

Klausur: vorauss. H 010f

Bitte Web eintragungen beachten.

1.4.3. Berechnung des Elektronen propagators

beginnen uns bei der Berechnung zeitgeordneter
Produkte über Diagramme,

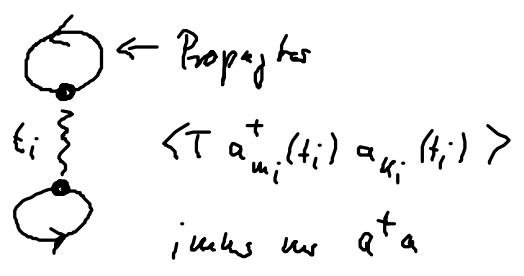
„binden“ von Indizes:

Contours-WW aus Reihe:

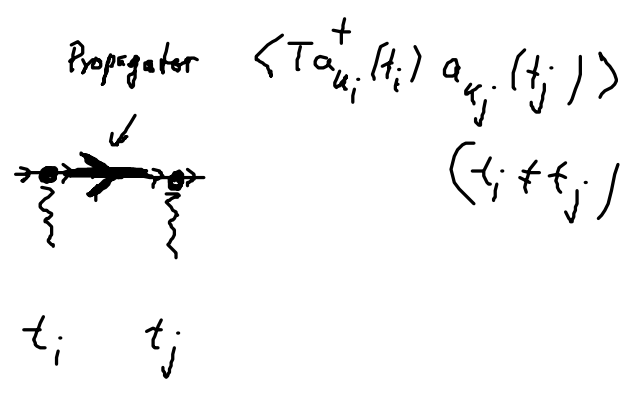
$$\begin{pmatrix} 1 \\ -it \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}^n \sum \dots V(t_i) - V(t_j) \dots \langle T \dots a_{u_i}^+(t_i) a_{u_i}^+(t_i) a_{k_i}(t_i) a_{l_i}(t_i) \dots a_{u_j}^+(t_j) a_{u_j}^+(t_j) a_{k_j}(t_j) a_{l_j}(t_j) \dots \rangle$$

↑
indizes (u_i, u_i, l_i, k_i)

(a) gleichzeitig Paarung



(b) nicht gleichzeitig, aber
normal geordnet $a^+ a$



(c) nicht gleichzeitig, aber
nicht normal geordnet ($a a^+$)
Propagator $\langle T a_{k_i}(t_i) a_{k_j}^+(t_j) \rangle$



erste Vertauschung f. Störreihe:

$$\frac{1}{i\hbar} \int dt_i \sum_{u_i, k_i, l_i, q_i} V_{u_i, k_i, l_i, q_i} \hat{=} \begin{matrix} \bullet \\ \text{wavy line} \\ \bullet \\ t_i \end{matrix}$$

$$G_{ab}(t_a, t_b) \hat{=} \begin{matrix} \bullet & \xrightarrow{\hspace{2cm}} & \bullet \\ t_a & & t_b \end{matrix}$$

$$G_{ab}^+(t_a, t_b) \hat{=} \bullet \longleftarrow \bullet \quad (\text{"Ladlinien" miteinander verbunden})$$

$t_a \qquad t_b$

$$G_{ab}^+(t_a, t_a) \hat{=} \begin{matrix} \bullet & \bullet \\ \curvearrowright & \curvearrowright \\ t_a & t_a \end{matrix}$$

Bild

Elektronpropagatoren (siehe VL - bitte die Formeln für vergessen)

$$(a) \quad \langle \cancel{T} a_{n_i}^+(t_i) a_{k_i}(t_i) \rangle = \text{sp}(\rho_{eq} a_{n_i}^+(t) a_{k_i}(t)) \equiv G_{nk}^+(t, t)$$

\uparrow nicht benötigt, ist so konstant f. gleiche Zeite \uparrow Grundzustands-erwartungswert

$\leftarrow \sum_n \epsilon_n a_n^+ a_n$ in Schrödingerbild

$$= \text{sp} \left(\frac{e^{-\beta H_{el}}}{Z} \langle a_n^+(t) a_n(t) \rangle \right) = \frac{1}{Z} \text{sp} \left(a_n^+(t) e^{-\beta H_{el} - \beta \epsilon_n} e^{-\beta H_{el}} a_k(t) \right)$$

Zyklisch erweitert

$$\Rightarrow \frac{1}{Z} e^{-\beta \epsilon_n} \text{sp} \left(e^{-\beta H_{el}} a_k(t) a_n^+(t) \right)$$

entfällt bei Vertausch (Zahl)

$$\delta_{kn} = \langle a_n^+(t) a_k(t) \rangle$$

$$G_{mk} = (\delta_{km} - G_{mk}) e^{-\beta \varepsilon_m}, \quad G_{mk}(t, t) \equiv G_{mk}$$

$$\downarrow G_{mk} = \frac{\delta_{km}}{e^{\beta \varepsilon_m} + 1} = \boxed{\delta_{km} \int_K^{\rho F} = G_{mk}(t, t)}$$

