec{k}_1, \sigma_1) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3, \sigma_1, \dots, \sigma_3} \delta_{\vec{k} + \vec{k}_1, \vec{k}_2 + \vec{k}_3} \frac{|V_{\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3}|^2}{2m(k^2 + k_1^2 - k_2^2 - k_3^2)} n(\vec{k}_1, \sigma_1) (1 - n(\vec{k}_2, \sigma_2)) (1 - n(\vec{k}_3, \sigma_3)) \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3, \sigma_1, \dots, \sigma_3} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k} + \vec{k}_3} \frac{|V_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}, \vec{k}_3}|^2}{2m(k_1^2 + k_2^2 - k^2 - k_3^2)} n(\vec{k}_1, \sigma_1) n(\vec{k}_2, \sigma_2) (1 - n(\vec{k}_3, \sigma_3)) \\ &+ O(V^3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} f(\vec{k}_1, \sigma_1, \vec{k}_2, \sigma_2) &= V_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \vec{k}_2} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_3, \sigma_3, \vec{k}_4, \sigma_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \frac{|V_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4}|^2}{2m(k_1^2 + k_2^2 - k_3^2 - k_4^2)} (1 - n(\vec{k}_3, \sigma_3)) (1 - n(\vec{k}_4, \sigma_4)) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_3, \sigma_3, \vec{k}_4, \sigma_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \frac{|V_{\vec{k}_3, \vec{k}_4, \vec{k}_1, \vec{k}_2}|^2}{2m(k_1^2 + k_2^2 - k_3^2 - k_4^2)} n(\vec{k}_3, \sigma_3) n(\vec{k}_4, \sigma_4) \\ &- \sum_{\vec{k}_3, \sigma_3, \vec{k}_4, \sigma_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_3, \vec{k}_2 + \vec{k}_4} \frac{|V_{\vec{k}_1, \vec{k}_3, \vec{k}_2, \vec{k}_4}|^2}{2m(k_1^2 + k_3^2 - k_2^2 - k_4^2)} n(\vec{k}_3, \sigma_3) (1 - n(\vec{k}_4, \sigma_4)) \\ &+ O(V^3) \end{aligned}$$

Obwohl diese Rechnung im Prinzip durchführbar ist, erkennt man das typische Problem der Störungsrechnung: Es treten kleine Energienenner auf. Speziell in höheren Ordnungen treten dadurch Divergenzen auf. Im Prinzip müssten in so einer Störungsrechnung unendlich viele Terme aufsummiert werden. Das wird in praktischen Rechnungen auch gemacht, aber typischerweise, indem man für die aufsummierten Größen Integralgleichungen aufstellt und dann diese Integralgleichungen löst. Diese Rechnungen werden natürlich auf der Basis einer feldtheoretischen Störungsrechnung durchgeführt, wie wir sie im vorangegangenen Kapitel kennengelernt haben. Wie diese Rechnung im Prinzip funktioniert, werden wir uns jetzt ansehen.

## Selbstenergie

Analog zu dem nichtwechselwirkenden Propagator setzt man im translationsinvarianten wechselwirkenden System

$$\langle \phi_{\vec{k}, \sigma}^*(\tau) \phi_{\vec{k}, \sigma}(\tau') \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \exp(-i\omega_n(\tau - \tau')) G_{\vec{k}, \sigma}(\omega_n)$$

Für  $G_{\vec{k}, \sigma}(\omega_n)$  kann man eine graphische Entwicklung machen.  $G_{\vec{k}, \sigma}(\omega_n)$  ist durch die Summe aller zusammenhängenden Diagramme mit zwei äußeren Linien gegeben. Formal kann man

$$G_{\vec{k}, \sigma}(\omega_n) = \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu - i\omega_n + \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)}$$

geschrieben werden.  $\Sigma(\vec{k}, \omega_n)$  wird als Selbstenergie bezeichnet. Entwickelt man  $G_{\vec{k}, \sigma}(\omega_n)$ , so ergibt sich

$$G_{\vec{k}, \sigma}(\omega_n) = \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \tilde{g}_{\vec{k}}(\omega_n) \left[ \Sigma(\vec{k}, i\omega_n) \tilde{g}_{\vec{k}}(\omega_n) \right]^{r-1}$$

Daraus erkennt man, daß  $\Sigma(\vec{k}, \omega_n)$  diagrammatisch als Summe aller amputierten, ein-Teilchen irreduziblen Diagramme mit zwei äußeren Linien geschrieben werden kann. Dabei bedeutet amputiert, da für die äußeren Linien

kein Faktor  $\tilde{g}_{\vec{k}}(\omega_n)$  mitgenommen wird, und ein-Teilchen irreduzibel, daß das Diagramm nicht in zwei Teile zerfällt, wenn eine Linie durchschnitten wird.

Aus dem Einteilchenpropagator oder auch aus der Selbstenergie lassen sich die Einteilchenenergien bestimmen. Dazu setzt man zunächst den Einteilchenpropagator in die komplexe Ebene fort und führt für reelle  $\omega$  die beiden Größen:

$$G_{\vec{k},\sigma}^{R/A}(\omega) = -\frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu - \omega + \Sigma(\vec{k}, \omega) \mp i\eta}$$

ein. Im allgemeinen wird diese Fortsetzung durchgeführt, indem man

$$G_{\vec{k},\sigma} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\vec{k}, \omega')}{\omega' - i\omega_n}$$

schreibt und  $i\omega_n$  durch  $\omega$  ersetzt. Zunächst ist zu bemerken, da diese Fortsetzung nicht eindeutig ist. Da  $\exp(i\omega_n\beta) = \zeta$  ist, kann man  $G$  natürlich mit einem Faktor  $\zeta \exp(i\omega_n\beta)$  multiplizieren, ohne daß der Ausdruck sich ändert. Damit hätte man in  $G^{R/A}$  einen Faktor  $\zeta \exp(\omega\beta)$ .  $G^{R/A}$  sind aber die retardierten und avancierten Greenschen Funktionen, von denen das asymptotische Verhalten für große  $\omega$  aus ihrer direkten Berechnung bekannt ist, sie sind  $\propto |\omega|^{-1}$ . Fordert man dies zusätzlich, dann ist die analytische Fortsetzung eindeutig. Die Pole von  $G^{R/A}$  ergeben die Einteilchenenergien.

$$\omega = \varepsilon_{\vec{k}} + \Sigma(\vec{k}, \omega)$$

Daraus ergibt sich

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{k}{m} + \frac{\partial \Sigma}{\partial k} + \frac{\partial \Sigma}{\partial \omega} \frac{d\omega}{dk}$$

Mit  $\frac{d\omega}{dk} = \frac{k}{m^*}$  erhält man für die effektive Masse

$$m^* = m \left( 1 + \frac{m}{k} \frac{\partial \Sigma}{\partial k} \right)^{-1} \left( 1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \omega} \right)$$

auszuwerten bei  $k = k_F$ .

Es bleibt also,  $\Sigma$  zu berechnen. In erster Ordnung erhält man den Beitrag

$$\Sigma'_1(\vec{k}) = \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{k}_1 \omega_1} V_{\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}, \vec{k}_1} \tilde{g}_{\vec{k}_1}(\omega_1) = \sum V_{\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}, \vec{k}_1} n_{\vec{k}_1}$$

Dieser Beitrag hängt nicht von  $\omega$  ab. Es ergibt sich also nur eine Verschiebung der Energieskala und damit eine Verschiebung des chemischen Potentials. Setzt man hier  $n_{\vec{k}_1} = n(\vec{k}_1) = \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\vec{k}_1})$  mit den ursprünglichen Einteilchenenergien  $\varepsilon_{\vec{k}_1}$  ein, dann erhält man das störungstheoretische Resultate erster Ordnung. Dieses Resultat läßt sich verbessern, indem man statt  $\Sigma'_1$  die Größe

$$\Sigma_1(\vec{k}) = \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{k}_1 \omega_1} V_{\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}, \vec{k}_1} G_{\vec{k}_1}(\omega_1) = \sum V_{\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}, \vec{k}_1} n_{\vec{k}_1}$$

berechnet. Hier ist  $n_{\vec{k}_1}$  die Besetzungszahl des wechselwirkenden Systems, die selbstkonsistent bestimmt wird. Dieser Beitrag entspricht einer Hartree-Fock Näherung.

In zweiter Ordnung ergibt sich der Beitrag

$$\begin{aligned} \Sigma'_2(\vec{k}, \omega_n) &= \frac{1}{\beta^2 V^2} \sum_{\vec{k}_1, \omega_{n_1}, \vec{k}_2, \omega_{n_2}} V_{\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}, \vec{k}_1} V_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \vec{k}_2} \tilde{g}_{\vec{k}_2}(\omega_{n_2}) \tilde{g}_{\vec{k}_1}^2(\omega_{n_1}) \\ &+ \frac{1}{\beta^2 V^2} \sum_{\vec{k}_1, \omega_{n_1}, \vec{k}_2, \omega_{n_2}} V_{\vec{k}, \vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2} V_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}, \vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}} \tilde{g}_{\vec{k}_1}(\omega_{n_1}) \tilde{g}_{\vec{k}_2}(\omega_{n_2}) \tilde{g}_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}}(\omega_{n_1} + \omega_{n_2} - \omega_n) \end{aligned}$$

Während der erste Term wie schon der Beitrag erster Ordnung nicht von  $\omega_n$  abhängt, gilt dies für den Beitrag zweiter Ordnung nicht mehr. Auch hier kann man natürlich wieder statt der Propagatoren des nicht-wechselwirkenden Systems die des wechselwirkenden Systems einsetzen und eine entsprechende Größe  $\Sigma_2$  berechnen. Macht man dies generell, erhält man für  $\Sigma$  eine Summe von zwei-Teilchen irreduziblen Diagrammen.

## Quasiteilchenenergie

Als nächstes suchen wir die Lösungen der Gleichung  $\omega = \varepsilon_{\vec{k}} + \Sigma(\vec{k}, \omega)$ , die die Pole der Greenschen Funktion liefert. In der ersten Ordnung  $\Sigma_1(\vec{k})$  gibt es wie für das freie System nur eine Lösung für  $\omega$ . Wir nehmen die zweite Ordnung mit. In dieser Ordnung treten in  $\Sigma_2(\vec{k}, \omega)$  Pole auf. Der Einfachheit halber betrachten wir ein artifizielles Modell, bei dem in  $\Sigma_2(\vec{k}, \omega)$  nur zwei Pole auftreten, also

$$\Sigma_2(\omega) = \frac{A_1}{\omega - \varepsilon_1} + \frac{A_2}{\omega - \varepsilon_2}$$

Die Greensche Funktion hat bis zu dieser Ordnung die Struktur

$$\begin{aligned} G_2(\omega) &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 - \Sigma_2(\omega)} \\ &= \frac{(\omega - \varepsilon_1)(\omega - \varepsilon_2)}{(\omega - \varepsilon_0)(\omega - \varepsilon_1)(\omega - \varepsilon_2) - A_1(\omega - \varepsilon_2) - A_2(\omega - \varepsilon_1)} \end{aligned}$$

Für kleine  $A_1, A_2$ , das entspricht dem Fall schwacher Wechselwirkung, gibt es drei Pole, die in der Nähe von  $\varepsilon_0, \varepsilon_1$  und  $\varepsilon_2$  liegen. Die Summe der Residuen ist 1, das Residuum von dem Pol nahe  $\varepsilon_0$  ist nahe bei 1, die anderen beiden Residua sind klein. In führender Ordnung in  $A_i$  sind die Residua

$$1 - \sum_{i=1}^2 \frac{A_i}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_i)^2}$$

$$\frac{A_i}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_i)^2}, \quad i = 1, 2$$

Für das allgemeine System ist die Situation ganz analog. Die Greensche Funktion hat einen Pol in der Nähe von  $\varepsilon_{\vec{k}}$  mit einem reduzierten Residuum. Der Pol in der Nähe von  $\varepsilon_{\vec{k}}$  wird als Quasiteilchen bezeichnet. Seine Energie ist gerade die Quasiteilchenenergie in der Fermiflüssigkeitstheorie.

## Wechselwirkung der Quasiteilchen

Die Wechselwirkung der Quasiteilchen in der Fermiflüssigkeit ist eine effektive Wechselwirkung, also eine Zweiteilchen-Eigenschaft des Systems. Um sie zu berechnen, benötigen wir die Zweiteilchen-Greensfunktion

$$\left\langle \phi_{\vec{k}_1 \sigma_1}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_2 \sigma_2}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_3 \sigma_3}(\tau) \phi_{\vec{k}_4 \sigma_4}(\tau) \right\rangle$$

Wir haben schon gesehen, daß man sie in der Form

$$\begin{aligned} \left\langle \phi_{\vec{k}_1 \sigma_1}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_2 \sigma_2}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_3 \sigma_3}(\tau) \phi_{\vec{k}_4 \sigma_4}(\tau) \right\rangle &= \left\langle \phi_{\vec{k}_1 \sigma_1}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_4 \sigma_4}(\tau) \right\rangle \left\langle \phi_{\vec{k}_2 \sigma_2}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_3 \sigma_3}(\tau) \right\rangle \\ &- \left\langle \phi_{\vec{k}_1 \sigma_1}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_3 \sigma_3}(\tau) \right\rangle \left\langle \phi_{\vec{k}_2 \sigma_2}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_4 \sigma_4}(\tau) \right\rangle \\ &+ \left\langle \phi_{\vec{k}_1 \sigma_1}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_2 \sigma_2}^*(\tau) \phi_{\vec{k}_3 \sigma_3}(\tau) \phi_{\vec{k}_4 \sigma_4}(\tau) \right\rangle_c \end{aligned}$$

schreiben kann, wobei der letzte Term den zusammenhängenden Anteil beschreibt. Die ersten beiden Beiträge beschreiben zwei Quasiteilchen, die nicht miteinander wechselwirken. Die Eigenschaften der Quasiteilchen selbst sind natürlich durch die Wechselwirkung der Teilchen bestimmt. Der dritte Term enthält die effektive Wechselwirkung. Er kann in der Form

$$\begin{aligned} \left\langle \phi_{\vec{k}_1 \sigma_1}^*(\tau_1) \phi_{\vec{k}_2 \sigma_2}^*(\tau_2) \phi_{\vec{k}_3 \sigma_3}(\tau_3) \phi_{\vec{k}_4 \sigma_4}(\tau_4) \right\rangle_c &= \sum_{\sigma'_1 \sigma'_2 \sigma'_3 \sigma'_4} \sum_{\vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \vec{k}'_3 \vec{k}'_4} \int d\tau'_1 \int d\tau'_2 \int d\tau'_3 \int d\tau'_4 \left\langle \phi_{\vec{k}_1 \sigma_1}^*(\tau_1) \phi_{\vec{k}'_1 \sigma'_1}(\tau'_1) \right\rangle \\ &\left\langle \phi_{\vec{k}_2 \sigma_2}^*(\tau_2) \phi_{\vec{k}'_2 \sigma'_2}(\tau'_2) \right\rangle \left\langle \phi_{\vec{k}'_3 \sigma'_3}(\tau_3) \phi_{\vec{k}_3 \sigma_3}(\tau_3) \right\rangle \left\langle \phi_{\vec{k}'_4 \sigma'_4}(\tau_4) \phi_{\vec{k}_4 \sigma_4}(\tau_4) \right\rangle \\ &\Gamma_{\vec{k}'_1 \sigma'_1, \vec{k}'_2 \sigma'_2, \vec{k}'_3 \sigma'_3, \vec{k}'_4 \sigma'_4}^{(2)}(\tau'_1, \tau'_2, \tau'_3, \tau'_4) \end{aligned}$$

$\Gamma^{(2)}$  kann als Wechselwirkung der Quasiteilchen interpretiert werden. In einer störungstheoretischen Entwicklung ist  $\Gamma^{(2)}$  in erster Ordnung gerade die ursprüngliche Wechselwirkung. Generell ist  $\Gamma^{(2)}$  die Summe aller amputierten, ein-Teilchen irreduziblen Diagramme mit vier äußeren Linien. In dieser Hinsicht ist  $\Gamma^{(2)}$  analog zur Selbstenergie. Der obige Ausdruck ist in dieser Form allgemein. Nimmt man Translationsinvarianz an, dann liefern die Summen nur Beiträge für  $\vec{k}'_i = \vec{k}_i$ ,  $\sigma'_i = \sigma_i$ . Führt man weiter die Frequenzen  $\omega_n$  ein, dann können die Integrale berechnet werden und es verbleiben Summen über  $\omega_{n_i}$ . Wegen der Energieerhaltung in den Einteilchenpropagatoren sind auch diese Summen trivial auszuführen. Damit erhält man schließlich die Größe

$$\Gamma_{\vec{k}_1\sigma_1, \vec{k}_2\sigma_2, \vec{k}_3\sigma_3, \vec{k}_4\sigma_4}^{(2)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) = \delta_{K_1+K_2, K_3+K_4} \Gamma_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}(K_1, K_2; K_1 - K_3)$$

wobei diese Gleichung gleichzeitig die Definition von  $\Gamma$  ist. Ferner ist  $K_i = (\omega_{n_i}, \vec{k}_i)$ .  $K_1 - K_3$  ist der Impulsübertrag bei der Wechselwirkung. Ähnlich wie die Selbstenergie hängt  $\Gamma$  in erster Ordnung nicht von den Frequenzen  $\omega_n$  ab, wohl aber in allen höheren Ordnungen. Diese Abhängigkeit drückt die Retardierung der Wechselwirkung aus. Die Spinabhängigkeit kann noch vereinfacht werden, wenn man die  $SU(2)$  Spinsymmetrie berücksichtigt. Man kann dann  $\Gamma$  in der Form

$$\begin{aligned} \Gamma_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}(K_1, K_2; K) &= \frac{1}{2}(\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4} - \delta_{\sigma_1\sigma_4}\delta_{\sigma_2\sigma_3})\Gamma_s(K_1, K_2; K) \\ &+ \frac{1}{2}(\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4} + \delta_{\sigma_1\sigma_4}\delta_{\sigma_2\sigma_3})\Gamma_t(K_1, K_2; K) \end{aligned}$$

schreiben, wobei  $\Gamma_s$  den Singulett-Anteil und  $\Gamma_t$  den Triplett-Anteil von  $\Gamma$  bezeichnet.

In der Fermiflüssigkeitstheorie wird eine effektive Wechselwirkung betrachtet, die nur von den Änderungen  $\delta n(\vec{k}, \sigma)$  abhängt. Das bedeutet, daß der Impulsübertrag verschwindet. Für die Berechnung der effektiven Quasiteilchenwechselwirkung wird man also in  $K = (\omega_n, \vec{k})$  den Impulsübertrag  $= 0$  setzen. Zudem wird der Limes tiefer Temperaturen betrachtet, wir werden also den Limes  $\omega_n \rightarrow 0$  betrachten. Schließlich werden wir  $\Gamma$  nur für  $\vec{k}_i$  in der Nähe der Fermikante, also  $k_i \approx k_F$  berechnen. In diesem Limes liefert  $\Gamma$  die effektive Wechselwirkung der Fermiflüssigkeitstheorie.

Betrachtet man eine Störungsentwicklung von  $\Gamma$ , so erhält man in erster Ordnung die ursprüngliche Wechselwirkung. Für Impulsübertrag  $= 0$  liefert dies die erste Ordnung von der Quasiteilchenwechselwirkung, in Übereinstimmung mit der Störungstheorie. Ebenso stimmt auch die zweite Ordnung überein. Man kann diese Entwicklung wie bei der Selbstenergie dadurch verbessern, daß man statt der Propagatoren des nicht-wechselwirkenden Systems eine diagrammatische Entwicklung mit den Propagatoren des wechselwirkenden Systems macht.  $\Gamma$  ist dann eine Summe über alle zwei-Teilchen irreduziblen Diagramme (statt vorher eine Summe über alle ein-Teilchen irreduziblen Diagramme, ganz analog zur Selbstenergie). In der Regeln wird auch  $\Gamma$  als eine Summe unendlich vieler Diagramme berechnet, indem man eine entsprechende Integralgleichung löst. Das Problem ist aber, daß in all diesen störungstheoretischen Entwicklungen Divergenzen auftreten können, so daß diese Entwicklungen oft nicht durchführbar sind.

## 2.4 Renormierung

### 2.4.1 Grundidee

Ein Verfahren, das es erlaubt, mit den in der Störungsrechnung auftretenden Divergenzen umzugehen, ist die Renormierung. Renormierung ist ein allgemeines Verfahren, das auf ganz unterschiedliche Modelle in ganz unterschiedlicher Weise angewandt wird. Wichtig ist, sich möglichst an einem Beispiel die Grundidee klar zu machen. Wir betrachten an dieser Stelle als Beispiel ein wechselwirkendes, translationsinvariantes Fermionensystem

$$Z = \int D[\phi] \exp(S[\phi^*, \phi])$$

$$S[\phi^*, \phi] = \sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) \phi_K^* \phi_K - V[\phi^*, \phi]$$

wobei  $K = (\omega_n, \vec{k}, \sigma)$  ein Multiindex ist, der die Matsubarafrequenzen, die Impulsvektoren und den Spin enthält. Die Wechselwirkung ist hier eine ganz allgemeine Wechselwirkung  $V[\phi^*, \phi]$ . Wir haben im ersten Kapitel der Vorlesung gesehen, daß man alle zusammenhängenden Propagatoren aus einer erzeugenden Funktion

$$W[J^*, J] = \ln \left\langle \exp(-V[\phi^*, \phi] + \sum_K (J_K^* \phi_K + \phi_K^* J_K)) \right\rangle_0$$

durch Ableiten nach den Feldern  $J_K$  und  $J_K^*$  berechnen kann. Dabei ist

$$\langle A[\phi^*, \phi] \rangle_0 = \frac{\int D[\phi] A[\phi^*, \phi] \exp(\sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) \phi_K^* \phi_K)}{\int D[\phi] \exp(\sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) \phi_K^* \phi_K)}$$

der Erwartungswert im nicht-wechselwirkenden System. Der Einteilchenpropagator im nichtwechselwirkenden System ist

$$C(K) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu}$$

und hat eine Divergenz für  $\omega_n = 0$  und  $\varepsilon_{\vec{k}} = \mu$ , also gerade für den Fall, der in der Fermiflüssigkeitstheorie interessiert: Quasiteilchen nahe der Fermikante bei tiefen Temperaturen. Die Idee der Renormierung ist nun eigentlich relativ einfach: Man führt einen Cutoff  $\Lambda$  ein und integriert in den Integralen zur Berechnung von  $W$  zunächst nur über die Felder  $\phi_K$  und  $\phi_K^*$ , für die  $|i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu| > \Lambda$  gilt. Die übrig gebliebenen Integrale können wieder in der Form

$$W[J^*, J] = \ln \left\langle \exp(-V_\Lambda[\phi^*, \phi, J^*, J] + \sum_{K: |i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu| < \Lambda} (J_K^* \phi_K + \phi_K^* J_K)) \right\rangle_{\Lambda, 0}$$

geschrieben werden. Dabei hängt der nichtwechselwirkende Anteil jetzt von  $\Lambda$  ab, dadurch hängt der Mittelwert von  $\Lambda$  ab, und die neue Wechselwirkung  $V_\Lambda[\phi^*, \phi, J^*, J]$  hängt explizit von  $\Lambda$  und von den Feldern  $J_K$  und  $J_K^*$  mit  $|i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu| > \Lambda$  ab. In dem neuen Integral sind insbesondere die Divergenzen verschoben, da die  $\varepsilon_{\vec{k}}$  und eventuell auch  $\mu$  verschoben sind. Interessiert man sich nur für Propagatoren in der Nähe der Fermikante, benötigt man zudem die Felder  $J_K$  und  $J_K^*$  in  $V_\Lambda[\phi^*, \phi, J^*, J]$  nicht und kann diese explizit 0 setzen. Als nächstes wird ein neuer Cutoff  $\Lambda_1$  eingeführt und es werden alle  $\phi_K$  und  $\phi_K^*$  integriert, mit  $|i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu| > \Lambda_1$ . Man erhält wiederum ein neues  $V_{\Lambda_1}$  und verschobene Einteilchenenergien. Iteriert man dieses Verfahren, so erhält man schließlich eine effektive Theorie, die nur noch Felder mit kleinen  $|i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu|$  enthält. Das ist die gesuchte effektive Theorie. A priori ist natürlich nicht klar, daß dieses Verfahren konvergiert. Im allgemeinen wird man keine Konvergenz erwarten können, lediglich in bestimmten Fällen und für schwache Wechselwirkung läßt sich die Konvergenz unter Umständen beweisen. Zudem wird das Verfahren technisch oft in unterschiedlicher Weise durchgeführt: An Stelle von diskreten Schritten kann man den Cutoff kontinuierlich variieren. An Stelle eines 'harten' Cutoffs kann man einen 'weichen' verwenden (diese Begriffe werden später genau erklärt). An Stelle von  $W$  kann man mit einer anderen Erzeugenden Funktion rechnen.

