

2.6 Berechnung v. Zustandssummen

stellt eine Anwendung des LCT (linked cluster Theorem) dar, zur Erinnerung:

$Z = \text{sp} (e^{-\beta H})$ ist die Zustandssumme im kanonischen Ensemble (Temperaturbad)

$$\beta = \frac{1}{kT}, \quad H = H_0 + H_W$$

H_0 - freie Teilchen / H_W - Wechselwirkung

um eine Anwendung v. LCT mgl. zu machen, wird Z umgeschrieben

$$Z = \text{sp} (e^{-\beta H}) = \text{sp} \left(e^{-\beta H_0} T_{\beta} e^{-\int_0^{\beta} d\beta' e^{\beta' H_0} H_W e^{-\beta' H_0}} \right)$$

folgt aus Aufgabe 15, Zettel 8,

man beachte die Analogie zw. Zeit und inverser Temperatur

$$it \leftrightarrow \beta$$

Ausatz ist wesentlich geschickter als $e^{-\beta H} = \sum_u \frac{(-\beta)^u}{u!} (H_0 + H_w)^u$,

weil die T_β -Reihe direkt als Störwertreihe in

H_w steht und nicht in H .

H_0 ist ja kein Start im Schrödingerbild

$$e^{\beta' H_0} H_w e^{-\beta' H_0} \equiv H_w' \longrightarrow H_w(\beta')$$

ist eine Art WW-Bild mit $\beta' = it/\hbar$

d.h. alle Formeln zur LGT sind okay, solange

wir auf $\beta' \leftrightarrow it/\hbar$ beim direkten Berechnen von

Diagrammen.

$$\frac{Z}{Z_0} = \text{sp} \left(\frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0} T_\beta \exp \left\{ - \int_0^\beta d\beta' H_w(\beta') \right\} \right)$$

$$Z_0 \equiv \text{sp} (e^{-\beta H_0}) \text{ sei bekannt.}$$

Wenn man diese Reihe rechts extrahiert:

$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_u \frac{(-1)^u}{u!} \int_0^\beta d\beta_1 \cdots \int_0^\beta d\beta_u \langle T H_w(\beta_1) \cdots H_w(\beta_u) \rangle$$

Das Verhältnis von wechselwirkender und freier Zustandssumme kann also über das LCT berechnet werden:

$$\frac{Z}{Z_0} = e^{\sum_e u_e}, \quad u_e = \frac{(-1)^e}{e!} \int_0^\beta d\beta_1 \cdots \int_0^\beta d\beta_e \langle T H_w(u_1) \cdots H_w(u_e) \rangle$$

am Ende dies folgt als Zeit
behandelte

β_i mit $i\hbar$ korrigieren, werden

Einsetzen der freien, weil

WW-Bild vorfalscht wurde

oft ist Energieverschiebung aufgrund einer WW wichtig:

$$E = -\partial_\beta \ln Z = -\partial_\beta \ln Z_0 - \partial_\beta \ln \left(e^{\sum_e u_e} \right)$$

↑
Gesamtenergie

↑
freier Anteil

↑
WW-Anteil $\equiv \Delta E$
bzgl. Vielteilchen-WW

Anwendungsbeispiel

Elektron-Phonon-WW in einem Band

$$H_W = \sum_{\alpha, k} g_{\alpha} a_k^{\dagger} a_{k+\alpha} (b_{\alpha}^{\dagger} + b_{-\alpha})$$

$$U_e = \frac{(-1)^e}{e} \int_0^{\beta} d\beta_1 \cdots \int_0^{\beta} d\beta_e \langle T_{\beta} H_W(\beta_1) \cdots H_W(\beta_e) \rangle$$

$$\underline{e=1} : \langle T_{\beta} H_W(\beta_1) \rangle = \text{sp} \left(\rho_0 \sum_{\alpha, k} g_{\alpha} a_k^{\dagger}(\beta_1) a_{k+\alpha}(\beta_1) (b_{\alpha}^{\dagger}(\beta_1) + b_{-\alpha}(\beta_1)) \right)$$

$= 0$, weil man eine ungeradzahlige Anzahl v. $b_{\alpha}, b_{\alpha}^{\dagger}$ hat

$$\underline{e=2} : \langle T_{\beta} H_W(\beta_1) H_W(\beta_2) \rangle =$$

mit Index 2

$$\left\langle T \left[\begin{array}{c} \uparrow \quad \phi \\ \bullet \\ \uparrow \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \quad \phi \\ \bullet \\ \uparrow \end{array} \right] \right\rangle = \begin{array}{c} k_1 \\ \bullet \\ k_1 + \alpha_1 \end{array} \text{---} \begin{array}{c} k_2 \\ \bullet \\ k_2 + \alpha_2 \end{array} + \begin{array}{c} k_1 \\ \bullet \\ k_1 + \alpha_1 \end{array} \text{---} \begin{array}{c} k_2 \\ \bullet \\ k_2 + \alpha_2 \end{array} + \begin{array}{c} k_1 \\ \bullet \\ k_1 + \alpha_1 \end{array}$$

$$\underbrace{\sum_{k_1, \alpha_1} a_{k_1}^+ a_{k_1 + \alpha_1} (b_{\alpha_1}^+ + b_{-\alpha_1}) g_{\alpha_1}}_{\text{alle von } \mathcal{B}_1}$$

$$\underbrace{\sum_{k_2, \alpha_2} a_{k_2}^+ a_{k_2 + \alpha_2} (b_{\alpha_2}^+ + b_{-\alpha_2}) g_{\alpha_2}}_{\text{alle von } \mathcal{B}_2}$$