↑
Temperatur

Bemerk.

$$e^{-\beta \hbar \omega} a_i^\dagger e^{\beta \hbar \omega} = e^{-\beta \varepsilon_i} a_i^\dagger \quad (\text{Nachschleifen})$$

$$(\text{WW-Bild: } \beta \rightarrow -i t)$$

$$(b) \quad G_{12}(t_1, t_2) = \langle T a_1^\dagger(t_1) a_2(t_2) \rangle$$

↑
(u_1, u_2)

$$T a_1^\dagger(t_1) a_2(t_2) = \theta(t_1 - t_2) a_1^\dagger(t_1) a_2(t_2)$$

↑
ordt die Zeit

$$+ \theta(t_2 - t_1) a_2(t_2) a_1^\dagger(t_1)$$

$$t_1 \omega_1 = \varepsilon_1$$


$$(t_2 > t_1)$$


$$G_{u_1 u_2}(t_1, t_2) = \theta(t_2 - t_1) e^{i\omega_1(t_2 - t_1)} \delta_{u_1 u_2} \int_{u_1}^F + \theta(t_1 - t_2) e^{i\omega_2(t_1 - t_2)} \delta_{u_1 u_2} (1 - \int_{u_1}^F)$$

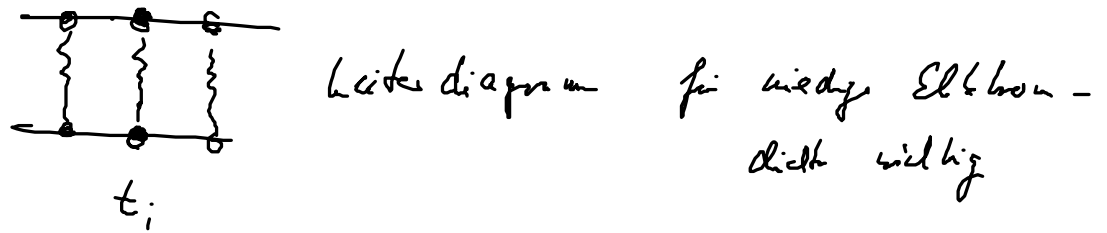
$$\begin{aligned} (c) \quad G^+(t_1, t_2) &= \langle T a_1(t_1) a_2^+(t_2) \rangle \\ &= \theta(t_1 - t_2) e^{-i\omega_1(t_1 - t_2)} \delta_{u_1 u_2} \int_{u_1}^F \\ &\quad + \theta(t_2 - t_1) e^{-i\omega_2(t_2 - t_1)} \delta_{u_1 u_2} (1 - \int_{u_1}^F) \\ &= G(t_2, t_1) \leftarrow \\ &\quad G(t_1, t_2) \rightarrow \end{aligned}$$

1.4.4. Übersetzungsvorschriften

Idea: in ein Ordng u alle Diagramme aufnehmen und diese Intuition oder durch beschränken die Wicklysten in der Ordnung. sich zu merken

Beispiel:  Ringdiagramme für hohe Elektronendichte wichtig


 Kaulgruppen diagramme = 0 für räumlich
 kompakte Systeme



Übersetzung des Diagramms in Formel: Sie sehen ein Diagramm -
 was machen Sie?

- 1) für alle Vertices wird ein Zeitintegral hingeschrieben: $\int dt_i$,
 für alle Vertices wird auch die Σ über die Quanta
 und die Matrixelemente des U hingeschrieben

$$\rightarrow \int dt_i \sum V_{u_i, u_i, e_i, e_i}$$

- 2) jedes Fermion wird mit Vorzeichen $(-1)^l$ versehen

wobei l die Zahl geschlossener Fermion-schleifen ist:



$$l=2 \rightarrow (-1)^2 = 1$$

„closed loops“

3) Werte weiterverarbeiten: für u - t Ordnungdiagramm

(u -Wellenfunktion) $\begin{pmatrix} 1 \\ - \\ it \end{pmatrix}^u$ $\frac{1}{u!}$ $\begin{pmatrix} 1 \\ - \\ 2^u \end{pmatrix}$

$\nwarrow \frac{1}{2}$ vor V in H

4) alle Propagatorlinien des Aufbaues werden auf Indizes und Zeit davon multipliziert

1.4.5 Vakuumamplitude

Grundzustandsenergie

$$\bar{E}_{int} - \bar{E}_0 = it \frac{d}{dt} \ln R(t, t') \Big|_{t \rightarrow \infty(1-i\epsilon)}$$