## 2.4.2 Effektive Wirkung

Für Fermisysteme scheint es günstig, statt mit  $W$  mit einer anderen Funktion zu rechnen, nämlich mit

$$G_{\text{eff}}[\psi^*, \psi] = \ln \langle \exp(-V[\phi^* + \psi^*, \phi + \psi]) \rangle_0$$

Wir hatten diese Größe schon im ersten Kapitel erwähnt und wollen Sie jetzt genauer betrachten. Zunächst gilt

$$\begin{aligned} Z_0 \langle \exp(-V[\phi^* + \psi^*, \phi + \psi]) \rangle_0 &= \int D[\phi] \exp(\sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) \phi_K^* \phi_K - V[\phi^* + \psi^*, \phi + \psi]) \\ &= \int D[\phi] \exp(\sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) (\phi_K^* - \psi_K^*) (\phi_K - \psi_K) - V[\phi^*, \phi]) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \exp\left(\sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) \psi_K^* \psi_K\right) \\
&\quad \times \int D[\phi] \exp\left(\sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) \phi_K^* \phi_K - V[\phi^*, \phi] \right. \\
&\quad \quad \left. - \sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) (\phi_K^* \psi_K + \psi_K^* \phi_K)\right) \\
&= Z_0 \exp\left(\sum_K (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu) \psi_K^* \psi_K + W[C(K)^{-1} \psi_K^*, C(K)^{-1} \psi_K]\right)
\end{aligned}$$

und damit

$$G_{\text{eff}}[\psi^*, \psi] = \sum_K \psi_K^* C(K)^{-1} \psi_K + W[C(K)^{-1} \psi_K^*, C(K)^{-1} \psi_K]$$

Da  $W$  die Erzeugende für zusammenhängende Propagatoren ist, kann man leicht ausrechnen, daß  $G_{\text{eff}}$  die erzeugende für zusammenhängende, amputierte Propagatoren ist. Durch die Faktoren  $C(K)^{-1}$  im Argument von  $W$  wird beim Ableiten das Resultat für jede äußere Linie mit einem Faktor  $C(K)^{-1} = (i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}} + \mu)$  multipliziert.

$-G_{\text{eff}}$  wird auch als effektive Wechselwirkung bezeichnet.

### 2.4.3 Renormierungsgleichung für $G_{\text{eff}}$

In diesem Abschnitt werden wir eine Renormierungsgleichung für die effektive Wirkung herleiten. Im Gegensatz zu dem oben beschriebenen Vorgehen werden wir eine kontinuierliche Renormierung vornehmen. Wir führen dazu einen modifizierten Propagator

$$C^\Lambda(K) = \frac{\Theta_\Lambda(K)}{i\omega_n - (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)}$$

ein. Dabei ist  $\Theta_\Lambda(K)$  eine Abschneidefunktion (cut-off Funktion), unter der man sich am einfachsten einen 'harten' cut-off

$$\Theta_\Lambda(K) = \theta(|\varepsilon_{\vec{k}} - \mu - i\omega_n| - \Lambda)$$

vorstellen kann. Da es für analytische Rechnungen unter Umständen günstiger ist, mit einer differenzierbaren Abschneidefunktion zu rechnen. Für  $|\varepsilon_{\vec{k}} - \mu - i\omega_n| \gg \Lambda$  ist  $\Theta_\Lambda(K) = 1$  und  $C^\Lambda(K) = C(K)$ . Für  $|\varepsilon_{\vec{k}} - \mu - i\omega_n| \ll \Lambda$  ist  $\Theta_\Lambda(K) = 0$  und damit  $C^\Lambda(K) = 0$ . Ich definiere

$$G_{\text{eff}}^\Lambda[\psi^*, \psi] = \ln \frac{\int D[\phi] \exp(\sum_K \phi_K^* (C^\Lambda(K))^{-1} \phi_K - V[\phi^* + \psi^*, \phi + \psi])}{\int D[\phi] \exp(\sum_K \phi_K^* (C^\Lambda(K))^{-1} \phi_K)}$$

Für  $K$ -Werte mit  $\Theta_\Lambda(K) = 0$  tragen in diesem Integral nur  $\phi_K = 0$  bei.  $G_{\text{eff}}^\Lambda$  ist dann durch  $-V$  gegeben. Für  $K$ -Werte mit  $\Theta_\Lambda(K) = 1$  ist  $G_{\text{eff}}^\Lambda$  durch  $G_{\text{eff}}$  gegeben.  $G_{\text{eff}}^\Lambda$  interpoliert zwischen  $-V$  und  $G_{\text{eff}}$ . Das Ziel besteht jetzt darin, eine Differentialgleichung für  $G_{\text{eff}}^\Lambda$  herzuleiten, mit die man mit der Anfangsbedingung  $-V$  die effektive Wirkung berechnen kann. Dazu benutzen wir die Beziehungen

$$F[\psi^*, \psi] = F \left[ \frac{\partial}{\partial \eta}, \frac{\partial}{\partial \eta^*} \right] \exp\left(\sum_K (\eta_K^* \psi_K + \eta_K \psi_K^*)\right) \Bigg|_{\eta = \eta^* = 0}$$

$$\int D[\phi] \exp\left(\sum_K \phi_K^* (C^\Lambda(K))^{-1} \phi_K + \sum_K (\eta_K^* \phi_K + \eta_K \phi_K^*)\right) = \exp\left(\sum_K \eta_K^* C^\Lambda(K) \eta_K\right) \int D[\phi] \exp\left(\sum_K \phi_K^* (C^\Lambda(K))^{-1} \phi_K\right)$$

Die zweite Gleichung läßt sich in der Form

$$\begin{aligned}
\left\langle \exp\left(\sum_K (\eta_K^* \phi_K + \eta_K \phi_K^*)\right) \right\rangle_{\Lambda, 0} &= \frac{\int D[\phi] \exp(\sum_K \phi_K^* (C^\Lambda(K))^{-1} \phi_K + \sum_K (\eta_K^* \phi_K + \eta_K \phi_K^*))}{\int D[\phi] \exp(\sum_K \phi_K^* (C^\Lambda(K))^{-1} \phi_K)} \\
&= \exp\left(\sum_K \eta_K^* C^\Lambda(K) \eta_K\right)
\end{aligned}$$

schreiben. Damit gilt

$$\begin{aligned}
\exp(G_{\text{eff}}^{\Lambda}[\psi^*, \psi]) &= \langle \exp(-V[\phi^* + \psi^*, \phi + \psi]) \rangle_{\Lambda,0} \\
&= \exp\left(-V\left[\frac{\partial}{\partial \eta}, \frac{\partial}{\partial \eta^*}\right]\right) \left\langle \exp\left(\sum_K (\eta_K^* (\phi_K + \psi_K) + \eta_K (\phi_K^* + \psi_K^*))\right) \right\rangle_{\eta=\eta^*=0} \\
&= \exp\left(-V\left[\frac{\partial}{\partial \eta}, \frac{\partial}{\partial \eta^*}\right]\right) \exp\left(\sum_K \eta_K^* C^{\Lambda}(K) \eta_K + \sum_K (\eta_K^* \psi_K + \eta_K \psi_K^*)\right) \Big|_{\eta=\eta^*=0} \\
&= \exp\left(-V\left[\frac{\partial}{\partial \eta}, \frac{\partial}{\partial \eta^*}\right]\right) \exp\left(\sum_K \frac{\partial}{\partial \psi_K} C^{\Lambda}(K) \frac{\partial}{\partial \psi_K^*}\right) \exp\left(\sum_K (\eta_K^* \psi_K + \eta_K \psi_K^*)\right) \Big|_{\eta=\eta^*=0} \\
&= \exp\left(\sum_K \frac{\partial}{\partial \psi_K} C^{\Lambda}(K) \frac{\partial}{\partial \psi_K^*}\right) \exp\left(-V\left[\frac{\partial}{\partial \eta}, \frac{\partial}{\partial \eta^*}\right]\right) \exp\left(\sum_K (\eta_K^* \psi_K + \eta_K \psi_K^*)\right) \Big|_{\eta=\eta^*=0} \\
&= \exp\left(\sum_K \frac{\partial}{\partial \psi_K} C^{\Lambda}(K) \frac{\partial}{\partial \psi_K^*}\right) \exp(-V[\psi_K^*, \psi_K])
\end{aligned}$$

Damit erhält man

$$\frac{\partial}{\partial \Lambda} \exp(G_{\text{eff}}^{\Lambda}[\psi^*, \psi]) = \sum_K \frac{\partial}{\partial \psi_K} \frac{\partial C^{\Lambda}(K)}{\partial \Lambda} \frac{\partial}{\partial \psi_K^*} \exp(G_{\text{eff}}^{\Lambda}[\psi^*, \psi])$$

und somit

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \Lambda} G_{\text{eff}}^{\Lambda}[\psi^*, \psi] &= \sum_K \frac{\partial}{\partial \psi_K} \frac{\partial C^{\Lambda}(K)}{\partial \Lambda} \frac{\partial}{\partial \psi_K^*} G_{\text{eff}}^{\Lambda}[\psi^*, \psi] \\
&\quad + \sum_K \frac{\partial G_{\text{eff}}^{\Lambda}[\psi^*, \psi]}{\partial \psi_K} \frac{\partial C^{\Lambda}(K)}{\partial \Lambda} \frac{\partial G_{\text{eff}}^{\Lambda}[\psi^*, \psi]}{\partial \psi_K^*}
\end{aligned}$$

Dies ist die gesuchte Differentialgleichung für  $G_{\text{eff}}^{\Lambda}$ . Es handelt sich hier um eine exakte Renormierungsgleichung. Allerdings ist sofort zu bemerken, daß sich diese Gleichung in der Regel nicht exakt lösen läßt und daß man auf typischerweise störungstheoretische Näherungen angewiesen ist. Um diese Gleichung weitervzu behandeln, kann man  $G_{\text{eff}}^{\Lambda}$  in Monome von Faktoren  $\psi_K$  und  $\psi_K^*$  entwickeln und Differentialgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten herleiten. In dem vorliegenden Fall ist es günstiger, eine Entwicklung der Form

$$\begin{aligned}
G_{\text{eff}}^{\Lambda}[\psi^*, \psi] &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(m!)^2} \sum_{K_1, \dots, K_m} \sum_{K'_1, \dots, K'_m} G_m^{\Lambda}(K'_1, \dots, K'_m; K_1, \dots, K_m) \\
&\quad \exp\left(\sum_K \frac{\partial}{\partial \psi_K} \frac{\partial D^{\Lambda}(K)}{\partial \Lambda} \frac{\partial}{\partial \psi_K^*}\right) \prod_{j=1}^m \psi_{K_j}^* \psi_{K_j}
\end{aligned}$$

mit

$$D^{\Lambda}(K) = C(K) - C^{\Lambda}(K) = \frac{1 - \Theta_{\Lambda}(K)}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu}$$

Die Ableitung von  $G_{\text{eff}}^{\Lambda}$  nach  $\Lambda$  liefert zwei Beiträge, einen von der Ableitung der Koeffizienten und einen von der Ableitung von  $D^{\Lambda}(K)$ . Wegen

$$\frac{\partial D^{\Lambda}(K)}{\partial \Lambda} = -\frac{\partial C^{\Lambda}(K)}{\partial \Lambda}$$

liefert der zweite Term einen Beitrag von der Form des ersten in der Renormierungsgleichung von  $G_{\text{eff}}^{\Lambda}$ . Dieser Term liefert damit keinen Beitrag zur Ableitung der Koeffizienten, lediglich der zweite Term trägt zur Ableitung der Koeffizienten bei. Die Differentialgleichung für die Koeffizienten kann wieder in einer graphischen

Form aufgeschrieben werden. Diese Form ist besonders für Störungsentwicklungen nützlich. In der Störungsentwicklung treten nur ein-Teilchen irreduzible Diagramme auf.

Wir wollen die Gleichungen für die Koeffizienten jetzt in niedrigster Ordnung störungstheoretisch auswerten. Die niedrigste Ordnung, die einen Beitrag zur Ableitung von  $G_m^\Lambda$  liefert, ist  $O(V^2)$ . Beachtet man zudem, daß wir mit einer Zweiteilchenwechselwirkung starten, so sind alle Koeffizienten  $G_m^\Lambda$  mit  $m > 2$  zu Beginn 0. Diese Koeffizienten liefern nur höhere Ordnung als  $O(V^2)$ . In  $O(V^2)$  hat man also nur eine Gleichung für die Koeffizienten  $G_2^\Lambda$  zu betrachten, wobei auf der rechten Seite auch wieder nur Terme auftreten, die zwei Faktoren  $G_2^\Lambda$  enthalten. Diese Gleichung lautet

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Lambda} G_2^\Lambda(K'_1, K'_2; K_1, K_2) &= - \sum_{K, K'} \frac{\partial(D^\Lambda(K)D^\Lambda(K'))}{\partial \Lambda} \left[ \frac{1}{2} G_2^\Lambda(K'_1, K'_2; K, K') G_2^\Lambda(K, K'; K_1, K_2) \right. \\ &\quad \left. - G_2^\Lambda(K'_1, K; K_1, K') G_2^\Lambda(K', K'_2; K, K_2) + G_2^\Lambda(K'_2, K; K_1, K') G_2^\Lambda(K', K'_1; K, K_2) \right] \end{aligned}$$

Da  $G_2^\Lambda = -\frac{1}{\beta V} \Gamma^{(2)}$  kann diese Gleichung direkt in eine Renormierungsgleichung für  $\Gamma^{(2)}$  umgeschrieben werden.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Lambda} \Gamma_\Lambda^{(2)}(K'_1, K'_2; K_1, K_2) &= \frac{1}{\beta V} \sum_{K, K'} \frac{\partial(D^\Lambda(K)D^\Lambda(K'))}{\partial \Lambda} \left[ \frac{1}{2} \Gamma_\Lambda^{(2)}(K'_1, K'_2; K, K') \Gamma_\Lambda^{(2)}(K, K'; K_1, K_2) \right. \\ &\quad \left. - \Gamma_\Lambda^{(2)}(K'_1, K; K_1, K') \Gamma_\Lambda^{(2)}(K', K'_2; K, K_2) + \Gamma_\Lambda^{(2)}(K'_2, K; K_1, K') \Gamma_\Lambda^{(2)}(K', K'_1; K, K_2) \right] \end{aligned}$$

Sie läßt sich noch weiter vereinfachen, wenn man die Translationsinvarianz und die Spinsymmetrie berücksichtigt. Wir hatten oben die Größen

$$\Gamma_{\vec{k}_1 \sigma_1, \vec{k}_2 \sigma_2, \vec{k}_3 \sigma_3, \vec{k}_4 \sigma_4}^{(2)}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}, \omega_{n_3}, \omega_{n_4}) = \delta_{K_1+K_2, K_3+K_4} \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}(K_1, K_2; K_1 - K_3)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}(K_1, K_2; K) &= \frac{1}{2} (\delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} - \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3}) \Gamma_s(K_1, K_2; K) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} + \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3}) \Gamma_t(K_1, K_2; K) \end{aligned}$$

eingeführt, wobei hier der Index  $K$  nur noch  $\vec{k}$  und  $\omega_n$  enthält. Damit kann man entsprechende Gleichungen für  $\Gamma_s$  und  $\Gamma_t$  einführen, sie lauten

$$\frac{\partial}{\partial \Lambda} \Gamma_\alpha(K_1, K_2; K) = \sum_{r=1}^3 \sum_{\alpha', \alpha''=s,t} C_{\alpha, \alpha', \alpha''}^r \beta_{\alpha', \alpha''}^r(K_1, K_2; K)$$

$$\beta_{\alpha', \alpha''}^1(K_1, K_2; K) = \frac{1}{2\beta V} \sum_{K'} \frac{\partial(D^\Lambda(K_1 - K')D^\Lambda(K_2 + K'))}{\partial \Lambda} \Gamma_{\alpha'}(K_1, K_2; K') \Gamma_{\alpha''}(K_1 - K', K_2 + K'; K - K')$$

$$\beta_{\alpha', \alpha''}^2(K_1, K_2; K) = -\frac{1}{\beta V} \sum_{K'} \frac{\partial(D^\Lambda(K')D^\Lambda(K' + K))}{\partial \Lambda} \Gamma_{\alpha'}(K_1, K'; K) \Gamma_{\alpha''}(K' + K, K_2; K)$$

$$\begin{aligned} \beta_{\alpha', \alpha''}^3(K_1, K_2; K) &= \frac{1}{\beta V} \sum_{K'} \frac{\partial(D^\Lambda(K')D^\Lambda(K_2 - K_1 + K' + K))}{\partial \Lambda} \Gamma_{\alpha'}(K_2, K'; K_2 + K - K_1) \\ &\quad \times \Gamma_{\alpha''}(K_2 - K_1 + K + K', K_1; K_2 + K - K_1) \end{aligned}$$

$$C_{sss}^1 = C_{ttt}^1 = 1, \quad C_{\alpha, \alpha', \alpha''}^1 = 0 \text{ sonst}$$

$$C_{sss}^2 = -C_{sss}^3 = -\frac{1}{4}, \quad C_{s\alpha\alpha'}^2 = -C_{s\alpha\alpha'}^3 = \frac{3}{4} \text{ sonst}$$

$$C_{ttt}^2 = C_{ttt}^3 = \frac{5}{4}, \quad C_{t\alpha\alpha'}^2 = C_{t\alpha\alpha'}^3 = \frac{1}{4} \text{ sonst}$$

Im allgemeinen kann man diese Gleichungen nicht analytisch lösen. Zum zweiten ist keinesfalls garantiert, daß diese Gleichungen zu nicht-divergenten Resultaten führen. Es ist bekannt, daß bei hinreichend tiefen Temperaturen eine Divergenz auftritt, die zu einer supraleitenden Instabilität gehört. Das System ist dann keine Fermiflüssigkeit mehr, sondern ein Supraleiter. Dieser Effekt heißt Kohn-Luttinger Effekt. Er wurde von Kohn und Luttinger in einer Störungsrechnung zweiter Ordnung 1965 gefunden (Phys. Rev. Lett. **15**, 524 (1965)) und läßt sich mathematisch exakt untersuchen (siehe hierzu eine Reihe von Arbeiten von Knörrer, Trubowitz, Feldman, Sinclair, Salmhofer). Es gibt aber Hinweise darauf, daß für schwache Wechselwirkung und nicht zu niedrige Temperaturen die Renormierungsgleichungen endliche Resultate liefern. In diesen Fällen verhält sich das System dann tatsächlich wie eine Fermiflüssigkeit.

#### 2.4.4 Das Hubbardmodell I, Renormierung

Das Hubbardmodell ist ein Modell für Elektronen auf einem Gitter. Es wird meist in der Form

$$H = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} + U \sum_x n_{x,\uparrow} n_{x,\downarrow}$$

geschrieben. Für ein translationsinvariantes Gitter mit einem Band kann man Fourier-transformieren und erhält

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} + \frac{U}{N_s} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}',\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow} c_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}$$

wobei  $N_s$  die Anzahl der Gitterplätze ist. Wir kommen auf allgemeine Resultate für dieses Modell im nächsten Abschnitt zurück, in diesem Unterabschnitt wollen wir Resultate von Renormierungsrechnungen für dieses Modell kennenlernen. Viele dieser Resultate sind generisch, das Hubbardmodell beschreibt damit eine typische Fermiflüssigkeit. Die in diesem Abschnitt vorgestellten Resultate sowie die Abbildungen entstammen der Arbeit: Renormalization group analysis of the 2D Hubbard model von Christoph J. Halboth und Walter Metzner, preprint cond-mat/9908471.

Ausgangspunkt für die Renormierungsrechnung ist das Hubbardmodell auf einem Quadratgitter. Es gilt also

$$\varepsilon_{\vec{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t'(\cos k_x \cos k_y)$$

wobei  $-t$  das Hüpfmatrixelement  $t_{x,y}$  für benachbarte Gitterplätze  $x$  und  $y$  ist,  $-t'$  das Matrixelement für übernächste Nachbarn. In allen anderen Fällen gilt  $t_{x,y} = 0$ . Die  $\varepsilon_{\vec{k}}$  kann man bildlich durch Linien konstanter Energie in der  $(k_x, k_y)$ -Ebene darstellen, siehe Abbildung 2.1.

Die Wechselwirkung ist

$$V[\phi^*, \phi] = \frac{U}{N_s} \sum_{K,K',Q} \phi_{K,\uparrow}^* \phi_{K',\downarrow}^* \phi_{K'-Q,\downarrow} \phi_{K,\uparrow}$$

Die Matrixelemente der Wechselwirkung sind also unabhängig von  $K$ ,  $K'$ , und  $Q$ . Im folgenden geht es darum, die Renormierungsgleichungen in der angegebenen Näherung numerisch zu lösen. Dazu sind verschiedene zusätzliche Näherungen und Annahmen nötig (die in der Vorlesung deutlich ausführlicher diskutiert werden, als hier. Details findet man in der zitierten Arbeit von Halboth und Metzner.):

1. Zuerst benötigt man eine geeignete Diskretisierung im  $\vec{k}$ -Raum. Hat man  $N$  Punkte im  $\vec{k}$ -Raum für die Diskretisierung ausgewählt, so gibt es  $O(N^3)$  Kopplungen.  $N$  kann also nicht zu groß gemacht werden. Ein typischer Wert ist  $N = 16$ .
2. Die Abhängigkeit von  $\Gamma$  von den  $\omega_n$  wird vernachlässigt.

Abbildung 2.1: Linien konstanter Energie  $\varepsilon_{\vec{k}}$  in der Brillouin-Zone für  $t' = 0$  (a) und  $t' = -0.16$  (b).

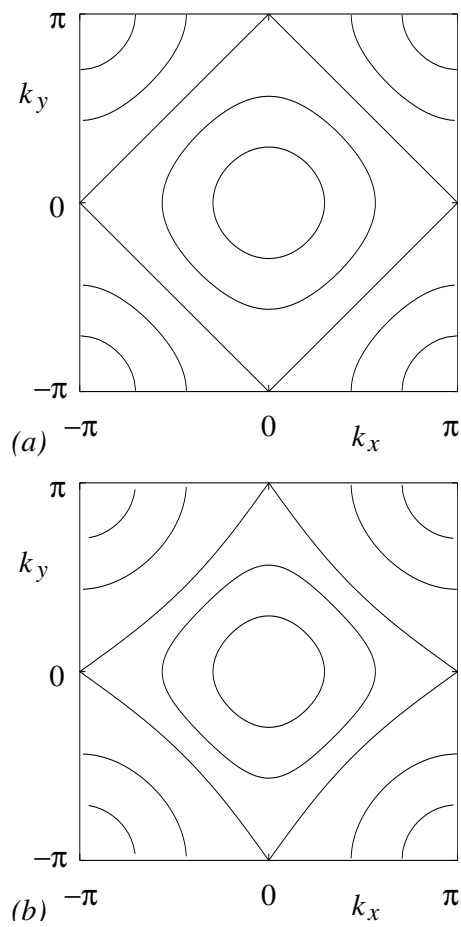
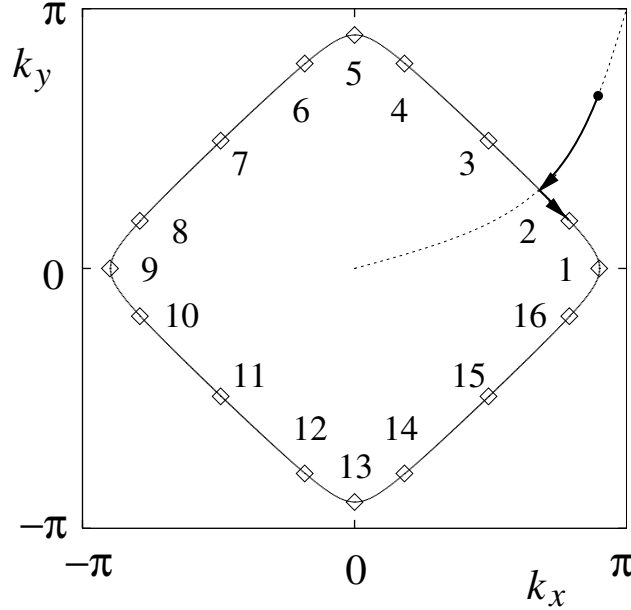


Abbildung 2.2: Die Diskretisierung der Fermikante. Die späteren Resultate beziehen sich auf die hier angegebene Nummerierung der Winkel.



3. Da  $N$  so klein ist, man aber genaue Ergebnisse auf der Fermifläche haben will, legt man die Punkte der Diskretisierung auf die Fermikante. Bei der Rechnung treten auch  $\Gamma$  auf mit Indices, die nicht auf der Fermikante liegen. Die Werte für die Wechselwirkung werden durch die Werte angenähert, die man erhält, wenn man die  $\vec{k}$  auf die Fermifläche projiziert. Für große  $\Lambda$  ist das exakt, da  $\Gamma$  dann konstant ist. Für kleine  $\Lambda$  treten überhaupt nur noch  $\Gamma$  auf mit Indices nahe der Fermikante, auch hier ist die Näherung gut.
4. In der Nähe der Ecken der Fermifläche sollte die Diskretisierung enger gewählt werden als auf den geraderen Stücken.

