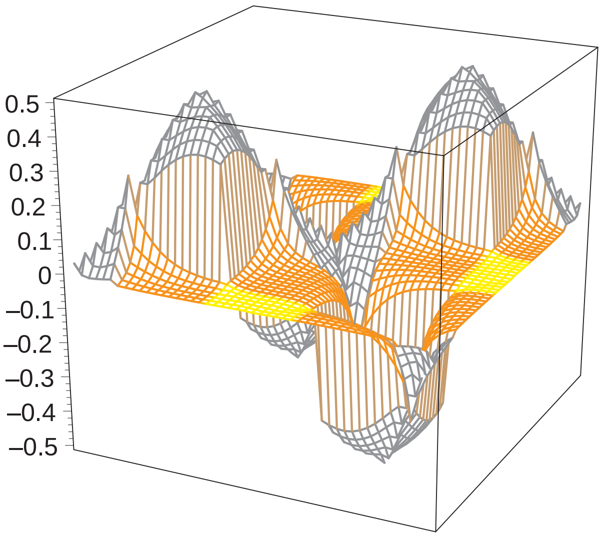
Flussgleichungsrenormierung eines spinlosen eindimensionalen Fermisystems



Diplomarbeit

vorgelegt von

Caspar P. Heidbrink

im

Institut für Theoretische Physik
der Universität zu Köln

Juni 2001

Inhaltsverzeichnis

Vorwort

In den vergangenen Jahren und Jahrzehnten ist das Interesse an der Physik niedrigdimensionaler Quantensysteme stetig gewachsen. Die Fortentwicklung experimenteller Präparations- und Untersuchungsmethoden hat die Realisierung derartiger Systeme ermöglicht und zur Entdeckung einer Vielzahl neuer Strukturen und Phänomene wie der Hochtemperatursupraleitung, den Quantendrähten etc. geführt.
Aufgabe der Theorie der kondensierten Materie ist es, die Modellierung solcher Systeme voranzutreiben und deren Physik in qualitativer und quantitativer Hinsicht richtig zu beschreiben. Ein bedeutendes Problem ist dabei, dass viele dieser Vielteilchensysteme stark korreliert sind, weshalb eine Anwendung quantenmechanischer Standardtechniken wie der Störungsrechnung unzureichend ist. Zudem spielt die Dimension des Systems eine entscheidende Rolle für die zugrundeliegende Physik. So verhalten sich Fermionensysteme in einer Dimension gewöhnlich wie Luttingerflüssigkeiten und damit qualitativ anders als entsprechende Systeme in höheren Dimensionen, die sich normalerweise wie Fermiflüssigkeiten verhalten. Es existiert bislang keine theoretische Methode, die in der Lage wäre, Systeme in einer und in mehreren Dimensionen einheitlich zu beschreiben. Daher muss man bislang bei der Untersuchung der Systeme immer zuerst die Dimension festlegen, bevor man die theoretischen Untersuchungen beginnen kann. Eine Methode, die eine dimensionsunabhängige Untersuchung quantenmechanischer Vielteilchensysteme erlaubt, wäre daher ein bedeutender Fortschritt.
Dabei wäre eine solche Methode nicht nur ein begrifflicher Gewinn, der es erlaubte, eine einheitliche Sichtweise von Systemen in verschiedenen Dimensionen zu entwickeln. So sind z.B. niedrigdimensionale Quantensysteme in der Natur nur näherungsweise ein- oder zweidimensional und noch ist unklar, wie die qualitativen Übergänge beim Wechsel der Dimension zu verstehen sind. Eine dimensionsunabhängige Methode könnte somit zu einem besseren Verständnis der Physik führen.
Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, erste Schritte in der Untersuchung zu machen, ob die Methode der *kontinuierlichen unitären Transformationen* nach Wegner, die sogenannte Flussgleichungsmethode, einen solchen dimensionsunabhängigen Zugang bietet.
Dazu wird ein eindimensionales exakt lösbares Fermionenmodell mit der Flussgleichungsmethode in einer Abwandlung von Mielke, Knetter und Uhrig untersucht. Dieser Zugang orientiert sich an einem Bild von Quasiteilchen, das den Fermiflüssigkeiten und somit eigentlich höheren Dimensionen zuzuordnen ist. Ist es möglich, mit diesem Zugang dennoch das Verhalten der eindimensionalen Luttingerflüssigkeit wiederzugeben, so stellt er einen hervorragenden Anwärter für eine dimensionsunabhängige Beschreibungsmethode dar.

Übersicht

In *Kapitel 1* werden die grundlegenden Unterschiede zwischen ein- und mehrdimensionalen Fermionensystemen und ihren jeweiligen Standardbeschreibungen dargestellt. Anschließend wird das untersuchte Modell, ein Modell spinloser Fermionen auf einer Kette, vorgestellt und einige der exakten Resultate für die physikalische Größen bei $T = 0$ präsentiert. Dann wird die Methode der Flussgleichungen als Methode kontinuierlicher unitärer Transformationen vorgestellt und auf verschiedene Ansätze eingegangen.

In *Kapitel 2* wird der konkrete Ansatz der Flussgleichungen für das untersuchte Modell in seiner abstrakten Form dargestellt.

Kapitel 3 beschäftigt sich mit einer ersten Näherung der Flussgleichungen, die in dieser Arbeit strukturerhaltend genannt wird. Dabei werden alle Terme in den entstehenden Differentialgleichungen bis zur 2-Teilchen-Wechselwirkung einschließlich und damit bis zur Ordnung V^2 der Wechselwirkung vollständig berücksichtig. Wechselwirkungen, die drei oder mehr Teilchen betreffen, werden vernachlässigt. Diese Differentialgleichungen werden numerisch integriert. Für nicht zu große Werte von V lassen sich Grundzustandsenergie, Dispersion und Fermigeschwindigkeit sowie die für die eindimensionalen Luttingerflüssigkeiten typische Impulsverteilung sehr gut reproduzieren. Für größere Werte von V divergiert das Differentialgleichungssystem, was sich aber durch eine analytische Untersuchung des Systems mit nur 4 Kettenplätzen als Artefakt der Näherung begreifen lässt.

In *Kapitel 4* werden die genäherten Flussgleichungen um eine Mitnahme von 3-Teilchenwechselwirkungen erweitert, um damit das Konvergenzverhalten und die physikalischen Resultate quantitativ zu verbessern. Es zeigt sich aber, dass eine allzu grobe Beschreibung der Wechselwirkungen nicht zum Ziel führt.

Abschließend werden die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf weiterführende Untersuchungen gegeben.

1. Einleitung

1.1. Ein Modell eindimensionaler Fermionen

In der vorliegenden Arbeit wird ein eindimensionales Modell spinloser Fermionen mit Hilfe der Flussgleichungsmethode untersucht. Eindimensionale wechselwirkende Fermionenmodelle verhalten sich prinzipiell nicht wie Fermiflüssigkeiten. Vielmehr zeigen sie das sogenannntes Luttingerflüssigkeitsverhalten. So gibt es eine qualitativ andere Impulsverteilung und auch die Korrelationsfunktionen haben andere Gestalt. Zudem sind die Beschreibungen der Fermi- bzw. Luttingerflüssigkeiten nicht auf den jeweils anderen Fall übertragbar. In diesem Unterkapitel wird nun zunächst auf die Hauptunterschiede zwischen Fermi- und Luttingerflüssigkeiten und ihrer Beschreibungen eingegangen. Dies motiviert die Suche nach einem einheitlichen Zugang und damit die Anwendung der Flussgleichungsmethode. Danach wird das zu untersuchende Modell vorgestellt. Es ist mittels Bethe-Ansatz exakt lösbar. Die Lösungen dieses Modells sind daher ein Prüfstein für die Ergebnisse, die mit der Flussgleichungsmethode erhalten werden.