\nearrow ω System \uparrow ω System

$$R = \langle \phi_0 | U_{int}(t, t') | \phi_0 \rangle, \quad H_0 | \phi_0 \rangle = E_0 | \phi_0 \rangle$$

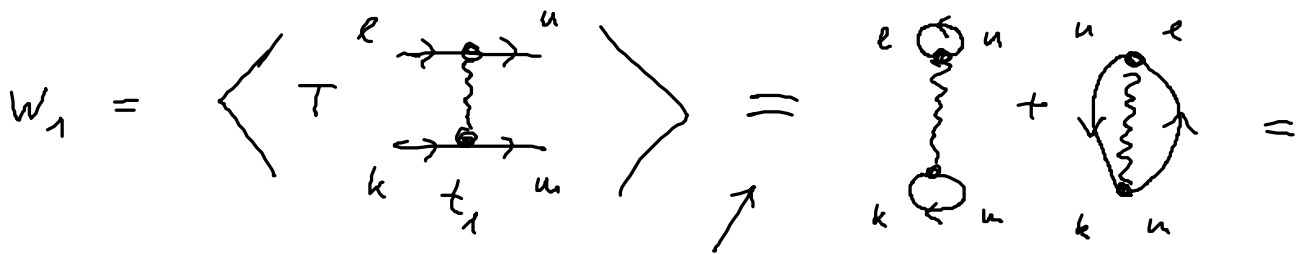
$$H | \phi_{int} \rangle = E_{int} | \phi_{int} \rangle$$

Vakuumamplitude

$\rightarrow \sum \omega_n$

a) Hartree-Fock-Energie

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{u, l, m, k} V_{u, m, l, k} a_u^\dagger a_m^\dagger a_k a_l$$



$u=1$
 $(2u)! = 2$ Diagram in dieser
 Ordng. aufzählen

Rezept

$$= \underbrace{\frac{1}{1!} \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2}}_{\text{Vorzeichen}} \underbrace{\int_{t'}^t dt_1 \sum_{u, l, m, k}}_{\text{Rezept 1}} V_{u, m, l, k} \underbrace{\left((-1)^2 G_{ue} G_{mk} \overset{1}{-1} G_{nk} G_{ml} \right)}_{\substack{\text{Loopregel} \\ \text{(falls a circle/2e)}}}$$

$$G_{ue} \sim \delta_{ue} f_u^{\bar{F}}$$

$$= \frac{1}{2i\hbar} (t - t') \sum_{u, m} \left(V_{u, m, u, m} \int_u^{\bar{F}} \int_u^{\bar{F}} - V_{u, m, m, u} \int_u^{\bar{F}} \int_u^{\bar{F}} \right) = W_1$$

Zu Vakuum amplituden: $\ln(1 + W_1) \approx W_1$

$$\Delta E = i\hbar \frac{d}{dt} W_1 = \frac{1}{2} \sum_{u, m} \left(\underbrace{V_{u, m, u, m}}_{\text{direkter Anteil}} \int_u^{\bar{F}} \int_u^{\bar{F}} - \underbrace{V_{u, m, m, u}}_{\text{Anteil aus beidg}} \int_u^{\bar{F}} \int_u^{\bar{F}} \right)$$

$$V_{1234} = \iint d\vec{r} d\vec{r}' \frac{\varphi_1^*(\vec{r}) \varphi_2^*(\vec{r}') \varphi_3(\vec{r}) \varphi_4(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'| 4\pi\epsilon_0}$$

direkt: $1=3$
 $2=4$

$|\varphi_1(\vec{r})|^2 |\varphi_2(\vec{r}')|^2$ WW klassisch Ladungsdicht

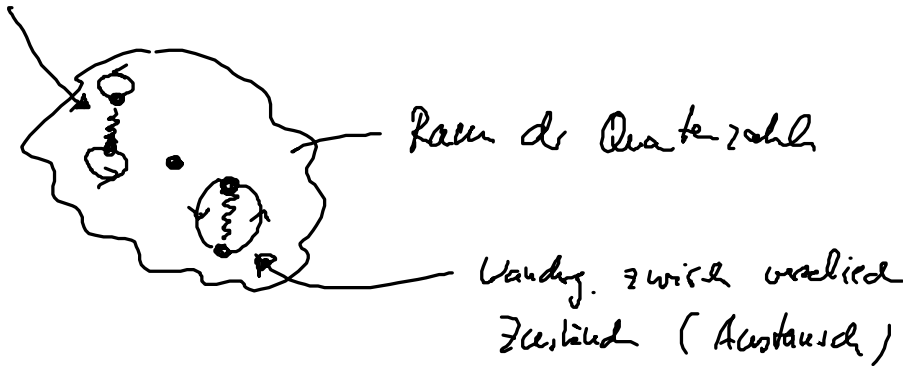
Austausch $1=4$
 $3=2$

$\varphi_1^*(\vec{r}') / \varphi_1(\vec{r}') \varphi_2^*(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r})$

