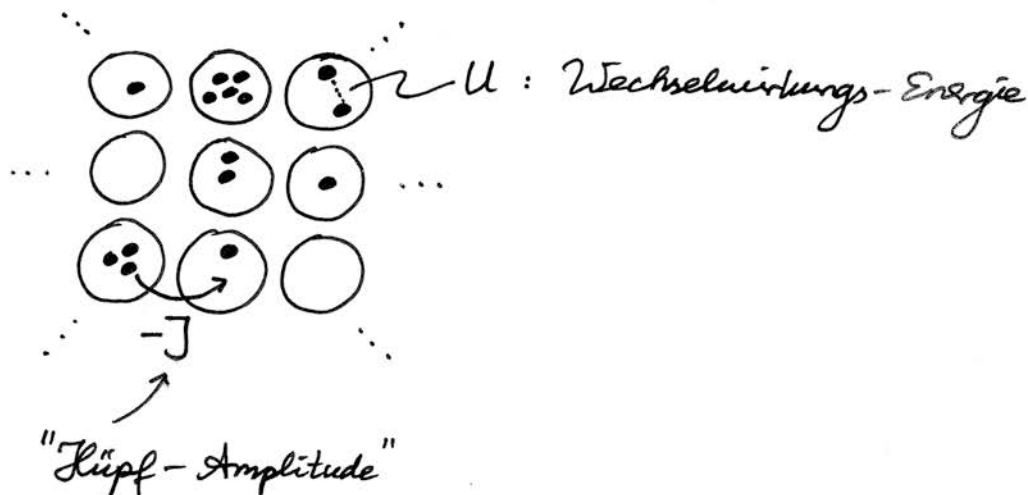


# 4. Das Hubbard-Modell

"Minimalmodell" für wechselwirkende Fermionen oder Bosonen auf dem Gitter

## Base-Hubbard-Modell



$$\hat{H} = \underbrace{-J \sum_i \sum_{l \in \text{NN}(i)} \hat{a}_l^+ \hat{a}_i}_{\text{"Hüpfen" = kinetische Energie}} + \underbrace{\frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1)}_{\text{(lokale) Wechselwirkung}}$$

$\sum_i$  : über alle Gitterplätze

$\sum_{l \in \text{NN}(i)}$  : nur über nächste Nachbarn von  $i$

$$\hat{n}_j = \hat{a}_j^+ \hat{a}_j$$

Seit ~10 Jahren realisiert für kalte Atome in Lichtgittern!

$U > 0$  : Repulsion (Teilchen vermeiden sich)

$U < 0$  : Attraktion

# Physikalische Phänomene

(Diskussion ohne Herleitung)

Ann. im Folgenden: Kubisches Gitter mit  $M = M_x \cdot M_y \cdot M_z$  Plätzen,  $\vec{r}_\ell = \begin{pmatrix} \ell_x \\ \ell_y \\ \ell_z \end{pmatrix}$ ,  $\ell_x = 1..M_x$  etc. periodische Randbed.

• Nur  $N=1$  Teilchen  $\Rightarrow$

Lsg. durch ebene Wellen

$$\hat{a}_\ell = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}_\ell}}{\sqrt{M}} \hat{b}_{\vec{k}}$$

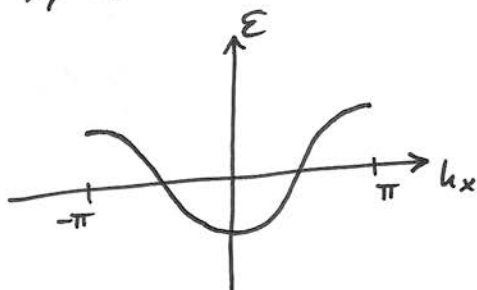
mit  $\vec{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}$ ,  $k_x = \frac{2\pi}{M_x} \cdot n_x \in [-\pi, \pi]$  etc.  
 $n_x \in \mathbb{Z}$

(vgl. Gitter von harmon. Osz.)

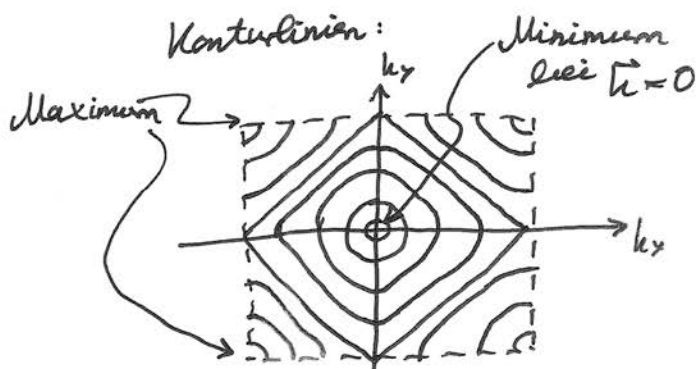
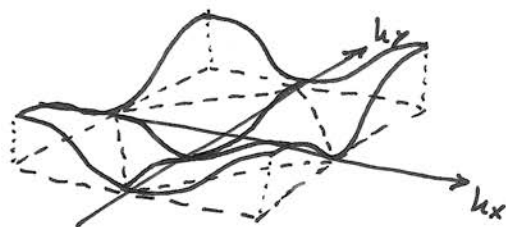
$\Rightarrow$  Dispersionsrelation

$$\epsilon(\vec{k}) = -2J [\cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z)]$$

$k_y = k_z = 0$ :



$k_z = 0$ :



Greensfkt.  $G$  beschreibt "ballistische" Ausbreitung eines Wellenpakets:

$$\hat{a}_x(t) = \sum_j G(x-j, t) \hat{a}_j(0) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}_x - \vec{r}_j)} e^{-i\epsilon_{\vec{k}}t/\hbar}}{M}$$

Für  $\vec{k} \approx 0$ : "Parabolisches"  $\epsilon(\vec{k})$  wie bei freien Teilchen



$$\epsilon(\vec{k}) \approx -2J \left[ 3 - \frac{1}{2} k^2 \right]$$

$$= \text{const} + J k^2$$

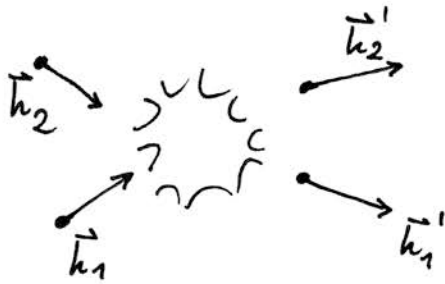
$$\hat{=} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{eff}}}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{m_{\text{eff}}} = \frac{2J}{\hbar^2} \quad \text{"Bandmasse"}$$

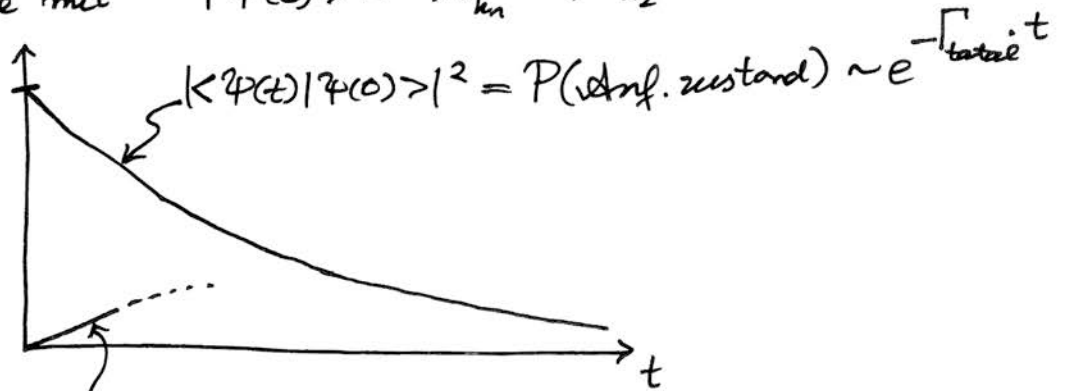
$\Rightarrow$  Wellenpakete aus  $\vec{k} \approx 0$  ( $|k_x, y, z| \ll 1$ ) bewegen sich wie Teilchen mit dieser Masse.