1.1.1. Fermi- und Luttingerflüssigkeiten

Wechselwirkende Vielteilchensysteme zu verstehen, ein Bild ihrer Anregungen zu entwickeln und thermodynamische Größen abzuleiten ist *die* Aufgabe der Theorie der kondensierten Materie. Trotz der großen Komplexität solcher Systeme, ist es in vielen Fällen möglich, ein einfaches Bild zu entwickeln. Die Ideen stammen von Landau (Ref.[1]). Er postulierte, dass Vielteilchensysteme oftmals mit einem analogen Teilchenbild zu beschreiben sind wie das entsprechende freie System. Mit "adiabatisch eingeschalteter" Wechselwirkung bleiben die Quantenzahlen des ungestörten Systems sinnvoll. Alle Größen wie Masse, Korrelationsexponenten etc. werden renormiert. Die neuen Teilchen mit den ursprünglichen Quantenzahlen werden *Quasiteilchen* genannt. Zwischen dem gestörten und dem ungestörten System wird eine kontinuierliche Abbildung angenommen: die Landausche Quasiteilchen-Abbildung[1].
Fermionische Systemen, die sich auf diese Art auf ein freies Elektronengas zurückführen lassen, werden als Fermiflüssigkeiten bezeichnet[2]. Es gibt aber auch viele fermionische Systeme, die sich einem solchen Zugang entziehen. Insbesondere eindimensionale wechselwirkende Fermionensysteme sind mit den Standardtechniken der Störungsrechnung prinzipiell nicht zu beschreiben.

[1]Eine konkrete Realisierung dieser Abbildung existiert im Allgemeinen aber nicht.
[2]Das Konzept, Quasiteilchen ausgehend von einem ungestörten System mittels Störungsrechnung zu entwickeln, hat sich auch bei vielen weiteren Systemen als gangbar erwiesen.

Eindimensionale Fermionensysteme werden ebenfalls schon lange untersucht. Insbesondere das exakt lösbare Modell von Tomanaga und Luttinger führt zu einem tieferen Verständnis der Eigenheiten von Fermionen in einer Dimension (s. Ref.[2, 3, 4]). Haldane führte schliesslich für eindimensionale Fermionensysteme in Ref.[5] den Begriff der Luttingerflüssigkeiten ein. Er postulierte, dass solche Modelle ohne Anregungslücke bezüglich ihrer niedrigen Anregungen eine neue Universalitätsklasse bilden[3]. Ihr Verhalten kann durch das Tomanaga-Luttinger-Modell verstanden werden, welches mittels Bosonisierung gelöst wird. Ein wesentlichster Unterschied zwischen Fermiflüssigkeiten und den Luttingerflüssigkeiten ist die Impulsverteilung bei $T = 0$. Während Fermiflüssigkeiten bei k_F einen diskreten Sprung der Grösse $Z_{k_F} > 0$ in der Impulsverteilung aufweisen, ist der Übergang bei Luttingerflüssigkeiten kontinuierlich. Des Weiteren folgen z.B. 1-Teilchen-Korrelationsfunktionen bei Fermiflüssigkeiten $\frac{1}{r}$-Gesetzen, bei Luttingerflüssigkeiten ist ein allgemeines algebraisches Verhalten ($r^{-\alpha}$ mit $\alpha < 1$) vorzufinden.

Fermiflüssigkeitstheorie

In diesem Abschnitt wird kurz auf die Theorie der Fermiflüssigkeiten eingegangen und ein grundlegendes mikroskopisches Verständnis entwickelt. Anschließend wird argumentiert, warum dieser Zugang in einer Dimension versagt. Genauere Analysen hierzu sind in in vielen Übersichtsartikeln und Büchern zu finden (u.a. in Ref.[6, 7, 8]).

Allgemeines Ausgangspunkt der Theorie der Fermiflüssigkeiten ist das Modell freier Elektronen mit der Dispersion

$$\varepsilon_k^{\text{frei}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad . \tag{1.1}$$

Die entsprechende Impulsverteilung n_k^{frei} ist bei $T = 0$ eine Stufenfunktion, die bei $k = k_F$ von 1 auf 0 springt.
Wichtige Größen zur Untersuchung physikalischer Systeme in theoretischer wie experimenteller Hinsicht sind Spektralfunktionen. Die 1-Teilchen-Spektralfunktion $A(k, \omega)$ gibt die Verteilung der Energien ω für das Hinzufügen oder Entfernen eines Teilchens mit Impuls k an. Die Spektralfunktion entspricht wiederum dem Imaginärteil der (retardierten) 1-Teilchen-Greensfunktion $G(k, \omega)$ der Teilchen.
Im freien Fall handelt es sich bei der Spektralfunktion einfach um eine δ-Distribution[4]

$$\begin{aligned} A^{\text{frei}}(k, \omega) &= \delta(\omega - (\varepsilon_k - \mu)) \qquad \text{bei } \omega > \mu \\ &= -\frac{1}{\pi}\text{Im}\frac{1}{\omega - (\varepsilon_k - \mu) + i\delta} = -\frac{1}{\pi}\text{Im}G^{\text{frei}}(k, \omega) \quad . \end{aligned} \tag{1.2}$$

[3] In Ref.[7] wird sogar von einer übergeordneten Klasse der "Singulären Fermiflüssigkeiten" gesprochen, da Luttingerflüssigkeitsverhalten mittlerweile auch bei mehrdimensionalen Systemen gefunden worden sein soll und mannigfaltige Gründe für ein Abweichen von Fermiflüssigkeitsverhalten klassifiziert werden können.

[4] Das infinitesimal kleine, aber positive δ ist dabei eine Reminiszens an das adiabatische Hinzufügen der Teilchen oder Löcher und wird am Ende aller Berechnungen gegen 0 geschickt.

Ein neues Teilchen mit Impuls k existiert gemäß der Spektralfunktion nur zu genau definierter Energie und bleibt auch für alle Zeit in diesem Zustand, der Eigenzustand des Systems ist.
Im allgemeinen Fall mit Wechselwirkung gilt

$$G(k,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(k,x)}{\omega - \mu - x + i\delta \, \mathrm{sign}(\omega - \mu)} \quad . \tag{1.3}$$

Damit gilt auch hier die Beziehung

$$A(k,\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} G(k,\omega) \quad . \tag{1.4}$$

Natürlich weicht die allgemeine Greensfunktion von der freien Greensfunktion ab. Diese Abweichung wird formal mit der 1-Teilchen-Selbstenergie $\Sigma(k,\omega)$ beschrieben

$$(G(k,\omega))^{-1} = (G^{\mathrm{frei}}(k,\omega))^{-1} - \Sigma(k,\omega) \tag{1.5}$$