Die Näherung durch die Projektion ergibt

$$\Gamma_{\alpha}^{\Lambda}(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{k}'_1, \vec{k}'_2) \approx \Gamma_{\alpha}^{\Lambda}(\vec{k}_{F1}, \vec{k}_{F2}; \vec{k}'_{F1}, \vec{k}_{F1} + \vec{k}_{F2} - \vec{k}'_{F1})$$

Anstelle der  $\vec{k}_F$  kann man den Winkel angeben, der die Richtung von  $\vec{k}_F$  bestimmt. Man erhält dann

$$\Gamma_{\alpha}^{\Lambda}(\vec{k}_{F1}, \vec{k}_{F2}; \vec{k}'_{F1}, \vec{k}_{F1} + \vec{k}_{F2} - \vec{k}'_{F1}) = \Gamma_{\alpha}^{\Lambda}(\phi_1, \phi_2; \phi'_1)$$

Die Diskretisierung, die für die Numerik verwendet wurde, ist in Abbildung 2.2 angegeben.

Neben den effektiven Wechselwirkungen werden im folgenden immer Resultate für eine Reihe von Suszeptibilitäten angegeben. Eine divergierende effektive Wechselwirkung deutet auf eine Instabilität des Systems hin. Divergiert eine Suszeptibilität gleichzeitig, erkennt man daran, welche Art von physikalischer Instabilität vorliegt. Folgende Suszeptibilitäten werden berechnet:

1. kommensurable antiferromagnetische Spinsuszeptibilität  $\chi_S(\pi, \pi)$ ,
2. incommensurable antiferromagnetische Spinsuszeptibilitäten  $\chi_S(\vec{q})$  mit  $\vec{q} = (\pi - \delta, \pi)$  oder  $\vec{q} = (1 - \delta)(\pi, \pi)$ . Dabei ist  $\delta = 1 - N_e/N_s$  die Dotierung, also die Abweichung von halber Füllung.
3. kommensurable Ladungssuszeptibilität  $\chi_C(\pi, \pi)$ ,

4. Verschiedene Singlet-Paar Suszeptibilitäten für s-Wellen (Formfaktor  $d(\vec{k}) = 1$ ), modifizierte s-Wellen ( $d(\vec{k}) = (\cos k_x + \cos k_y)/\sqrt{2}$ ), d-Wellen mit Symmetrie  $d_{x^2-y^2}$  (Formfaktor  $d(\vec{k}) = (\cos k_x - \cos k_y)/\sqrt{2}$ ) und mit Symmetrie  $d_{xy}$  ( $d(\vec{k}) = \sin k_x \sin k_y$ ).

Die Resultate, die im folgenden gezeigt werden, sind Resultate für  $U = t$ . Die Resultate für die Suszeptibilitäten sind in Einheiten der Suszeptibilität für  $U = 0$  angegeben. Alle Resultate sind nahe halber Füllung und für kleine  $t'$ . Wir werden im folgenden Abschnitt sehen, daß das Hubbardmodell bei halber Füllung, d.h. einem Elektron pro Gitterplatz, einen Antiferromagneten beschreibt. Dieser antiferromagnetische Zustand sollte auch für Dichten in der Nähe von halber Füllung noch stabil sein. Das zeigen die Resultate in Abbildung 2.3. Bewegt man sich von halber Füllung weiter weg, sollte der Antiferromagnet nicht mehr stabil sein. In diesem Fall sollte man erwarten, daß aufgrund der Kohn-Luttinger Instabilität das System supraleitend wird. Das wird tatsächlich beobachtet, siehe Abbildung 2.4. Man erkennt deutlich, daß die Spinsuszeptibilitäten zunächst ansteigen, dann aber am einem bestimmten  $\Lambda$  nicht weiter oder kaum noch anwachsen. Dann zeigt sich plötzlich die d-Wellen Supraleitung, die das Verhalten dominiert. Führt man entsprechende Rechnungen für viele Parameter durch, kann man ein Phasendiagramm des Hubbardmodells für kleine  $U$  und nahe halber Füllung ableiten, siehe Abbildung 2.5. Abbildung 2.6 zeigt schließlich das kritische  $\Lambda_c$ , bei dem die Divergenz auftritt. Für kleine  $t' \neq 0$  können entsprechende Rechnungen durchgeführt werden. Man erkennt, daß der Bereich, in dem das Modell antiferromagnetisch wird, deutlich kleiner wird.

Als ersten Eindruck aus diesen Ergebnissen bleibt, daß das Hubbardmodell keine Fermiflüssigkeit beschreibt. Daß ist sicher nicht richtig. Die präsentierten Ergebnisse sind alle für sehr tiefe Temperaturen. Erhöht man die Temperatur, so sollte der Supraleiter instabil werden und das System wird zu einer Fermiflüssigkeit. Lediglich bei halber Füllung ist bis zu höheren Temperaturen mit einem Antiferromagneten zu rechnen. Allerdings sollte man bemerken, daß diese Rechnungen ein systematisches Problem haben: Ausgangspunkt war eine Entwicklung der Renormierungsgleichungen bis in zweite Ordnung. Eine solche Entwicklung ist nur gut, solange die effektive Wechselwirkung klein ist. Da aber Wechselwirkungen divergieren, sollte man erwarten, daß der Gültigkeitsbereich dieser Näherung verlassen wird, bevor das System die Divergenz erreicht hat. Der Status der Resultate ist damit nicht ganz klar. Das ist ein grundsätzliches Problem beim Hubbardmodell: Es gibt kein wirklich befriedigendes Näherungsverfahren, das zuverlässige Resultate liefert. Man ist in der Regel auf verschiedene Verfahren angewiesen, die sich gegenseitig ergänzen. Dazu gehören auch numerische Simulationen. Es gibt wenige exakte Resultate zum Hubbardmodell, die als feste Stützen in dem Verständnis dieses Modells dienen.

## 2.5 Ergänzung: Das Hubbardmodell II, Allgemeine Resultate

Der Hamiltonoperator des Hubbardmodells ist

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{WW}} = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} + U \sum_x c_{x\uparrow}^\dagger c_{x\downarrow}^\dagger c_{x\downarrow} c_{x\uparrow}$$

Dieses Modell wurde unabhängig voneinander von J. Hubbard (Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963)), von J. Kanamori (Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963)) und von M.C. Gutzwiller (Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963)) vorgeschlagen. Es wird zur Beschreibung von Systemen mit einem Metall-Isolator Übergang, zur Beschreibung von Ferro-, Antiferro- und Ferrimagnetismus benutzt. Unter dem Namen Pariser-Paar-Pople Modell dient es in der Chemie zur Beschreibung von  $\pi$ -Elektronensystemen. In jüngster Zeit dient es als Modell zur Beschreibung von Hochtemperatursupraleitern, zumindest im normalleitenden Zustand.

Generell beschreibt man mit diesem Modell stark wechselwirkende, also korrelierte Elektronen. Die Wechselwirkung  $U$  ist dann ebenso groß oder größer als typische Werte von  $t_{xy}$ . Deshalb fällt es eigentlich aus dem Rahmen dieses Kapitels. Lediglich für schwache Wechselwirkung (und evt. wegen der Kohn-Luttinger Instabilität für nicht zu tiefe Temperaturen) ist der Grundzustand eine Fermiflüssigkeit. Der Vollständigkeit halber sollen hier aber trotzdem einige wichtige Fakten des Modells zur Sprache kommen.

Abbildung 2.3: Fluß der Singlet-Funktionen  $\Gamma_s^\Lambda$  für verschiedene  $\vec{k}$ -Werte. Die Werte entsprechen den Punkten in Abbildung 2.2. Gezeigt sind diejenigen Kopplungen, die sich am stärksten verändern. Die untere Abbildung zeigt die Suszeptibilitäten. Es ist  $t' = 0$  und  $\mu = -0.005$ , das entspricht einer Dichte knapp unterhalb von halber Füllung. Man erkennt, daß das System eine Instabilität zu einem antiferromagnetischen Verhalten zeigt.

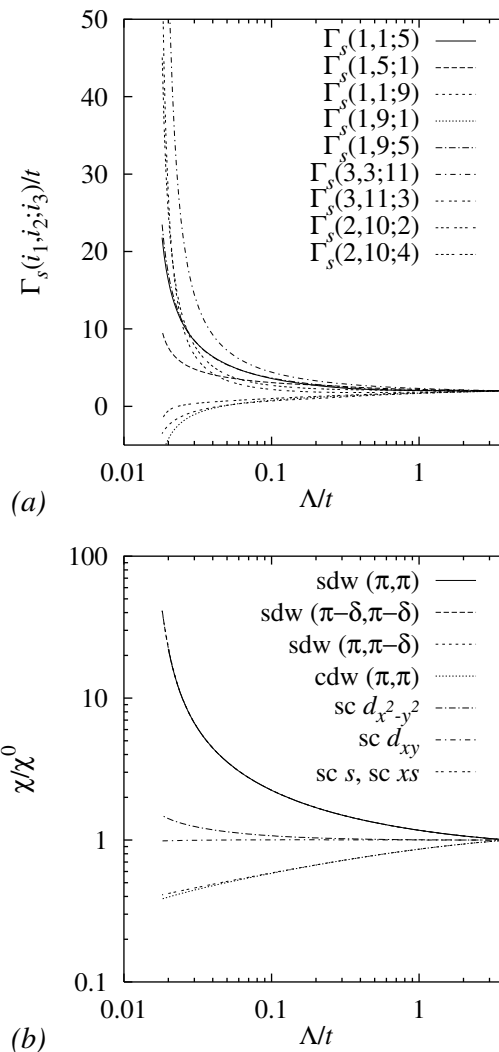


Abbildung 2.4: Wie Abbildung 2.3, aber mit  $\mu = -0.02$ .

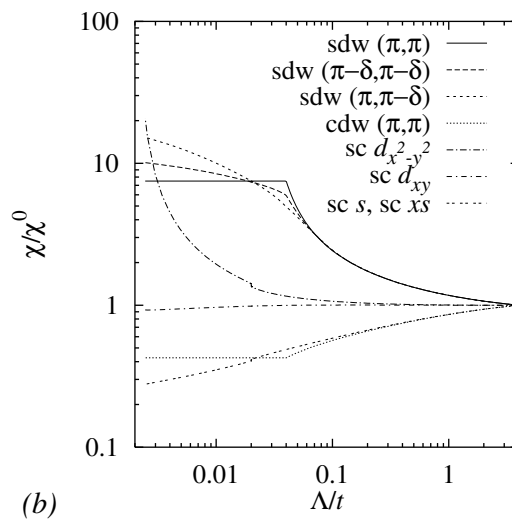
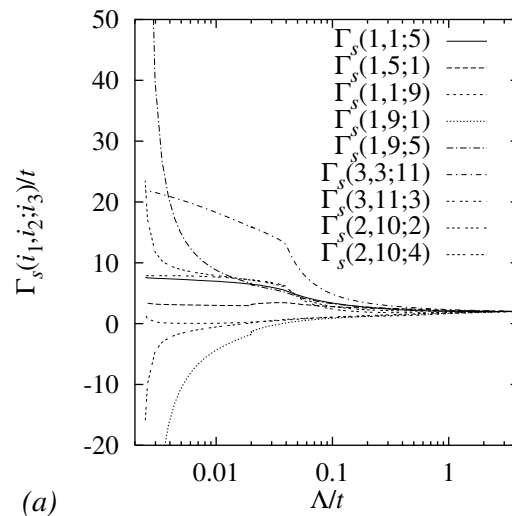


Abbildung 2.5: Ein Phasendiagramm des Hubbardmodells für kleine  $U$  und nahe halber Füllung,  $t' = 0$ , das sich aus den Renormierungsrechnungen ergibt.

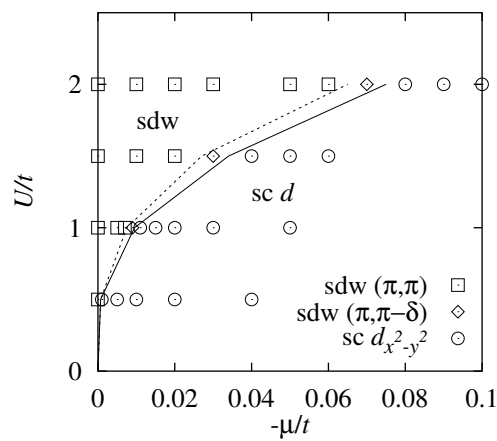
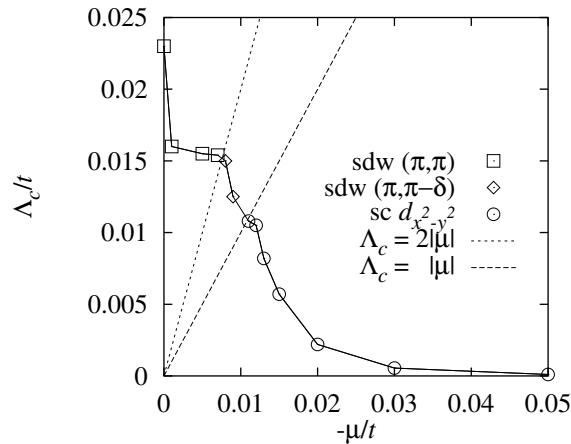


Abbildung 2.6: Das kritische  $\Lambda_c$ , bei dem die Rechnungen divergieren.

### 2.5.1 Symmetrien des Hubbardmodells

**Eichsymmetrie:**

$$c_{x\sigma}^\dagger \rightarrow \exp(i\alpha)c_{x\sigma}^\dagger, \quad c_{x\sigma} \rightarrow \exp(-i\alpha)c_{x\sigma}$$

Der Hamiltonoperator ist unter dieser Transformation invariant. Als Konsequenz ist die Teilchenzahl  $N_e = \sum_{\vec{n}\sigma} c_{\vec{n}\sigma}^\dagger c_{\vec{n}\sigma}$  eine Erhaltungsgröße.

**Spinsymmetrie:** Mit Hilfe der Paulimatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

kann man lokale Spinoperatoren

$$S_{\alpha,x} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} c_{x\sigma}^\dagger (\sigma_\alpha)_{\sigma,\sigma'} c_{x\sigma'}, \quad \alpha = x, y, z$$

und globale Spinoperatoren

$$S_\alpha = \sum_x S_{\alpha,x}$$

eingeführen. Häufig arbeitet man auch mit Auf- und Absteigeoperatoren

$$S_\pm = S_x \pm iS_y, \quad S_+ = \frac{\hbar}{2} \sum_{\vec{n}} c_{\vec{n}\uparrow}^\dagger c_{\vec{n}\downarrow}, \quad S_- = S_+^\dagger$$

Die Operatoren erfüllen eine  $SU(2)$ -Symmetrie. Es gelten die Vertauschungsrelationen

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

und zyklisch. Außerdem vertauschen diese Operatoren mit  $H$ , so daß  $H$ ,  $S^2$  und  $S_z$  (oder eine andere Komponente) gleichzeitig diagonalisiert werden können.

**Teilchen-Loch Transformation.** Unter der Transformation

$$c_{x\sigma}^\dagger \rightarrow c_{x\sigma}, \quad c_{x\sigma} \rightarrow c_{x\sigma}^\dagger$$

transformiert sich der Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} H \rightarrow H' &= \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} c_{x\sigma} c_{y\sigma}^\dagger + U \sum_x c_{x\uparrow} c_{x\downarrow} c_{x\downarrow}^\dagger c_{x\uparrow}^\dagger \\ &= - \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} c_{y\sigma}^\dagger c_{x\sigma} + U \sum_x (1 - c_{x\uparrow}^\dagger c_{x\uparrow}) (1 - c_{x\downarrow}^\dagger c_{x\downarrow}) \\ &= - \sum_{\vec{n}, \vec{n}', \sigma} t_{x,y} c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} + U \sum_x c_{x\uparrow}^\dagger c_{x\downarrow}^\dagger c_{x\downarrow} c_{x\uparrow} + U(N - N_e) \end{aligned}$$

Die Teilchen-Loch Transformation ist also im Allgemeinen keine Symmetrie-Transformation des Hubbardmodells. Sie ist aber nützlich, da sie erlaubt, Eigenzustände des Hubbardmodells in andere zu transformieren. Oft hat man ein Gitter, das in zwei Untergitter  $A$  und  $B$  zerfällt, so daß  $t_{x,y} = 0$  gilt, wenn  $x$  und  $y$  auf dem gleichen Untergitter liegen. Beispiel: Quadratgitter oder kubisches Gitter mit nichtverschwindenden Matrixelementen  $t_{x,y}$  nur für benachbarte Gitter. Solche Gitter heißen paare Gitter. Auf diesen Gittern kann man die Transformation

$$c_{x\sigma}^\dagger \rightarrow c_{x\sigma}^\dagger \text{ falls } x \in A, \quad c_{x\sigma}^\dagger \rightarrow -c_{x\sigma}^\dagger \text{ falls } x \in B$$

Diese Transformation verändert das Vorzeichen der kinetischen Energie. Führt man diese Transformation zusammen mit der Teilchen-Loch Transformation durch, so geht der Hamiltonoperator bei halber Bandfüllung (d.h.  $N_e = N$ ) in sich über. Damit hat man also eine weitere Symmetrie.

**Weitere Symmetrien.** Das Hubbardmodell hat in speziellen Fällen weitere Symmetrien. Auf einem paaren Gitter bei halber Füllung gilt es statt der  $SU(2)$  eine  $SU(2) \times SU(2) = SO(4)$  Symmetrie. Es wird sogar eine approximative  $SO(5)$ -Symmetrie für das Hubbardmodell diskutiert, besonders im Hinblick auf die Hochtemperatursupraleiter. In einer Dimension gibt es viele zusätzliche Symmetrien. In diesem Fall kann man das Hubbardmodell sogar exakt lösen, und zwar mittels des Bethe-Ansatz. Das ist ein spezieller Ansatz für Eigenzustände von eindimensionalen Modellen. Für das Hubbardmodell stammt diese Lösung von E. Lieb und F. Wu (Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968)).

## 2.5.2 Das Hubbardmodell bei halber Füllung: Antiferromagnetismus

Der Hamiltonoperator des Hubbardmodells

$$H = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} + U \sum_x c_{x,\uparrow}^\dagger c_{x,\downarrow}^\dagger c_{x,\downarrow} c_{x,\uparrow}$$

kann in der Form

$$H = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} - \frac{2U}{3\hbar^2} \sum_x \vec{S}_x^2 + \frac{1}{2} U N_e$$

geschrieben werden. In der zweiten Form erkennt man deutlich, daß die Wechselwirkung versucht, den Spin pro Gitterplatz zu maximieren. Ist  $U$  sehr groß und ist  $N_e = N$  (halbe Füllung), dann hat man ein Elektron pro Gitterplatz. In welcher Richtung ist der Spin der Elektronen ausgerichtet. Man kann in einem Zustand, bei dem jeder Gitterplatz einfach besetzt ist, virtuelle Hüpfprozesse zulassen. Dabei hüpfen ein Elektron von einem Gitterplatz auf einen anderen und sofort wieder zurück. Der Zwischenzustand ist wegen der Wechselwirkung um die Energie  $U$  höher als der Grundzustand. Jedes Hüpfen hat ein Matrixelement  $t$ , so daß der Energiegewinn für diesen Prozeß von der Größenordnung  $t^2/U$  sein wird. Allerdings ist dieser Prozeß nur möglich, wenn das Elektron, das auf einen besetzten Gitterplatz hüpfen, einen anderen Spin hat als das Elektron, das sich dort befindet. Das bedeutet, daß man die Energieabsenkung durch virtuelle Hüpfprozesse nur bekommen kann, wenn Elektronen auf benachbarten Gitterplätzen einen umgekehrten Spin haben. Diese Situation liegt in einem Antiferromagneten oder allgemeiner in einem Ferromagneten vor.

Diese Überlegung kann man noch formalisieren. Dazu führen wir eine unitäre Transformation

$$H \rightarrow \exp(S)H \exp(-S)$$

durch mit dem Ziel, die kinetische Energie im Hamiltonoperator, die ja doppelt besetzte Plätze erzeugt, zu eliminieren. Dazu machen wir für  $S$  den Ansatz

$$S = \sum_{x,y,\sigma} s_{x,y,\sigma} c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma}$$

und werten die Transformation störungstheoretisch aus. Dann gilt

$$H \rightarrow H_{\text{WW}} + H_{\text{kin}} + [S, H_{\text{WW}}] + [S, H_{\text{kin}}] + \frac{1}{2}[S, [S, H_{\text{WW}}]] + \dots$$

Es ist wichtig zu beachten, daß man  $H_{\text{kin}}$  in der Form

$$H_{\text{kin}} = H_{\text{kin},0} + H_{\text{kin},1}$$

zerlegen kann.  $H_{\text{kin},0}$  ist der Anteil, der die Anzahl doppelt besetzter Plätze nicht verändert,  $H_{\text{kin},1}$  verändert sie um  $\pm 1$ . Es gilt

$$H_{\text{kin},1} = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} (n_{x,-\sigma} - n_{y,-\sigma})^2 c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma}$$

Ich wähle  $S$  so, daß

$$H_{\text{kin},1} + [S, H_{\text{WW}}] = 0$$

gilt. Damit hat man

$$H \rightarrow H_{\text{eff}} = H_{\text{WW}} + H_{\text{kin},0} - \frac{1}{2}[S, [S, H_{\text{WW}}]] + \dots$$

Es gilt

$$[S, H_{\text{WW}}] = -U \sum_{x,y,\sigma} s_{x,y,\sigma} (n_{x,-\sigma} - n_{y,-\sigma}) c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma}$$

und damit

$$s_{x,y,\sigma} = \frac{t_{x,y}}{U} (n_{x,-\sigma} - n_{y,-\sigma})$$

Sei  $P_0$  der Projektor auf Zustände, bei denen jeder Gitterplatz einfach besetzt ist. Beschränkt man sich in  $H_{\text{eff}}$  von vornherein auf diese Zustände, so gilt

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= P_0 S H_{\text{WW}} S P_0 \\ &= U P_0 S^2 P_0 \\ &= U P_0 \sum_{x,y,\sigma} \frac{t_{x,y}}{U} (n_{x,-\sigma} - n_{y,-\sigma}) c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} \sum_{x',y',\sigma'} \frac{t_{x',y'}}{U} (n_{x',-\sigma'} - n_{y',-\sigma'}) c_{x',\sigma'}^\dagger c_{y',\sigma'} P_0 \\ &= -\frac{1}{U} P_0 \sum_{x,y,\sigma,\sigma'} t_{x,y}^2 c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} c_{y,\sigma'}^\dagger c_{x,\sigma'} P_0 \\ &= \frac{1}{U} P_0 \sum_{x,y,\sigma,\sigma'} t_{x,y}^2 c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} c_{y,\sigma'}^\dagger c_{x,\sigma} P_0 - \frac{1}{U} \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} t_{x,y}^2 \\ &= \sum_{x,y} \frac{2t_{x,y}^2}{U} \vec{S}_x \cdot \vec{S}_y P_0 \\ &\quad + \frac{1}{U} P_0 \sum_{x,y,\sigma,\sigma'} t_{x,y}^2 c_{x,\sigma}^\dagger c_{x,\sigma} c_{y,\sigma'}^\dagger c_{y,\sigma'} P_0 - \frac{1}{U} \sum_{x,y} t_{x,y}^2 \\ &= \sum_{x,y} \frac{2t_{x,y}^2}{U} \vec{S}_x \cdot \vec{S}_y P_0 \end{aligned}$$

In diesem Modell sieht man deutlich die antiferromagnetische Kopplung. Benachbarte Spins werden sich antiparallel ausrichten. Dieser effektive Hamiltonoperator ist das antiferromagnetische Heisenbergmodell. Auf dem kubischen Gitter in drei Dimensionen hat dieses Modell eine kritische Temperatur, unterhalb derer eine langreichweitige Ordnung der Spins auftritt. In zwei Dimensionen gibt es eine langreichweitige Ordnung nur bei  $T = 0$  (Mermin-Wagner Theorem).

Eine Rechnung, wie wir sie hier durchgeführt haben, kann man in systematischer Weise auch mit kontinuierlichen unitären Transformationen durchführen. Das erlaubt einem die systematische Entwicklung eines effektiven Hamiltonoperators auch abseits von halber Füllung und in beliebig hohen Ordnungen.