•  $N=2$  Teilchen:

⇒ Streuung durch WW:



→ Berechne Streuraten mit QM  
 Starte mit  $|\psi(0)\rangle = |n_{\vec{k}_1}=1, n_{\vec{k}_2}=1\rangle$



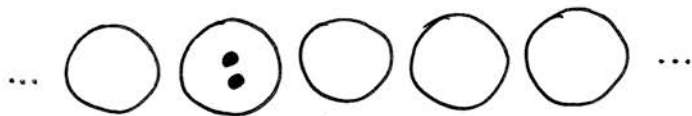
$$|\langle \psi(t) | n_{\vec{k}_1'}=1, n_{\vec{k}_2'}=1 \rangle|^2 \approx \frac{\Gamma_{\vec{k}_1', \vec{k}_2' \leftarrow \vec{k}_1, \vec{k}_2}}{2} \cdot t$$

$\Gamma \sim U^2$  wenn  $U$  nicht zu groß

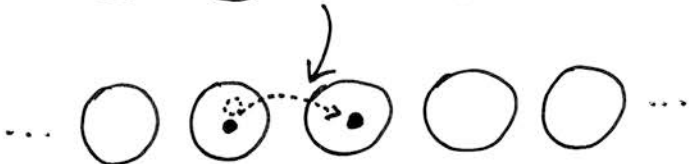
Bem.: Wegen Gitter muß Impulserhaltung nur modulo  $2\pi$  gelten, also  $\vec{k}_1' + \vec{k}_2' = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + 2\pi \begin{pmatrix} \Delta n_x \\ \Delta n_y \\ \Delta n_z \end{pmatrix}$  ist ok!

(hängt von  $U$  ab, von Gittergröße, etc.)

Geladene Zustände:



} WW-Energie =  $\frac{U}{2}$



} WW-En. = 0

falls  $|U| \gg |J|$ : Wegen Energieerhaltung "nicht mögl."  
 ⇒ Paar : liebt beisammen (auch wenn  $U > 0$  = repulsiv!)

•  $N \gg 1$  Teilchen :

- Betrachte z.B. Gleichgewicht  
(bei  $T > 0$  oder  $T = 0 \rightarrow$  Grundzustand)

- als Funktion von  
mittlerer Teilchendichte  $\bar{n} = \frac{N}{M}$

oder  
chemischem Potential  $\mu$   
in

~~$P(N, \nu)$~~   
$$P(N, \nu) \sim e^{-\frac{1}{k_B T} (E_\nu - \mu N)}$$
  
↓  
nummeriert  
Vierteilchen-  
Energie-Eigenzust.e

• Niedrige Dichte, " $\bar{n} \ll 1$ ":

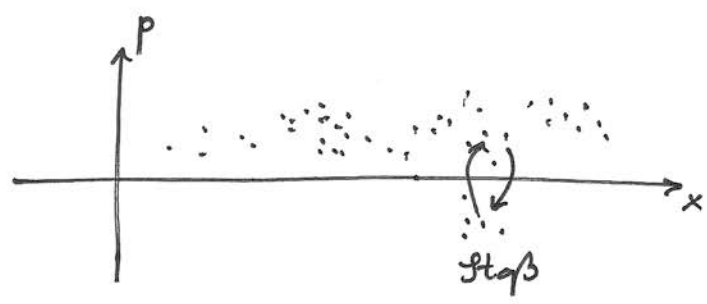
Bei "hohen" Temperaturen:  
Klassische Boltzmann-Glg. für Dichte  
im Phasenraum

$$S(\vec{r}, \vec{p}, t)$$

↳ "wieviele Teilchen nahe  $\vec{r}$   
mit Impuls  $\vec{p}$  nahe  $\vec{p}$  ?"

Dabei gehen ein :

- Dispersionsrelation  $\mathcal{E}(\vec{k}) \Rightarrow$   
Geschw. heit  $\vec{v} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\hbar \partial \vec{k}}$
- Zweiteilchen-Streuquerschnitte



• Höhere Dichten bzw. niedrigere Temperaturen :

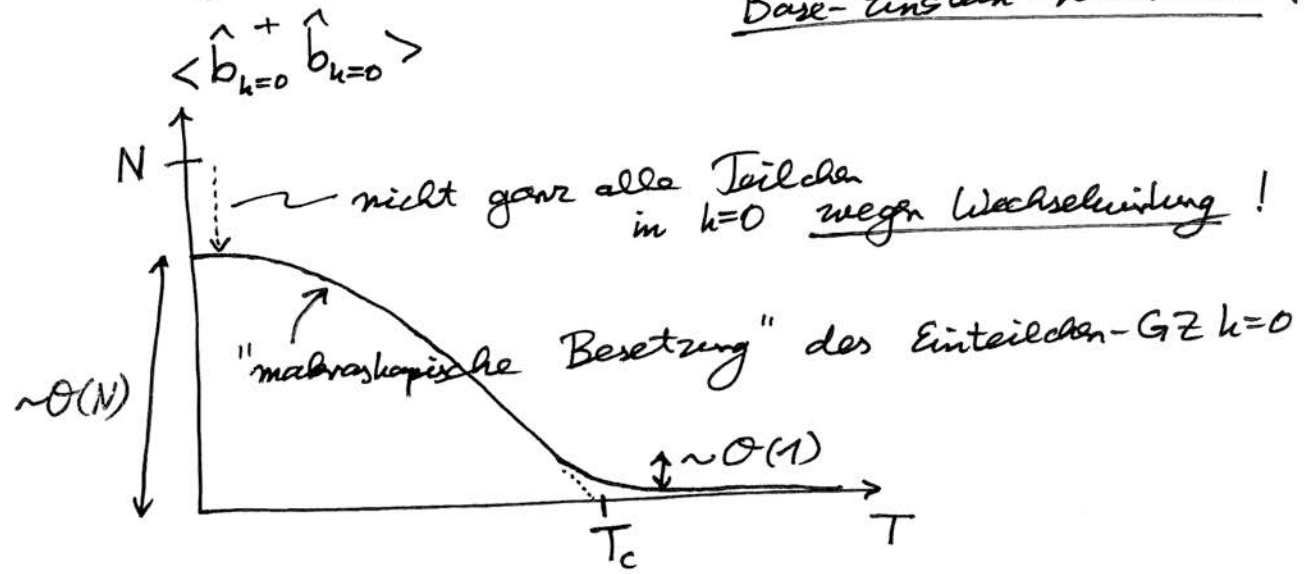
nicht mehr getrennte Wellenpakete

... sondern: Materiewellen überlappen



(=> semiklass. Bwgg.,  
Boltzm. gg.)

=> Möglk. der  Bose-Einstein-Kondensation !



Wichtig: •  $U > 0$ ,  
sonst Instabilität

• 3D

# Einteilchendichtematrix im BEC

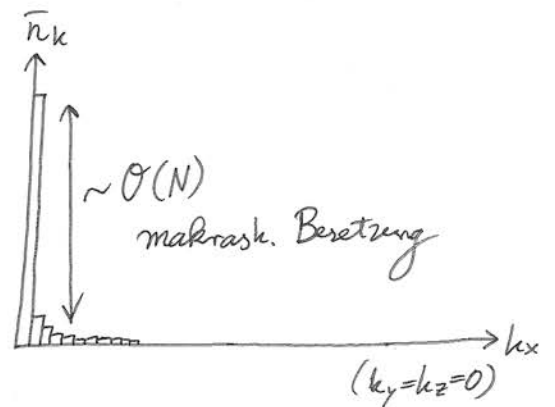
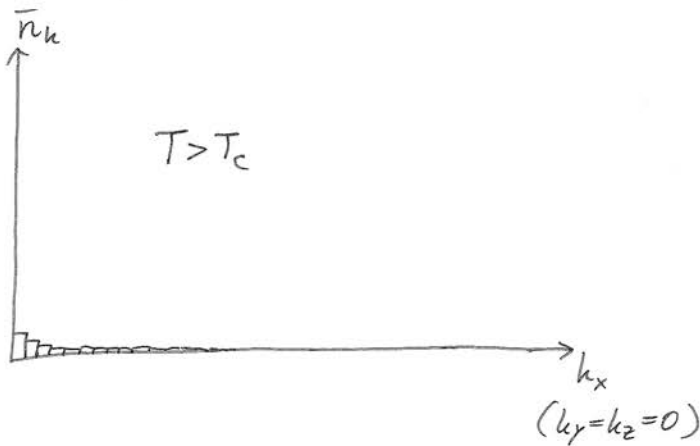
(Bose-Einstein-Kondensat)

Wissen (für  $\mu=0$ ):

$$\langle \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1} = \bar{n}_k \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$\mu = 0$ :  
 $\sum_k \langle \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \rangle = N$