Das physikalische Bild ist nun, dass das hinzugefügte Teilchen mit den schon vorhandenen wechselwirkt und diese in andere Zustände transferiert. Dies zieht weitere Wechselwirkungen und Umsetzungen nach sich und so weiter und so fort. Störungstheoretisch ergäbe sich (unter Berücksichtigung aller Erhaltungssätze) das Bild des Zustandes mit $N+1$ Teilchen als

$$|\psi_k^{N+1}\rangle = Z_k c_k^\dagger \, |\psi^N\rangle + \frac{1}{V^{\frac{3}{2}}} \sum_{k_1 k_2 k_3} \alpha_{k_1 k_2 k_3} c_{k_3}^\dagger c_{k_2} c_{k_1}^\dagger \delta_{k,k_1-k_2+k_3} |\psi^N\rangle + \dots \quad , \tag{1.6}$$

wobei die $c^\dagger$,c die fermionischen Erzeuger und Vernichter des freien Modells sind. Z_k lässt sich damit auch einfach als Überlapp-Integral verstehen

$$Z_k = \langle \psi_k^{N+1} | c_k^\dagger | \psi^N \rangle \quad . \tag{1.7}$$

Daher nennt man Z_k auch die Quasiteilchen-Amplitude. Eine zentrale Voraussetzung der Landauschen Fermiflüssigkeitstheorie ist nun, dass Z_{k_F} endlich ist und dass im wechselwirkenden System die tiefliegenden Anregungen mit den ursprünglichen Quantenzahlen k beschrieben werden können.
Die Wechselwirkungen bedingen im Allgemeinen ein Aufweichen des Quasiteilchen-Peaks und damit eine endliche Lebensdauer τ des Quasiteilchens. Man kann die Spektralfunktion und dementsprechend auch die Greensfunktion in einen kohärenten und einen inkohärenten Anteil aufteilen. So ergeben sich folgende formale Relationen mit Z_k (s. Ref.[7]):

$$\begin{aligned} G_{koh} &= \frac{Z_k}{\omega - (\varepsilon_k - \mu) + i/\tau_k} \\ \frac{1}{\tau_k} &= Z_k \mathrm{Im}\Sigma(k_F, \omega = 0) \\ Z_k &= \left(1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial \omega}\right)^{-1}_{\omega=0,k=k_F} \end{aligned} \tag{1.8}$$

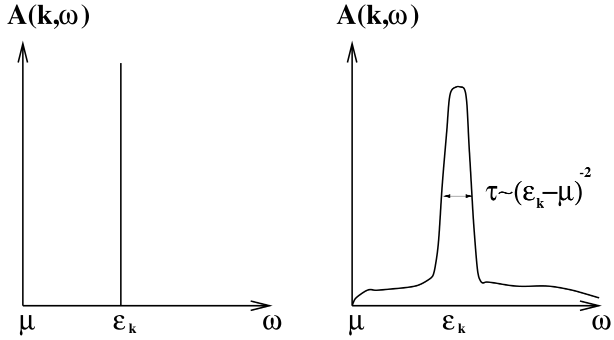


Abbildung 1.1.: Spektrale Verteilungen. Links: ohne Wechselwirkung, rechts: mit Wechselwirkung

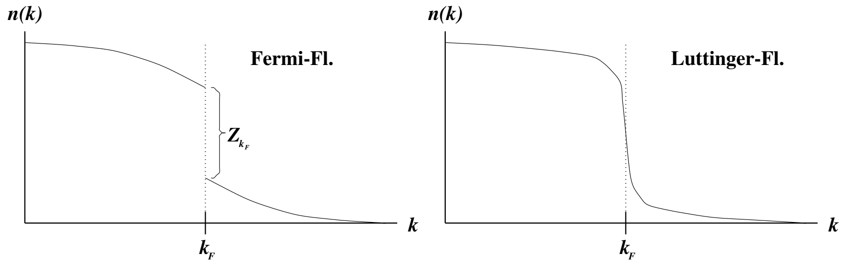


Abbildung 1.2.: Typische Impulsverteilungen

Man kann folgern, dass die Lebensdauer τ_k reziprok zur Halbwertsbreite des Peaks ist. Nahe der Fermikante ist die Halbwertsbreite wiederum proportional zu $(\varepsilon_k - \mu)^2$ und die Quasiteilchen haben dort sehr lange Lebensdauern.
Ein weiteres Resultat der Fermiflüssigkeitstheorie ist, dass $\lim_{k\to k_F} Z_k$ gerade die Größe des Sprunges in der Impulsverteilung beschreibt. Dies setzt einen glatten Verlauf der Selbstenergie um $k = k_F$ und $\omega = 0$ voraus. Eine Näherung der Impulsverteilung in der Nähe der Fermikante ist (vgl. Ref.[9] und Abbildung 1.2)

$$n_{k<k_F} = \frac{1 + Z_{k_F}}{2} + C_1 \ln(\tfrac{|k-k_F|}{\pi})\tfrac{|k-k_F|}{\pi} + C_2\tfrac{|k-k_F|}{\pi} \quad . \tag{1.9}$$

Dabei sind C_1, C_2 modellabhängige Konstanten.

Mikroskopisches Verständnis der Fermiflüssigkeiten Auf Basis der Störungstheorie soll nun ein mikrokopisches Verständnis der Fermiflüssigkeiten entwickelt werden. Abbildung 1.3 zeigt die drei möglichen Korrekturen 2. Ordnung zur freien Theorie. In den Diagrammen (a) und (b) ist der Zwischenzustand ein Teilchen-Loch-Paar. Diagramm (c) zeigt Prozess mit zwei Teilchen als Zwischenzustand.

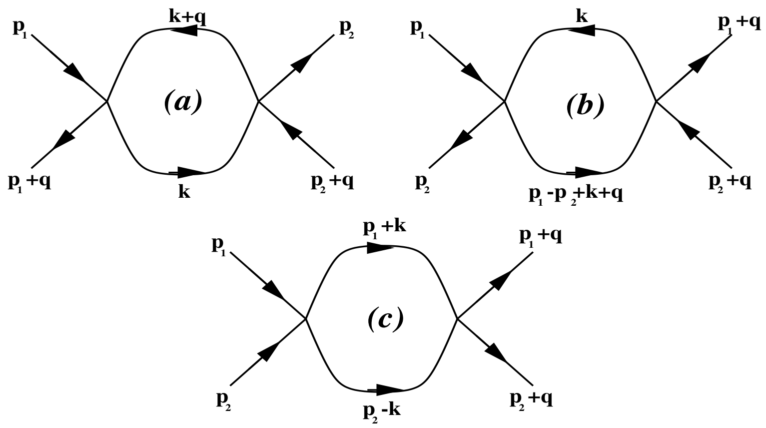


Abbildung 1.3.: Diagramme der 2.Ordnung der Störungstheorie aus der Theorie freier Fermionen nach [7]

Wie später noch deutlich werden wird, ist das entscheidende Diagramm bei abstoßender Wechselwirkung Diagramm (a).
Es seien tiefe Temperaturen vorausgesetzt und nur kleine Impulsüberträge $\mathbf{q}$ gestattet[5]. Bei tiefen Temperaturen ist die Wechselwirkung auf einen kleinen Bereich um die Fermifläche begrenzt (da $n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}} \sim \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)$. Der Bereich, in dem Teilchen bzw. Löcher existieren, entspricht kleinen Schalen um die Fermifläche, deren Volumen proportional $v_F\mathbf{qk}$ ist. Damit ist das Streupotential im erlaubten Bereich im Wesentlichen konstant und wird mit g notiert. Auch die Dispersion läßt sich dort linearisieren ($\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \simeq v_F\mathbf{qk}$).
Aus Diagramm (a) ergibt sich so die Teilchen-Loch-Suszeptibilität

$$\chi(\mathbf{q},\omega) = g^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{\omega - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) + i\delta} \tag{1.10}$$

näherungsweise als

$$g^2 \frac{v_F\mathbf{qk}}{\omega - v_F\mathbf{qk} + i\delta} \frac{d}{d\varepsilon_{\mathbf{k}}} f \quad . \tag{1.11}$$

Dieser Ausdruck kann beide Vorzeichen annehmen und wird singulär[6] für $\omega = v_F\mathbf{qk}$. Die Ableitung der Verteilungfunktion n_k ist näherungsweise eine δ-Peak an der Fermikante. Damit ergibt eine Auswertung des Imaginärteils von Gleichung 1.10 ein lineares Verhalten in ω

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\chi(\mathbf{q},\omega) &= g^2\pi\, N(0)\frac{\omega}{qv_F} && \text{für } \omega < qv_F \\ &= 0 && \text{sonst} \ . \end{aligned} \tag{1.12}$$

Dies ist der Absorptionsanteil der Teilchen-Loch-Suszeptibilität. Der Realteil hingegen ist

$$\mathrm{Re}\chi(\mathbf{q},\omega) = g^2 N(0)\left(1 + \frac{\omega}{qv_F}\ln\left|\frac{\omega - qv_F}{\omega + qv_F}\right|\right) \tag{1.13}$$

[5]Die fettgedruckten Größen sind Vektoren
[6]Diese Singularität ist für die kollektiven Moden in Fermiflüssigkeiten verantwortlich.