### 2.5.3 Ferromagnetismus im Hubbardmodell

Ausgangspunkt:

$$H = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} - \frac{2U}{3\hbar^2} \sum_x \vec{S}_x^2 + \frac{1}{2} UN_e$$

Mean-field Rechnung:

$$\vec{S}_x^2 = (\vec{S}_x - \langle \vec{S}_x \rangle)^2 + 2\vec{S}_x \cdot \langle \vec{S}_x \rangle - \langle \vec{S}_x \rangle^2 \approx 2\vec{S}_x \cdot \langle \vec{S}_x \rangle - \langle \vec{S}_x \rangle^2$$

Translationsinvarianz, Isotropie:

$$\langle \vec{S}_x \rangle = \vec{S}_{\text{m.f.}} = S\vec{e}_z$$

$$\vec{S}_x \cdot \langle \vec{S}_x \rangle = S \frac{\hbar}{2} (c_{x,\uparrow}^\dagger c_{x,\uparrow} - c_{x,\downarrow}^\dagger c_{x,\downarrow})$$

$$\begin{aligned} H_{\text{m.f.}} &= \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} - \frac{2US}{3\hbar} \sum_x (c_{x,\uparrow}^\dagger c_{x,\uparrow} - c_{x,\downarrow}^\dagger c_{x,\downarrow}) + \frac{1}{2} UN_e + \frac{2UN}{3\hbar^2} S^2 \\ &= \sum_{\vec{k},\sigma} \left( \varepsilon_{\vec{k}} - \frac{2US\sigma}{3\hbar} \right) c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} + \frac{1}{2} UN_e + \frac{2UN}{3\hbar^2} S^2 \end{aligned}$$

$S$  ist hier ein Variationsparameter, der bestimmt wird, indem die Energie minimiert wird. Die Grundzustandsenergie ist

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2} UN_e + \frac{2UN}{3\hbar^2} S^2 + \sum_{\vec{k},\sigma} \left( \varepsilon_{\vec{k}} - \frac{2US\sigma}{3\hbar} \right) f\left( \varepsilon_{\vec{k}} - \frac{2US\sigma}{3\hbar} \right) \\ &= \frac{1}{2} UN_e + \frac{2UN}{3\hbar^2} S^2 + N \sum_{\sigma} \int d\varepsilon \rho(\varepsilon + \frac{2US\sigma}{3\hbar}) \varepsilon f(\varepsilon) \\ &= \frac{1}{2} UN_e + \frac{2UN}{3\hbar^2} S^2 + 2N \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) \varepsilon f(\varepsilon) \\ &\quad + \frac{2NU^2 S^2}{9\hbar^2} \int d\varepsilon \rho''(\varepsilon) \varepsilon f(\varepsilon) \\ &\quad + \frac{2^4 NU^4 S^4}{3^4 4! \hbar^4} \int d\varepsilon \rho''''(\varepsilon) \varepsilon f(\varepsilon) + \dots \\ &= N(e_0 + \frac{1}{2} a S^2 + \frac{1}{4} b S^4 + \dots) \end{aligned}$$

typischerweise gilt  $b > 0$ , andernfalls muß man höhere Terme berücksichtigen. Für  $a > 0$  hat man ein Minimum bei  $S = 0$ , d.h. kein Ferromagnetismus. Für  $a < 0$  hat man ein Minimum bei  $S \neq 0$ , d.h. Ferromagnetismus.

$$\begin{aligned} a &= \frac{4U}{3\hbar^2} + \frac{4NU^2 S^2}{9\hbar^2} \int d\varepsilon \rho(\varepsilon)'' \varepsilon f(\varepsilon) \\ &= \frac{4U}{3\hbar^2} \left( 1 - \frac{1}{3} U \int d\varepsilon \rho'(\varepsilon) (f(\varepsilon) + \varepsilon f'(\varepsilon)) \right) \\ &\approx \frac{2NU}{3\hbar^2} \left( 1 - \frac{1}{3} U (\rho(\varepsilon_F) - \varepsilon_F \rho'(\varepsilon_F)) \right) \end{aligned}$$

Die letzte Beziehung gilt für tiefe Temperaturen. Der letzte Term ist klein, da die Ableitung der Zustandsdichte an der Fermikante klein ist. Wir vernachlässigen diesen Term. Man findet also  $a < 0$  und damit  $S \neq 0$  falls  $U\rho(\varepsilon_F) > 3$ .

Die mean-field Rechnung hat ein Problem. Sie ist eigentlich eine Entwicklung in  $SU$ . Ferromagnetismus tritt für große  $U$  auf, also in einem Bereich, indem die Methode ihre Gültigkeit verliert. Tatsächlich überschätzt die mean-field Rechnung das Auftreten von Ferromagnetismus. Zudem steht der Ferromagnetismus in Konkurrenz zum Antiferromagnetismus. Trotzdem kann man Ferromagnetismus für große  $U$  oder große  $\rho(\varepsilon_F)$  erwarten. Zudem gibt es ein exaktes Resultat, das Theorem von Nagaoka, das besagt, daß das Hubbardmodell einen ferromagnetischen Grundzustand (genauer:  $S = N_e/2$ ) im Limes  $U \rightarrow \infty$  besitzt, falls  $N_e = N - 1$ . Dieses Resultat gilt präzise auf einer großen Klasse von Gittern, das Quadratgitter und das kubische Gitter eingeschlossen.

Daneben gibt es spezielle Gitter, die in bestimmten Bereichen eine sehr hohe Zustandsdichte haben. Dazu gehören das Kagomegitter in zwei Dimensionen und das octahedrische Untergitter eines Spinells in drei Dimensionen. Für diese Gitter kann man exakt zeigen, daß es in einem weiten Dichtebereich und für viele  $U$  Ferromagnetismus gibt.

# 3 Hochtemperatursupraleitung: Dotierte Mottisolatoren

## 3.1 Vorbemerkungen

Durch die Entdeckung der Hochtemperatursupraleiter im Jahr 1986, für die J.G. Bednorz und K.A. Müller 1987 mit dem Nobelpreis <http://www.nobel.se/physics/laureates/1987/> ausgezeichnet wurden, ist das Interesse an stark korrelierten Elektronensystemen sprunghaft gestiegen. Das Hubbardmodell oder Erweiterungen des Hubbardmodells wurden zunächst zur Beschreibung der elektronischen Eigenschaften dieser Systeme im Normalzustand vorgeschlagen. Später wurde sogar vermutet, daß für die Entstehung der Supraleitung ausschließlich oder hauptsächlich elektronische Anregungen (also keine Phononen) verantwortlich sind. Ziel dieses Kapitels ist es, in diesen Bereich der modernen Forschung einzuführen. Dabei beschränken wir uns auf die Diskussion der elektronischen Modelle, also auf das Hubbardmodell und seine Erweiterungen. Alle anderen Aspekte der Hochtemperatursupraleiter werden nicht diskutiert.

Einen Überblick über den derzeitigen Stand der Theorie liefert der Übersichtsartikel von P.A. Lee, N. Nagosa und X.-G. Wen, Doping a Mott Insulator: Physics of high-temperature superconductivity. Rev. Mod. Phys. 79, 1-6 (2006).

Die Materialien, die Hochtemperatursupraleitung zeigen, sind sehr komplex und haben ein reichhaltiges Phasendiagramm. Nicht nur die supraleitende Phase, auch andere Eigenschaften der Hochtemperatursupraleiter sind lange Zeit nicht verstanden gewesen. Deshalb wurden diese Systeme intensiv experimentell untersucht. Viele experimentelle Verfahren wurden deutlich verfeinert, um genauere Daten zu Hochtemperatursupraleitern zu bekommen.

Folgende Aspekte sind allen Hochtemperatursupraleitern gemein:

1. Gemeinsames Strukturmerkmal dieser Materialien sind die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen.
2. Im undotierten Fall sind die Materialien Isolatoren.
3. Im undotierten Fall ist das Leitungsband halbgefüllt. Es handelt sich auf Grund der Bandstruktur also nicht um klassische Isolatoren, sondern um Mottisolatoren.
4. Im undotierten Fall gibt es eine langreichweitige, antiferromagnetische Ordnung, die aber bei Dotierung schnell verschwindet.

## 3.2 Modelle für Hochtemperatursupraleiter

Ein gemeinsames Strukturmerkmal aller Hochtemperatursupraleiter sind die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen. Je nach Material kann man in diesen Ebenen noch weitere Sauerstoffatome hinzunehmen, so daß man z.B. Schichten aus Oktaedern erhält. Diese Oktaeder sind dann allerdings verzerrt (Jahn-Teller-Verzerrung): Der Abstand zwischen Cu und O in der Ebene ist kleiner als der Abstand zwischen Cu und O außerhalb der Ebene. Je nach Material kann man also das einfache Modell der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen durch Hinzunahme weitere Strukturelemente an die Realität anpassen. Dazu gehört dann auch die Kopplung der Ebenen zu einer dreidimensionalen Struktur. Da diese Ebenen aber das auf den ersten Blick einzige gemeinsame Strukturmerkmal dieser Materialien ist, sollte ein wesentlicher Teil der physikalischen Eigenschaften der Hochtemperatursupraleiter mit der Ebenenstruktur zusammenhängen und durch ein einfaches Modell für diese Ebenen beschrieben werden können. Ausgangspunkt unserer Überlegungen ist also ein Modell für Elektronen in den  $\text{CuO}_2$ -Ebenen.

### 3.2.1 Einteilchen-Hamiltonoperator

Der einfachste Einteilchen-Hamiltonoperator, den man angeben kann, ist

$$H_0 = \varepsilon_A \sum_{x \in A} n_x + \varepsilon_B \sum_{y \in B} n_y + t \sum_{\langle x \in A, y \in B \rangle, \sigma} (c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} + c_{y\sigma}^\dagger c_{x\sigma})$$

Dabei sind  $A$  und  $B$  die beiden Untergitter ( $A$  für Cu,  $B$  für O) der  $\text{CuO}_2$ -Ebene,  $\varepsilon_{A,B}$  die Energien für Elektronen auf diesen Gitterplätzen und  $t$  das Hüpfmatrixelement zwischen benachbarten Gitterplätzen. Die Notation  $\langle \dots \rangle$  bedeutet, daß die beiden Gitterplätze benachbart sind. Jede Elementarzelle des Gitters enthält drei Gitterplätze. Die Elementarzellen bilden ein Quadratgitter.

Aufgrund der Struktur der 3d-Orbitale des Cu und der p-Orbitale des O werden häufig die Vorzeichen der Hüpfmatrixelemente nicht konstant gewählt. Durch eine geeignete Umeichung ist es aber möglich, ein einheitlich positives oder negatives Hüpfmatrixelement zu erhalten.

Nach einer Fouriertransformation erhält man

$$H_0 = \sum_k \sum_{a,b=1}^3 h_{ab}(k) c_{k,a,\sigma}^\dagger c_{k,b,\sigma}$$

Die Indizes  $a, b$  sind die Bandindizes für die drei Bänder. Die Matrix  $H(k) = (h_{ab}(k))_{a,b=1,2,3}$  hat die Gestalt

$$H(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & 2t \cos(k_x/2) & 2t \cos(k_y/2) \\ 2t \cos(k_x/2) & \varepsilon_B & 0 \\ 2t \cos(k_y/2) & 0 & \varepsilon_B \end{pmatrix}$$

und kann leicht diagonalisiert werden. Die Eigenwerte sind

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(k) &= \frac{\varepsilon_A + \varepsilon_B}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{2}\right)^2 + 4t^2(\cos^2(k_x/2) + \cos^2(k_y/2))} \\ \varepsilon_3(k) &= \varepsilon_B \end{aligned}$$

Eines der Bänder ist flach. Für den Spezialfall  $\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0$  ist dieses Gitter das paare Gitter, daß bei der Diskussion des Theorems von Lieb als Beispiel für einen Ferrimagneten diente.

Im Fall der Hochtemperatursupraleiter ist im undotierten Zustand der Sauerstoff als  $\text{O}^{2-}$  und Kupfer als  $\text{Cu}^{2+}$  ionisiert. Das bedeutet, daß alle  $p$ -Orbitale im Sauerstoff doppelt besetzt sind und die  $d$ -Orbitale im Cu einfach. Das Modell hat demnach fünf Elektronen pro Elementarzelle, d.h. ein Loch pro Elementarzelle. Damit ist das oberste Band  $\varepsilon_2(k)$  einfach besetzt, die beiden anderen Bänder sind doppelt besetzt. Das bedeutet, daß im undotierten Fall ein Metall vorliegen würde.

Das Modell kann noch erweitert werden, indem man ein zusätzliches Hüpfmatrixelement  $t_{BB}$  zwischen den  $B$ -Gitterplätzen einführt. Das führt zu einer Verbreiterung des flachen Bandes und zu einer leichten Modifikation der anderen Bänder, ändert aber an den grundsätzlichen Eigenschaften des Modells nichts.

### 3.2.2 Wechselwirkungen

Die Hochtemperatursupraleiter sind im undotierten Fall Isolatoren mit einer antiferromagnetischen Spinordnung. Die Coulombwechselwirkung der Elektronen führt also zu einem korrelationsinduzierten Isolator und zu einer antiferromagnetischen Ordnung.

Die wichtigsten Wechselwirkungsbeiträge sind

$$H_{\text{WW}} = U_A \sum_{x \in A} n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} + U_B \sum_{y \in B} n_{y\uparrow} n_{y\downarrow} + U_{AB} \sum_{\langle x \in A, y \in B \rangle} n_x n_y$$

Die kinetische Energie ist

$$H_{\text{kin}} = \varepsilon_A \sum_{x \in A} n_x + \varepsilon_B \sum_{y \in B} n_y + t \sum_{\langle x \in A, y \in B \rangle, \sigma} (c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} + c_{y\sigma}^\dagger c_{x\sigma}) \\ + t' \sum_{\langle y \in B, y' \in B \rangle, \sigma} c_{y\sigma}^\dagger c_{y'\sigma}$$

und damit lautet der Hamiltonoperator

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{WW}}$$

Dieses Modell enthält sechs unabhängige Energieparameter: Die drei Wechselwirkungen  $U_A$ ,  $U_B$ , und  $U_{AB}$  sowie die drei Parameter in der kinetischen Energie  $\Delta = \varepsilon_A - \varepsilon_B$ ,  $t$  und  $t'$ . Da die  $A$ -Gitterplätze die Cu-Atomrümpfe representieren und die  $3d$ -Orbitale des ionisierten Cu relativ klein sind, kostet die Doppelbesetzung dieser Gitterplätze besonders viel Energie. Der Parameter  $U_A$  wird also der größte sein.

Mit dieser Überlegung betrachten wir zunächst den Limes sehr großer  $U_A$ . Im Limes  $U_A \rightarrow \infty$  sollten bei einem Loch pro Elementarzelle die  $B$ -Gitterplätze doppelt besetzt sein und die  $A$ -Gitterplätze einfach. Eine Bewegung der Elektronen ist damit nicht möglich, alle Spinkonfigurationen sind entartet. Diese Situation kennen wir vom Hubbardmodell auf dem Quadratgitter bei halber Füllung. Ist  $U_A$  groß aber endlich, dann sind virtuelle Prozesse möglich, bei denen Elektronen auf den  $A$ -Gitterplätzen ausgetauscht werden. Dazu sind vier Hüpfprozesse mit der Hüpfamplitude  $t$  nötig. Die virtuellen Zwischenzustände haben die Energiedifferenzen  $U_A - U_B + \Delta$ ,  $U_B - \Delta$  und  $\Delta - U_B$ . Analog zum Hubbardmodell erhält man also eine Austauschwechselwirkung der Stärke  $J = -\frac{4t^4}{(U_A - U_B + \Delta)(U_B - \Delta)^2}$ . Damit erhält man also wie beim Hubbardmodell eine antiferromagnetische Ordnung im Grundzustand. Das entspricht genau den Erwartungen, die wir mit der Konstruktion dieses Modells verbunden haben.

### 3.2.3 Ein effektives Einbandmodell

Ausgangspunkt ist wie oben das Drei-Band-Hubbardmodell mit den beiden Untergittern  $A$  und  $B$ . Der Hamiltonoperator kann in der Form

$$H = H_0 + H_+ + H_- \quad (3.1)$$

geschrieben werden.  $H_+$  transferiert ein Elektron von  $B$  nach  $A$ ,  $H_- = H_+^\dagger$  umgekehrt ein Elektron von  $A$  nach  $B$ .  $H_0$  läßt die Anzahl der Elektronen auf den beiden Untergittern invariant.

Flußgleichungen:

$$\eta = H_- - H_+ \quad (3.2)$$

$$\frac{dH}{d\ell} = [\eta, H] = [H_-, H_0] - [H_+, H_0] - 2[H_+, H_-] \quad (3.3)$$

$$\frac{dH_0}{d\ell} = -2[H_+, H_-] \quad (3.4)$$

$$\frac{dH_+}{d\ell} = -[H_+, H_0] \quad (3.5)$$

$$\frac{dH_-}{d\ell} = [H_-, H_0] \quad (3.6)$$

$H_+$  enthält alle denkbaren Hüpfmatrixelemente, die ein Elektron von einem auf einen benachbarten Gitterplatz hüpfen lassen.

$$H_+ = \sum_{\langle x \in A, y \in B \rangle, \sigma} (t + t_{2A} n_{x-\sigma} + t_{2B} n_{y-\sigma} + t_{2AB} n_{x-\sigma} n_{y-\sigma}) c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} \quad (3.7)$$

$\langle x \in A, y \in B \rangle$  bedeutet, daß  $x$  und  $y$  benachbarte Gitterplätze sind und daß  $x$  auf  $A$  und  $y$  auf  $B$  liegt. Beschränkt man  $H_+$  auf diese Terme, dann enthält  $H_0$  nur Terme mit maximal drei benachbarten Gitterplätzen. Dafür verwende ich die Notationen  $\langle x \in A, y \in B, x' \in A \rangle$  etc. Man erhält

$$\begin{aligned}
H_0 = & \varepsilon_A \sum_{x \in A} n_x + \varepsilon_B \sum_{y \in B} n_y + U_A \sum_x n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} + U_B \sum_y n_{y\uparrow} n_{y\downarrow} \\
& + J_{AB} \sum_{\langle x \in A, y \in B \rangle} \left[ \frac{1}{2} n_x n_y - 2 \vec{S}_x \cdot \vec{S}_y \right] + K_{AB} \sum_{\langle x \in A, y \in B \rangle} [n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} n_y - n_{y\uparrow} n_{y\downarrow} n_x] \\
& + t_A \sum_{\langle x \in A, x' \in A \rangle \sigma} c_{x\sigma}^\dagger c_{x'\sigma} + t_{AA} \sum_{\langle x \in A, x' \in A \rangle \sigma} (n_{x-\sigma} + n_{x'-\sigma}) c_{x\sigma}^\dagger c_{x'\sigma} \\
& + t_B \sum_{\langle y \in B, y' \in B \rangle \sigma} c_{y\sigma}^\dagger c_{y'\sigma} + t_{BB} \sum_{\langle y \in B, y' \in B \rangle \sigma} (n_{y-\sigma} + n_{y'-\sigma}) c_{y\sigma}^\dagger c_{y'\sigma} \\
& + \sum_{\langle x \in A, y \in B, x' \in A \rangle \sigma \tau} \sigma \tau [\tilde{K}_{AB} + \tilde{K}_{2AB} (n_{x-\sigma} + n_{x'-\tau}) + \tilde{K}_{3AB} n_{x-\sigma} n_{x'-\tau}] c_{x\sigma}^\dagger c_{y-\sigma}^\dagger c_{y-\tau} c_{x'\tau} \\
& + \sum_{\langle y \in B, x \in A, y' \in B \rangle \sigma \tau} \sigma \tau [\tilde{K}_{BA} + \tilde{K}_{2BA} (n_{y-\sigma} + n_{y'-\tau}) + \tilde{K}_{3BA} n_{y-\sigma} n_{y'-\tau}] c_{y\sigma}^\dagger c_{x-\sigma}^\dagger c_{x-\tau} c_{y'\tau}
\end{aligned}$$

Einige der Terme in  $H_0$  sind verschwinden anfangs, werden aber durch die Transformation erzeugt.

Beachtet man, daß nach einer Teilchen-Loch-Transformation daß System nur ein Elektron (bei Dotierung weniger) pro Elementarzelle enthält, und daß  $\varepsilon_A$  deutlich kleiner ist als  $\varepsilon_B$  (dies wird durch die Flußgleichungen noch verstärkt), dann hat man am Ende nur noch Elektronen auf dem Untergitter  $A$ . Das bedeutet, daß man nach der Transformation alle Terme weglassen kann, die Erzeugungs- oder Vernichtungsoperatoren auf dem Untergitter  $B$  enthalten. Der effektive Hamiltonoperator lautet damit

$$H_{\text{eff}} = \varepsilon_A \sum_{x \in A} n_x + U_A \sum_x n_{x\uparrow} n_{x\downarrow} \quad (3.8)$$

$$+ t_A \sum_{\langle x \in A, x' \in A \rangle \sigma} c_{x\sigma}^\dagger c_{x'\sigma} + t_{AA} \sum_{\langle x \in A, x' \in A \rangle \sigma} (n_{x-\sigma} + n_{x'-\sigma}) c_{x\sigma}^\dagger c_{x'\sigma} \quad (3.9)$$

Der letzte Term zerstört die Teilchen-Loch-Symmetrie. Das ist wichtig, da das Drei-Band-Hubbardmodell eben gerade nicht Teilchen-Loch symmetrisch um die Dichte von einem Elektron pro Elementarzelle ist.

Die Parameter in  $H_{\text{eff}}$  können mit Hilfe der Flußgleichungen hergeleitet werden. Dabei ist aber zu beachten, daß die vernachlässigten Terme dadurch, daß man Teilchenzahloperatoren und Produkte von Teilchenzahloperatoren durch ihre Erwartungswerte ersetzt, auf die mitzunehmenden Terme zurückkoppeln. Die Details dieser etwas komplizierteren Rechnung lassen wir hier weg.

### 3.2.4 $t - J$ Modell

Wir haben gesehen, daß das Hubbardmodell für große  $U$  bei halber Füllung äquivalent zum antiferromagnetischen Heisenbergmodell ist. Das gleiche gilt für (3.8,3.9). In der Tat sind die Hochtemperatursupraleiter im undotierten Zustand Antiferromagneten. Diese werden dann dotiert. Statt des Hubbardmodells wird häufig das sogenannte  $t - J$  Modell zu Beschreibung dieser Situation verwendet. Der Hamiltonoperator lautet

$$H = t \sum_{\langle x, y \rangle \sigma} (1 - n_{x-\sigma}) c_{x\sigma}^\dagger c_{y\sigma} (1 - n_{y-\sigma}) + J \sum_{\langle x, y \rangle} S_x S_y \quad (3.10)$$

Dabei sind  $S_x$  die oben eingeführten lokalen Spinoperatoren. Wichtig ist, daß der Hilbertraum, auf dem dieser Hamiltonoperator definiert ist, keine doppelt besetzten Gitterplätze enthält. Wenn man sich auf diesen Hilbertraum beschränkt, kann man die Faktoren  $(1 - n_{x/y, \sigma})$  in dem Term  $\propto t$  auch weglassen.

Für halbe Füllung, also ein Elektron pro Gitterplatz, ist dieser Hamiltonoperator identisch mit dem Heisenbergmodell. Bei weniger Elektronen beschreibt er einen dotierten Antiferromagneten. Da der Antiferromagnet auch ein Mott-Isolator ist, spricht man auch von einem dotierten Mott-Isolator.

Das  $t - J$  Modell kann entweder aus dem Ein-Band-Hubbardmodell wie in Abschnitt 2.5.2 hergeleitet werden oder aus (3.8,3.9) oder direkt aus dem Drei-Band-Hubbardmodell. Die Kopplung  $J$  ist wie oben diskutiert von der Ordnung  $\frac{4t}{(U_A - U_B + \Delta)(U_B - \Delta)^2}$ .

## 3.3 Frustrierte Spinsysteme

### 3.3.1 Grundlegende Ideen

Bei halber Füllung hat der Grundzustand von (3.10) antiferromagnetische Ordnung. Die antiferromagnetische Ordnung wird aber durch eine schwache Dotierung schnell zerstört. In Hochtemperatursupraleitern genügt 1% Dotierung, um den Antiferromagneten zu destabilisieren. Damit ergeben sich folgende Fragen:

1. Wie sieht das Spinsystem bei schwacher Dotierung aus?
2. Wie bewegen sich Löcher in diesem Spinsystem?
3. Welche effektive Wechselwirkung vermitteln die Spinfluktuationen zwischen den Löchern?

ad 1.: Die grundlegende Idee zu dem Grundzustand des Spinsystems stammt von Anderson, Baskaran und Zhou. Danach befindet sich das Spinsystem in einem Resonating-Valence-Bond (RVB) Zustand. Es gibt inzwischen von verschiedenen Autoren verschiedene verwandte Vorschläge für einen solchen Zustand. Alle diese Zustände haben im undotierten Fall eine Energie, die nur knapp über der Grundzustandsenergie liegt, sie haben keine langreichweitige antiferromagnetische Ordnung, aber lokale antiferromagnetische Ordnung.

ad 2.: Wenn sich ein Loch durch den Spinhintergrund bewegt, werden die Spins auf dem Gitter verschoben. Dadurch wird eine (lokale) antiferromagnetische Ordnung der Spins gestört. Die Bewegung eines einzelnen Lochs wird dadurch erschwert.

ad 3.: Wenn sich zwei Löcher korreliert durch den Spinhintergrund bewegen, kann das zweite Loch die Defekte, die das erste Loch durch seine Bewegung im Spinhintergrund erzeugt hat, teilweise ausheilen. Damit wird die korrelierte Bewegung von zwei Löchern begünstigt. Es gibt also eine möglicherweise eine effektive, attraktive Wechselwirkung zwischen den Löchern.

