2.6 Berechnung v. Zustandssummen

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

$$Z = sp\left(e^{-\beta H}\right)$$ 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 mögl. zu machen, wird Z umgeschrieben

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

folgt aus Aufgabe 15, Zettel 8,

man beachte die Analogie zw. Zeit und inverser Temperatur

$$it \leftrightarrow \beta$$

Ansatz ist wesentlich geschickter als $e^{-\beta H} = \sum_n \frac{(-\beta)^n}{n!} (H_0 + H_W)^n$,

weil die T_β-Reihe direkt als Störungsreihe 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 zum LCT sind okay, solange

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

Diagrammen.

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

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

wenn man diese Reihe rechts entwickelt:

$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_n \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\beta_1 \cdots \int_0^\beta d\beta_n \left\langle T H_W(\beta_1) \cdots H_W(\beta_n) \right\rangle_0$$

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

$$\frac{Z}{Z_0} = e^{\sum_l u_l} \quad , \quad u_l = \frac{(-1)^l}{l} \int_0^\beta d\beta_1 \cdots \int^\beta d\beta_n \left\langle T H_W(1) \cdots H_W(n) \right\rangle$$

am Ende dies jetzt als Zeit behandelte β_i mit ihren korrigieren, wegen Einsetzen der Grenzen, weil WW-Bild verfälscht wurde

oft ist Energieverschiebung aufgrund einer WW wichtig:

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

$\uparrow$ Gesamtenergie $\qquad$ $\uparrow$ freier Anteil $\qquad$ $\uparrow$ WW-Anteil $\equiv \Delta E$ bzgl. Vielteilchen-WW

Anwendungsbeispiel

Elektron-Phonon-WW in einem Band

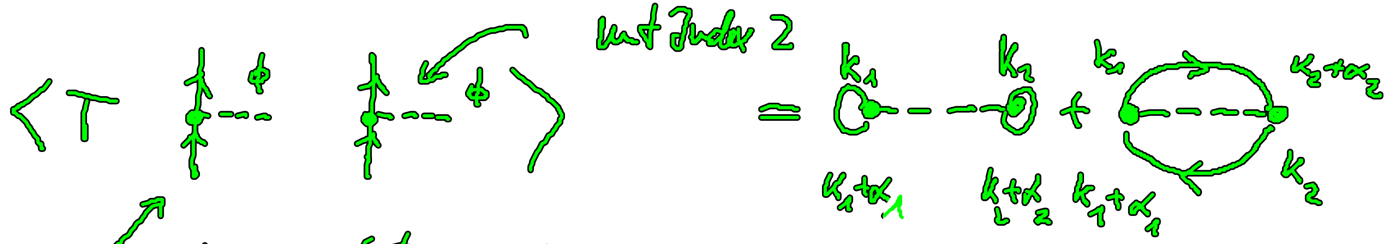
$$H_W = \sum_{\alpha,k} g_\alpha \; a_k^+ \; a_{k+\alpha} \left(b_\alpha^+ + b_{-\alpha} \right)$$

$$u_e = \frac{(-1)^e}{e} \int_0^\beta d\beta_1 \cdots \int_0^\beta d\beta_e \left\langle T_\beta H_w(\beta_1) \cdots H_w(\beta_e) \right\rangle$$

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

$= 0$, weil man eine ungeradzahlige Anzahl v. b_α, b_α^+ hat

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



$$\underbrace{\sum_{k_1,\alpha_1} a^+_{k_1}\, a_{k_1+\alpha_1} \underline{(b^+_{\alpha_1} + b_{-\alpha_1})\, g_{\alpha_1}}}_{\text{alle von } \beta_1}$$

$$\underbrace{\sum_{k_2\,\alpha_2} a^+_{k_2}\, a_{k_2+\alpha_2} \underline{(b^+_{\alpha_2} + b_{-\alpha_2})\, g_{\alpha_2}}}_{\text{alle von } \beta_2}$$

Das sind die einzige Diagramm, sind verbunden und ergeben unterschiedliche Ergebnisse → müssen in U_e laut LCT mitgenommen.