Das sind die vier Diagramme, sind orbifold und ergeben unterschiedliche Ergebnisse \rightarrow muss in \mathcal{H}_2 laut LCT mitgenommen werden.

$$\frac{Z}{Z_0} = e^{\sum_e u_e} = \text{bis zur 2. Ordnung} =$$

$$= e^{0 + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2 \\ k_1, k_2}} g_{\alpha_1} g_{\alpha_2} \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \left[(u_{\alpha_1} + 1) e^{-\frac{t \omega_{\alpha_1} (\beta_1 - \beta_2)}{2}} + u_{\alpha_1} e^{-\frac{t \omega_{\alpha_1} (\beta_1 - \beta_2)}{2}} \right]}$$

$$\left(G_{k_1, k_2 + \alpha_1}(\beta_1 - \beta_1) G_{k_2, k_2 + \alpha_2}(\beta_2 - \beta_2) \right) \rightarrow$$

+ $G_{k_1, k_2 + \alpha_2}(\beta_2 - \beta_2) G_{k_1 + \alpha_1, k_2}(\beta_1 - \beta_2)$) Korrektur des Propagators
 die aufgrund der falschen Besch. des Propagators bzgl. WW und Zeit entsteht

$$= \exp \left(\frac{1}{2} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 \sum_{\alpha_1, k_1} g_{\alpha_1}^2 \left[(u_{\alpha_1} + 1) e^{-\frac{t \omega_{\alpha_1} (\beta_1 - \beta_2)}{2}} + u_{\alpha_1} e^{-\frac{t \omega_{\alpha_1} (\beta_1 - \beta_2)}{2}} \right] \right)$$

$$\cdot \left(\delta_{k_1, k_2 + \alpha_1} \cdot u_{k_1}^F e^{+t \omega_{\alpha_1} (\beta_1 - \beta_1)} \cdot \delta_{k_2, k_2 + \alpha_2} (1 - u_{k_2 + \alpha_2}^F) e^{-t \omega_{\alpha_2} (\beta_2 - \beta_2)} \right)$$

unendlich große Wellenlänge \leftarrow

beruht $\alpha_1 = 0$

Phonon

\rightarrow Term F nicht

$$+ \sum_{k_1, k_2 + \alpha_2} u_{k_1}^F e^{t \omega_k (\beta_1 - \beta_2)} \cdot \delta_{k_2 + \alpha_1, k_1} \cdot \left(1 - u_{k_2 + \alpha_1}^F \right) e^{-t \omega_{k_2 + \alpha_1} (\beta_1 - \beta_2)}$$

$$= \exp \left(\int_0^\beta dt \int_0^t ds \sum_{k, \alpha} g_\alpha^2 \left[(u_\alpha + 1) e^{-\omega_\alpha t s} + u_\alpha e^{\omega_\alpha t s} \right] \right)$$

$\alpha_1 = -\alpha_2$
 $k_1 = k$
 inds sum

$$u_k^F e^{\omega_k t s} \quad (1 - u_{k+\alpha}^F) e^{-\omega_{k+\alpha} t s}$$

$$\Delta E = -\partial_\beta \ln e^{\dots} = -\sum_{k, \alpha} \int_0^\beta ds \left[(u_\alpha + 1) e^{-\omega_\alpha t s} + u_\alpha e^{\omega_\alpha t s} \right] g_\alpha^2 \cdot (1 - u_{k+\alpha}^F) e^{-\omega_{k+\alpha} t s} \cdot u_k^F e^{\omega_k t s}$$

$$\Delta E = -\sum_{k, \alpha} g_\alpha^2 u_k^F (1 - u_{k+\alpha}) \cdot \left[\frac{(u_\alpha + 1) e^{t(\omega_k - \omega_{k+\alpha} - \omega_k) s}}{t(\omega_k - \omega_{k+\alpha} - \omega_k)} + \frac{u_\alpha e^{t(\omega_k - \omega_{k+\alpha} + \omega_k) s}}{t(\omega_k - \omega_{k+\alpha} + \omega_k)} \right]$$

over from β

↑
untere
Grenze

→ Das ist die Energiekorrektur die aus der Wechselwirkung v. El mit Phonon resultiert, bis $l=2$.

2 Beiträge: $u_{k+1} \rightarrow$ Phonon emission
 $u_k \rightarrow$ Phonon absorption

untere Grenze $S=0$ reproduziert den Polaron shift aus der Grundlagene VL, wenn $u_k \gg 1$ im Hochtemperaturfall, $u_{k+\alpha} \ll 1$.

$$\Delta E = \sum_{k,\alpha} g_\alpha^2 u_k^F u_\alpha \left(\frac{1}{\hbar(\omega_k - \omega_{k+\alpha} - \omega_\alpha)} + \frac{1}{\hbar(\omega_k - \omega_{k+\alpha} + \omega_\alpha)} \right)$$
$$= \sum_{k,\alpha} \frac{2 g_\alpha^2 \hbar \omega_\alpha u_k^F u_\alpha}{\left[(\omega_{k+\alpha} - \omega_k)^2 - \omega_\alpha^2 \right] \hbar^2}$$

$\hat{=}$ der bedingt Polaron shift.