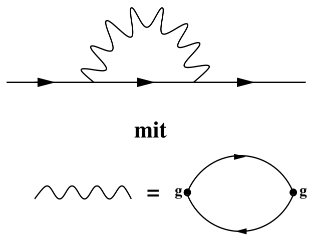


Abbildung 1.4.: 2.Ordnung Störungsrechnung zur Selbstenergie

und damit für kleine ω nahezu konstant.
Nun kann man auch erkennen, warum die anderen beiden Diagramme vernachlässigt werden. Bei Diagramm (b) steht in der zu Gleichung 1.10 korrespondierenden Gleichung ein $\omega - (\varepsilon_{p_1-p_2+k+q} - \varepsilon_k)$ im Nenner und dies ist immer endlich. Auch Diagramm (c) ist irrelevant bis auf eine $\ln\omega$-Divergenz bei $p_1 = p_2$ im Falle attraktiver Wechselwirkung[7]. Hier werde jedoch nur abstoßendes Verhalten betrachtet.
Eine genauere Analyse des Raumes, in dem die Teilchen-Loch-Anregungen bei kleinen ω existieren können (vgl. [7]), ergibt eine Begrenzung von $|q| \leq 2k_F$. - in *mehr* als einer Dimension (s. Abbildung 1.5).
Insgesamt weist Abbildung 1.4 nun den Weg zur Berechnung der Selbstenergie und damit der Lebensdauer der Quasiteilchen bei $k \simeq k_F$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(k,\omega)} = \mathrm{Im}\Sigma(k,\omega) &= g^2 N(0)\left(\frac{\omega}{E_F}\right)^2 \qquad \text{in 3d} \\ &\sim \omega^2 \ln\left(\frac{E_F}{\omega}\right) \qquad \text{in 2d} \ . \end{aligned} \tag{1.14}$$

Auch die Quasiteilchen-Amplitude bei k_F kann abgeschätzt werden, indem man sich über die Kramers-Kronig-Relation den Realteil von Σ ableitet und Gleichung 1.4 in 2. Ordnung der Störungsrechnung auswertet:

$$Z_{k_F} \simeq 1 - 2\frac{g^2 N(0)}{E_F} \ . \tag{1.15}$$

Wenn g^2 klein ist, ergibt sich wie gefordert ein endlicher Sprung Z_{k_F} an der Fermikante. Was hier nun in 2.Ordnung der Störungstheorie berechnet wurde, behält seine qualitative Gültigkeit in jeder Ordnung der Störungstheorie (vgl. Ref.[10]).

Zusammenbruch der Fermiflüssigkeitstheorie in einer Dimension In einer Dimension ist insbesondere die Restriktion des Parameterbereiches, in dem Teilchen-Loch-Anregungen existieren, dafür verantwortlich, dass die Fermiflüssigkeitstheorie versagt. Wie auch in Abbildung 1.5 dargestellt sind für kleine ω nur kleine Bereiche von k um 0 und $2k_F$

[7] Dies ist der Streuprozess, der für die Supraleitung verantwortlich ist. Auch in diesem Fall kann kein Fermiflüssigkeitsverhalten abgeleitet werden.

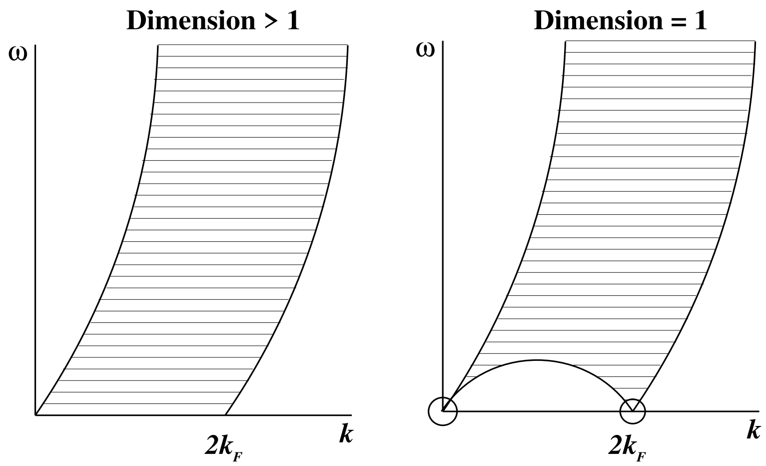


Abbildung 1.5.: Skizze der Parameterbereiche möglicher Teilchen-Loch-Anregungen in verschiedenen Dimensionen

möglich. Dies führt zu einer endlichen Gewichtung des singulären Anteils des Diagramms (a) bei der Integration und damit zu

$$\mathrm{Re}\chi(k_F, \omega) \sim \ln \frac{\omega + q v_F}{E_F} \quad . \tag{1.16}$$

In weiterer Konsequenz folgt nach Ref.[7]

$$\mathrm{Re}\Sigma(k_F, \omega) \sim \omega \ln \omega \quad . \tag{1.17}$$

Das singuläre Verhalten der Selbstenergie an der Fermikante führt zu einem Verschwinden von Z_{k_F} und damit zu einem Verhalten, dass qualitativ von dem der Fermiflüssigkeiten abweicht[8]. Der verschwindende Phasenraum im Fall $\omega \to 0$ ist der Grund dafür, dass die Anregungen leichter in einer bosonischen Sprache beschrieben werden können.

Das Luttingermodell als Paradigma für 1d-Systeme

Für eindimensionale Systeme ohne Anregungslücke - die Luttingerflüssigkeiten - ist ein anderes Vorgehen als die Störungstheorie notwendig. Das Paradigma der Luttingerflüssigkeiten und deren Namensgeber ist das Tomanaga-Luttinger-Modell[9]

$$\begin{aligned} H \;=\; & \sum_{rk} v_F(rk - k_F) : c^\dagger_{rk} c_{rk} : + \\ & \frac{1}{L} \sum_q V_a(q) : \rho_+(q)\rho_-(q) : + \frac{1}{2L} \sum_{rp} V_b(q) : \rho_r(q)\rho_r(q) : \quad . \end{aligned} \tag{1.18}$$

[8] Ähnliche Folgen hat übrigens das Diagramm (c) bei attraktiver Wechselwirkung in beliebigen Dimensionen.