$$\frac{Z}{Z_0} = e^{\sum_\ell u_\ell} = \text{bis zur 2. Ordnung} =$$

$$= e^{\overset{\ell=1}{0} + \frac{1}{2}\int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 \sum_{\substack{\alpha_1\alpha_2\\ \kappa_1\kappa_2}} g_{\alpha_1} g_{\alpha_2} \delta_{\alpha_1\alpha_2}\left[(n_{\alpha_1}+1)e^{-\hbar\omega_\alpha|\beta_1-\beta_2|} + n_{\alpha_1} e^{\hbar\omega_\alpha|\beta_1-\beta_2|}\right]}$$

$$\Big(G_{\kappa_1,\kappa_1+\alpha_1}(\beta_1-\beta_1)\, G_{\kappa_2,\kappa_2+\alpha_2}(\beta_2-\beta_2)$$

$$+ G_{\kappa_1,\kappa_2+\alpha_2}(\beta_1-\beta_2)\, G^{+}_{\kappa_1+\alpha_1,\kappa_2}(\beta_1-\beta_2)\Big)$$

Korrelation des Propagators die aufgrund der frühen Brechung des Propagators bzgl. WW mit Zeit entsteht

$$= \exp\left(\frac{1}{2}\int_0^\beta d\beta_1 \int^\beta d\beta_2 \sum_{\alpha_1,\kappa_1} g^2_{\alpha_1}\left[(n_{\alpha_1}+1)e^{-\omega_\alpha\hbar|\beta_1-\beta_2|} + n_\alpha e^{\omega_\alpha\hbar|\beta_1-\beta_2|}\right]\right.$$

$$\cdot \Big(\delta_{\kappa_1,\kappa_1+\alpha_1}\cdot n^F_{\kappa_1} e^{+\hbar\omega_1(\beta_1-\beta_1)} \cdot \delta_{\kappa_2,\kappa_2+\alpha}(1-n^F_{\kappa_2+\alpha}) e^{-\hbar\omega_{\kappa+\alpha}(\beta_2-\beta_2)}$$

unendlich große Wellenlänge des Phonons

→ Term 𝔍 nicht

verlangt $\alpha_1 = 0$

$$+\delta_{k_1,k_2+\alpha_2}\, n^F_{k_1}\, e^{\hbar\omega_k(\beta_1-\beta_2)} \cdot \delta_{k_1+\alpha_1,k_2} \cdot \left(1-n^F_{k_1+\alpha_1}\right) e^{-\hbar\omega_{k_1+\alpha_1}(\beta_1-\beta_2)} \Big]$$

$$= \exp\left(\int_0^\beta dt \int_0^t ds \sum_{\alpha,k} g_\alpha^2 \left[(n_\alpha+1) e^{-\omega_\alpha \hbar s} + n_\alpha e^{\omega_\alpha \hbar s} \right] n^F_k e^{\omega_k \hbar s} \left(1-n^F_{k+\alpha}\right) e^{-\omega_{k+\alpha}\hbar s} \right.$$

$\alpha_1 = -\alpha_2$

$k_1 = k$

in der Summe

$$\Delta E = -\partial_\beta \ln e^{\cdots} = -\sum_{k,\alpha} \int^\beta ds \left[(n_\alpha+1) e^{-\omega_\alpha \hbar s} + n_\alpha e^{\omega_\alpha \hbar s} \right] g_\alpha^2 \cdot \left(1-n^F_{k+\alpha}\right) e^{-\omega_{k+\alpha}\hbar s}\, n^F_k e^{\omega_k \hbar s}$$

oben Grenze β

$$\Delta E = -\sum_{k,\alpha} g_\alpha^2 n^F_k \left(1-n_{k+\alpha}\right) \cdot \left\{ \frac{(n_\alpha+1)\, e^{\hbar(\omega_k-\omega_{k+\alpha}-\omega_\alpha)s}}{\hbar(\omega_k-\omega_{k+\alpha}-\omega_\alpha)} + \frac{n_\alpha\, e^{\hbar(\omega_k-\omega_{k+\alpha}+\omega_\alpha)s}}{\hbar(\omega_k-\omega_{k+\alpha}+\omega_\alpha)} \right\}$$

untere Grenze $\nearrow 0$

$\longrightarrow$ Das ist die Energiekorrektur die aus der Wechselwirkung v. El mit Phonon resultiert, bis $\ell = 2$.

2 Beiträge : $n_\alpha + 1 \rightarrow$ Phononemission

$n_\alpha \rightarrow$ Phononabsorption

untere Grenze $s = 0$ reproduziert den Polaronshift aus der Grundlagen VL, wenn $n_\alpha \gg 1$ im Hochtemperaturfall, $n_{k+\alpha} \ll 1$.

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

$$= \sum_{k,\alpha} \frac{2 g_\alpha^2 \hbar \omega_\alpha n_k^F n_\alpha}{\left[(\omega_{k+\alpha} - \omega_k)^2 - \omega_\alpha^2 \right] \hbar^2}$$

$\hat{=}$ dem bekannten Polaronshift.