Wenn diese Ideen die Realität zumindest qualitativ beschreiben, ist es zunächst wichtig, den Grundzustand des Spinsystems besser zu verstehen.

### 3.3.2 RVB-Zustände

Wir wollen zunächst ein Konzept kennenlernen, das zumindest für einige frustrierte Spinsysteme relevant ist und sogar zur Beschreibung von langreichweitiger Ordnung genutzt werden kann, die *valence bond* (VB) oder *resonating valence bond* (RVB) Zustände. Es gibt eine Reihe von Gittern, für die man zeigen kann, daß das Heisenbergmodell einen Grundzustand hat, der sich so beschreiben läßt.

Wir bezeichnen zunächst durch

$$|(x, y)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x \downarrow_y\rangle - |\downarrow_x \uparrow_y\rangle)$$

ein Singulettpaar auf den Gitterplätzen  $x$  und  $y$ . Wählt man auf einem Gitter eine Überdeckung  $P$  von Paaren aus, dann ist

$$|P\rangle = \prod_{(x,y) \in P} |(x, y)\rangle$$

ein Singulett-Zustand. Diese Art von Zustand bezeichnet man als VB-Zustand. Betrachtet man alle VB-Zustände, dann bilden diese ein übervollständiges System. Jeder Singulett-Zustand kann in der Form

$$|\Psi\rangle = \sum_P A(P) \prod_{(x,y) \in P} |(x, y)\rangle$$

geschrieben werden. Da die Zustände  $|P\rangle$  übervollständig sind, ist diese Darstellung nicht eindeutig. Sie ist aber nützlich, wenn man Variationszustände sucht. Ein populärer Variationsansatz ist durch

$$|\Psi\rangle = \sum_P \prod_{(x,y) \in P} a(|x-y|) |(x, y)\rangle$$

also

$$A(P) = \prod_{(x,y) \in P} a(|x-y|)$$

gegeben. Ein solcher Zustand wird als RVB-Zustand bezeichnet.

Für praktische Rechnungen mit solchen Zuständen ist es nützlich, von einem konkreten Gitter als Beispiel auszugehen. Im folgenden kann man dazu immer das Quadratgitter benutzen. Das Gitter wird in zwei gleichmächtige Untergitter,  $A$  und  $B$  zerlegt und es sei

$$a(|x-y|) = 0$$

falls  $x$  und  $y$  auf dem gleichen Untergitter liegen. Für das Quadratgitter oder andere paare Gitter ist diese Zerlegung natürlich, sie kann aber auch für viele frustrierte Gitter eingeführt werden. Betrachten wir als nächstes den Überlapp zweier VB-Zustände

$$\langle P' | P \rangle$$

wobei in  $P$  und  $P'$  nur Singulettpaare vorkommen sollen, bei denen die Spins auf unterschiedlichen Untergittern liegen. Als erstes Beispiel berechnen wir den Überlapp von Produkten von zwei Singulett. Es gilt

$$\begin{aligned} \langle (x_1, y_2)(x_2, y_1) | (x_1, y_1)(x_2, y_2) \rangle &= \frac{1}{4} (\langle \uparrow_{x_1} \downarrow_{y_2} | - \langle \downarrow_{x_1} \uparrow_{y_2} | ) (\langle \uparrow_{x_2} \downarrow_{y_1} | - \langle \downarrow_{x_2} \uparrow_{y_1} | ) (\langle \uparrow_{x_1} \downarrow_{y_1} | - \langle \downarrow_{x_1} \uparrow_{y_1} | ) (\langle \uparrow_{x_2} \downarrow_{y_2} | - \langle \downarrow_{x_2} \uparrow_{y_2} | ) \\ &= \frac{1}{4} (\langle \uparrow_{x_1} \downarrow_{y_2} | \langle \uparrow_{x_2} \downarrow_{y_1} | | \langle \uparrow_{x_1} \downarrow_{y_1} | | \langle \uparrow_{x_2} \downarrow_{y_2} | + \langle \downarrow_{x_1} \uparrow_{y_2} | \langle \downarrow_{x_2} \uparrow_{y_1} | | \langle \downarrow_{x_1} \uparrow_{y_1} | | \langle \downarrow_{x_2} \uparrow_{y_2} | ) \\ &= 2 \frac{1}{2^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle (x_1, y_1)(x_2, y_2) | (x_1, y_1)(x_2, y_2) \rangle &= \frac{1}{4} (\langle \uparrow_{x_1} \downarrow_{y_1} | - \langle \downarrow_{x_1} \uparrow_{y_1} | ) (\langle \uparrow_{x_2} \downarrow_{y_2} | - \langle \downarrow_{x_2} \uparrow_{y_2} | ) (\langle \uparrow_{x_1} \downarrow_{y_1} | - \langle \downarrow_{x_1} \uparrow_{y_1} | ) (\langle \uparrow_{x_2} \downarrow_{y_2} | - \langle \downarrow_{x_2} \uparrow_{y_2} | ) \\ &= \frac{1}{4} (\langle \uparrow_{x_1} \downarrow_{y_1} | - \langle \downarrow_{x_1} \uparrow_{y_1} | ) (\langle \uparrow_{x_1} \downarrow_{y_1} | - \langle \downarrow_{x_1} \uparrow_{y_1} | ) (\langle \uparrow_{x_2} \downarrow_{y_2} | - \langle \downarrow_{x_2} \uparrow_{y_2} | ) (\langle \uparrow_{x_2} \downarrow_{y_2} | - \langle \downarrow_{x_2} \uparrow_{y_2} | ) \\ &= 2^2 \frac{1}{2^2} \end{aligned}$$

Entsprechende Rechnungen kann man generell durchführen. Es gilt

$$\langle P' | P \rangle = 2^{n_L - N_s/2}$$

wobei  $n_L$  die Anzahl der Schleifen ist, die  $\langle P' | P \rangle$  liefert und  $N_s$  die Anzahl der Gitterplätze. Eine Schleife  $C$  ist bis auf zyklische Permutationen eine Folge von paarweise verschiedenen Gitterpunkten,  $C = (x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_n, y_n)$ . Aufgrund unserer Konstruktion erhalten wir nur Schleifen, die abwechselnd einen Gitterpunkt aus  $A$  und einen aus  $B$  enthalten.  $\langle P' | P \rangle$  enthält jeden Gitterpunkt genau einmal, kann also als eine Überdeckung  $\{C_i, i = 1, \dots, n_L\}$  des Gitters interpretiert werden. Die Norm des Zustand  $|\Psi\rangle$  ist dann

$$Z_\Psi = \sum_{\{C_i\}} \prod_i f(C_i)$$

wobei

$$f(C) = 2 \prod_{(x,y) \in C} \frac{a(|x-y|)}{\sqrt{2}}$$

ist. Analog kann man Korrelationsfunktionen berechnen. Es gilt

$$\langle P' | S_{3,x} S_{3,x'} | P \rangle = \frac{1}{4} 2^{n_L - N_s/2}$$

falls  $x \in A$  und  $x' \in A$  auf einer Scheife liegen, sonst verschwindet die linke Seite. Ebenso

$$\langle P' | S_{3,x} S_{3,y} | P \rangle = -2^{n_L - N_s/2}$$

für  $x \in A$  und  $y \in B$  auf einer Schleife. Man kann dieses Problem also auf ein statistisches Problem von Schleifen auf einem Gitter abbilden.

$$\rho(C) = Z_{\Psi}^{-1} f(C) Z_{\Psi \setminus C}$$

ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Schleife  $C$  und es gilt

$$\rho(C) = \frac{\partial \ln Z_{\Psi}}{\partial \ln f(C)}$$

Die Korrelationsfunktion

$$\rho_{z,z'} = 4s_{z,z'} \frac{\langle \Psi | S_{3,z} S_{3,z'} | \Psi \rangle}{Z_{\Psi}}$$

ist

$$\rho_{z,z'} = \sum_{C::z,z' \in C} \rho(C)$$

wobei  $s_{z,z'} = 1$  falls die beiden Gitterplätze auf dem gleichen Untergitter liegen und  $s_{z,z'} = -1$  falls sie auf verschiedenen Untergittern liegen. Die Größe

$$\ell = \sum_z \rho_{z,z'} = N_s^{-1} \sum_{z,z'} \rho_{z,z'}$$

ist die mittlere Schleifenlänge. Ist diese Größe extensiv, also  $\ell \propto N_s$ , dann hat das System eine langreichweitige Ordnung.

### 3.3.3 Der Néel-Zustand

Wenn das oben beschriebene Konzept sinnvoll sein soll, dann muß es möglich sein, den Néel-Zustand zu beschreiben, der eine gute Approximation für den Grundzustand des Heisenberg-Antiferromagneten und Ausgangspunkt für die lineare Spinwellentheorie ist. Der Néel-Zustand hat maximale Ordnung: Die Spins auf jedem Untergittern sind alle in die gleiche Richtung ausgerichtet. Einen solchen Zustand erhält man, wenn man  $a(|x - y|) = 1$  setzt.

Für diesen Zustand berechnen wir zuerst  $Z_{\Psi}$ . Es gilt

$$Z_{\Psi} = \frac{1}{2^{N_s/2}} \sum_{\{C_i\}} 2^{n_L}$$

Die Summe läuft über alle Aufteilungen des Gitters in Schleifen. Bezeichnen wir mit  $n_i$  die Anzahl der Schleifen mit Länge  $2i$ , so gilt

$$\sum_i n_i = n_L$$

$$\sum_i i n_i = N_s/2$$

Die Anzahl der Aufteilungen des Gitters in  $n_1$  Schleifen der Länge 2,  $n_2$  Schleifen der Länge 2, etc ist

$$\frac{\left(\frac{N_s}{2}\right)!^2}{\prod_i i^{n_i} n_i!}$$

Damit gilt

$$Z_{\Psi} = \frac{1}{2^{N_s/2}} \left(\frac{N_s}{2}\right)!^2 \sum_{\{n_i\}: \sum_i i n_i = N_s/2} \prod_i \frac{2^{n_i}}{i^{n_i} n_i!} = \frac{1}{2^{N_s/2}} \left(\frac{N_s}{2}\right)! \left(\frac{N_s}{2} + 1\right)!$$

Die mittlere Schleifenlänge ist

$$\ell = Z_{\Psi}^{-1} \frac{1}{2^{N_s/2}} \left(\frac{N_s}{2}\right)!^2 \sum_{\{n_i\}: \sum_i i n_i = N_s/2} \left(\frac{4}{N_s} \sum_i i^2 n_i\right) \prod_i \frac{2^{n_i}}{i^{n_i} n_i!} = \frac{2}{3} (N_s/2 + 2)$$

Die Summen wurden jeweils mit Hilfe bekannter Formeln aus der Kombinatorik ausgewertet, siehe e.g. Abramowitz, Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, darin Kapitel 24. Da alle Gitterplätze gleichberechtigt sind, erhält man für die Korrelationsfunktion

$$\rho_{z,z'} = \frac{N_s + 1}{3(N_s - 1)}$$

für  $z \neq z'$ . Naiv hätte man für den Néel-Zustand  $\rho_{z,z'} = 1$  erwartet. Das wäre das Resultat für einen Zustand, für den auf einem Untergitter alle Spins nach oben, auf dem anderen alle nach unten zeigen. Tatsächlich kann man aber die Richtungen der Spins beliebig rotieren und alle diese Zustände linear kombinieren. Nur so erhält man einen Zustand mit Gesamtspin  $S = 0$ . Für diesen Zustand ist gerade  $\rho_{z,z'} = \frac{1}{3}$ .

### 3.3.4 Kurzreichweitige Korrelationen

Ein zweiter Extremfall sind Zustände, für die  $a(|x - y|) = 1$  für benachbarte Gitterplätze gilt,  $a(|x - y|) = 0$  sonst. Solche Zustände werden auch Dimerzustände genannt. Für diese Zustände gibt es keine langreichweitige Ordnung, die mittlere Scheifenlänge ist nicht  $\propto N_s$ . Allerdings lassen sich für diesen Fall keine analytischen Ergebnisse dafür angeben, wie die Korrelationsfunktion mit dem Abstand abfällt. Es gibt Argumente für einen algebraischen Abfall und solche für einen exponentiellen Abfall. Auch numerische Simulationen lassen keinen eindeutigen Schluß zu. Man sieht aber, daß der RVB-Ansatz allgemein genug ist, um sowohl langreichweitige als auch kurzreichweitige Korrelationen gut zu beschreiben.

### 3.3.5 Das zweidimensionale Heisenbergmodell

Liang, Douçot und Anderson haben Variationsrechnungen für das Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter mit RVB-Zuständen gemacht (Phys. Rev. Lett. **61**, 365-368 (1988)). Diese Ergebnisse wurden zwar von anderen Autoren noch etwas verbessert, stellen aber die besten Rechnungen für das Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter dar. Der energetisch niedrigste Zustand hat eine Grundzustandsenergie pro Gitterplatz von  $-0.6688J$  und  $a(|x - y|) \propto |x - y|^{-4}$ . Er zeigt langreichweitige Korrelationen,  $\rho_{z,z'}$  geht gegen 0.12 für große Abstände (also weniger als im Néel-Zustand). Die Autoren betonen aber auch, daß es Zustände ohne langreichweitige Ordnung gibt, die energetisch sehr nahe am Grundzustand liegen. Für endliche Temperaturen hat man wegen des Mermin-Wagner Theorems natürlich keine langreichweitige Ordnung. Man kann aber erwarten, daß sich durch die Einführung von Frustration in diesen Systemen die langreichweitige Ordnung auch unterdrücken läßt.

Analytisch läßt sich das Problem behandeln, wenn man einem Argument von Flory aus der Theorie der Polymere folgt: Wir betrachten hier ein Modell von Schleifen auf einem Gitter. Innerhalb einer Schleife besteht eine Abstoßung, denn die Schleife kann einen Gitterplatz nur einfach durchlaufen. Zwischen den Schleifen besteht ebenso eine Wechselwirkung, die verhindert, daß zwei Schleifen durch den gleichen Gitterplatz laufen. Nach Flory führt die Wechselwirkung innerhalb einer Schleife dazu, daß diese sich aufbläht, während die Wechselwirkung der Schleifen untereinander eine einzelne Schleife zusammendrückt. Diese Effekte heben sich eventuell auf und man kann die Wechselwirkung der Schleifen vernachlässigen. Für den Fall des Néel-Zustands liefert dieses Argument tatsächlich das exakte Resultat. Es gibt gute Gründe anzunehmen, daß Florys Argument für  $d \geq 3$  Dimensionen qualitativ richtig ist. Für eine Dimension ist es definitiv falsch. In zwei Dimensionen ist die Situation nicht klar. Wegner hat diese Näherung für den Heisenbergantiferromagneten auf dem Quadratgitter angewandt und erhält für die Korrelationsfunktion  $\rho_{z,z'} \rightarrow 0.13$ . Allerdings ist das Ergebnis für die Energie pro Gitterplatz mit  $E = -1.0056J$  nicht gut. Für die Energie sind die kurzreichweitigen Korrelationen wichtig, die mit Florys Argument sicher nicht richtig wiedergegeben werden.

## 3.4 Feldtheoretische Beschreibung

### 3.4.1 Fermionen und Schwingerbosonen

Man kann Spins durch fermionische oder bosonische Operatoren ausdrücken. Die fermionische Darstellung ist klar, es gilt

$$S_{3,x} = \frac{1}{2}(c_{x+}^\dagger c_{x+} - c_{x-}^\dagger c_{x-})$$

$$S_{+,x} = c_{x+}^\dagger c_{x-}$$

$$S_{-,x} = c_{x-}^\dagger c_{x+}$$

$$S_{1,x} = \frac{1}{2}(S_{+,x} + S_{-,x})$$

$$S_{2,x} = \frac{1}{2i}(S_{+,x} - S_{-,x})$$

wobei ich einen Spin  $\uparrow$  durch ein  $+$ , einen Spin  $\downarrow$  durch ein  $-$  bezeichnet habe. Die Vertauschungsrelationen für Spinoperatoren sind erfüllt, wenn

$$c_{x+}^\dagger c_{x+} + c_{x-}^\dagger c_{x-} = 1$$

Analog kann man Spins durch bosonische Operatoren darstellen. Seien  $b_{x\sigma}$  und  $b_{x\sigma}^\dagger$  Vernichter und Erzeuger für Bosonen auf dem Gitterplatz  $x$ .  $\sigma$  nimmt die Werte  $\pm 1$  an. Es gilt :

$$S_{3,x} = \frac{1}{2}(b_{x+}^\dagger b_{x+} - b_{x-}^\dagger b_{x-})$$

$$S_{+,x} = b_{x+}^\dagger b_{x-}$$

$$S_{-,x} = b_{x-}^\dagger b_{x+}$$

ie Vertauschungsrelationen für Spinoperatoren sind erfüllt, wenn

$$b_{x+}^\dagger b_{x+} + b_{x-}^\dagger b_{x-} = 1$$

Man berechnet

$$\begin{aligned} S_{3,x}^2 + \frac{1}{2}(S_{+,x}S_{-,x} + S_{-,x}S_{+,x}) &= \frac{1}{4}(b_{x+}^\dagger b_{x+} - b_{x-}^\dagger b_{x-})^2 \\ &\quad + \frac{1}{2}(b_{x+}^\dagger b_{x-} b_{x-}^\dagger b_{x+} + b_{x-}^\dagger b_{x+} b_{x+}^\dagger b_{x-}) \\ &= \frac{1}{4}(b_{x+}^\dagger b_{x+} + b_{x-}^\dagger b_{x-})^2 \\ &\quad + \frac{1}{2}(b_{x+}^\dagger b_{x+} + b_{x-}^\dagger b_{x-}) \\ &= \frac{3}{4} \end{aligned}$$

$$[S_{3,x}, S_{\pm,x}] = \pm S_{\pm,x}$$

$$[S_{+,x}, S_{-,x}] = b_{x+}^\dagger b_x b_x^\dagger b_{x+} - b_{x-}^\dagger b_x b_x^\dagger b_{x-} = 2S_{3,x}$$

Der Hamiltonoperator des Heisenbergmodells lautet

$$H = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{x,y} \left[ \frac{1}{4} (a_{x+}^\dagger a_{x+} - a_{x-}^\dagger a_{x-}) (a_{y+}^\dagger a_{y+} - a_{y-}^\dagger a_{y-}) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} (a_{x+}^\dagger a_x a_{y-}^\dagger a_{y+} + a_{x-}^\dagger a_x a_{y+}^\dagger a_{y-}) \right]$$

wobei zusätzlich beachtet werden muß, daß die lokale Nebenbedingung  $a_{x+}^\dagger a_{x+} + a_{x-}^\dagger a_{x-} = 1$  gilt.  $a$  und  $a^\dagger$  sind entweder fermionische oder bosonische Operatoren. Der Projektionsoperator auf den Teilraum aller Zustände, die diese Nebenbedingung erfüllen, kommutiert mit  $H$ . Der Hamiltonoperator kann noch etwas kompakter in der Form

$$H = \frac{1}{4} \sum_{x,y,\sigma,\tau} J_{x,y} (\zeta a_{x\sigma}^\dagger a_{y\tau}^\dagger a_{y\sigma} a_{x\tau} - \frac{1}{2})$$

geschrieben werden.  $\zeta = +1$  für Bosonen und  $\zeta = -1$  für Fermionen. Bis auf eine Konstante  $-\frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{x,y}$  lautet der Hamiltonoperator

$$H = \frac{\zeta}{4} \sum_{x,y} J_{x,y} P_{x,y}$$

wobei der Operator  $P_{x,y}$  die Teilchen auf den Gitterplätzen  $x$  und  $y$  vertauscht. Die Eigenzustände von  $H$  sind symmetrisch gegenüber dem Vertauschen von Bosonen. Für eine Zweiteilchenzustand gibt es also zwei Fälle

1. Für Bosonen: Symmetrisch im Orts- und Spinraum, für Fermionen: Antisymmetrisch im Orts- und symmetrisch im Spinraum

$$a_{x+}^\dagger a_{y+}^\dagger |0\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{x+}^\dagger a_{y-}^\dagger + a_{x-}^\dagger a_{y+}^\dagger) |0\rangle, \quad a_{x-}^\dagger a_{y-}^\dagger |0\rangle$$

Das sind die Triplet-Zustände.

2. Für Bosonen: Antisymmetrisch im Orts- und Spinraum, für Fermionen: Symmetrisch im Orts- und antisymmetrisch im Spinraum

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (a_{x+}^\dagger a_{y-}^\dagger - a_{x-}^\dagger a_{y+}^\dagger) |0\rangle$$

Das ist der Singulett-Zustand.

Ein RVB-Zustand kann also in der Form

$$|\Psi\rangle = \sum_P \prod_{(x,y) \in P} \frac{a(|x-y|)}{\sqrt{2}} (a_{x+}^\dagger a_{y-}^\dagger - a_{x-}^\dagger a_{y+}^\dagger) |0\rangle$$

geschrieben werden.

### 3.4.2 Feldtheoretische Formulierung

Wie im ersten Kapitel dieser Vorlesung angegeben kann man das Modell, wenn man es durch fermionische oder bosonische Operatoren ausgedrückt hat, auch mit Hilfe von Feldern in einer Lagrangeformulierung schreiben. Der Unterschied zu früher besteht nur darin, daß keine kinetische Energie auftritt, sondern stattdessen eine lokale Nebenbedingung. Die Wirkung ist

$$S = \int_0^\beta d\tau L$$

$$L = \sum_{x,\sigma} \phi_{x,\sigma}^*(\tau) (\partial_\tau - \mu) \phi_{x,\sigma}(\tau) - i \sum_x \lambda_x(\tau) \left( \sum_\sigma \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{x,\sigma}(\tau) - 1 \right) + V(\{\phi_{x,\sigma}^*(\tau), \phi_{x,\sigma}(\tau)\})$$

mit

$$V(\{\phi_{x,\sigma}^*(\tau), \phi_{x,\sigma}(\tau)\}) = \frac{\zeta}{4} \sum_{x,y,\sigma,\sigma'} J_{x,y} \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{y,\sigma'}^*(\tau) \phi_{y,\sigma}(\tau) \phi_{x,\sigma'}(\tau)$$

wobei eine Konstante weggelassen wurde.  $\lambda_x(\tau)$  ist ein reelles Feld, das einen Lagrangeparameter darstellt. Die Integration über  $\lambda_x(\tau)$  sichert, daß die Nebenbedingung

$$\sum_\sigma \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{x,\sigma}(\tau) = 1$$

gewährleistet ist. Das chemische Potential ist wegen dieser Nebenbedingung eigentlich überflüssig. Im folgenden werde ich mich auf die Behandlung eines Modells mit Kopplungen zwischen benachbarten Gitterplätzen beschränken. Das Potential ist dann

$$V(\{\phi_{x,\sigma}^*(\tau), \phi_{x,\sigma}(\tau)\}) = \frac{\zeta J}{4} \sum_{x,i,\sigma,\sigma'} \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{x+e_i,\sigma'}^*(\tau) \phi_{x+e_i,\sigma}(\tau) \phi_{x,\sigma'}(\tau)$$

$i$  durchläuft dabei die benachbarten Gitterplätze. Diese Wechselwirkung kann man mit einer Hubbard-Stratonovich Transformation umformen, so daß die resultierende Wirkung quadratisch in den Feldern  $\phi$  und  $\phi^*$  ist. Diese können dann ausintegriert werden und man erhält eine effektive Theorie, in der das Hubbard-Stratonovich Feld und der Lagrangeparameter  $\lambda_x$  vorkommen. Diese effektive Wirkung kann dann zum Beispiel im Rahmen einer Sattelpunktnäherung (mean-field Näherung) untersucht werden, auch Fluktuationen um den Sattelpunkt können studiert werden. Allerdings ist zu beachten, daß die resultierende Theorie eine lokale Eichinvarianz besitzt. Diese Schritte wollen wir im folgenden durchführen.