[9] Hier ist das Modell für spinlose Fermionen angegeben. Ein anderes spinloses Modell wird auch unten untersucht.

mit

$$\rho_r(q) = \sum_k : c^\dagger_{rk+rq} c_{rk} : \ , \tag{1.19}$$

wobei r $+1$ oder -1 ist. Damit bezeichnet r sozusagen einen "linken" und einen "rechten" Ast der Dispersion. Die Fermionen auf den entsprechenden Ästen werden Links- bzw. Rechtsläufer genannt. Die Doppelpunkte $:\ldots:$ stehen dafür, dass die Operatoren relativ zum ungestörten Zustand normalgeordnet sind.
Produkte von Erzeugern- und Vernichtern werden normalgeordnet, indem man umsortiert. Dabei definiert man neue Operatoren

$$\begin{aligned} b^\dagger_k &= \begin{cases} c_k & \text{wenn} \quad k < k_F \\ c^\dagger_k & \text{wenn} \quad k > k_F \end{cases} \\ b_k &= \begin{cases} c^\dagger_k & \text{wenn} \quad k < k_F \\ c_k & \text{wenn} \quad k > k_F \end{cases} \quad . \end{aligned} \tag{1.20}$$

$b^\dagger$ erzeugt also ein Fermion oberhalb des im Grundzustand gefüllten Fermikörpers bzw. ein Loch unterhalb. b vernichtet Löcher im Fermikörper und Teilchen oberhalb. Ihre Wirkung ist also immer nur bezüglich des Fermikörpers im Grundzustand des freien Systems zu verstehen. In diesem Sinne sind die Erzeuger $b^\dagger$ und Vernichter b Quasiteilchenoperatoren.
Die Normalordnung verlangt nun, dass alle $b^\dagger$ nach links und alle b nach rechts getauscht werden. Damit wirkt ein normalgeordneter Operator nur auf solche Zustände, in denen die entsprechenden Quasiteilchen auch vorhanden sind und annuliert den Fermisee. Es gibt ein kanonisches Vorgehen, wie aus gewöhnlichen Produkten normalgeordnete Operatoren gebildet werden können. Details hierzu sind dem nächsten Kapitel oder auch dem Anhang zu entnehmen. Aus einem Produkt von n Operatoren entstehen dabei im Allgemeinen diverse normalgeordnete Operatorprodukte mit $n - 2m$ Operatoren und systematischen Vorfaktoren[10].
Wegen der linearen Dispersionsrelation, kann das System mittels Bosonisierung (s. Ref.[11, 12, 13]) exakt diagonalisiert werden. Bei der Bosonisierung werden die fermionischen Auf- und Absteiger $c^\dagger_k$, c_k in geschickter Weise gemäß der Gleichung

$$b^\dagger_q = \frac{i}{\sqrt{n_q}} \sum_k c^\dagger_{k+q} c_k \qquad \text{mit} \qquad q = \frac{2\pi}{L} n_q > 0,\ n_q \in Z^+ \tag{1.21}$$

auf bosonische Operatoren $b^\dagger_k$, b_k abgebildet. Das gesamte Modell wird unter dieser Transformation in eine Form gebracht, die sich schließlich mit einer Boguliubov-Transformation leicht diagonalisieren läßt.
Die entsprechende Gestalt des Tomanaga-Luttinger-Modells ist dann

$$\tilde{H} = \frac{\pi}{L} \sum_r \nu(q) : \tilde{\rho}_r(q) \tilde{\rho}_r(-q) : + \frac{\pi}{2L} \left(\nu_N N^2 + \nu_J J^2 \right) + \text{const.} \ . \tag{1.22}$$

[10]Die Normalordnung wird in dieser Arbeit noch in extenso genutzt. Daher wird sie später an passender Stelle und insbesondere im Anhang A detailliert beschrieben

Dabei ist N gleich der Summe der Fermionen auf beiden Dispersionsästen und J der Strom aus der Differenz der Rechts- und der Linksläufer. Die diversen Geschwindigkeiten sind gegeben durch (vgl. Ref.[8])

$$\begin{aligned} v(q) &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{(2\pi v_F + V_b(q))^2 - V_a^2(q)} \\ v_N &= v_F + \frac{V_b(0) + V_a(0)}{2\pi} \\ v_J &= v_F + \frac{V_b(0) - V_a(0)}{2\pi} \quad . \end{aligned} \tag{1.23}$$

Mit der Bosonisierung lassen sich auch alle anderen möglichen physikalischen Größen und Korrelationen berechnen. Insbesondere läßt sich folgern, welche Form die Impulsverteilung bei $T = 0$ besitzt (vgl. Abbildung 1.2). Ihr Verhalten für $\lim_{k\to k_F}$ folgt einem Potenzgesetz und es ist *kein* Sprung vorhanden. Ihre Form ist nach Ref.[8] näherungweise

$$n_k \simeq \frac{1}{2} - C_1 \mathrm{sign}(k - k_F)|k - k_F|^\alpha - C_2(k - k_F) \quad . \tag{1.24}$$

Nach Ref.[8] ist der Exponent α gegeben durch

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{\eta} + \frac{\eta}{4} - 1 \qquad \text{mit} \\ \eta &= 2\kappa(0) \quad , \qquad \text{wobei} \\ \kappa(q) &= \sqrt{\frac{2\pi v_F + V_b(q) - V_a(q)}{2\pi v_F + V_b(q) + V_a(q)}} \quad . \end{aligned} \tag{1.25}$$

Das Bosonisierungverfahren ist auch der approximative Standardzugang zu sonstigen eindimensionalen Fermionensystemen. Die Näherung besteht darin, die Dispersion an der Fermikante zu linearisieren. Das Postulat von Haldane bezieht sich nun darauf, dass dieser Zugang für die tiefliegenden Anregungen gerechtfertigt ist und die physikalische Größen wie v_F, $\kappa(0)$ etc. im Wesentlichen nur renormiert werden.
Es wird zwar auch Bosonisierung in höheren Dimensionen für starke Vorwärtsstreuung diskutiert (vgl. Ref.[14]), streng funktioniert das Bosonisierungsverfahren aber nur in einer Dimension. Nur dort lässt sich der fermionische Operatorraum bijektiv auf einen Raum zu verschiedener Zahl von Teilchen-Loch-Paaren mit bosonischem Charakter abbilden.

Das begriffliche Problem - Motivation

Offensichtlich verhält sich ein fermionisches Modell in einer Dimension grundlegend anders als typische Modelle in mehreren Dimensionen. Die paradigmatischen Modelle und deren Näherungsverfahren verstärken den Eindruck eines fundamentalen Unterschiedes, da die Verfahren in der jeweils anderen Klasse ihre Anwendbarkeit verlieren. Dies verlangt stets eine sehr sorgfältige Differenzierung in der Verwendung der Begriffe. Die Übergänge in der Natur sind aber nicht so eindeutig. Niedrigdimensionale Systeme sind meist nur näherungsweise ein- oder zweidimensional und oftmals entscheidet schlicht der Erfolg eines

bestimmten Lösungsansatzes über die Sprache, in der über das Modell gesprochen wird.
Es wäre daher ein großer Fortschritt, wenn es einen Ansatz gäbe, der die physikalischen Eigenschaften respektierte, ohne explizit von der Dimensionalität des Modells Gebrauch zu machen. Ergäben sich die physikalischen Unterschiede von selbst, so wäre es möglich, einheitlich über Fermi- und Luttingerflüssigkeiten zu denken.
Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, erste Schritte in der Untersuchung zu machen, ob die Methode der Flussgleichungen nach Wegner (vgl. Ref.[15]) in einer Abwandlung von Mielke, Knetter und Uhrig (s. Ref.[16]) einen solchen Ansatz bietet. Dazu wird ein exakt lösbares Modell spinloser eindimensionaler Fermionen herangezogen, das im nächsten Abschnitt vorgestellt wird. Der gewählte Ansatz für die Flussgleichungen benutzt eine Bild von Quasiteilchen, wie es für Fermiflüssigkeiten typisch ist. Nach dem Vorangegangenen würde man erwarten, dass dies in mehreren, aber nicht in einer Dimension funktioniert.
Es ist ein interessantes Ergebnis, dass mit diesem Ansatz dennoch die Eigenschaften des Modells reproduziert werden können.