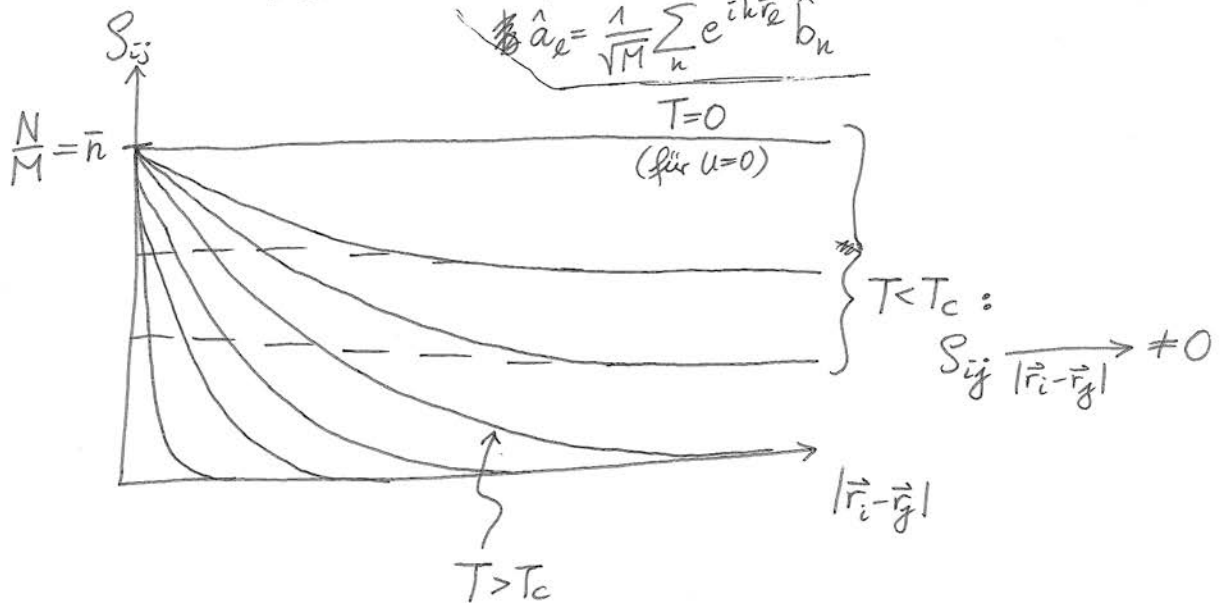
enthält auch thermische Mittelung (über viele Energie-Eigenzustände und Teilchenzahlen)  
 Bose-Einstein-Verteilung



Betrachte "Einteilchendichtematrix"

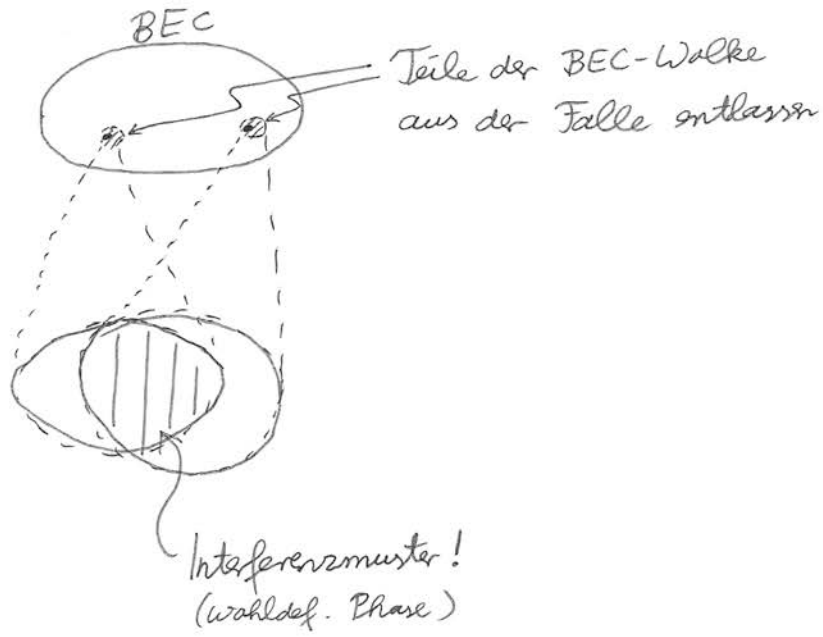
$$S_{ij} \equiv \langle \hat{a}_j^+ \hat{a}_i \rangle = \frac{1}{M} \sum_k \bar{n}_k e^{ik(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$$

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{ik\vec{r}_i} \hat{b}_k$$



"langreichweitige Ordnung" in Außerdiaagonalelementen von  $S$   
 (vgl. magn. Systeme  ~~$\langle \hat{b}_i \hat{b}_j \rangle$~~   $\langle \hat{b}_i \hat{b}_j \rangle$ )

⇒ verschiedene Teile des Kondensats können interferieren

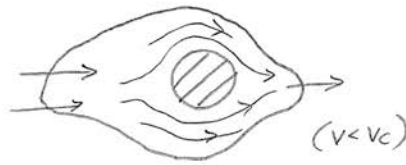


Superfluidität

$T > T_c$ : Streuung am Hindernis



$T < T_c$



(s. später: "lineare Antwort" auf bewegtes Hindernis)



Große Dichte:  $\bar{n} = \frac{N}{M} \sim \mathcal{O}(1)$

Neue Möglichkeit: Der "Mott-Isolator"

z.B.  $\bar{n} = 2$

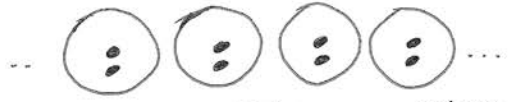
BEC,  $T=0$ ;  $u=0$ :



Var  $\hat{n}_j \equiv \langle \hat{n}_j^2 \rangle - \langle \hat{n}_j \rangle^2 = \dots = \langle \hat{n}_j \rangle = \bar{n}$   
 (Zustand jeden Platzes  $\approx$  kohärenter Zustand)

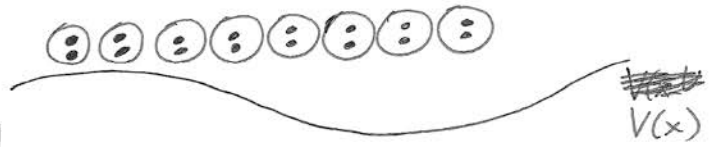
$u \gg J$ :

Mott-Isolator



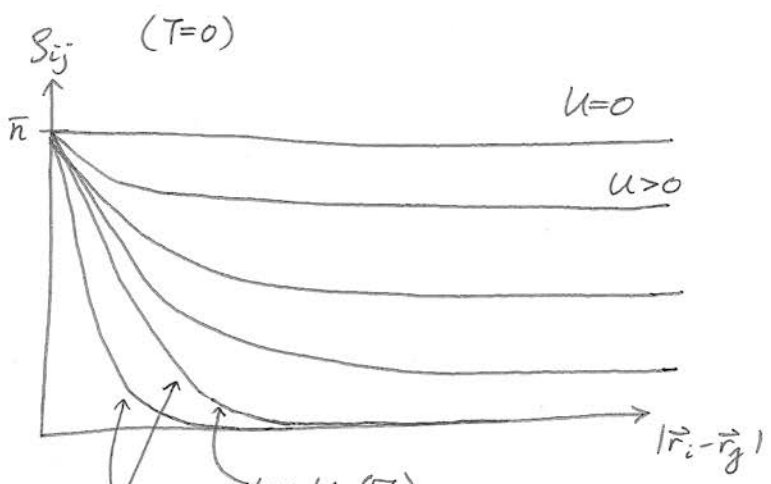
$|\psi\rangle \sim \hat{a}_1^{\dagger 2} \hat{a}_2^{\dagger 2} \hat{a}_3^{\dagger 2} \dots \hat{a}_M^{\dagger 2} |0\rangle$

inkompressibel:



$\otimes$   
 $\bar{n}(\mu)$

(schwaches)  $V$  ändert Dichte nicht



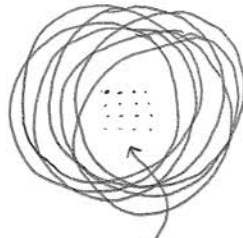
Mott-Isolator

$\Rightarrow$  keine Interferenz zwischen weit entfernten Plätzen

# Beobachtung in Expansionsbildern:

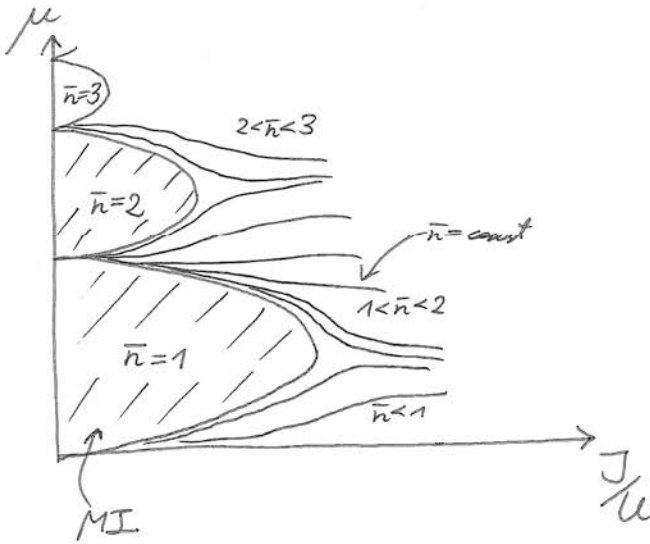
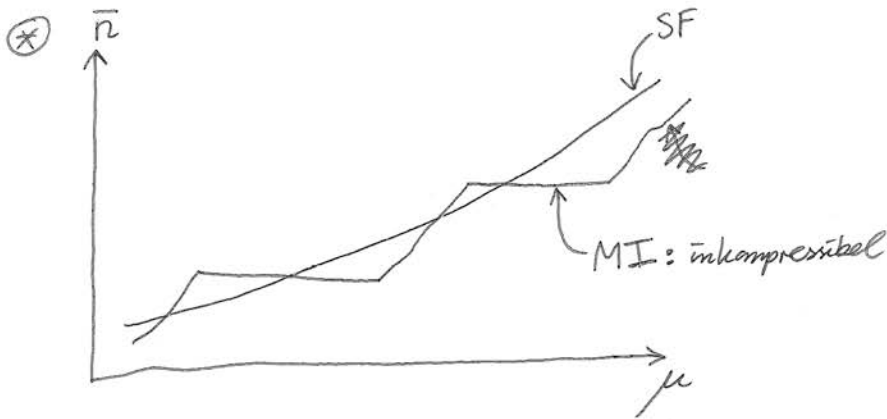
0000  
0000  
0000  
0000