**Hubbard-Stratonovich Transformation.** Die Hubbard-Stratonovich Transformation ist nichts anderes als ein Gaussintegral. Es gilt

$$\exp\left(-\frac{J}{2} z^* z\right) \propto \int d\chi d\chi^* \exp\left(-\frac{2}{J} \chi^* \chi + \chi^* z + z^* \chi\right)$$

Beachtet man, daß in dem Ausdruck für  $V$  jeder Term doppelt vorkommt, dann kann man die Summation über  $i$  auf positive Richtungen beschränken:

$$\begin{aligned} V(\{\phi_{x,\sigma}^*(\tau), \phi_{x,\sigma}(\tau)\}) &= \frac{\zeta J}{2} \sum_{x,i,\sigma,\sigma'} \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{x+e_i,\sigma'}^*(\tau) \phi_{x+e_i,\sigma}(\tau) \phi_{x,\sigma'}(\tau) \\ &= \frac{J}{2} \sum_{x,i} \left( \sum_\sigma \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{x+e_i,\sigma}(\tau) \right) \left( \sum_\sigma \phi_{x+e_i,\sigma}^*(\tau) \phi_{x,\sigma}(\tau) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \exp(-V(\{\phi_{x,\sigma}^*(\tau), \phi_{x,\sigma}(\tau)\})) &\propto \int D[\chi(\tau)] D[\chi^*(\tau)] \exp\left(-\frac{2}{J} \sum_{x,i} \chi_{x,i}^*(\tau) \chi_{x,i}(\tau) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{x,i} (\chi_{x,i}^*(\tau) \sum_\sigma \phi_{x+e_i,\sigma}^*(\tau) \phi_{x,\sigma}(\tau) + \chi_{x,i}(\tau) \sum_\sigma \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{x+e_i,\sigma}(\tau)) \right) \end{aligned}$$

Man erhält so ein neues

$$\begin{aligned} L' &= \sum_{x,\sigma} \phi_{x,\sigma}^*(\tau) (\partial_\tau - \mu) \phi_{x,\sigma}(\tau) - i \sum_x \lambda_x(\tau) \left( \sum_\sigma \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{x,\sigma}(\tau) - 1 \right) \\ &\quad - \frac{2}{J} \sum_{x,i} \chi_{x,i}^*(\tau) \chi_{x,i}(\tau) \\ &\quad + \sum_{x,i} \left( \chi_{x,i}^*(\tau) \sum_\sigma \phi_{x+e_i,\sigma}^*(\tau) \phi_{x,\sigma}(\tau) + \chi_{x,i}(\tau) \sum_\sigma \phi_{x,\sigma}^*(\tau) \phi_{x+e_i,\sigma}(\tau) \right) \end{aligned}$$

An dieser Stelle können die  $\phi$  und  $\phi^*$  ausintegriert werden. Bevor wir so eine effektive Wirkung ableiten, ist es wichtig, die Symmetrien von  $L'$  zu untersuchen.

**Lokale Eichsymmetrie.** Schreibt man

$$\chi_{x,i}(\tau) = \rho_{x,i}(\tau) \exp(iA_{x,i}(\tau))$$

dann kann man die lokale Eichtransformation in der Form

$$\phi_x(\tau) \rightarrow \phi_x(\tau) \exp(i\varphi_x(\tau))$$

$$\lambda_x(\tau) \rightarrow \lambda_x(\tau) + \partial_\tau \varphi_x(\tau)$$

$$A_{x,i}(\tau) \rightarrow A_{x,i}(\tau) - \varphi_{x+e_i}(\tau) + \varphi_x(\tau)$$

schreiben. Es gilt dann

$$L' \rightarrow L' + i \sum_x \partial_\tau \varphi_x(\tau)$$

und

$$S \rightarrow S + i \sum_x \int_0^\beta d\tau \partial_\tau \varphi_x(\tau) = S + i \sum_x (\varphi_x(\beta) - \varphi_x(0)) = S$$

da  $\varphi_x(\tau)$  als bosonisches Feld periodisch in  $\tau$  muß. Man kann die periodische Randbedingung an  $\varphi_x(\tau)$  sogar noch verallgemeinern, indem man

$$\varphi_x(\beta) = \varphi_x(0) + 2\pi m_x$$

setzt. Das System ist auch noch unter dieser größeren Gruppe von Eichtransformationen invariant. Eine Folge der Eichtransinvarianz ist, daß man eine spezielle Eichung wählen kann. Die Eichung muß nur garantieren, daß die Nebenbedingung

$$\sum_\sigma \phi_{x\sigma}^*(\tau) \phi_{x\sigma'}(\tau) = 1$$

für einen festen Wert  $\tau$  erfüllt ist. Beispielsweise kann man

$$\lambda_x(\tau) = \lambda_x \delta(\tau - \tau_0)$$

wählen.

**Sattelpunktsnäherung.** Es ist möglich, in diesem Modell einen Parameter einzuführen, der dafür sorgt, daß in einem bestimmten Limes die Sattelpunktsnäherung exakt wird. Dies erlaubt dann eine systematische Entwicklung um die Sattelpunktslösung. Die Idee besteht darin, statt einer  $SU(2)$  Symmetrie für die Spins eine  $SU(N)$  Symmetrie anzunehmen. Es gilt dann

$$H = \frac{1}{N} \sum_{x,y} J_{x,y} \sum_{\alpha,\beta=1}^N \hat{S}_\alpha^\beta(x) \hat{S}_\beta^\alpha(y)$$

mit den Generatoren  $\hat{S}_\alpha^\beta(x)$  der  $SU(N)$  Algebra. Als Darstellung kann man

$$\hat{S}_\alpha^\beta(x) = \sum_{a=1}^{n_c} c_{\alpha a}^\dagger(x) c^{\beta a}(x) - \delta_\alpha^\beta \frac{n_c}{2}$$

wählen, wobei die Nebenbedingung

$$\sum_{\alpha=1}^N c_{\alpha a}^\dagger(x) c^{\alpha b}(x) = \begin{cases} \delta_a^b m & x \in A \\ \delta_a^b (N-m) & x \in B \end{cases}$$

auf einem paaren Gitter mit den Untergittern  $A$  und  $B$  erfüllt sein muß. Für  $N = 2$  gibt es nur den Wert  $m = 1$  und man erhält die Darstellungen der  $SU(2)$ . Der Spin der Darstellung ist  $s = n_c/2$ . Für  $n_c = 1$  ergeben sich also die obigen Operatoren. Ich beschränke mich im folgenden auf  $n_c = 1$ ,  $N$  gerade und  $m = N/2$ . Andere Fälle sind aber ebenso interessant, beispielsweise liefert  $n_c \rightarrow \infty$  die Spinwellennäherung. Für die Lagrangedichte erhält man

$$\begin{aligned} L' &= \sum_{x,\alpha} \phi_{x,\alpha}^*(\tau) (\partial_\tau - \mu) \phi_{x,\alpha}(\tau) - i \sum_x \lambda_x(\tau) \left( \sum_\alpha \phi_{x,\alpha}^*(\tau) \phi_{x,\alpha}(\tau) - \frac{N}{2} \right) \\ &\quad - \frac{N}{J} \sum_{x,i} \chi_{x,i}^*(\tau) \chi_{x,i}(\tau) \\ &\quad + \sum_{x,i} \left( \chi_{x,i}^*(\tau) \sum_\alpha \phi_{x+e_i,\alpha}^*(\tau) \phi_{x,\alpha}(\tau) + \chi_{x,i}(\tau) \sum_\alpha \phi_{x,\alpha}^*(\tau) \phi_{x+e_i,\alpha}(\tau) \right) \end{aligned}$$

Für  $N = 2$  entspricht dies direkt dem obigen Ausdruck. Integriert man die (in dieser Notation jetzt fermionischen) Felder  $\phi$  und  $\phi^*$  aus, so erhält man

$$S_{\text{eff}}[\lambda, \chi, \chi^*] = N \bar{S}[\lambda, \chi, \chi^*]$$

$$\begin{aligned} \bar{S}[\lambda, \chi, \chi^*] &= \text{Tr} \ln \left( (\partial_\tau - \mu - i \lambda_x(\tau)) \delta_{x,y} \delta_{\tau,\tau'} + (\chi_{x,i}(\tau) \delta_{y,x+e_i} + \chi_{x-e_i,i}^*(\tau) \delta_{y,x-e_i}) \delta_{\tau,\tau'} \right) \\ &\quad - \int d\tau \left( \frac{1}{J} \sum_{x,i} \chi_{x,i}^*(\tau) \chi_{x,i}(\tau) - \frac{i}{2} \sum_x \lambda_x(\tau) \right) \end{aligned}$$

Da die effektive Wirkung  $\propto N$  ist, kann man für große  $N$  eine Sattelpunktsnäherung rechtfertigen und gegebenenfalls auch um den Sattelpunkt entwickeln.  $1/N$  ist der Entwicklungsparameter. Die entsprechenden Sattelpunktgleichungen lauten

$$\frac{\delta \bar{S}}{\delta \rho_{x,i}(\tau)} = 0$$

$$\frac{\delta \bar{S}}{\delta A_{x,i}(\tau)} = 0$$

$$\frac{\delta \bar{S}}{\delta \lambda_x(\tau)} = 0$$

Sie wurden bisher nicht vollständig untersucht, es gibt lediglich Lösungen in bestimmten Untermanigfaltigkeiten des Lösungsraums.

Wir betrachten im folgenden einige Lösungen der Sattelpunktgleichung für das Quadratgitter. Wir haben oben gesehen, daß man die Phase von  $\chi$  und  $\lambda$  als elektromagnetisches Potential interpretieren kann, den Betrag von  $\chi$  als Dichte. Nimmt man eine konstante Dichte und Magnetfeld 0 an, so erhält man eine Lösung der Sattelpunktgleichung, die zuerst von Baskaran, Zou und Anderson gefunden wurde. Sie erhalten für die Energie

$$E_{\text{BZA}} = \frac{4NN_s}{J} \bar{\rho}^2 - \frac{16}{\pi^2} NN_s \bar{\rho}$$

mit einem Minimum  $E = -16NN_s J / \pi^4 = -0.164NN_s J$  für  $\bar{\rho} = 2J/\pi^2$ . Bei konstanter Dichte und einem konstanten Magnetfeld  $\neq 0$  erhält man Flußphasenzustände, die energetisch unter der von Baskaran, Zou und Anderson gefundenen Lösung liegen. Es gilt

$$E_{\text{Flussphase}} = \frac{4NN_s}{J} \bar{\rho}^2 - 8NN_s \bar{\rho} \int_{|p_i| \leq \frac{\pi}{2}} \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \sqrt{\sin^2 p_1 + \sin^2 p_2}$$

Für das Minimum gilt  $E = -0.230NN_sJ$ . Schließlich gibt es Dimer-Zustände, die energetisch noch unter diesen Lösungen liegen:

$$E = \frac{4NN_s}{J}\bar{\rho}^2 - NN_s\bar{\rho}$$

mit einem Minimum  $E = -JNN_s/4$  bei  $\bar{\rho} = J/4$ . Diese Energie liegt noch deutlich oberhalb der Variationsenergie der RVB-Zustände für  $N = 2$  ( $E = -0.6688JN_s$ ). Allerdings fehlen hier die  $1/N$  Korrekturen. Ein wesentliches Problem ist aber, daß in allen diesen Zuständen die lokale Eichinvarianz gebrochen ist. Der Status dieser Theorie ist also noch offen.

**Flußphasen.** Flußphasenzustände sind allgemein Zustände mit  $\lambda = 0$  und einem von  $\tau$  unabhängigen  $\chi$ . Setzt man dies in die Wirkung ein, die die fermionischen Operatoren noch enthält, so erhält man hieraus einen effektiven Hamiltonoperator

$$H = - \sum_{x,j,\alpha} \bar{\rho}_{x,j} (c_{x,\alpha}^\dagger \exp(iA_{x,j})c_{x+e_j,\alpha} + \text{h.c.}) + \frac{N}{J} \sum_{x,j} \bar{\rho}_{x,j}^2$$

Flußphasenzustände haben ein feste  $\bar{\rho}_{x,j} = \bar{\rho}$ . Man kann das Flußphasenproblem also auch lösen, indem man die Grundzustandsenergie von  $H$  zunächst für festes  $\bar{\rho}$  minimiert, indem man die  $A_{x,j}$  variiert und danach das Minimum als Funktion von  $\bar{\rho}$  aufsucht. Dabei ist zu beachten, daß die Anzahl der Fermionen durch die Anzahl der Gitterplätze gegeben ist, man hat also ein halbgefülltes Band. Wir beschränken uns im folgenden auf ein Quadratgitter und nehmen ein Vektorpotential  $A_{x,j}$ , das einem Fluß  $\phi$  durch jedes elementare Quadrat entspricht. Das ist die Situation eines konstanten Magnetfelds. Dann ist die Grundzustandsenergie von  $H$  durch

$$E_0 = -\bar{\rho}\text{Tr}|T| + \frac{4NN_s}{J}\bar{\rho}^2$$

gegeben, wobei  $T = (t_{x,y})$  die Matrix mit den Elementen

$$t_{x,y} = \exp(iA_{x,j})\delta_{y,x+e_j}$$

und es gilt die Flußphasenbedingung

$$A_{x,2} + A_{x+e_2,1} - A_{x+e_1,2} - A_{x,1} = \phi$$

$|T|$  ist diejenige positiv definite Matrix, für die  $|T|^2 = T^2$  gilt.  $\text{Tr}|T|$  ist die Summe der Beträge der Eigenwerte von  $T$ . Eine spezielle Eichung, für die die Flußphasenbedingung erfüllt ist, ist

$$A_{x,1} = \frac{\phi}{2}, \quad A_{x,2} = (-1)^{x_1} \frac{\phi}{2}$$

Mit dieser Eichung erhält man 4 Untergitter des Quadratgitters. Macht man für die Eigenfunktionen von  $T$  den Ansatz

$$\psi_x = \exp(ikx)a_i$$

für  $x$  im Untergitter  $i = 1, \dots, 4$ , so erhält man für die  $a_i$  eine Eigenwertgleichung mit einer  $4 \times 4$ -Matrix. Die Eigenwerte lassen sich berechnen und damit auch  $\text{Tr}|T|$ . Das Minimum erhält man für

$$\phi = \pi$$

und für die Eigenwerte erhält man

$$\pm 2\sqrt{\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2}$$

Damit ergibt sich die obige Formel für die Grundzustandsenergie. Der optimale Wert  $\phi = \pi$  für den Fluß ist allgemeiner als aus dieser Rechnung ersichtlich. Man kann z.B. zeigen, daß sich für diesen Wert auch ein Minimum von  $\det T$  ergibt. Weiter kann man einen solchen optimalen Wert für allgemeinere zweidimensionale Gitter oder generell für planare Graphen finden. Für einen planaren Graphen ist der optimale Fluß  $\pi(n-2)/2$  durch jedes  $n$ -Eck. Man kann diese Flußphasenzustände sogar dann noch konstruieren, wenn die Dichte der Elektronen nicht mehr 1 ist.

### 3.5 Der verdünnte Antiferromagnet: Das $t - J$ Modell

Dotiert man einen Antiferromagneten, so erhält man Löcher in dem Spinsystem, die beweglich sind und die antiferromagnetische Ordnung schwächen oder ganz zerstören können. Ein Modell, mit dem sich solche dotierten oder verdünnten Antiferromagnete beschreiben lassen, ist das  $t - J$  Modell

$$H_{t-J} = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} (1 - n_{x,-\sigma}) c_{x,\sigma}^\dagger c_{y,\sigma} (1 - n_{y,-\sigma}) + \sum_{x,y} J_{x,y} \vec{S}_x \cdot \vec{S}_y$$

wobei wir die Spins als elektronische Spins interpretieren,

$$S_{3,x} = \frac{1}{2} (c_{x+}^\dagger c_+ - c_{x-}^\dagger c_{x-})$$

$$S_{+,x} = c_{x+}^\dagger c_{x-}, \quad S_{-,x} = c_{x-}^\dagger c_{x+}$$

$$S_{1,x} = \frac{1}{2} (S_{+,x} + S_{-,x}), \quad S_{2,x} = \frac{1}{2i} (S_{+,x} - S_{-,x})$$

Der Spin-Anteil des Hamiltonoperators ist der eines Heisenbergmodells, der kinetische Anteil erlaubt ein Hüpfen der Spins von einem Gitterplatz auf einen anderen. Die Faktoren  $(1 - n_{x,-\sigma})(1 - n_{y,-\sigma})$  garantieren, daß es niemals zwei Elektronen auf einem Gitterplatz gibt. Ähnlich wie wir bei halber Füllung und starker Abstoßung das Heisenbergmodell aus dem Hubbardmodell abgeleitet hatten, kann man das  $t - J$  Modell herleiten. Man eliminiert dazu mit Hilfe einer unitären Transformation diejenigen Terme im Hamiltonoperator, die die Anzahl der doppelt besetzten Gitterplätze verändern. Die Transformation ist also die gleiche wie früher. Ist man nicht bei halber Füllung, so treten neben dem Heisenbergterm weitere Terme im Hamiltonoperator auf. Der wesentliche Term ist der kinetische Term im Hubbardmodell, der abseits von halber Füllung zu dem kinetischen Term im  $t - J$  Modell führt. Andere Terme sind von der Größenordnung  $J(1 - n)$  wobei  $n$  die Teilchendichte ist. Solange man nicht zu sehr dotiert, ist  $(1 - n)$  klein. Daher werden diese Terme vernachlässigt. Man kann das  $t - J$  Modell aber auch anders motivieren, wir betrachten es hier als ein Modell an sich und nicht als Limes eines anderen Modells.

Ein Effekt, den man für das  $t - J$  Modell erwartet, ist eine Schwächung oder Aufhebung der langreichweitigen Ordnung der Spins durch Dotierung. Es gibt eine Reihe von Methoden, mit denen das Modell bisher studiert wurde. Das Modell ist in einer Dimension für einen bestimmten Wert von  $t/J$  exakt lösbar. In höheren Dimensionen wurde schon sehr früh die Bewegung eines Lochs in einem antiferromagnetisch geordneten Spinbackground untersucht. Wie sich das Modell bei endlicher Konzentration von Löchern verhält, ist bis heute nicht richtig verstanden. Im Rahmen der in dieser Vorlesung vorgestellten Methoden kann man das Modell behandeln, indem man wie für das Heisenbergmodell Hilfsfelder einführt. In dem Modell gibt es drei Zustände pro Gitterplatz:  $|0\rangle_x$ , der leere Gitterplatz,  $|+\rangle_x$  und  $|-\rangle_x$ , ein mit einem Elektron mit Spin  $\sigma = \pm$  besetzter Gitterplatz. Man kann die Spins durch fermionische Operatoren  $f_{x,\sigma}^\dagger$  und  $f_{x,\sigma}$  darstellen wie vorher, die Löcher durch Bosonen  $b_x^\dagger$  und  $b_x$ . Ein ursprünglicher elektronischer Operator wird dann durch

$$c_{x,\sigma}^\dagger = b_x f_{x,\sigma}^\dagger, \quad c_{x,\sigma} = b_x^\dagger f_{x,\sigma} \quad (3.11)$$

dargestellt. Es gilt die Nebenbedingung

$$b_x^\dagger b_x + \sum_{\sigma} f_{x,\sigma}^\dagger f_{x,\sigma} = 1 \quad (3.12)$$

Der kinetische Anteil im Hamiltonoperator lautet

$$H_t = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} f_{x,\sigma}^\dagger f_{y,\sigma} b_y^\dagger b_x$$

Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Spins durch bosonische Operatoren  $b_{x,\sigma}^\dagger$  und  $b_{x,\sigma}$  darzustellen und die Löcher durch fermionische Operatoren  $a_x^\dagger$  und  $a_x$ . Dann gilt

$$c_{x,\sigma}^\dagger = a_x^\dagger b_{x,\sigma}, \quad c_{x,\sigma} = a_x b_{x,\sigma}$$

$$a_x^\dagger a_x + \sum_{\sigma} b_{x,\sigma}^\dagger b_{x,\sigma} = 1$$

$$H_t = \sum_{x,y,\sigma} t_{x,y} b_{x,\sigma}^\dagger b_{y,\sigma} a_y^\dagger a_x$$

Die Lochanregungen werden als Holonen, die Spinanregungen als Spinonen bezeichnet. Abseits halber Füllung können die bosonischen Löcher kondensieren, was früher fälschlicherweise als Hoch- $T_c$  Übergang interpretiert wurde. Tatsächlich ist dies ein Übergang, der lediglich durch die Darstellung auftritt und physikalisch keine Bedeutung hat.

Das  $t - J$  Modell kann ähnlich wie das Heisenbergmodell feldtheoretisch behandelt werden, indem man zunächst die Spin-Spin Wechselwirkung mit Hilfe einer Hubbard-Stratonovich Transformation entkoppelt und dann die Felder  $f_{x,\sigma}^\dagger$  und  $f_{x,\sigma}$  oder  $b_{x,\sigma}^\dagger$  und  $b_{x,\sigma}$  ausintegriert. Man erhält dann eine Wirkung, die neben dem Hubbard-Stratonovich Hilfsfeld und einem Lagrangeparameterfeld noch die Lochfelder enthält. Auch diese Theorie ist wieder lokal eichinvariant. Untersucht man, welchen Einfluß die Löcher auf die für das Heisenbergmodell diskutierten Zustände haben, so stellt sich heraus, daß der Flußphasenzustand durch Löcher stabilisiert wird. Auf dem Quadratgitter ist der optimale Fluß ist dann  $\pi n$ , wobei  $n$  die Elektronendichte ist.

Wir wählen in folgenden den Ansatz (3.11). Die Spin-Spin-Wechselwirkung kann in der Form

$$\vec{S}_x \cdot \vec{S}_y = -\frac{1}{4} \sum_{\sigma,\sigma'} f_{x\sigma}^\dagger f_{y\sigma} f_{y\sigma'}^\dagger f_{x\sigma'} - \frac{1}{4} (f_{x+}^\dagger f_{y-}^\dagger - f_{x-}^\dagger f_{y+}^\dagger) (f_{y-x} f_{x+} - f_{y+} f_{x-}) + \frac{1}{4} \sum_{\sigma} (f_{x\sigma}^\dagger f_{x\sigma} + f_{y\sigma}^\dagger f_{y\sigma})$$

Die Herleitung ist einfach: Man drückt die Spinoperatoren durch die Fermionen aus, verwendet (3.11) und eliminiert die Operatoren  $b_x^{(\dagger)}$  mit Hilfe von (3.12). Die Dichte-Dichte Wechselwirkung kann man entsprechend in der Form

$$n_x n_y = (1 - b_x^\dagger b_x) (1 - b_y^\dagger b_y)$$

schreiben. Den Term  $b_x^\dagger b_y^\dagger b_y b_x$  läßt man wegen niedriger Lochkonzentration meist weg. Die anderen quartischen Terme kann man mit Hubbard-Stratonovich Feldern entkoppeln. Das Ergebnis ist

$$\begin{aligned} L_1 = & \frac{1}{4} \sum_{xy} J_{xy} (|\chi_{xy}|^2 + |\Delta_{xy}|^2) + \sum_{x\sigma} f_{x\sigma}^* (\partial_\tau - i\lambda_x) f_{x\sigma} \\ & - \frac{1}{4} \left[ \sum_{xy\sigma} J_{xy} \chi_{xy}^* f_{x\sigma}^* f_{y\sigma} + \text{c.c.} \right] + \frac{1}{4} \left[ \sum_{xy} J_{xy} \Delta_{xy} (f_{x+}^* f_{y-}^* - f_{x-}^* f_{y+}^*) + \text{c.c.} \right] \\ & + \sum_x b_x^* (\partial_\tau - i\lambda_x + \mu) b_x - \sum_{xy\sigma} t_{xy} b_x b_y^* f_{x\sigma}^* f_{y\sigma} \end{aligned}$$

$S$  ist unter der lokalen Eichsymmetrie

$$\begin{aligned} f_{x\sigma} & \rightarrow \exp(i\theta_x) f_{x\sigma}, & b_x & \rightarrow \exp(i\theta_x) b_x \\ \chi_{xy} & \rightarrow \exp(-i\theta_x) \chi_{xy} \exp(i\theta_y) \\ \Delta_{xy} & \rightarrow \exp(i\theta_x) \Delta_{xy} \exp(i\theta_y) \\ \lambda_x & \rightarrow \lambda_x + \partial_\tau \theta_x \end{aligned}$$

Oft wird  $L_1$  in der Form

$$L_1 = \frac{1}{8} \sum_{xy} \text{Tr} J_{xy} U_{xy}^\dagger U_{xy} + \frac{1}{8} \sum_{xy\sigma} (\Phi_{x\sigma}^\dagger U_{xy} \Phi_{y\sigma} + \text{c.c.}) \\ + \sum_{x\sigma} f_{x\sigma}^* (\partial_\tau - i\lambda_x) f_{x\sigma} + \sum_x b_x^* (\partial_\tau - i\lambda_x + \mu) b_x - \sum_{xy\sigma} t_{xy} b_x b_y^* f_{x\sigma}^* f_{y\sigma}$$

mit

$$\Phi_{x+} = \begin{pmatrix} f_{x+} \\ f_{x-}^* \end{pmatrix}, \quad \Phi_{x-} = \begin{pmatrix} f_{x-} \\ -f_{x+}^* \end{pmatrix} \\ U_{xy} = \begin{pmatrix} -\chi_{xy}^* & \Delta_{xy} \\ \Delta_{xy}^* & \chi_{xy} \end{pmatrix}$$

In dieser Darstellung ist  $S$  bei halber Füllung ( $\mu = 0, b = 0$ ) invariant unter

$$\Phi_{x\sigma} \rightarrow V_x \Phi_{x\sigma}$$

$$U_{xy} \rightarrow V_x U_{xy} V_y^\dagger$$

wobei die  $V_x$  eine lokale  $SU(2)$ -Matrizen sind. Neben der lokalen Eichsymmetrie gibt es also eine lokale  $SU(2)$ -Symmetrie.