1.1.2. Das Modell

Haldane zog in Ref.[5] als Exempel für eine Luttingerflüssigkeit ein Modell heran, dessen exakte Lösung für $T = 0$ bereits von Yang und Yang in Ref.[17] mit dem algebraischen Bethe-Ansatz bestimmt wurde.
Ausgangspunkt der vorliegenden Untersuchungen sei dasselbe System

$$\mathcal{H} = -\tfrac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \left(a_{i+1}^{\dagger} a_i + h.c. \right) + V \sum_{i=1}^{N} \left(n_i - \tfrac{1}{2} \right) \left(n_{i+1} - \tfrac{1}{2} \right) \quad , \tag{1.26}$$

in dem $a_i^{\dagger}$ und a_i fermionische Operatoren im Ortsraum und n_i die entsprechenden Dichten sind. Im Folgenden wird das Modell bei halber Füllung ($\langle n_i \rangle = \frac{1}{2}$) und mit periodischen Randbedingungen untersucht.
Der Hamiltonian beschreibt damit ein System eindimensionaler spinloser Fermionen auf einer Kette. Der erste Term modelliert ein Hüpfen der Fermionen auf benachbarte Plätze, der zweite Anteil stellt eine Wechselwirkung benachbarter Fermionen dar.
Das Modell wurde jedoch nicht in der Form **??** exakt gelöst. Der Hamiltonoperator läßt sich aber via Jordan-Wigner-Transformation

$$a_i = \left(\prod_{j<i} 2\sigma_j^z \right) \sigma_i^- \tag{1.27}$$

auf das sogenannte *XXZ-Modell* abbilden. Dabei sind σ_i Spin-$\frac{1}{2}$-Paulimatrizen auf einem Platz i. $\prod_{j<i}$ bezeichnet das sukzessive Produkt aller Operatoren, die räumlich links von i liegen. Der dazu gehörende Hamiltonian ist

$$\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}} = -\frac{1}{2} \sum_{n} \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y - V \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \mathrm{h.c.} \right) \ . \tag{1.28}$$

Damit wird ein System wechselwirkender lokalisierter Spins $\frac{1}{2}$ auf einer Kette beschrieben. Die Wechselwirkung für die X- und Y-Komponenten der Spins ist isotrop und die Z-Kompenente wird anisotrop mit V angekoppelt. Das Modell wird daher auch *Spin-$\frac{1}{2}$-Heisenberg-Ising-XY-Kette* genannt.
Dieses System ist nun für $T = 0$ mit dem Bethe-Ansatz vollständig integrabel. Die wesentlichen Beiträge hierzu kamen von Yang und Yang, Luther und Peschel, sowie Haldane und sind in den Referenzen [5, 11, 17, 18] zu finden.
Unten werden einige der exakten Resultate und der genäherten Ergebnisse, die man mittels Bosonisierung erhält, angegeben. Diese Resultate stellen einen Prüfstein für die Ergebnisse der Flussgleichungsmethode dar.
Für die Bosonisierung und die späteren Untersuchungen benötigt man die Darstellung des fermionischen Modells 1.26 im Impulsraum

$$\mathcal{H} \;\; = \;\; -\tfrac{N}{4} + \sum_{k} - \cos(k)\; c_k^{\dagger} c_k + \sum_{kk'q} V \cos(q)\; c_{k+q}^{\dagger} c_{k'-q}^{\dagger} c_{k'} c_k \ . \tag{1.29}$$

Mit normalgeordneten Operatoren erhält man im thermodynamischen Limes für $N \to \infty$

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -N\left(\tfrac{1}{\pi}+\tfrac{V}{2\pi}\right)+\sum_k -\left(1+\tfrac{2V}{\pi}\right)\cos(k)\ :c_k^\dagger c_k:+\\ &\sum_{k,k',q}\tfrac{V}{N}\cos(q)\ :c_{k+q}^\dagger c_{k'-q}^\dagger c_{k'}c_k:\quad .\end{aligned} \tag{1.30}$$

Der erste Anteil ist dabei eine Konstante, die sich aus Hartree- und Focktermen ergibt. Auch die Dispersion enthält in dieser Darstellung einen Fockterm.

Exakte Lösungen

Die Grundzustandsenergie Die Grundzustandsenergie pro Platz ist nach Ref.[17, 19]

$$\frac{E}{N}=\begin{cases}\dfrac{\cos\mu}{4}-\sin^2\mu\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{2\cosh\pi x(\cosh 2x\mu-\cos\mu)} & V=\cos\mu\ (|V|<1)\\ \dfrac{1}{4}-\ln 2 & V=1\\ \dfrac{\cosh\lambda}{4}-\dfrac{\sinh^2\lambda}{4}\left(\dfrac{\lambda}{2}+2\lambda\displaystyle\sum_1^{\infty}(1+\exp 2\lambda n)^{-1}\right) & V=\cosh\lambda\ (V>1)\end{cases}\quad . \tag{1.31}$$

Es gibt in dem System zwei Phasen, in denen die Grundzustandsenergie analytisch ist (vgl. Ref.[20]). In der Phase mit $V > 1$ ist das System ein Mott-Isolator. Die Fermionen ordnen sich bei $V \to \infty$ und halber Füllung so an, dass zwischen ihnen je ein Loch sitzt. Jede Bewegung eines Fermions gegen diese Konfiguration kostet dann die Energie V und eine Lücke der Breite V tut sich auf. Für $V < 1$ ist das System metallisch.
Am Punkt $V = 1$ findet demnach ein Metall-Isolator-Übergang statt. Dabei wächst die Anregungslücke ab $V = 1$ exponentiell an (s. Ref.[20]).
Die Grundzustandsenergie beinhaltet einen linearen Anteil aus den Hartree- und Fock-Diagrammen, der das Verhalten für kleine V maßgeblich festlegt. Dieser lineare Anteil ist in der normalgeordneten Version des Modells direkt ablesbar und hat die Grösse

$$\frac{E_{\text{lin.}}}{N}=-\frac{V}{\pi^2}-\frac{1}{\pi}\quad . \tag{1.32}$$

Dispersion, Fermigeschwindigkeit

In der metallischen Phase $V < 1$ hat die effektive Dispersion der Fermionen keine Lücke und die Dispersion der freien Teilchen wird nur mit einem Renormierungsfaktor versehen. Der analytische Ausdruck hierfür ist nach (vgl. [5, 21])

$$\varepsilon_k=-\underbrace{\left(\frac{\pi}{2\mu}\sin\mu\right)}_{v_F}\cos k\qquad V=\cos\mu\quad \text{für}\quad |V|<1\quad . \tag{1.33}$$

Der Proportionalitätsfaktor v_F entspricht damit der Fermigeschwindigkeit, da $\frac{\partial}{\partial k}\cos(k)|_{k_F} = -1$. Auch die Fermigeschwindigkeit ist weitgehend durch einen linearen Anteil aus dem Fock-Term bestimmt, der in der normalgeordneten Form explizit auftritt. Er beträgt

$$v_{F,\text{lin.}} = 1 + \frac{2V}{\pi} \quad . \tag{1.34}$$

Die Impulsverteilung Haldane berechnete die asymptotische Form ($x \to \infty$) der allgemeine Zweipunktkorrelationsfunktion $\langle a_x^\dagger a_0 \rangle$ für Luttingerflüssigkeiten, aus der man wiederum die Impulsverteilung $\langle n_k \rangle$ berechnen kann. In der Impulsverteilung zeigt sich dann auch die typische Eigenschaft der Luttingerflüssigkeiten, nämlich dass es keinen Sprung bei k_F gibt.
Für die gleichzeitige Zweipunktkorrelationsfunktion fermionischer 1d-Systeme gilt nach Ref.[18]

$$\langle a_x^\dagger a_0 \rangle \sim \rho_0(\rho_0 x)^{-\frac{1}{\eta}} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} C_m(\rho_0 x)^{-(m+\frac{1}{2})^2 \eta} \sin(2\pi(m+\tfrac{1}{2})\rho_0 x) \right\} , \tag{1.35}$$