⇒  
Falle  
ausschalten,  
ballistische  
Expansion  
 $\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{v}_0 t$



Interferenzmuster,  
falls BEC

~~mmmm~~



# Fermi-Hubbard-Modell

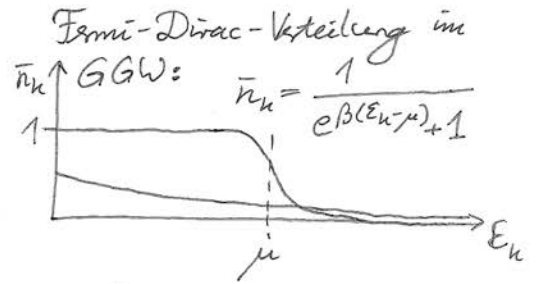
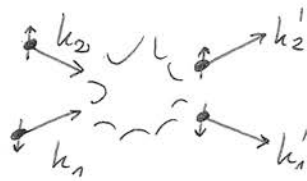
(hier: Spin  $s = \pm \frac{1}{2} = \uparrow/\downarrow$ )

$$\hat{H} = \underbrace{-J \sum_i \sum_{j \in NNC(i)} \sum_{s=\uparrow, \downarrow} \hat{C}_{j s}^+ \hat{C}_{i s}}_{\text{kin. Energie (kein Spin-Flip)}} + \underbrace{U \sum_j \hat{n}_{j \uparrow} \hat{n}_{j \downarrow}}_{\text{nur WW für } \uparrow\downarrow}$$



hinreichend niedriges ~~temperatur~~ hohe T:

Balanzmanglg., aber: Pauli-Blockade-Faktoren



$$\Gamma \sim \bar{n}_{k_1 \uparrow} \bar{n}_{k_2 \uparrow} (1 - \bar{n}_{k_1 \downarrow}) (1 - \bar{n}_{k_2 \downarrow})$$

für diesen Prozess

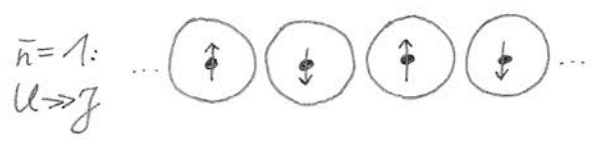
Bem.: keine ~~Streuung~~ Streuung zwischen  $\uparrow$  &  $\uparrow$  !  
direkte

Konsequenz:

$$\Gamma(\text{totale Rate von Streuprozessen im GGW}) \sim T^2 \xrightarrow{\text{für } T \rightarrow 0} 0$$

$\Rightarrow$  Thermalisierung sehr langsam bei tiefen T!

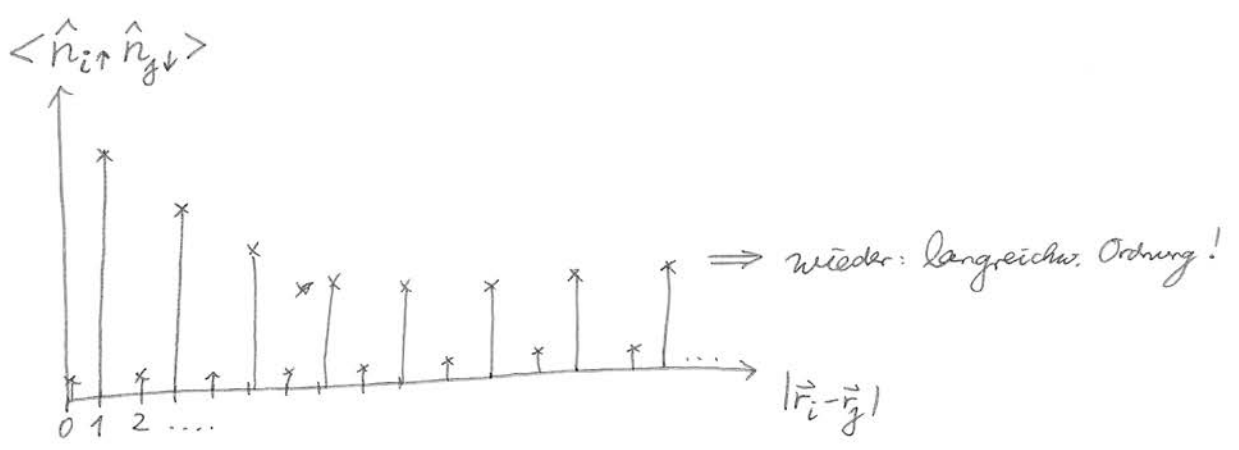
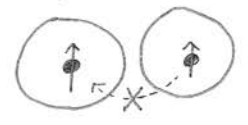
Mott-Isolator:



Bem.: Es bildet sich antiferromagn. Ordnung,  
 denn folgende Prozesse senken die Energie:

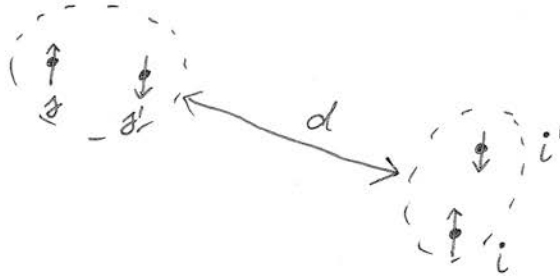


nicht möglich für



# Supraleitung:

$\bar{n} \neq 1$  : metallisch,  
unterhalb  $T_c$  : Bildung von Cooper-Paaren



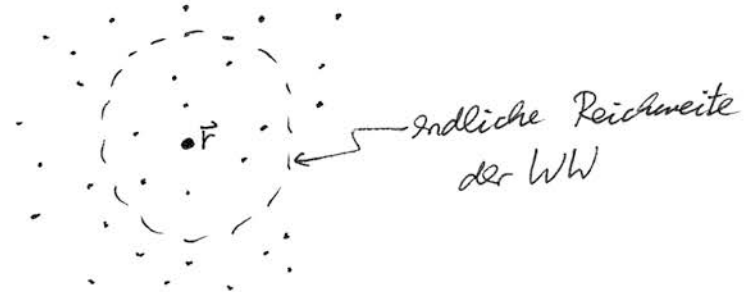
$$\langle \hat{C}_{j\uparrow}^+ \hat{C}_{j\downarrow}^+ \hat{C}_{i'\downarrow} \hat{C}_{i\uparrow} \rangle \xrightarrow{d \rightarrow \infty} 0$$

(analog zu  $\langle \hat{a}_j^+ \hat{a}_i \rangle \xrightarrow{d \rightarrow \infty} 0$ )

# 5. Molekularfeldnäherung (Hartree & Hartree-Fock)

~~z.B. Base-Atom~~

Idee: Teilchen spürt mittleres Feld der umgebenden Teilchen



$$\bar{V}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \underbrace{V(\vec{r}-\vec{r}')}_{\substack{\text{2-Teilchen-WW} \\ \downarrow}} \underbrace{\bar{n}(\vec{r}')}_{\substack{\text{mittlere Teilchendichte}}}$$

Näherung!

Kann ~~schlecht~~ schlecht werden, wenn:

- keine gute Mittelung:  
nur wenige Teilchen in der Nähe, Langsame Bewegung



- Korrelationen zwischen den Teilchen  
=> ~~n~~  $\bar{n} \neq$  echte Dichte, gegessen daß Teilchen bei  $\vec{r}$



(auch: Pauli-Prinzip, s.u.!)

Im GGW:

Allgemeines Prinzip: Minimiere  $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$  wobei:

(von Hartree-(Fock))

$$|\Psi\rangle = \begin{cases} N \times \text{bestmöglicher Einteilchenzust. } \phi & \text{für Bosonen} \\ \text{Slater-determinante} & \text{für Fermionen} \end{cases}$$

z.B.: Bose-Hubbard-Modell

$$\hat{H} = -J \sum_{i,j \in NN(i)} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1) + \sum_j V_j \hat{n}_j$$

$\hookrightarrow$  mögl. ext. Potential  $\Rightarrow$  inhom. Sit.!

