

Die Einteilchen-Greenfunktion für ein Elektron- Zusammenfassung

Die Wellenfunktion des Grundzustandes eines Systems von N wechselwirkenden Elektronen \rightarrow eine komplizierte Funktion von N Orts-Spin-Koordinaten:

$$\Psi_0^{(N)} = \Psi_0(x_1, x_2, \dots, x_N).$$

Anwendung von **Feldoperatoren** $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ bzw. $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ auf Ψ_0 vernichtet oder erzeugt ein Elektron mit Spin α am Ort \mathbf{r} :

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r})\Psi_0^{(N)} \rightarrow \Psi^{(N-1)} \quad \text{bzw.} \quad \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\Psi_0^{(N)} \rightarrow \Psi^{(N+1)}.$$

Dasselbe Problem nicht in der Ortsdarstellung ("erste Quantisierung"), sondern in der **Teilchenzahldarstellung** ("zweite Quantisierung"):

$$\Psi_0^{(N)} = |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots, n_\infty \rangle \quad \text{mit} \quad \sum_{i=1}^{\infty} n_i = N,$$

mit den n_i gleich 0 oder 1 (wegen dem Pauli-Prinzip).

Anwendung der **c-Operatoren** \hat{c}_j bzw. \hat{c}_j^\dagger vernichtet oder erzeugt einen elektronischen Einteilchen-Quantenzustand $|j \rangle$:

$$\hat{c}_j |\Psi_0^{(N)} \rangle = |\Psi^{(N-1)} \rangle \propto |n_1, n_2, \dots, n_j - 1, \dots, n_\infty \rangle$$

bzw.

$$\hat{c}_j^\dagger |\Psi_0^{(N)} \rangle = |\Psi^{(N+1)} \rangle \propto |n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots, n_\infty \rangle .$$

Zusammenhang zwischen Feldoperatoren und c -Operatoren unter Verwendung der Einteilchen-Basisfunktionen $\psi_i(\mathbf{x})$:

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i(x) \hat{c}_i \quad \text{bzw.} \quad \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^*(x) \hat{c}_i^\dagger .$$

Definition einer **Einteilchen-Greenfunktion** in einem wechselwirkenden Elektronensystem (s. Skriptum, Glg. (1.1)):

$$iG_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \langle \Psi_0^{(N)} | \hat{T} \left[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{r}t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t') \right] | \Psi_0^{(N)} \rangle .$$

\hat{T} ist der **Zeitoperator**, der sicherstellt, daß die Zeitargumente in dieser Gleichung stets der Bedingung $t > t'$ genügen. Im Falle $t < t'$ sorgt dieser Operator für eine Vertauschung der beiden Feldoperatoren, was im Fall von Elektronen (Fermionen) zu einem negativen Vorzeichen des Matrixelementes führt.

Das "H" bei den Feldoperatoren bedeutet, daß diese nicht in der **Schrödinger-**, sondern in der **Heisenberg-**Darstellung zu verwenden sind.

Für $t > t'$ gilt:

$$iG_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \left(\langle \Psi_0^{(N)} | \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{r}t) \right) \left(\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t') | \Psi_0^{(N)} \rangle \right)$$

bzw.

$$iG_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \underbrace{\left(\hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{r}t) | \Psi_0^{(N)} \rangle \right)^\dagger}_{[\Psi_\alpha^{(N+1)}(\mathbf{r}t)]^*} \underbrace{\left(\hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t') | \Psi_0^{(N)} \rangle \right)}_{\Psi_\beta^{(N+1)}(\mathbf{r}'t')} .$$

Interpretation der Greenfunktion:

Die Greenfunktion beschreibt die Überlappung der Vielteilchenfunktion von $(N+1)$ Elektronen, wenn das zusätzliche Elektron vom Spin-Orts-Zeitpunkt $(\beta\mathbf{r}'t')$ zum Spin-Orts-Zeitpunkt $(\alpha\mathbf{r}t)$ propagiert ist, bzw.

die Greenfunktion gibt die Wahrscheinlichkeit an, ein Elektron mit Spin β , das sich zum Zeitpunkt t' sich am Ort \mathbf{r}' befunden hat, zum späteren Zeitpunkt t am Ort \mathbf{r} aufzufinden, wobei seine Spin-Orientierung α ist.

Was hat man von der Greenfunktion?

Wie im weiteren Verlauf dieser LV klar wird, ergibt sich aus der Greenfunktion mittelbar oder unmittelbar eine große Zahl von (auch meßbaren!) Informationen über die Physik der Elektronen im Elektronengas.

Wie erhält man die Greenfunktion?

Die Greenfunktion $G_{\alpha,\beta}$ kann im Fall eines Systems von untereinander wechselwirkenden Elektronen nicht in geschlossener Form angegeben werden.

Man kann sie jedoch im Prinzip mit beliebiger Genauigkeit **störungstheoretisch** berechnen.

Ausgangspunkte dieser Störungsentwicklung:

- (1) der die Wechselwirkung beschreibende Operator \hat{H}_1 ,
- (2) die **wechselwirkungsfreie** Greenfunktion $G_{\alpha,\beta}^0$.

Einige Details dieser Störungsentwicklung finden Sie im Abschnitt 1.2.1 des Skriptums. Der formale Zusammenhang zwischen einer die Wechselwirkung enthaltenden Greenfunktion G und einer wechselwirkungsfreien Greenfunktion G^0 lautet wie folgt:

$$iG_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \langle \Psi_0^{(N)} | \hat{T} \left[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{r}t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t') \right] | \Psi_0^{(N)} \rangle .$$

$$iG_{\alpha,\beta}^0(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \langle \Phi_0^{(N)} | \hat{T} \left[\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{r}t) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{r}'t') \right] | \Phi_0^{(N)} \rangle .$$

Dabei ist $\Phi_0^{(N)}$ die Grundzustandsfunktion eines Systems von N nicht-wechselwirkenden Elektronen, und $\hat{\psi}_I$ bedeutet, daß die Feldoperatoren in der **Interaction-Darstellung** genommen werden müssen [s. Gleichungen (1.10) und (1.11) im Skriptum].