wobei die Konstanten C_m modellabhängige sind. Für das XXZ-Modell kann η exakt bestimmt werden. Es ergibt sich für $V \leq |1|$ zu

$$\eta = \frac{\pi}{\pi - \arccos(V)}. \tag{1.36}$$

Dieser Exponent dominiert das langreichweitige Verhalten der Zweipunktkorrelationsfunktion in führender Ordnung von Gleichung 1.35 mit $x^{-\frac{1}{\eta}-\frac{\eta}{4}}$. Die Fouriertransformation der Impulsverteilung der Quasiteilchen

$$\langle n_k \rangle \sim \frac{1}{2} - C_1 \operatorname{sign}(k-k_F)|k-k_F|^\alpha - C_2(k-k_F) \; . \tag{1.37}$$

verknüpft α mit η. Es folgt folgt nämlich $\langle a^\dagger(x) a(0) \rangle \sim x^{-1-\alpha}$ und daher gilt insgesamt

$$\boxed{\alpha = \frac{1}{\eta} + \frac{\eta}{4} - 1} \quad . \tag{1.38}$$

Resultate aus der Bosonisierung

Man kann das Modell auch näherungsweise mit dem Bosonisierungsverfahren behandeln. Dazu wird auf die entsprechende normalgeordnete Form des Hamiltonoperators zurückgegriffen und die Dispersion bei $\pm k_F$ linearisiert.

$$\varepsilon_{k,\text{norm.}} = -\left(1 + \frac{2V}{\pi}\right)\cos k \quad \xrightarrow{\text{Linear.}} \quad \varepsilon_{k,r} = \pm r \left(1 + \frac{2V}{\pi}\right)|k - k_F| \quad . \tag{1.39}$$

Die Wechselwirkung braucht nur für kleine Impulsüberträge von Fermionen nahe der Fermikante ausgewertet zu werden. Solche Prozesse haben eine Stärke von nahezu V und sind vierfach vorhanden (vgl. Gleichung 1.30). Also ist mit den Bezeichnungen aus dem vorangegangenen Abschnitt

$$V_a(0) = 4V \quad . \tag{1.40}$$

Nun ergibt sich nach den Formeln 1.23 und 1.25 die Fermigeschwindigkeit

$$\tilde{v}_F = v(0) = \left(1 + \frac{2V}{\pi}\right)\sqrt{1 - 4\left(\frac{V}{\pi + 2V}\right)^2} \quad . \tag{1.41}$$

Die Übereinstimmung mit dem exakten Resultat beschränkt sich auf den linearen Anteil:

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{F,\text{exakt}} &= 1 + \frac{2V}{\pi} - \frac{\pi^2 - 8}{2\pi^2}V^2 + \mathcal{O}(V^3) \\ \tilde{v}_{F,\text{boson.}} &= 1 + \frac{2V}{\pi} - \frac{2}{\pi^2}V^2 + \mathcal{O}(V^3) \quad . \end{aligned} \tag{1.42}$$

Der Exponent α gegeben durch

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2}(\kappa(0) + \kappa^{-1}(0) - 2) \\ \kappa(0) &= \sqrt{\frac{2\pi}{2\pi + 8V}} \quad . \end{aligned} \tag{1.43}$$

Dieses Ergebnis stimmt in der Ordnung V^2 mit den exakten Resultaten überein.

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{exakt}} &= \frac{2}{\pi^2}V^2 - \frac{4}{\pi^3}V^3 + \mathcal{O}(V^4) \\ \alpha_{\text{boson.}} &= \frac{2}{\pi^2}V^2 + \frac{8}{\pi^3}V^3 + \mathcal{O}(V^4) \quad . \end{aligned} \tag{1.44}$$

1.2. Die Flussgleichungsmethode

Das soeben beschriebene Modell soll in dieser Arbeit mit der sogenannten Flussgleichungsmethode behandelt werden. Die Flussgleichungsmethode wird präziser auch die *Methode der kontinuierlichen unitären Transformation* oder *continuous unitary transformation, CUT*, genannt. Diese Methode, die 1994 von Wegner in Ref.[15] vorgeschlagen wurde, ist eine vollkommen allgemeine Methode zur Vereinfachung bzw. Renormierung von quantenmechanischen Problemen. Es handelt sich dabei um ein kontinuierliches Verfahren der unitären Transformation des Hamiltonians und ist somit ein Verfahren, den Hamiltonian "fließen" zu lassen. Es zeigt sich, dass dies zu einer differentiellen Operatorgleichung führt, bei der der Generator der unitären Transformation in physikalisch geeigneter Weise zu wählen ist.
Für den Generator der unitären Transformation gibt es unterschiedliche systematische Ansätze. Hervorzuheben ist neben dem ursprünglichen Ansatz von Wegner, der Ansatz von Mielke bzw. dessen Verallgemeinerung von Knetter und Uhrig (vgl. Ref.[15, 22, 16]). Die Flussgleichungsmethode wurde mit den unterschiedlichen Ansätzen auf verschiedenen Feldern der Physik mit Erfolg angewendet (siehe unter anderem Ref.[16, 23, 24, 25, 26]). Auch eindimensionale Fermionensysteme wurden schon mit diesem Verfahren untersucht. So war die erste Arbeit von Wegner (s. Ref.[15]) einem eindimensionalen n-Orbital-Modell gewidmet. Diese Arbeit wurde von Nicodemus in einer Diplomarbeit (s. Ref.[27]) fortgeführt. Für das Modell wurde später auch unterschiedliches Verhalten in verschiedenen Dimensionen ermittelt (vgl. Ref.[28]). Kehrein widmete sich darüberhinaus in Ref.[29, 30] dem effektiven Niederenergiemodell des XXZ-Modells, dem sogenannten *Sinus-Gordon-Modell*. Dabei konnte er den Phasenübergang beim Wechsel von schwacher zu starker Wechselwirkung wiedergeben. Allerdings benutzt er einen anderen Ansatz, der nicht den Anspruch der Dimensionsunabhängigkeit erhebt.
Im Folgenden wird die Methode der Flussgleichungen dargestellt und einige Ansätze für den Generator der unitären Transformation diskutiert. Abschließend zeigt ein instruktives Beispiel die Wirkungsweise der Flussgleichungsmethode.

1.2.1. Die allgemeine Flussgleichung

Die Flussgleichungen sind ein kontinuierliches Verfahren zur Diagonalisierung bzw. Renormierung quantenmechanischer Systeme. Dazu wird eine kontinuierliche unitäre Transformation $\mathcal{U}$ eingeführt, die mit l parametrisiert sei. Man erhält den Fluss des Hamiltonians im Laufe des Flussparameters l als

$$\mathcal{H}(l) = \mathcal{U}(l)\mathcal{H}(0)\mathcal{U}^{-1}(l) \quad . \tag{1.45}$$

Dabei soll die Transformation so gewählt sein, dass $\lim_{l\to\infty}\mathcal{H}(l)$ einen Fixpunkt in der gewünschten vereinfachten Form darstellt.
Infinitesimale unitäre Transformationen werden allgemein lokal in l von antihermiteschen Operatoren erzeugt. Es gilt mit diesem Generator

$$\eta^\dagger(l) = -\eta(l) \tag{1.46}$$

für die unitäre Transformation

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{U}(l)}{dl} &= \eta(l)\mathcal{U}(l) \\ \frac{d\mathcal{U}^{-1}(l)}{dl} = \frac{d\mathcal{U}^{\dagger}(l)}{dl} &= \mathcal{U}^{-1}\eta^{\dagger}(l) \;=\; -\mathcal{U}^{-1}\eta(l) \quad . \end{aligned} \tag{1.47}$$