kann nicht zu klassischen Zuständen gebracht

Es bleiben im Zustand

werden



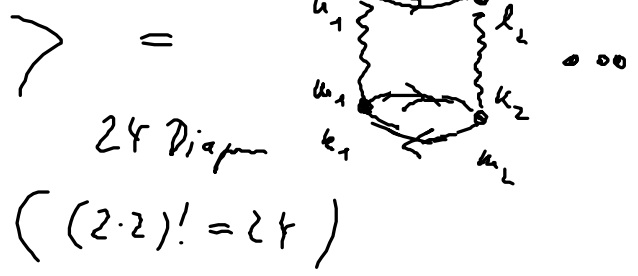
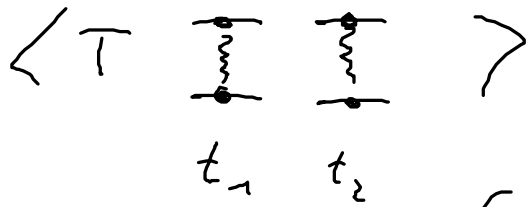
Besonderheit in räumlich homogen System: (Ionen verschmieselt, Elektron verschmieselt $\hat{=}$ Fermionenmodell)

= 0 \rightarrow WW-Energie < 0

in einem Metallblock wird die chemische Bindung durch die Austausch WW gemacht (Energie absenkend.)

b) ein Ethen Diagramm

2. Ordnung



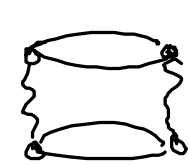
Loops Vertiefen:

$$\rightarrow \frac{(-1)^2}{2!} \left(\frac{1}{2ik} \right)^2 \int dt_1 \int dt_2 \sum_{\{1\}} \sum_{\{2\}} V_{u_1 m_1 l_1 k_1} V_{u_2 m_2 l_2 k_2}$$

$$\left(G_{l_1 u_2}^+(t_1, t_2) \underbrace{G_{u_1 l_2}(t_1, t_2)}_{(t_1 - t_2)} G_{u_1 k_2}(t_1, t_2) G_{k_1 m_2}^+(t_1, t_2) \right)$$

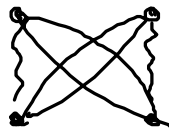
ohne Reduz:

$$\Delta E \text{ (diagram)} = -\frac{1}{4} \sum_{u m l k} \frac{V_{u m l k}^2}{t^2} \frac{(1-f^F) f_u^F f_m^F (1-f^F)}{\epsilon_e - \epsilon_u - \epsilon_m + \epsilon_k}$$



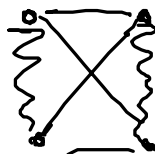
"direkt"

=



(auch Repl)

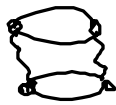
≠



"Austausch"

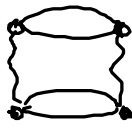
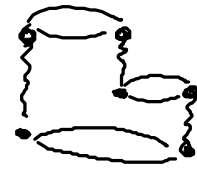
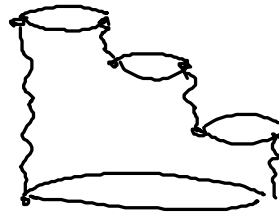
wird man noch berechnen

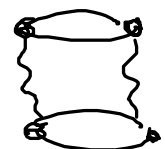
c) formale Rechnung und Diagramm : Stärke!

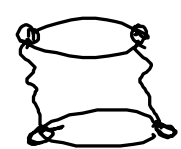
man stellt fest  \Rightarrow ∞ Wert im Metall

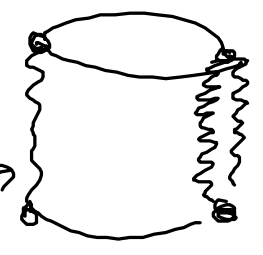
\rightarrow funktioniert, aber: man kann ein ∞ Reihe solder

Diagramm bilden und aufsummieren:

Reihe:  +  +  + ...

=  $\left(1 + \text{diagram} + \text{diagram}^2 + \dots \right)$

=  $\left(\frac{1}{1 - \text{diagram}} \right)$

\equiv  $\frac{e^{-\lambda r}}{r}$

$V \approx \frac{1}{r}$

neue Wechselwirkung:
in Metall ist das eine
abgeschirmte WW, und

diem lojill da Piogn

2. Ordj. diu ludhile Gest