Sei  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left( \sum_j \phi_j \hat{a}_j^\dagger \right)^N |0\rangle$

also  $N$  Teilchen im Zustand  $\phi$

Variere  $\phi$ , um  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$

zu minimieren!

$$\langle \psi | \hat{n}_j | \psi \rangle = N |\phi_j|^2 = \bar{n}_j = \text{mittlere Dichte bei } j$$

$$\langle \psi | \hat{n}_j^2 | \psi \rangle = N^2 |\phi_j|^4 + N |\phi_j|^2 (1 - |\phi_j|^2)$$

setze  $\hat{a}_j = \sum_k \phi_j^{(k)} \hat{b}_k$   
 aber nur  $k=0$  liestet,  
 mit  $\phi_j^{(k=0)} \equiv \phi_j$

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \underbrace{\langle \psi | \hat{H}_0 | \psi \rangle}_{\substack{\text{alles} \\ \text{außer } U\text{-Term}}} + \frac{U}{2} N(N-1) \sum_j |\phi_j|^4$$

$$\approx N \sum_{i,j} \phi_j^* \tilde{H}_{ji} \phi_i$$

mit  $\tilde{H}_{ji} = \begin{cases} -J & \text{wenn } j \in NN(i) \\ V_j & \text{wenn } i=j \end{cases} \quad \left. \vphantom{\tilde{H}_{ji}} \right\} = \text{Einteilchen-Ham.op.}$

Wollen:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \stackrel{!}{=} \min, \quad \text{aber unter Nebenbedingung}$$

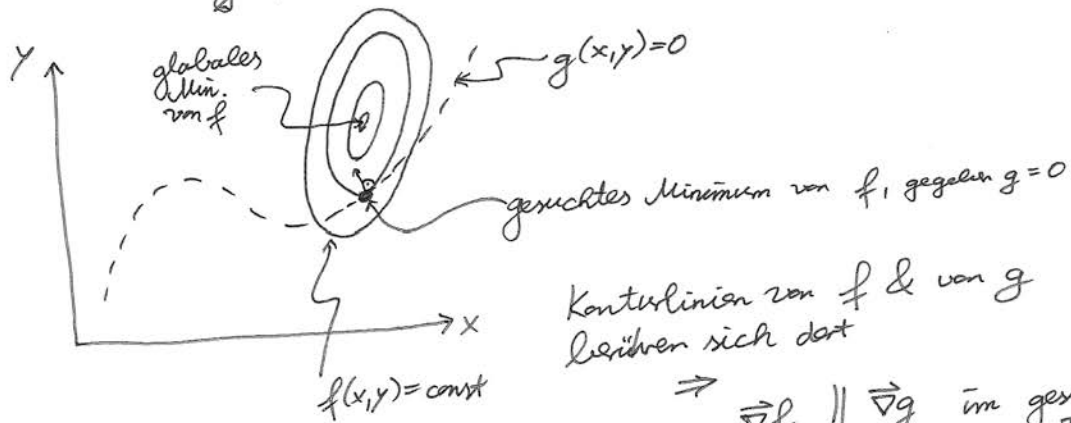
$$\sum_j |\phi_j|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

Bem.:

### Lagrange-Multiplikatoren

[hier: 2 Variablen  $x, y$ ; später:  $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots$ ]

Suche Minimum von  $f(x, y)$  unter Nebenbed.  $g(x, y) = 0$



Konturlinien von  $f$  & von  $g$  berühren sich dort

$$\Rightarrow \nabla f \parallel \nabla g \text{ im gesuchten Punkt}$$

$$\Rightarrow \exists \lambda \text{ mit } \nabla f = \lambda \nabla g$$

$\Rightarrow$  Suche  $\nabla (f - \lambda g) \stackrel{!}{=} 0$  mit Zwangsbed.  $g \stackrel{!}{=} 0$

Lagrange-Multiplikator  
(kommt auch aus Geg.en heraus)

Bem.:  $\phi \in \mathbb{C}$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \text{Re} \phi} f(\phi) \stackrel{!}{=} 0 \quad \& \quad \frac{\partial}{\partial \text{Im} \phi} f(\phi) \stackrel{!}{=} 0$$

$\Leftrightarrow$

$$\frac{\partial}{\partial \phi^*} f(\phi) \stackrel{!}{=} 0 \quad \& \quad \frac{\partial}{\partial \phi} f(\phi) \stackrel{!}{=} 0$$

Bem.:  $\hat{a}_j = \sum_k \phi_j^{(k)} \hat{b}_k$

$$\Rightarrow \langle \hat{a}_j + \hat{a}_j^* \hat{a}_j + \hat{a}_j^* \hat{a}_j \rangle = \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_3, k_4}} \phi_j^{(k_1)*} \phi_j^{(k_2)} \phi_j^{(k_3)*} \phi_j^{(k_4)} \langle \hat{b}_{k_1} + \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_3} + \hat{b}_{k_4} \rangle$$

$$= \underbrace{|\phi_j^{(0)}|^4 \cdot N^2}_{\text{aus } k_1=k_2=k_3=k_4} + N \cdot \sum_{k \neq 0} |\phi_j^{(k)}|^2 \cdot \underbrace{\sum_{k \neq 0} |\phi_j^{(k)}|^2}_{1 - |\phi_j^{(0)}|^2}$$

aus Normierungsrelationen



⇒ Lagrange-Multiplikator

$$\delta \left( \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \underbrace{N\varepsilon}_{\text{Lagrange-Multiplikator}} \left[ \sum_j |\phi_j|^2 - 1 \right] \right) \stackrel{!}{=} 0$$

Variation (von  $\phi$ ),  
ohne Nebenbed.

falls  $\phi_j \in \mathbb{C}$  (hier nicht nötig), dann:

$$\frac{\partial}{\partial \phi_j^*} (\dots) \stackrel{!}{=} 0 \quad \left[ \text{alternativ: } \phi_j \in \mathbb{R} \ \& \ \frac{\partial}{\partial \phi_j} (\dots) = 0 \right]$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \phi_j^*} |\phi_j|^4 = 2 |\phi_j|^2 \phi_j$$

$$\boxed{\sum_{i \neq j} \tilde{H}_{ji} \phi_i + \frac{U}{2} (N-1) |\phi_j|^2 \phi_j = \varepsilon \phi_j}$$

(& fordere  $\sum_j |\phi_j|^2 \stackrel{!}{=} 1$ )

⇒ Hartree-Potential:

$$\bar{V}_j = U(N-1) |\phi_j|^2 \approx U \cdot \bar{n}_j \quad \text{☺}$$

↓  
vermeidet (zu gewissem Grad)  
Selbst-WW

⇒ Finde Lsg. dieses nichtlin. Eigenwert-Problems,  
nehme kleinsten EW  $\varepsilon$ .

in der Praxis: Testfkt.  $\phi_j \Rightarrow \bar{n}_j = N |\phi_j|^2$

⇒ löse normales EW-Problemm zu festem  $\bar{n}_j$

⇒ iteriere, bis  $\bar{n}_j \Big|_{\text{INPUT}} = \bar{n}_j \Big|_{\text{aus } \phi_j, \text{ das sich als GZ ergibt}}$

$\phi_j \rightarrow \bar{n}_j \rightarrow$  neuer GZ  $\phi_j' \rightarrow$  neues  $\bar{n}_j' \rightarrow \dots \rightarrow$  bis sich nichts mehr ändert!

Alternativ:

"kleine Fluktuationen"

$$\hat{n}_y = \langle \hat{n}_y \rangle + \delta \hat{n}_y \quad (\text{also } \delta \hat{n}_y \equiv \hat{n}_y - \langle \hat{n}_y \rangle)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{n}_y^2 &= (\langle \hat{n}_y \rangle + \delta \hat{n}_y)^2 \\ &= \langle \hat{n}_y \rangle^2 + 2\delta \hat{n}_y \langle \hat{n}_y \rangle + \underbrace{\delta \hat{n}_y^2}_{\substack{\text{Fluktuation} \\ \text{"klein"}}} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{MF} = \underbrace{-J \sum_{i,j \in NN(i)} \hat{a}_j^+ \hat{a}_i}_{\text{"mean field"}} + \frac{U}{2} \sum_j \underbrace{2\delta \hat{n}_j \langle \hat{n}_j \rangle + \langle \hat{n}_j^2 \rangle - \langle \hat{n}_j \rangle^2}_{\hat{n}_j (2\langle \hat{n}_j \rangle - 1) - \langle \hat{n}_j \rangle^2} + \sum_j V_j \hat{n}_j$$

mer noch quadratisch! (zu gegebenen Werten von  $\langle \hat{n}_j \rangle$ )

⇒ löse Einteilchenproblem für

$$(\tilde{H}_{MF})_{ji} = \begin{cases} -J & j \in NN(i) \\ V_j + \frac{U}{2} (2\langle \hat{n}_j \rangle - 1) & \text{für } j=i \end{cases}$$