Zu dieser Theorie gibt es viele von verschiedenen Autoren vorgeschlagene Mean-Field Lösungen, die Sattelpunktsnäherungen entsprechen. In diesen Sattelpunktsnäherungen haben die Variablen die Bedeutung

$$\chi_{xy} = \sum_{\sigma} \langle f_{x\sigma}^* f_{y\sigma} \rangle$$

$$\Delta_{xy} = \langle f_{x+}^* f_{y-} - f_{x-}^* f_{y+} \rangle$$

Die erste ist der homogen RVB-Zustand von Baskaran, Zou und Anderson. Der Ansatz ist  $\chi_{xy} = \chi$  reell und  $\Delta_{xy} = 0$ . Das Spektrum ist dann das einer fermionischen Modells

$$H_{BZA} = -\frac{\chi}{2} \sum_{xy\sigma} J_{xy} f_{x\sigma}^\dagger f_{y\sigma}$$

Es gibt einige andere Zustände mit niedrigerer Energie, dazu gehören ein  $d$ -Wellen Zustand und ein Fluß-Phasen Zustand. Beide haben die gleiche Energie und die gleichen Dispersionsrelationen für die niedrigen Anregungen. Man kann zeigen, daß sie unter der  $SU(2)$ -Symmetrie äquivalent sind. Insgesamt erhält man vier Mean-Field Phasen (Lee, Nagosa, 1992): Fermiflüssigkeit ( $\chi \neq 0, b \neq 0$ ), Spin-Gap Phase ( $\chi \neq 0, \Delta \neq 0$ ),  $d$ -Wellen Supraleitung ( $\chi \neq 0, b \neq 0, \Delta \neq 0$ ), seltsames Metall ( $\chi \neq 0$ ) und bei hohen Temperaturen den RVB-Zustand. Die Mean-Field-Theorie spiegelt den experimentellen Befund recht gut wieder.

Wie sich diese Überlegungen in mathematisch sauberer Weise durchführen lassen, wurde von J. Fröhlich und P. Marchetti (Phys. Rev. **B46**, 6535 (1992)) gezeigt. Die resultierende Feldtheorie ist aber noch nicht systematisch untersucht worden.



# 4 Der Quantenhalleffekt

## Literatur zu diesem Kapitel:

1. The Quantum Hall Effect. Ed. R.E. Prange und S.M. Girvin, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1987. Eine Sammlung von guten Einführungen zu verschiedenen Aspekten dieses Themas.
2. T. Chakraborty, P. Pietiläinen: The Fractional Quantum Hall Effect. Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1988. Es gibt inzwischen eine zweite, aktualisierte Auflage. Dieses Buch behandelt ausschließlich den gebrochenzahligen Quantenhalleffekt und legt den Hauptaspekt auf numerische Ergebnisse.
3. Aus dem eingangs zitierten Buch von Fradkin die Kapitel 9 und 10.

## 4.1 Einführung

Der Quantenhalleffekt wurde 1980 in einer Arbeit von von Klitzing, Dorda und Pepper erstmals publiziert, Klaus von Klitzing erhielt für diese Entdeckung 1985 den Nobelpreis. Der Quantenhalleffekt wird in zweidimensionalen Elektronensystemen beobachtet, die sich in einem starken Magnetfeld befinden, das senkrecht auf der Ebene steht, in der sich die Elektronen bewegen können. Unter bestimmten Bedingungen beobachtet man in diesen Systemen einen Leitfähigkeitstensor

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & -n \frac{e^2}{h} \\ n \frac{e^2}{h} & 0 \end{pmatrix}$$

Es gilt also  $\sigma_H = n \frac{e^2}{h}$ . Für den ganzzahligen Quantenhalleffekt ist  $n$  eine ganze Zahl, für den gebrochenzahligen Quantenhalleffekt nimmt  $n$  bestimmte, einfache rationale Werte an. Das erstaunliche ist, daß diese Gleichung experimentell mit extrem hoher Präzision verifiziert wurde: Die relative Genauigkeit, die erreicht wird, ist  $3 \cdot 10^{-7}$ . Damit erlaubt dieser Effekt eine extrem genaue Messung der Feinstrukturkonstante  $\frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ , da  $c$  fest definiert ist. Eine wesentliche Frage an die Theorie ist, warum in allen Experimenten diese Genauigkeit auftritt, obwohl die untersuchten Systeme alles andere als ideal sind, und obwohl die Geometrie der Systeme nicht exakt bekannt ist. Experimentell wird nämlich nicht die Leitfähigkeit, sondern der Leitwert oder der Widerstand einer Probe bestimmt. Man kann aber zeigen, daß in zwei Dimensionen Halleitwert und Halleitfähigkeit gleich sind. Geometrieabhängige Faktoren fallen heraus. Trotzdem ist die Präzision verwunderlich, da in diesen Systemen viele Verunreinigungen vorhanden sind.

## Der Halleffekt

Die einfachste Theorie der Leitfähigkeit berücksichtigt Quanteneffekte nur in einer halbklassischen Näherung. Sie basiert auf der Annahme einer mittleren freien Weglänge  $\ell_0$  oder alternativ einer mittleren freien Flugzeit  $\tau_0$ . Ein Elektron fliegt im Mittel eine Strecke  $\ell_0 = v_F \tau_0$ , bevor es gestreut wird. In einem elektrischen Feld  $\vec{E}$  nimmt seine Geschwindigkeit zwischen zwei Streuungen daher um  $\Delta \vec{v} = -e \vec{E} \tau_0 / m$  zu. Addiert man die Beiträge aller Elektronen, so erhält man die Stromdichte  $\vec{j} = \sigma_0 \vec{E}$  mit

$$\sigma_0 = \rho e^2 \tau_0 / m$$

Dabei sind Quanteneffekte wie etwa eine modifizierte Dispersionsrelation in der Masse  $m$  und in  $\tau_0$  berücksichtigt.

Legt man zusätzlich ein Magnetfeld an, dann wirkt auf die Elektronen eine Lorentzkraft. Damit gilt

$$\vec{j} = \sigma_0 \vec{E} - \frac{\sigma_0}{\rho e c} \vec{j} \times \vec{B}$$

In zweidimensionalen Systemen findet man damit

$$\sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma_0^{-1} & \frac{B}{\rho e c} \\ -\frac{B}{\rho e c} & \sigma_0^{-1} \end{pmatrix}$$

Damit erhält man für die Leitfähigkeit

$$\sigma_{xx} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau_0^2}, \quad \sigma_{xy} = \frac{\rho e c}{B} + \frac{\sigma_{xx}}{\omega_c \tau_0}$$

wobei  $\omega_c = \frac{eB}{mc}$  die Zyklotronfrequenz ist.

## Experimentelle Realisierung

Der Quantenhalleffekt wird in zweidimensionalen Elektronensystemen beobachtet. In bestimmten Halbleiterstrukturen kann man die Bewegung der Elektronen in einer Richtung stark einschränken, so daß man ein effektiv zweidimensionales Elektronensystem bekommt. Diese Systeme sind z.B. Si-MOSFETs und GaAs-GaAlAs Heterostrukturen. Die Grundidee ist relativ einfach: Man bildet eine Grenzfläche zwischen einem Isolator (z.B. SiO<sub>2</sub>, GaAs) und einem Halbleiter (dotiertes Si, GaAlAs). Über ein Gate legt man eine elektrische Spannung senkrecht zu der Grenzfläche an. Dadurch werden Elektronen aus dem Halbleiter in Richtung Grenzfläche gezogen. Sie können aber wegen der großen Energielücke des Isolators nicht in den Isolator eindringen. An der Grenzfläche bildet sich so eine Inversionschicht: Die Bewegung der Elektronen senkrecht zu der Grenzfläche entspricht einem Potentialtopf, in dem die Elektronen gefangen sind, parallel zur Grenzschicht können sie sich einigermaßen frei bewegen. Ihre Bewegung wird natürlich durch die Streuung an Störstellen und Fremdatomen im dotierten Halbleiter gestört, die freie Weglänge ist nicht sehr groß.

## Landauniveaus

Der Hamiltonoperator eines Elektrons in zwei Dimensionen in einem senkrechten Magnetfeld ist

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB}{\hbar c} y \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right]$$

wobei die Landaueichung  $A_x = -yB$ ,  $A_y = 0$  gewählt wurde. Da  $x$  als Variable nicht vorkommt, kann man für die Eigenfunktionen des Ansatz

$$\psi \propto \exp(ikx) \phi(y)$$

machen und erhält als Eigenwertgleichung

$$\frac{\hbar \omega_c}{2} \left( -l_B^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \left( \frac{y}{l_B} - l_B k \right)^2 \right) \phi = E \phi$$

wobei  $l_B = (\hbar c / eB)^{1/2}$  die magnetische Länge ist. Diese Eigenwertgleichung ist die Gleichung eines verschobenen harmonischen Oszillators, die Lösungen sind

$$\phi_{n,k} \propto H_n(y/l_B - l_B k) \exp(-(y - l_B^2 k) / 2l_B^2)$$

$$E_{nk} = \hbar \omega_c (n + 1/2)$$

Die Eigenenergien sind unabhängig von  $k$  und damit hoch entartet. Man nennt sie Landauniveaus. Die Anzahl der Zustände in einem Landauniveau ist  $F/2\pi l_B^2$ , wobei  $F$  die Fläche des Systems ist. Randeffekte wurden hierbei vernachlässigt. Die Dichte von Zuständen pro Flächeneinheit ist

$$n_B = \frac{1}{2\pi l_B^2} = \frac{eB}{hc}$$

Die konstruierten Zustände in den Landauniveaus sind in  $y$ -Richtung lokalisiert und in  $x$ -Richtung ausgehnt. Die hohe Entartung erlaubt aber die Konstruktion von Zuständen, die in  $x$ -Richtung lokalisiert und in  $y$ -Richtung ausgehnt sind, oder sogar solche, die in beiden Richtungen lokalisiert sind.

Ist ein Landauniveau gefüllt, dann liegt die Fermienergie zwischen zwei Landauniveaus. Es gibt dann keine Streuung, d.h.  $\tau_0 = \infty$ . Der Füllfaktor

$$\nu = \frac{\rho}{n_B}$$

ist dann eine ganze Zahl und man erhält

$$\sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma_0^{-1} & \frac{B}{\rho ec} \\ -\frac{B}{\rho ec} & \sigma_0^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{h}{ve^2} \\ -\frac{h}{ve^2} & 0 \end{pmatrix}$$

$\sigma$  hat dann die oben angegebene Form.

Ein zweites Argument, daß zu dem gleichen Resultat führt, basiert auf der Lorentzinvarianz. Man kann ein System mit einem Magnetfeld  $\vec{B}$  und einem dazu senkrechten elektrischen Feld  $\vec{E}$  in ein relativ zu diesem System mit einer Geschwindigkeit

$$\vec{v} = c \frac{\vec{E} \times \vec{B}}{B^2}$$

bewegtes System transformieren, in dem es kein elektrisches Feld und folglich auch keinen makroskopischen Strom gibt. Treten in dem System keine Streuungen auf, dann erhält man eine Stromdichte

$$\vec{j} = -\rho e \vec{v}$$

was auf den gleichen Leitfähigkeitstensor führt im Fall eines gefüllten Landauniveaus. Die wesentliche Frage, die sich demnach stellt, ist, welchen Einfluß die Wechselwirkung der Elektronen hat und welchen Einfluß Störstellen haben. Ohne Störstellen und Randeffekte hat man ein homogenes System, in dem das zweite Argument immer

$$\sigma_{xx} = 0, \quad \sigma_{xy} = \frac{\rho ec}{B} = \nu \frac{e^2}{h}$$

liefert.

## 4.2 Der ganzzahlige Quantenhalleffekt

In diesem Abschnitt werden wir zwei unterschiedliche Argumente für das Auftreten der Plateaus beim ganzzahligen Quantenhalleffekt kennenlernen. Dabei geht es in erster Linie um ein qualitatives Verständnis des Effekts und nicht um theoretische Details, da wir uns in dieser Vorlesung hauptsächlich mit wechselwirkenden Systemen beschäftigen. Die Wechselwirkung der Elektronen spielt für den gebrochenzahligen Effekt eine wesentliche Rolle.

### 4.2.1 Störstellen

Der ganzzahlige Quantenhalleffekt wird typischerweise wie folgt erklärt: Wir haben oben gesehen, daß ein gefülltes Landauniveau einen Beitrag  $\frac{e^2}{h}$  zu  $\sigma_{xy}$  liefert. Die Frage ist, welchen Beitrag ein nicht ganz gefülltes Landauniveau liefert. Das zweite Argument, in dem die Lorentztransformation benutzt wurde, benutzt, daß das System keine Störstellen enthält. Das ist aber tatsächlich nicht richtig. In allen Systemen, die experimentell

untersucht werden, und dortierte Halbleiter enthalten, die per se viele Störstellen enthalten. Was ist der Effekt dieser Störstellen? Generell führt die Anwesenheit von Störstellen zu Lokalisierung. Betrachten wir dazu ein Elektron im untersten Landauniveau und in einem zusätzlichen Potential  $V(x, y)$ . Der Hamiltonoperator ist

$$H_0 = P_0 V(x, y) P_0$$

wobei  $P_0$  der Projektionsoperator auf das unterste Landauniveau ist. Dies entspricht einer entarteten Störungsrechnung erster Ordnung. Ein solcher Zugang ist gerechtfertigt, wenn  $|V(x, y)|$  klein verglichen mit  $\hbar\omega_c$  ist. Wir nehmen im folgenden an, daß  $V(x, y)$  ein Potential ist, daß die Störstellen beschreibt. Es handelt sich dabei typischerweise um ein glattes Zufallspotential mit zufällig verteilten Minima und Maxima von zufälliger Tiefe oder Höhe. Die Eigenzustände von  $H_0$  kann man über sich mittels eines Variationsverfahrens berechnet vorstellen. Der Grundzustand ist dann ein Zustand, der in der Nähe der tiefsten Minima lokalisiert ist. Ebenso wird der am höchsten angeregte Zustand in der Nähe der Maxima lokalisiert sein. Generell ergibt sich das folgende Bild:

- Die Entartung des Landauniveaus wird aufgehoben.
- Die Zustände, die weit von der ursprünglichen Energie entfernt sind, sind lokalisiert.
- Da ein gefülltes Landauniveau den Beitrag  $\frac{e^2}{h}$  zur Leitfähigkeit liefert, muß es in der Mitte des Landauniveaus mindestens einen Zustand geben, der nicht lokalisiert ist und diesen Beitrag zur Leitfähigkeit liefert.

Eine Veränderung des Füllfaktors führt zu einer Veränderung der Fermienergie. Befindet sich die Fermienergie im Bereich der lokalisierten Zustände, so treten keine Streuungen auf, da die den Strom tragenden Zustände alle besetzt sind. Die Leitfähigkeit ist also die eines vollbesetzten (oder mehrerer vollbesetzter) Landauniveaus. Bewegt sich die Fermienergie durch einen Bereich ausgedehnter Zustände, so treten Streuungen auf und die Leitfähigkeit  $\sigma_{xx}$  verschwindet nicht. Im Experiment wird typischerweise das Magnetfeld variiert. Das führt zu einer Verschiebung der Landauniveaus gegenüber der Fermienergie und zu einer Änderung der Zustandsdichte  $n_B$  in den Landauniveaus, im übrigen sind die Argumente für das Auftreten der Plateaus die gleichen. Diese Argumente lassen sich selbstverständlich mathematisch präziser formulieren.

## 4.2.2 Laughlins Eichargument

Wir wählen das Vektorpotential

$$A_x = -By + \frac{\Phi}{2\pi R}, \quad A_y = 0$$

so daß der Hamiltonoperator

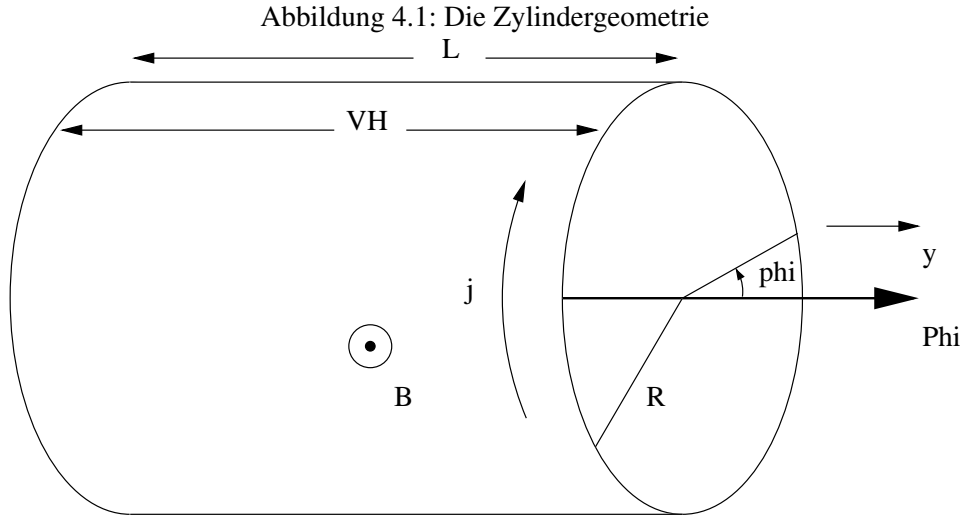
$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB}{\hbar c} y + \frac{e\Phi}{2\pi R \hbar c} \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] + V(x, y)$$

lautet. Zusätzlich wählen wir periodische Randbedingungen in  $x$ -Richtung, also

$$x = \varphi R$$

mit  $0 < \varphi \leq 2\pi$ . Das entspricht einer Zylindergeometrie: Das Potential  $V(x, y)$  enthält die Hallspannung  $V_H$ , die in  $y$ -Richtung angelegt ist, ein Randpotential, das auch nur von  $y$  abhängt, und ein Potential von den Streuzentren. Für  $V = 0$  sind die Energieniveaus wie oben durch  $n$ , den Landauniveauindex, charakterisiert. Innerhalb eines Landauniveaus können die Zustände mit einem weiteren Index durchnummeriert werden. Die Einteilchenzustände sind

$$\psi_{n,k} \propto \exp(ikx) H_n(y/l_B - l_B(k + \frac{e\Phi}{2\pi R \hbar c})) \exp(-(y - l_B^2(k + \frac{e\Phi}{2\pi R \hbar c}))/2l_B^2)$$



wobei  $k = l/R$ ,  $l \in \mathbb{Z}$  wegen der periodischen Randbedingungen.

$$\psi_{n,l} \propto \exp(2\pi i l \varphi) H_n \left( \frac{y}{l_B} - \frac{l_B}{R} \left( l + \frac{e\Phi}{hc} \right) \right) \exp \left( -\frac{1}{2} \left( \frac{y}{l_B} - \frac{l_B}{R} \left( l + \frac{e\Phi}{hc} \right) \right)^2 \right)$$

Die Energieeigenwerte hängen nicht von  $l$  und  $\Phi$  ab. Wir führen jetzt ein Potential  $V_0(y)$  ein, das die Randbedingungen festlegt. Es ist weiterhin möglich, die Zustände durch  $n$  und  $l$  zu kennzeichnen, jetzt hängen aber die Energien zusätzlich von  $l$  und  $\Phi$  ab. Die Abhängigkeit von  $E_{n,l}(\Phi)$  ist aber nicht beliebig. Die  $x$ -Abhängigkeit der Wellenfunktionen ändert sich nicht und der effektive Hamiltonoperator hängt nur von  $l + \frac{e\Phi}{hc}$  ab, es gilt also  $E_{n,l}(\Phi) = E_n(l + e\Phi/hc)$  und damit

$$E_{n,l} \left( \Phi + \frac{hc}{e} \right) = E_{n,l+1}(\Phi)$$

$V_0(y)$  ist lediglich am Rand merklich von 0 verschieden. Die Zustände werden also in  $y$ -Richtung weiterhin nahe  $\frac{l_B}{R} \left( l + \frac{e\Phi}{hc} \right)$  lokalisiert sein und lediglich für Zustände, für die diese Größe in der Nähe des Randes liegt, wird die Energie merklich von  $\hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$  abweichen. Der Beitrag eines Zustands zum Strom (in  $x$ -Richtung) ist

$$I_{n,l} = -c \frac{dE_{n,l}(\Phi)}{d\Phi}$$

Nur die Zustände am Rand haben eine wesentliche  $\Phi$ -Abhängigkeit. Sie liefern einen Beitrag zum Strom, und zwar mit jeweils festem Vorzeichen. Der Gesamtstrom ergibt sich als Summe über alle Beiträge  $I_{n,l}$  gewichtet mit der Besetzungszahl. Mittelt man über  $\Phi$  so erhält man

$$\begin{aligned} I &= \frac{e}{h} \int_0^{hc/e} d\Phi \sum_{n,l} n_{n,l} I_{n,l} \\ &= -\frac{e}{h} \sum_{n,l} n_{n,l} (E_{n,l}(hc/e) - E_{n,l}(0)) \\ &= -\frac{e}{h} \sum_{n=0}^{\nu} (E_{n,l_{\max}}(0) - E_{n,l_{\min}}(0)) \\ &= \frac{e^2}{h} \nu V_H \end{aligned}$$

Damit ist  $\sigma_H = I/V_H$  ein ganzzahliges Vielfaches von  $e^2/h$ . Dieses Argument gilt auch dann noch, wenn Unordnung im System vorhanden ist. Die Energien  $E_{n,l}(\Phi)$  hängen dann nicht mehr nur von  $l + \frac{e\Phi}{hc}$  ab, sondern separat von  $l$  und  $\Phi$ . Die Periodizität des Hamiltonoperators in  $\Phi$  bleibt aber bestehen und damit auch das

obige Argument. Durch Unordnung werden zwar Zustände lokalisiert, aber es muß immer Strom-tragende Zustände geben. Nach der obigen Argumentation ist klar, daß der Strom im wesentlichen durch die Randzustände getragen wird.

Experimentelle Systeme haben immer einen Rand. Der Rand kann durch ein entsprechendes Randpotential beschrieben werden. Am Rand werden die sonst flachen Landauniveaus nach oben verbogen. Die Entartung der Niveaus wird also durch den Rand aufgehoben. Wir haben gesehen, daß die Randzustände den Strom tragen. Sie sind parallel zum Rand ausgedehnt. Das obige Argument basierte zwar auf periodischen Randbedingungen in  $x$ -Richtung, man kann aber auch in  $x$ -Richtung einen Rand einführen. Setzt man voraus, daß die Randzustände den Strom tragen, so erhält man pro Kanal einen Beitrag  $e^2/h$  zur Leitfähigkeit.

### 4.3 Der gebrochenzahlige Quantenhalleffekt

Der gebrochenzahlige Quantenhalleffekt wurde von Tsui, Störmer und Gossard Ende 1981 entdeckt und in Phys. Rev. Lett. **48**, 1559 (1982) publiziert. Erste theoretische Arbeiten folgten sofort, der Durchbruch kam aber erst mit Laughlins Arbeit (Phys. Rev. Lett. **50**, 1395 (1983)), in der als Grundzustand des Vielelektronensystems eine Quantenflüssigkeit vorgeschlagen wurde, die gebrochenzahlig geladene Anregungen hat. Diese ursprünglichen Vorstellungen sollen hier zunächst vorgestellt werden.