⇒ effektives Potential

$$U \langle \hat{n}_j \rangle \quad \checkmark$$

(+ const)

(entspricht alter Methode, für  $N \gg 1$ )

⇒ fordere "Selbstkonsistenz", also

$$\langle \hat{n}_j \rangle \Big|_{\substack{\text{aus} \\ \text{neuem GZ}}} \stackrel{!}{=} \langle \hat{n}_j \rangle \Big|_{\text{vorgegeben}}$$

zeitabhängige Hartree-Theorie:

$$i\hbar \partial_t |\Psi\rangle = \hat{H}_{MF}(\Psi) |\Psi\rangle$$

hängt von  $|\Psi(t)\rangle$  ab, über  $\langle \hat{n}_j \rangle$

z.B.: Besonders schnelle Expansion einer Atomwolke durch repulsive WW



Selbes Prinzip, aber nun für Fermionen:

$$|\Psi\rangle = \text{Slater-Det. aus } \phi^{(1)}(\vec{r}), \phi^{(2)}(\vec{r}), \dots$$

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \stackrel{!}{=} \min$$

Hier: Bsp. in der Ortsbasis, für ~~kontin.~~ <sup>kontin.</sup> Ort: (relevant für Atome & Moleküle)

$$\hat{H} = \sum_b \int d^3\vec{r} \hat{\Psi}_b^+(\vec{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}_b(\vec{r})$$

$$+ \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \sum_{b,b'} \hat{\Psi}_b^+(\vec{r}) \hat{\Psi}_{b'}^+(\vec{r}') \hat{\Psi}_{b'}(\vec{r}') \hat{\Psi}_b(\vec{r}) \cdot \underbrace{V(\vec{r}-\vec{r}')}_{\text{z.B. Coulomb-WW}}$$

$$\langle \Psi | \hat{\Psi}_b^+(\vec{r}) \hat{\Psi}_{b'}^*(\vec{r}') | \Psi \rangle = \dots = \sum_{k \text{ besetzt}} [\phi_b^{(k)}(\vec{r})]^* [\phi_{b'}^{(k)}(\vec{r}')] \Rightarrow \text{speziell die Dichte: } (\vec{r}=\vec{r}') = \sum_{k \text{ besetzt}} |\phi_b^{(k)}(\vec{r})|^2$$

↑ Slaterdet.

aber was ist  $\langle \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} \hat{\Psi} \rangle = ?$

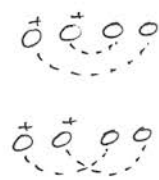
↑ in Slaterdet.

"Satz von Wick":

$$\langle \hat{\Psi}_b^+(\vec{r}) \hat{\Psi}_{b'}^+(\vec{r}') \hat{\Psi}_{b'}(\vec{r}') \hat{\Psi}_b(\vec{r}) \rangle$$

$$= \langle \hat{\Psi}_b^+(\vec{r}) \hat{\Psi}_b(\vec{r}) \rangle \langle \hat{\Psi}_{b'}^+(\vec{r}') \hat{\Psi}_{b'}(\vec{r}') \rangle$$

$$- \langle \hat{\Psi}_b^+(\vec{r}) \hat{\Psi}_{b'}(\vec{r}') \rangle \langle \hat{\Psi}_{b'}^+(\vec{r}') \hat{\Psi}_b(\vec{r}) \rangle$$



↑ wg. Fermionen: einmal durchtauschen nötig!

Einteilchen dichtematrix:

$$S_{z_0 z_0'}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \hat{\psi}_{z_0'}^+(\vec{r}') \hat{\psi}_{z_0}(\vec{r}) \rangle$$

$$\stackrel{\substack{\uparrow \\ \text{für} \\ \text{Slaterdet.}}}{=} \sum_{k \text{ besetzt}} \phi_{z_0'}^{(k)*}(\vec{r}') \phi_{z_0}^{(k)}(\vec{r}) = S_{z_0 z_0'}(\vec{r}', \vec{r})^*$$

$\Rightarrow$  Dichte  $\bar{n}_{z_0}(\vec{r}) = S_{z_0 z_0}(\vec{r}, \vec{r})$

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{H}_{\text{un}} | \psi \rangle = \int_{z_0} \int_{z_0'} d\vec{r} d\vec{r}' V(\vec{r} - \vec{r}') \left\{ \bar{n}_{z_0}(\vec{r}) \bar{n}_{z_0'}(\vec{r}') - \underbrace{|S_{z_0 z_0'}(\vec{r}, \vec{r}')|^2}_{\text{"Austausch-Korrektur" (s.u.)}} \right\}$$

Bem.: Ohne Spineffekte wird  $S_{z_0 z_0'}(\vec{r}, \vec{r}') = S_{z_0 z_0}(\vec{r}, \vec{r}) S_{z_0 z_0'}(\vec{r}', \vec{r}')$ ,  
diagonal im Spin!

Variation unter Nebenbed.

$$\langle \phi^{(k)} | \phi^{(k)} \rangle \stackrel{!}{=} 1$$

$$\int_{z_0} |\phi_{z_0}^{(k)}(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1$$

(Bem.:  $\phi^{(k)}$  können am Ende immer orthonormal gewählt werden, ohne  $|\psi\rangle$  zu verändern)  
Sl. det.

$$\Rightarrow S \left( \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \sum_k \epsilon_k (\langle \phi^{(k)} | \phi^{(k)} \rangle - 1) \right) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\text{für } \frac{\delta}{\delta \phi_{z_0}^{(k)*}(\vec{r})} (\dots) = 0$$

$\Rightarrow$  ohne Magnetfeld & Spin-Bahn-Kopplung:

Hartree-Fock-Glg.en

$$\begin{aligned} & \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \phi_{z_0}^{(k)}(\vec{r}) + \\ & + \underbrace{\left( \sum_{z_0'} \int d^3\vec{r}' V(\vec{r} - \vec{r}') \bar{n}_{z_0'}(\vec{r}') \right)}_{\text{"Hartree-Potential"}} \phi_{z_0}^{(k)}(\vec{r}) \\ & - \sum_{z_0'} \int d^3\vec{r}' V(\vec{r} - \vec{r}') S_{z_0 z_0'}(\vec{r}, \vec{r}') \phi_{z_0'}^{(k)}(\vec{r}') \stackrel{!}{=} \epsilon_k \phi_{z_0}^{(k)}(\vec{r}) \\ & \text{"nichtlokaler Austauschterm"} \end{aligned}$$

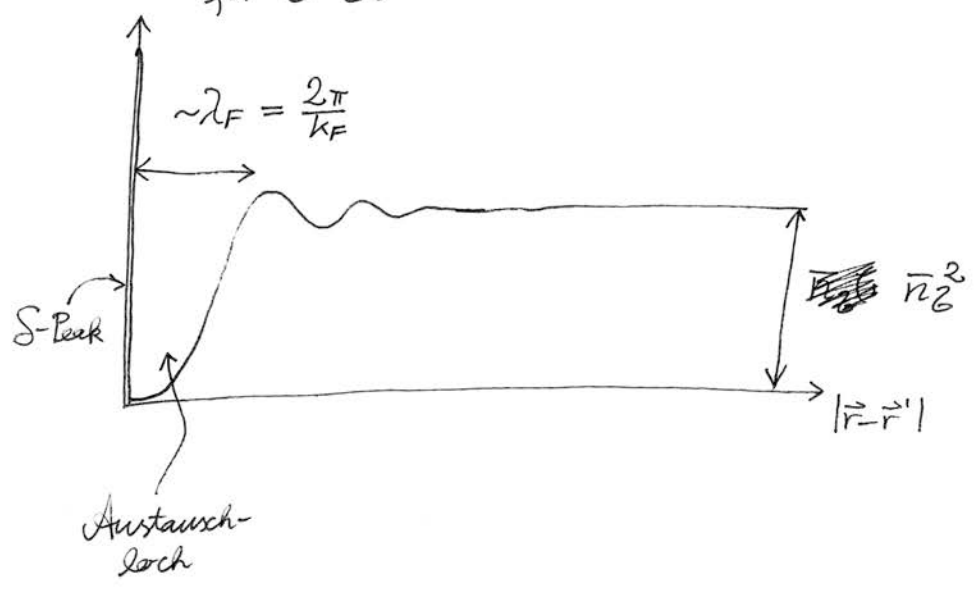
Dem.:

- Sehr wichtig für Quantenchemie (modern Dichtefunktionaltheorie)
- Bedeutung der Austausch-Korrektur:  
Korrelationen wg. Pauli-Prinzip!

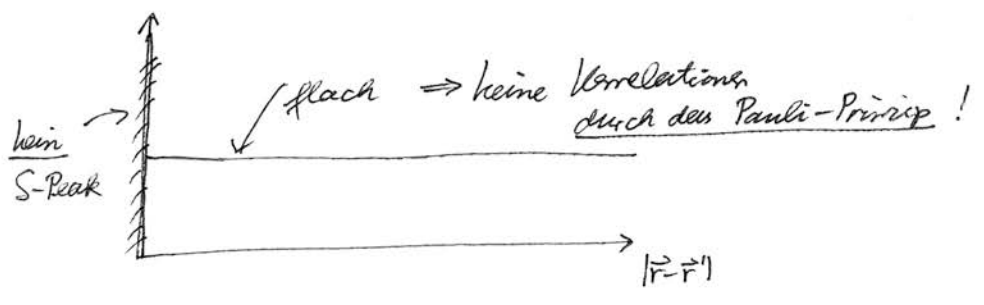
z.B. in Dichte-Dichte-Korrelation:

$$\begin{aligned}
 & \langle \hat{\Psi}_\sigma^+(\vec{r}) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(\vec{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \rangle \\
 \stackrel{\text{ Wick }}{=} & \bar{n}_\sigma(\vec{r}) \bar{n}_{\sigma'}(\vec{r}') + \underbrace{\langle \hat{\Psi}_\sigma^+(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \rangle}_{S_{\sigma'\sigma}(\vec{r}',\vec{r})} \underbrace{\langle \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(\vec{r}') \rangle}_{S_{\sigma\sigma'}(\vec{r},-\vec{r}')} - \underbrace{\langle \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(\vec{r}') \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) \rangle}_{S_{\sigma\sigma'}(\vec{r},\vec{r}')}
 \end{aligned}$$

⇒ z.B. für freies Fermigas:  
für  $\sigma = \sigma'$ :



für  $\sigma \neq \sigma'$ :



Mean-field für ein Bose-Kondensat

Vgl.:

Spins: magn. Ordnung

$$\langle \hat{b}_i \hat{b}_j \rangle \xrightarrow{|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \rightarrow \infty} 0$$

$$\Rightarrow \langle \hat{b}_j \rangle \neq 0$$

(obwohl  $\langle \hat{b}_j \rangle = 0$   
laut Baltmann!)

BEC:

$$\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \rangle \xrightarrow{} 0$$

$$\Rightarrow \langle \hat{a}_j \rangle \neq 0$$

(obwohl  $\langle \Psi | \hat{a}_j | \Psi \rangle = 0$   
für jeden Zustand mit  
fester Teilchenzahl  $N$ !)

$\langle \hat{a}_j \rangle \neq 0$  mögl. in

$$|\Psi\rangle = \sum_N e^{iN\varphi} c_N \underbrace{|\Psi_N\rangle}_{N\text{-Teilchen-Zustand}}$$

(unphysikalisch, aber nützlich)

Wenn  $\hat{H}$  die Teilchenzahl erhält:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_N |c_N|^2 \langle \Psi_N | \hat{H} | \Psi_N \rangle$$

$\Rightarrow$  wie großkanon. Ensemble!  $\checkmark$

$\Rightarrow \varphi$  ist irrelevant!  $\checkmark$

Jetzt: Setze

$$\hat{a}_j = \underbrace{\alpha_j}_{\langle \hat{a}_j \rangle} + \underbrace{S \hat{s}_j}_{\text{kleine Fluktuationen}}$$

"Ordnungsparameterfeld"  
"Kondensat"

(analog zu  $\hat{n}_j = \bar{n}_j + S \hat{n}_j$ )

z.B. base-ansatz:

$$\hat{H} = -J \sum_{i,j \text{ ENN}(i)} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_j^2 \rangle &= \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle = \langle (\alpha + S\hat{a})^\dagger (\alpha + S\hat{a}) (\alpha + S\hat{a})^\dagger (\alpha + S\hat{a}) \rangle \\ (\text{also } \hat{n}_j^2 \dots) \quad (\text{also } \hat{a}_j \dots) &= |\alpha|^4 + 2|\alpha|^2 (\alpha^* S\hat{a} + \alpha S\hat{a}^\dagger) \\ &\quad + |\alpha|^2 (3 S\hat{a}^\dagger S\hat{a} + S\hat{a} S\hat{a}^\dagger) \\ &\quad + (\alpha^{*2} S\hat{a}^2 + \alpha^2 S\hat{a}^{\dagger 2}) \\ &\quad + \mathcal{O}(S\alpha^3) \end{aligned}$$

⇒

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \text{Terme mit } \alpha_j^{(*)} \quad \left. \begin{array}{l} \} \rightarrow \text{mean-field-Resultat} \\ \text{(für } N \gg 1) \\ \Rightarrow \text{minimiere } \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \sim \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \\ \text{um } \alpha_j \text{ zu finden} \end{array} \right\}$$

- \* + Terme mit  $\mathcal{O}(S\hat{a}^1) \rightarrow = 0$ , wenn  $\alpha_j$  korrekt
- + Terme mit " $\mathcal{O}(S\hat{a}^2)$ "  $\rightarrow$  s.u.
- +  $\mathcal{O}(S\hat{a}^3)$  "klein"

$$\hat{H}_{mf} \equiv$$

$$\begin{aligned} (E_{mf} - \mu N) - J \sum_{i,j \text{ ENN}(i)} S\hat{a}_j^\dagger S\hat{a}_i + \frac{U}{2} \sum_j S\hat{a}_j^\dagger S\hat{a}_j (4|\alpha_j|^2 - 1) \\ + (\alpha_j^{*2} S\hat{a}_j^2 + \alpha_j^2 S\hat{a}_j^{\dagger 2}) \\ - \mu \sum_j S\hat{a}_j^\dagger S\hat{a}_j \end{aligned}$$

↑  
wichtig, muss mitgenommen werden!

nicht teilchenzahlerhaltend!

⇒ Diagonalisiere mit Bogoliubov-Transform.

$$\hat{\eta}_j = \dots S\hat{a} + \dots S\hat{a}^\dagger$$

(mische Erzeuger & Vernichter)

Es ergibt sich (aus ~~dem~~ Nebenbed. in gegeben):  
 $\mu = U\alpha + \dots$

$$\hat{S} \hat{a}_j = \sum_k \frac{1}{\sqrt{M}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}_j} \hat{b}_k$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{mf} = E_{mf}^{-\mu \bar{N}} + \sum_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k \left( \epsilon_k^{-\mu} + \frac{U}{2} (4|\alpha|^2 - 1) \right) + \frac{U}{2} \sum_k \left( \alpha^{*2} \hat{b}_k \hat{b}_{-k} + \alpha^2 \hat{b}_k^+ \hat{b}_{-k}^+ \right)$$

Wir finden:  $\mu = \min(\epsilon_k) + \frac{U}{2} + U\bar{n}$  (aus Minimierung von  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \mu \bar{N}$  unter Nebenbed.:  $\bar{n}$  vorgegeben!)  
 $\Rightarrow$  für  $(k, -k)$ -Moden:

$$\hat{H}_{(k,-k)} = (\hat{b}_k^+ \hat{b}_k + \hat{b}_{-k}^+ \hat{b}_{-k}) (\epsilon_k + U\bar{n}) + U\bar{n} (\hat{b}_k \hat{b}_{-k} + \hat{b}_k^+ \hat{b}_{-k}^+)$$

(wenn  $\alpha \in \mathbb{R}$ )

$\Rightarrow$  diagonalisiert durch

$$\hat{b}_k = u_k \hat{\eta}_k + v_k \hat{\eta}_{-k}^+$$

(wir haben hier:  $u_k, v_k \in \mathbb{R}$ ,  $v_{-k} = v_k$ ,  $u_{-k} = u_k$ ,  $u_k^2 = 1 + v_k^2$ )

$\Rightarrow$  .... (fordere:  $\hat{\eta}_k \hat{\eta}_{-k}$ -Terme verschwinden)