#### 4.3.1 Wellenfunktionen

##### Unterstes Landauniveau

Für den gebrochenzahligen Quantenhalleffekt ist die Wechselwirkung der Elektronen von entscheidender Bedeutung. Der Hamiltonoperator des Systems ist

$$H = \sum_j \left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_j + \frac{e}{c} \vec{A}_j \right)^2 + V_1(\vec{r}_j) \right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} V(|\vec{r}_j - \vec{r}_k|)$$

$V_1(\vec{r})$  ist dabei ein Einteilchenpotential, daß im einfachsten Fall einen neutralisierenden, homogenen Hintergrund beschreibt, sonst eventuell noch Streuung an Störstellen. Für die Wechselwirkung  $V(|\vec{r}|)$  wurde ein isotroper Ansatz gewählt. Ein typisches Beispiel wäre etwa eine Coulombwechselwirkung

$$V(|\vec{r}|) = \frac{e^2}{|\vec{r}|}$$

oder eine abgeschirmte, kurzreichweitige Wechselwirkung. Da sich die Elektronen in einem starken Magnetfeld bewegen, ist der Spin in Magnetfeldrichtung polarisiert und wir können ihn in der folgenden Diskussion weglassen, solange der Füllfaktor  $\nu \leq 1$  ist. Für das Vektorpotential wählen wir im folgenden eine symmetrische Eichung

$$\vec{A} = \frac{B}{2}(y\vec{e}_x - x\vec{e}_y)$$

$m$  ist eine effektive Masse, die vom Material abhängt. Für GaAs-Heterostrukturen ist  $m = 0.07m_e$  ein typischer Wert. Ich nehme im folgenden an, daß  $V_1$  nur eine homogene Hintergrundladung beschreibt, also konstant ist. Der Einteilchen-Hamiltonoperator ist dann

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \hbar \omega_c \left[ \left( -il_B \frac{\partial}{\partial x} - \frac{y}{2l_B} \right)^2 + \left( -il_B \frac{\partial}{\partial y} + \frac{x}{2l_B} \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \hbar \omega_c [z^* z + z^* \partial_{z^*} - z \partial_z - \partial_z \partial_{z^*}] \end{aligned}$$

wobei

$$z = \frac{1}{2l_B}(x - iy), \quad z^* = \frac{1}{2l_B}(x + iy)$$

$$\partial_z = l_B \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \partial_{z^*} = l_B \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

Definiert man

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (z^* - \partial_z)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (z + \partial_{z^*})$$

mit  $[a, a^\dagger] = 1$ , so gilt

$$H = \hbar \omega_c (a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

Eine Wellenfunktion im untersten Landauniveau erfüllt die Bedingung

$$a\psi = 0$$

$$z\psi + \partial_{z^*}\psi = 0$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi = f(z) \exp(-z^*z)$$

$f(z)$  ist dabei eine beliebige analytische Funktion von  $z$ . Im folgenden wollen wir annehmen, daß  $\hbar \omega_c$  die größte Energieskala ist und daß  $\nu < 1$  gilt. Man kann dann den Hilbertraum auf das unterste Landauniveau beschränken. Eine allgemeine Wellenfunktion von  $N_e$  Elektronen im untersten Landauniveau hat die Form

$$\Psi = f(z_1, \dots, z_{N_e}) \exp\left(-\sum_i z_i^* z_i\right)$$

wobei  $f$  wiederum eine analytische Funktion ist.

### Konstruktion einer Einteilchenbasis und Drehimpuls

Bevor wir einen Ansatz für den Grundzustand machen, wollen wir zunächst eine geeignete Einteilchenbasis finden. Da der Hamiltonoperator rotationsinvariant ist, kann man Einteilchenzustände suchen, die Eigenzustände des Drehimpulsoperators ist. Es gilt

$$\begin{aligned} L_z &= ix \frac{\partial}{\partial y} - iy \frac{\partial}{\partial x} \\ &= z \partial_z - z^* \partial_{z^*} \end{aligned}$$

$$L_z f(z) \exp(-z^*z) = z f'(z) \exp(-z^*z)$$

Die Eigenzustände zu  $L_z$  sind also

$$\psi_m = z^m \exp(-z^*z)$$

mit Eigenwert  $m$ . Die  $\psi_m$  sind ganz offensichtlich vollständig und als Eigenfunktionen von  $L_z$  orthogonal. Damit ist  $\{\psi_m, m = 1, \dots, \infty\}$  eine Basis von Einteilchenzuständen.  $|\psi_m(z, z^*)|^2$  ist rotationsinvariant und hat ein Maximum bei  $|z|^2 = m$ . Um in einem endlichen System zu rechnen, beschränkt man den Hilbertraum auf  $m \leq M$ , der Füllfaktor ist dann  $\nu = N_e/M$ . Dies entspricht einer Scheibengeometrie mit einem weichen Rand.

Eine Vielteilchenwellenfunktion

$$\Psi = f(z_1, \dots, z_{N_e}) \exp\left(-\sum_i z_i^* z_i\right)$$

ist dann eine Eigenfunktion von  $L_z$ , wenn  $f(z_1, \dots, z_{N_e})$  ein homogenes Polynom in den Variablen ist.

## Laughlins Ansatz für den Grundzustand

Durch die Projektion auf das unterste Landauniveau spielt für die Energie nur noch die Wechselwirkung eine Rolle. Die Elektronen sollten also möglichst voneinander Abstand halten. Ein Ansatz für eine Grundzustandswellenfunktion, die das in geeigneter Weise berücksichtigt, und die beispielsweise für flüssiges He<sub>3</sub> recht erfolgreich war, ist der Jastrowansatz, der von der Form

$$\prod_{j < k} f(\vec{r}_j - \vec{r}_k)$$

ist. In unserem Fall bedeutet dies

$$\Psi = \prod_{j < k} f(z_j - z_k) \exp\left(-\sum_i z_i^* z_i\right)$$

Diese Wellenfunktion soll

- Eigenfunktion von  $L_z$  sein. Also muß  $f(z) \propto z^m$  sein.
- antisymmetrisch gegenüber Vertauschung der Variablen sein. Also ist  $m$  ungerade.

Es gilt also

$$\Psi = \Psi_m = \prod_{j < k} (z_j - z_k)^m \exp\left(-\sum_i z_i^* z_i\right)$$

$\Psi_m$  ist eine Wellenfunktion zu dem Drehimpuls  $L_z = mN_e(N_e - 1)/2$ . Die höchste Potenz, mit der ein Argument  $z_j$  vorkommt, ist  $M = m(N_e - 1)$ . Der Füllfaktor ist also  $\nu = 1/m$ . Damit hat diese Wellenfunktion keinen freien Parameter mehr: Aus dem ursprünglichen variationellen Ansatz ist durch die notwendigen Einschränkungen eine feste Wellenfunktion geworden. Wenn der Jastrowansatz gewählt wird, ist damit der Ansatz für den Grundzustand fest.

Um zu klären, ob diese Wellenfunktion ein guter Ansatz für den Grundzustand des Hamiltonoperators ist, kann man verschiedene Wege einschreiten. Für kleine Systeme mit wenigen Teilchen läßt sich der Hamiltonoperator direkt diagonalisieren und man kann den Überlapp des wahren Grundzustands mit dem Laughlinzustand  $\Psi_m$  bestimmen. Der Überlapp von  $\Psi_m$  mit dem wahren Grundzustand hängt natürlich von der Wechselwirkung ab. Er wird umso besser, je kurzreichweitiger die Wechselwirkung ist. Für die Coulombwechselwirkung beträgt er etwa 99% pro Teilchen. Diese Rechnungen können aber nur mit bis zu 7 Elektronen für  $\nu = 1/3$  durchgeführt werden. Eine zweite Frage ist, wie die Wellenfunktion von den Randbedingungen abhängt. Wir kommen auf diesen Punkt später zurück, man kann sich aber davon überzeugen, daß man auch für andere Randbedingungen eine entsprechende Wellenfunktion konstruieren kann. Eine dritte Frage ist, ob die Wellenfunktion in einem bestimmten Limes der exakte Grundzustand ist. Um das zu klären, betrachten wir eine kurzreichweitige Wechselwirkung  $V(r)$ . Der möglichst kurzreichweitige Ansatz wäre  $V(r) = V_0 \delta(r)$ . Diese Wechselwirkung liefert aber keinen Beitrag, da aufgrund des Pauliprinzips je zwei Elektronen nicht am gleichen Ort sitzen können. Der nächst kurzreichweitigere Ansatz ist

$$V(r) = V_2 \nabla^2 \delta(r)$$

Man kann zeigen, daß  $\Psi_m$  in diesem Fall ein exakter Grundzustand ist. Wir kommen gleich auf diesen Punkt zurück. Man sieht also, daß  $\Psi_m$  offenbar ein guter Ansatz für den wahren Grundzustand ist und die Physik des Problems mit diesem Zustand gut beschrieben wird.

## Eigenschaften von $\Psi_m$

Betrachten wir zunächst den Fall  $m = 1$ .

$$\Psi_1 = \prod_{j < k} (z_j - z_k) \exp\left(-\sum_i z_i^* z_i\right)$$

Der Faktor  $\prod_{j<k}(z_j - z_k)$  ist eine sogenannte Vandermonde Determinante, es gilt

$$\prod_{j<k}(z_j - z_k) = (-1)^{N_e(N_e-1)/2} \sum_P (-1)^P \prod_i z_{P(i)}^i$$

Bis auf einen Normierungsfaktor ist  $\Psi_1$  also die Slaterdeterminante der  $N_e$  Einteilchenzustände  $\psi_m$ ,  $m = 1, \dots, N_e$ . Damit ist  $\Psi_1$  (trivialerweise) der exakte Grundzustand zu  $v = 1$ .

Wenden wir uns nun generell  $\Psi_m$  zu.

$$|\Psi_m|^2 = \exp(-\beta \phi_m(z_1, \dots, z_{N_e}))$$

ist die Verteilungsfunktion für die Elektronen, sie kann als klassische Verteilungsfunktion eines klassischen Gases mit einer freien Energie  $\phi(z_1, \dots, z_{N_e})$  interpretiert werden. Wählt man  $\beta = 2/m$ , so gilt

$$\phi_m(z_1, \dots, z_{N_e}) = -m^2 \sum_{j<k} \ln |z_j - z_k| + m \sum_{l=1}^{N_e} |z_l|^2$$

Das ist die freie Energie eines klassischen, zweidimensionalen Einkomponentenplasmas mit einer Ladung  $m$ . Für ein klassisches, zweidimensionales Einkomponentenplasma ist

$$\phi_m(z_1, \dots, z_{N_e}) = -e^2 \sum_{j<k} \ln |z_j - z_k| + \frac{\pi}{2} \rho_0 e \sum_{l=1}^{N_e} |z_l|^2$$

Zwischen den Teilchen wirkt eine zweidimensionale Coulombabstoßung, der zweite Term entspricht der Wechselwirkung mit einer neutralisierenden, homogenen Hintergrundladung  $\rho$ . Hier gilt also

$$\rho_0 = \frac{2}{\pi}$$

Da das Plasma neutral ist, ist die Teilchendichten

$$\rho = \frac{2}{\pi m}$$

Das zweidimensionale Einkomponentenplasma ist sehr gut untersucht. Es verhält sich für nicht zu große  $m$  wie eine inkompressible Flüssigkeit. Die Dichte ist homogen. Die wesentliche, interessante Größe, die die Korrelation beschreibt, ist die Paarkorrelationsfunktion. Sie ist durch

$$g(z_1, z_2) = \frac{N_e(N_e - 1) \int d^2 z_3 \dots d^2 z_{N_e} |\Psi_m|^2}{\rho^2 \int d^2 z_1 \dots d^2 z_{N_e} |\Psi_m|^2}$$

und hängt für ein translationsinvariantes, isotropes System nur von  $r = |z_1 - z_2|$  ab. Für große Abstände  $r$  geht diese Funktion gegen 1. Für kleine Abstände verschwindet sie  $\propto r^{2m}$ . Die Wechselwirkungsenergie ist durch

$$E_{WW} = \frac{1}{2} \int d^2 z g(|z|) V(|z|)$$

gegeben. Berücksichtigt man den homogenen, neutralisierenden Hintergrund, der durch  $V_1$  gegeben ist, so erhält man für die Gesamtenergie

$$E = \frac{1}{2} \int d^2 z (g(|z|) - 1) V(|z|)$$

Für eine kurzreichweitige Wechselwirkung  $V(z) = V_2 \nabla^2 \delta(z)$  ist  $E = E_{WW}$ . Man erkennt sofort, daß in diesem Fall  $E = 0$  gilt, falls  $g(r)$  schneller als  $r^2$  verschwindet. Da  $E$  außerdem nichtnegativ ist, ist  $\Psi_m$  also ein Grundzustand. Man kann weiter zeigen, daß  $\Psi_m$  in diesem Fall für  $m = 3$  auch eindeutig ist. Für  $m = 5$  erhält man die Eindeutigkeit, wenn man  $V(z) = (V_2 \nabla^2 + V_4 (\nabla^2)^2) \delta(z)$  setzt. Entsprechendes gilt für höhere Werte von  $m$ .

Das erklärt die obige Behauptung, daß der Laughlinzustand für kurzreichweitige Wechselwirkungen der exakte Grundzustand ist.

Die Funktion  $g(r)$  hat die für eine inkompressible Flüssigkeit typischen Charakteristika. Sie verschwindet schnell für  $r = 0$ , hat ein Maximum bei einem charakteristischen Wert von  $r$  und geht ohne starke Oszillationen gegen 1 für große  $r$ . Für einen Kristall oszilliert  $g(r)$ . Für  $m = 1$  kann  $g(r)$  exakt berechnet werden, es gilt

$$g(r) = 1 - \exp(-r^2)$$

Die Wellenfunktionen  $\Psi_m$  beschreiben also einen Zustand, der einer inkompressiblen Flüssigkeit entspricht. Diese Zustände werden deshalb als inkompressible Quantenflüssigkeit beschrieben. Ein inkompressible Quantenflüssigkeit sollte auch durch eine nicht verschwindende Energielücke vom übrigen Spektrum getrennt sein. Man muß also als nächstes die Anregungen untersuchen.

### 4.3.2 Elementare Anregungen

Wir benutzen wieder das Quasiteilchenkonzept zur Beschreibung der elementaren Anregungen. Generell kann man damit (Quasi-) Teilchen-Loch-Anregungen konstruieren. Sind  $\varepsilon_p$  und  $\varepsilon_h$  die Energien des Quasiteilchens und des Quasilochs, dann ist  $\varepsilon = \varepsilon_p + \varepsilon_h$  eine Anregungsenergie. Im vorliegenden Fall kann man Quasiteilchen und -löcher erzeugen, indem man statt  $N_e$  den maximalen Einteilchen-Drehimpuls  $M$  ändert. Betrachten wir zunächst eine Erhöhung von  $M$ , das entspricht einem Quasiloch.

Für eine gegebene Wellenfunktion  $\Psi$  kann man  $M$  bestimmen, indem man alle Teilchenkoordinaten bis auf eine festhält und die Anzahl der Nullstellen von  $\Psi$  für diese eine Koordinate bestimmt. Ein Erhöhung von  $M$  entspricht also einer Erhöhung der Zahl der Nullstellen. Die einfachste Möglichkeit, einen Zustand mit  $M + 1$  Nullstellen zu konstruieren, ist

$$\Psi_m^{(-)} = S_{z_0} \Psi_m$$

$$S_{z_0} = \prod_{j=1}^{N_e} (z_j - z_0)$$

Die Wellenfunktion  $S_{z_0}^m \Psi_m$  entspricht einer Wellenfunktion mit Füllfaktor  $1/m$  und  $N_e + 1$  Elektronen, wobei ein Elektron am Ort  $z_0$  entfernt wurde.  $\Psi_m^{(-)}$  entspricht also einer Entfernung eines Drittelelektrons. Das Quasiloch, daß durch  $S_{z_0}$  am Ort  $z_0$  erzeugt wird, hat also die Ladung  $e/m$ . Das entsprechende gilt, wenn man das klassische, zweidimensionale Einkomponentenplasma betrachtet.  $S_{z_0}$  entspricht der Addition von  $-m \sum_j \ln |z_j - z_0|$  zu  $\phi_m$ , und damit einer fehlenden Ladung 1, während die Plasmateilchen die Ladung  $m$  haben.

Wegen der Translationsinvarianz hängt die Energie des Quasilochs nicht von  $z_0$  ab. Man kann die Energie des Quasiteilchens bestimmen, indem man entweder kleine Systeme numerisch diagonalisiert oder den Erwartungswert mit  $\Psi_m^{(-)}$  bestimmt, was auch wieder nur numerisch möglich ist. Man erhält als Energie etwa  $0.025 e^2 / l_B$ . Bei typischen Feldstärken von  $B \approx 10 - 20 T$  entspricht das einer Temperatur von  $4 - 8 K$  und damit der experimentellen Beobachtung, daß der gebrochenzahlige Quantenhalleffekt nur bei Temperaturen unterhalb von etwa  $1 K$  beobachtet wird.

Wellenfunktionen für Quasiteilchen sind etwas schwieriger zu konstruieren. Laughlins Vorschlag war

$$\Psi_m^{(+)} = \exp\left(-\sum_j |z_j|^2\right) \prod_{j=1}^{N_e} \frac{\partial}{\partial z_j} \prod_{k < l} (z_k - z_l)^m$$

für ein Quasiteilchen am Ursprung. Die numerischen Rechnungen zeigen, daß die Quasiteilchen-Wellenfunktion  $\Psi_m^{(+)}$  weniger gute Approximationen als die Quasiloch-Wellenfunktion liefern. Die grundlegende physikalische Vorstellung, die mit diesen Funktionen verbunden ist, ist aber die gleiche.

Die Anregungsenergie für Quasiteilchen und -löcher ist endlich, das System verhält sich also tatsächlich wie eine inkompressible Quantenflüssigkeit. Ähnlich wie im Fall des ganzzahligen Effekts kann man nun argumentieren, daß der Zustand  $\Psi_m$  einen Beitrag  $e^2 / hm$  zur Leitfähigkeit liefert, da der Füllfaktor  $\nu = 1/m$  ist. Eine

Variation des Magnetfelds führt zu einer Variation des Füllfaktors, die für kleine Änderungen durch ein Hinzu-fügen von Quasiteilchen oder -löchern beschrieben werden kann. Diese Quasiteilchen oder -löcher sind entartet und können daher leicht durch Störstellen lokalisiert werden. Sie liefern also keinen Beitrag zur Leitfähigkeit, so daß sich ein Plateau in der Leitfähigkeit bei  $e^2/hm$  bildet.

### 4.3.3 Periodische Randbedingungen

Die bisherigen Ideen lassen sich formalisieren, wenn man ein System mit periodischen Randbedingungen verwendet. Die Behandlung führt zu einigen Besonderheiten, projektive Darstellungen von Gruppen, doppelt-periodische Funktionen, etc.. Deshalb gehe ich darauf nicht im Detail ein. Man kann aber zeigen, daß sich Quasiteilchen oder -löcher tatsächlich wie Teilchen verhalten, und das lokalisierte Eigenzustände, wie sie bei Anwesenheit von Unordnung auftreten, nicht zum Strom beitragen. Auf diese Weise erhält man eine erste Erklärung für die Plateaus.

## 4.4 Universalität

### 4.4.1 Klassische Elektrodynamik in Quantenhallsystemen.

In diesem Abschnitt geht es um die klassische Elektrodynamik eines zweidimensionalen Elektronensystems mit einem Leitfähigkeitstensor der Form

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_H \\ \sigma_H & 0 \end{pmatrix} = \sigma_H \varepsilon$$

wobei  $\varepsilon = (\varepsilon_{\alpha\beta})_{\alpha,\beta=1,2}$  mit  $\varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = 1$ ,  $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = 0$ . Die Stromdichte ist im folgenden  $\vec{j} = (j^1, j^2)$ , die Ladungsdichte sei  $j^0$ . Das elektrische Feld ist  $\vec{E} = (E_1, E_2)$  und wir führen einen Feldstärketensor  $F$  ein, der antisymmetrisch mit  $F_{0\alpha} = E_\alpha$ ,  $F_{12} = -B$ .  $B$  ist das magnetische Feld, das senkrecht auf der Fläche steht, in der sich die Elektronen bewegen.  $x^0 = ct$  und  $x^1, x^2$  sind die Raumkoordinaten,  $x = (x^0, x^1, x^2)$ .

$$\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x^\alpha}$$

Die Stromdichte ist durch

$$j^\alpha(x) = \sigma_H \varepsilon^{\alpha\beta} E_\beta(x)$$

gegeben. Es gilt die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\alpha j^\alpha = 0$$

Das Faradaysche Gesetz hat die Form

$$\frac{\partial B}{\partial x^0}(x) + \nabla \times \vec{E}(x) = 0$$

oder

$$\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \partial_\alpha F_{\beta\gamma}(x) = 0$$

Aus der Kontinuitätsgleichung und dem Faradayschen Gesetz folgt

$$\sigma_H \partial_0 B = -\sigma_H \nabla \times \vec{E} = -\nabla \cdot \vec{j} = \partial_0 j^0$$

und damit

$$j^0(x) = \sigma_H B(x)$$

Man kann diese Gleichung mit der Materialgleichung für  $\vec{j}$  zusammenfassen zu

$$J_{\alpha\beta}(x) = \sigma_H F_{\alpha\beta}(x)$$

wobei

$$J_{\alpha\beta}(x) = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} j^\gamma(x)$$

$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$  ist der vollständig antisymmetrische Tensor. Die Kontinuitätsgleichung hat jetzt die Form

$$\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \partial_\alpha J_{\beta\gamma}(x) = 0$$

Damit muß  $\sigma_H$  lokal unabhängig von  $x$  sein! Linien, auf denen sich  $\sigma_H$  ändert, müssen einen Strom tragen. Die Kontinuitätsgleichung impliziert, daß man für  $J_{\alpha\beta}$  ebenso wie für  $F_{\alpha\beta}$  ein Vektorpotential einführen kann:

$$F_{\alpha\beta} = \partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha$$

$$J_{\alpha\beta} = \partial_\alpha a_\beta - \partial_\beta a_\alpha$$

und es gilt

$$\partial_\alpha (a_\beta - \sigma_H A_\beta) - \partial_\beta (a_\alpha - \sigma_H A_\alpha) = 0$$

Diese Beziehung kann aus der Wirkung

$$S_{CS}(a - \sigma_H A) = \int_{R \times \Omega} d^3x \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} (a_\alpha - \sigma_H A_\alpha) \partial_\beta (a_\gamma - \sigma_H A_\gamma)$$

hergeleitet werden.  $S_{CS}$  heißt Chern-Simons Wirkung. Diese Wirkung ist unabhängig von der Wahl der Koordinaten und benötigt keine Metrik.

Der Status der bisher durchgeführten Überlegungen ist der folgende: Während die Kontinuitätsgleichung wegen der Ladungserhaltung exakt gilt, ist die Materialgleichung  $J = \sigma_H F$  experimentell nur auf großen Zeit- und Längenskalen experimentell bestätigt. Man kann daher nicht ausschließen, daß zu der Wirkung  $S_{CS}$  noch ein Term  $S_I$  addiert werden muß, der allerdings die Parität erhält und zeitungkehrinvariant ist. Es gilt also

$$S(a, A) = S_{CS}(a - \sigma_H A) + S_I(a, A)$$

wobei aber  $S_{CS}$  die Eigenschaften auf großen Skalen bestimmt.

#### 4.4.2 Quantisierung

Die Stromdichte  $j$  ist ein quantenmechanischer Operator (genauer eine Operatorwertige Verteilung), folglich muß auch das Vektorpotential  $a$  ein Operator sein. Das gleiche gilt natürlich auch für  $A$ , für unsere Fälle wird es aber genügen,  $A$  als klassisches Feld zu betrachten. Wir haben also die Aufgabe, die Wirkung  $S(a, A)$  zu quantisieren, wobei  $A$  als klassisches, äußeres Feld behandelt wird. Dies geschieht am einfachsten mit Hilfe eines Pfadintegrals. Wir gehen dazu zu euklidischen Pfadintegralen über und setzen

$$a_0 \rightarrow -ia_0, \quad A_0 \rightarrow -iA_0, \quad \partial_0 \rightarrow -i\partial_0, \quad dx^0 \rightarrow idx^0$$

Sei weiter  $A_c$  das Vektorpotential eines konstanten, äußeren Magnetfeldes und  $A$  das Vektorpotential von lokalen Quellen,  $\tilde{A} = A_c + A$ . Das euklidische funktionale Maß  $dP_A$ , das den Grundzustand des Systems mit der Wirkung  $S$  beschreibt, ist dann durch

$$dP_A(a) := Z(A_c + A)^{-1} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S^E(a, A)\right) D[a]$$

gegeben, wobei

$$S^E(a, A) = -i\kappa S_{CS}(a - \sigma_H A) + S_I(a, A)$$

$$D[a] = \prod_x \prod_{\alpha=0}^2 da_\alpha(x)$$

und  $Z(A_c + A)$  ist die Zustandssumme, die so gewählt ist, daß  $\int dP_A(a) = 1$ . Die Wirkung  $S^E(a, A)$  müßte eigentlich aus einer Vielteilchentheorie hergeleitet werden. Das ist aber bisher nicht geschehen. Man kann aber aus der Struktur der Wirkung und aus allgemeinen Überlegungen schon eine Reihe von Phänomenen ableiten. Eine wesentliche Überlegung ist, daß  $Z(A_c + A)$  als (euklidische) Zustandssumme eines zweidimensionalen Elektronensystems unter lokalen Eichtransformationen invariant sein muß. Eine weitere Bedingung, die erfüllt sein muß, ist daß die Elektronenwellenfunktionen eindeutig sein müssen. Beide Bedingungen zusammen legen  $\sigma_H$  auf die Werte

$$\sigma_H = \pm \frac{1}{2l+1} \frac{e^2}{h}$$

fest, siehe J. Fröhlich, T. Kerler, *Universality in Quantum Hall Systems*. Nucl. Phys. B **354**, 369 (1991). Die Autoren zeigen weiter, daß sich diese Formel verallgemeinern läßt, wenn man mehrere Ströme  $J^{(i)}$  zuläßt, so daß für jeden dieser Ströme die Beziehung

$$J^{(i)} = \sigma_H^{(i)} F$$

gilt. Damit lassen sich die experimentell beobachteten Werte von  $\sigma_H$  erklären.