$\Rightarrow$

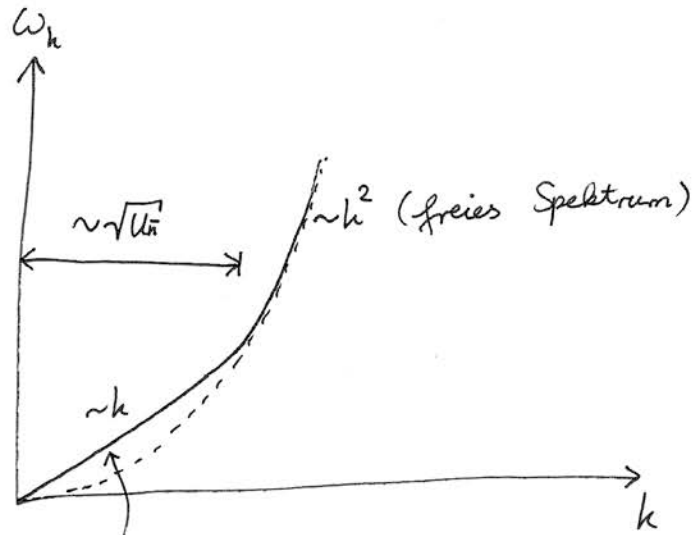
~~$\hat{H}_{mf}$~~

$$\hat{H}_{mf} = \text{const} + \sum_k \hbar \omega_k \hat{\eta}_k^+ \hat{\eta}_k$$

mit

$$\hbar \omega_k = \sqrt{\epsilon_k (\epsilon_k + U\bar{n})}$$

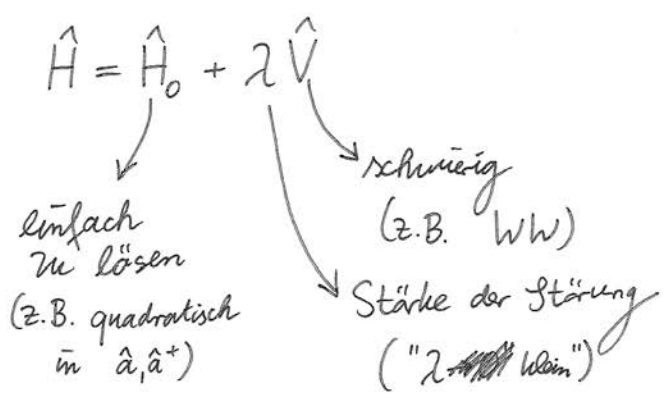




Schallwellen (d.h.  $\omega_k \sim |k|$ )  
bei kleinen  $k$ !

~~102~~

# 6. Störungsrechnung

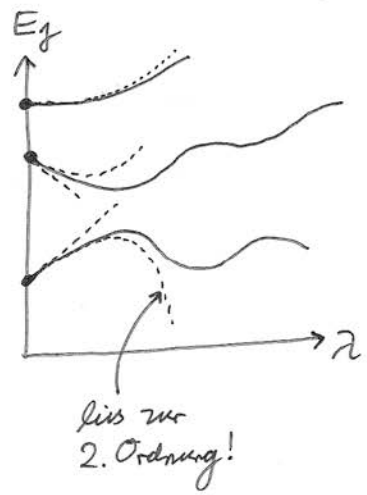


⇒ Taylorentwicklung in  $\lambda$

z.B. zeitunabhängige Störungsrechnung

$$E_j = E_j^{(0)} + \lambda \langle j | \hat{V} | j \rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq j} \frac{|\langle k | \hat{V} | j \rangle|^2}{E_j^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots$$

↑ neue Eigenenergien     ↓ alte Energien  
 analog zur MF-Rechnung  
 ist immer  $< 0$  für  $j = GZ$



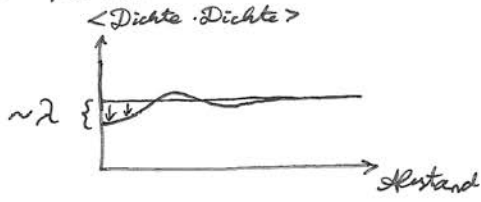
$$|j\rangle^{neu} = \underbrace{|j\rangle}_{\text{alter Eigenvektor}} + \lambda \sum_{k \neq j} |k\rangle \frac{\langle k | \hat{V} | j \rangle}{E_j^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots$$

# Beispiele für Anwendungen

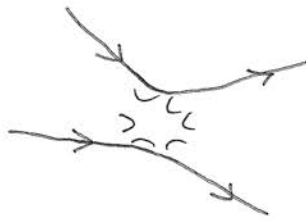
- Fermi-/Bose-Gas

⇒ schwache WW

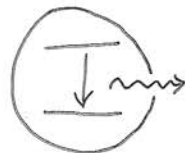
⇒ Korrelationen durch WW! ⇒ Energie-Absenkung!



⇒ Streuung von Teilchen



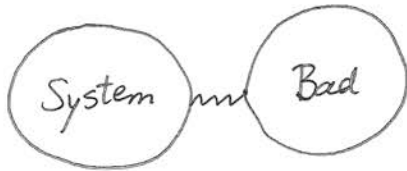
- Atom + Strahlungsfeld



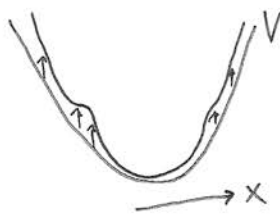
⇒ Spontane Emission: Rate = ?

⇒ Energieverschiebung  
"Lamb-Shift"

(qubit + Phononen, nanomech. Resonator + Phononen, einzelner Spin + Spinwellen, ...)



- Anharmonischer Oszillator



Nützlicher Trick:

$$\int_0^\infty dt \langle j | \hat{V}_I(t) \hat{V}_I(0) | j \rangle e^{-\eta t} \quad (\eta \downarrow 0 \text{ zur Konvergenz})$$

Zeitentwicklung "im WW-Bild" (interaction picture)

$$\hat{V}_I(t) \equiv e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$$

$$= \int_0^\infty dt \sum_f \langle j | e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} | f \rangle \langle f | \hat{V} | j \rangle e^{-\eta t}$$

$$= \int_0^\infty dt \sum_f |V_{jf}|^2 e^{-\eta t + \frac{i}{\hbar} (E_j^{(0)} - E_f^{(0)}) t}$$

$$= i\hbar \sum_f \frac{|V_{jf}|^2}{E_j^{(0)} - E_f^{(0)} + i\hbar\eta}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\hbar} \text{Im} [ \dots ] \Big|_{\eta \downarrow 0} = \sum_f \frac{|V_{jf}|^2}{E_j^{(0)} - E_f^{(0)}} = \mathcal{S} E_j^{(2)}$$

# Feynman-Diagramme (Idee)

z.B. Fermigas,  $SE^{(2)} = ?$   
 (Energiekorrektur durch Korrelationen!)

⇒ brauchen  $\hat{V} = WW$

$$\langle \hat{V}(t) \hat{V}(0) \rangle = ?$$

$$\langle \underbrace{\hat{\Psi}_{2'}^+ \hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_2 \hat{\Psi}_{2'}}_{\text{bei } t} \underbrace{\hat{\Psi}_{1'}^+ \hat{\Psi}_1^+ \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_{1'}}_{\text{bei } 0} \rangle \cdot V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_1'|) V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_2'|)$$

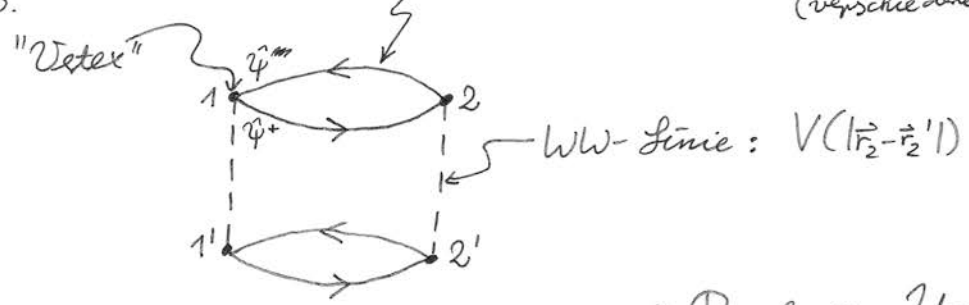
$\hat{\Psi}_1 \equiv \hat{\Psi}_{2,1}(\vec{r}_1, 0)$  usw.

↑  
im nicht-WW  
GZ

Wick ⇒ alle Paarungen!

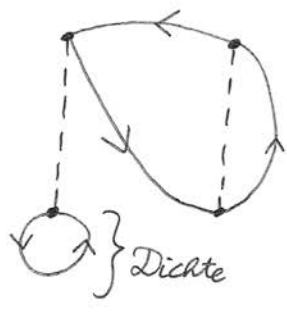
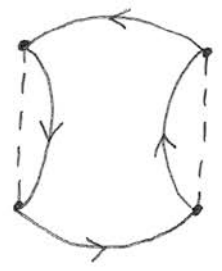
Feynman: graphisch!

z.B. "Vertex"  $\langle \hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_1 \rangle \Rightarrow$  Greensfunktionen!  
 (verschiedene Varianten existieren)

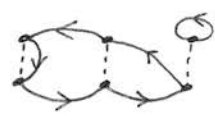


(Pfeil rein  $\Rightarrow \hat{\Psi}$   
 raus  $\Rightarrow \hat{\Psi}^+$ )

⇒ Regeln zur Umwandlung  
 in Integral  
 (mit allen Faktoren etc.)



usw. ...  
auch: höhere Ordnungen



### Feynman-Diagramme:

- für Fermionen & Bosonen
- für SE und  $\Gamma$  und  $S < \hat{\Psi}_2 + \hat{\Psi}_1 >$   
 (Energie-änderung)      (Streu-raten)      (Änderung der Grenzskt.en)

- oft nützlich: summiere "Klasse von Diagrammen"  
 (=> verschiedene Näherungen)



=> z.B. siehe Buch von Mattuck  
(-> Homepage)