So kann man das infinitesimale Verhalten des Flusses des Hamiltonians untersuchen:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(l+dl) &= \mathcal{U}(l+dl)\mathcal{H}(0)\mathcal{U}^{-1}(l+dl) \\ &= \left\{\mathcal{U}(l)+\eta(l)\mathcal{U}(l)dl\right\}\mathcal{H}(0)\left\{-\mathcal{U}^{-1}(l)\eta(l)dl+\mathcal{U}^{-1}(l)\right\} \quad . \end{aligned} \tag{1.48}$$

Kurz gefasst folgt daraus die *allgemeine Flussgleichung*

$$\boxed{\frac{d\mathcal{H}(l)}{dl} = [\eta(l), \mathcal{H}(l)]} \quad . \tag{1.49}$$

Ein Fixpunkt ist erreicht, wenn $[\eta(l), \mathcal{H}(l)] = 0$ gilt
Diese Transformation ist selbstverständlich mit dem gleichen $\eta(l)$ auch für alle anderen zu untersuchenden Observablen möglich

$$\frac{d\mathcal{O}(l)}{dl} = [\eta(l), \mathcal{O}(l)] \quad . \tag{1.50}$$

Das Konzept ist elegant und anschaulich - letzten Endes ist die Theorie der kontinuierlichen Transformationsgruppen, deren einfache Folgerung die Flussgleichungen sind, aber auch schon altbekannt. Das Problem der Transformation hat sich nur verlagert. Anstelle der kompletten Transformation ist nun ein $\eta(l)$ zu bestimmen, das tatsächlich (asymptotisch) auf einen Fixpunkt führt und anschließend ist die im Allgemeinen nichtlineare gekoppelte autonome[11] Differentialgleichung zu integrieren.
Diese Integration kann auch abstrakt formuliert werden, indem Gleichung 1.47 integriert wird (vgl. Ref.[23])

$$\mathcal{U}(l) = 1 + \int_0^l \eta(l')\mathcal{U}(l')dl' \quad , \tag{1.51}$$

was zur formalen Lösung

$$\mathcal{U}(l) = T_l \exp \int_0^l \eta(l')dl' \tag{1.52}$$

führt. Hier ist T_l als "l-Ordnungsoperator" in der Wirkungsweise des Dysonschen Zeitordnungsoperators zu verstehen.
Zum Vergleich mit bestehenden Methoden kann man die resultierende Gesamttransformation

$$\mathcal{U}(\infty) = e^{-\mathcal{S}} \tag{1.53}$$

[11] Dadurch, dass die Differentialgleichungen mit den gängigen Ansätzen nicht von l abhängt, hat die Transformation Gruppencharakter

untersuchen. Dabei ist $\mathcal{S}$ in Termen von η

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= \mathcal{S}_1+\mathcal{S}_2+\dots\\ &= -\int_0^\infty dl\eta(l)-\frac{1}{2}\int_0^\infty dl\int_0^l dl'\left[\eta(l),\eta(l')\right]-\mathcal{O}(\eta^3)\ .\end{aligned} \tag{1.54}$$

Es ist zu erkennen, wie sich die l-Abhängigkeit von η rückkoppelnd auf die Gesamttransformation auswirkt.

Normalerweise wird man sich jedoch mit den Differentialgleichungen 1.49 für die Koeffizienten von $\mathcal{H}$ auseinandersetzen und dieses mit analytischen oder numerischen Methoden untersuchen. Man berechnet dazu den Kommutator und nimmt einen Koeffizientenvergleich vor. Dabei tritt im Allgemeinen die Schwierigkeit auf, dass sich die Struktur des Hamiltonians im Fluss von l verkompliziert. Das bedeutet, dass Matrixelemente, die zunächst Null waren, zwischenzeitig entstehen bzw. dass neue Operatoren zum Hamiltonian hinzutreten. Wichtig ist es also, die physikalisch relevanten Terme zu berücksichtigen, aber unnötige Komplikationen zu vermeiden.

1.2.2. Ansätze für den Generator η

Einen ersten Ansatz für die Wahl von $\eta(l)$ machte Wegner in seiner grundlegenden Arbeit (vgl. Ref.[15]). Weitere Ansätze wurden von Mielke und Knetter/Uhrig in Ref.[16, 22] vorgeschlagen. Die verschiedenen Wahlmöglichkeiten für den Generator sollen im Folgenden kurz dargestellt werden. Dabei wird verschiedentlich auf die explizite Notation des Flussparameters l verzichtet, soweit keine Missverständnisse zu erwarten sind.

Der Wegnersche Ansatz

Der Ansatz für $\eta(l)$ von Wegner ist durch die Jacobi-Methode zur Diagonalisierung motiviert. Bei der Jacobi-Methode werden sukzessive alle möglichen 2×2-Blöcke zu je zwei Diagonalelementen diagonalisiert. Den Generator wählt Wegner daraufhin in Abhängigkeit von $\mathcal{H}(l)$ als

$$\eta(l)=[\mathcal{H}_d(l),\mathcal{H}(l)]\ , \tag{1.55}$$

wobei $\mathcal{H}_d(l)$ der diagonale Anteil des Hamiltonians ist. In der Schreibweise der Matrixelemente ($\mathcal{H}=(\mathcal{H}_{ij})$) bedeutet dies

$$\eta_{ij}=(\mathcal{H}_{ii}-\mathcal{H}_{jj})\mathcal{H}_{ij} \tag{1.56}$$

und

$$\frac{d\mathcal{H}_{ij}}{dl}=\sum_k\left(\mathcal{H}_{ii}+\mathcal{H}_{jj}-2\mathcal{H}_{kk}\right)\mathcal{H}_{ik}\mathcal{H}_{kj}\ . \tag{1.57}$$

Bekanntermaßen erhalten unitäre Transformationen die Spur von Operatoren und somit auch deren Quadrat $\mathrm{Sp}\mathcal{H}^2=\mathrm{const.}$. Diese Eigenschaft kann genutzt werden, um zu Aussagen über die Konvergenz zu gelangen. Es läßt sich nämlich schließen, dass für die Summe der Betragsquadrate der Nichtdiagonalelemente gilt

$$\sum_{ij|i\neq j} \frac{d\mathcal{H}_{ji}\mathcal{H}_{ij}}{dl} = -\sum_{i} \frac{d\mathcal{H}_{ii}^2}{dl} = -2\sum_{ij} (\mathcal{H}_{ii} - \mathcal{H}_{jj})^2 \mathcal{H}_{ij}\mathcal{H}_{ji} \leq 0 \ . \tag{1.58}$$

Da $\mathcal{H}$ selbstadjungiert ist, stehen in den Summen also nur positiv definite Betragsquadrate. Damit impliziert Gleichung 1.58, dass die Summe der Außerdiagonalelemente beständig abfällt, bis sich ihr komplettes Gewicht in den Diagonalelementen angesammelt hat oder die verbliebenen Ausserdiagonalelemente $\mathcal{H}_{ij}$ zu entarteten Diagonalelementen ($\mathcal{H}_{ii} - \mathcal{H}_{jj} = 0$) gehören. Auf jeden Fall ist die Summe der Ausserdiagonalelementsquadrate monoton abfallend und als nicht-negative Größe nach unten beschränkt. Dadurch ist das Verfahren konvergent gegen einen Fixpunkt, der einem blockdiagonalen Operator entspricht. Blockdiagonal bedeutet hier, dass alle $\mathcal{H}_{ij}$ zu verschiedenen Diagonalelementen $\mathcal{H}_{ii}$, $\mathcal{H}_{jj}$ verschwinden und höchstens solche zu gleichen Diagonalelementen übrigbleiben. Nur ohne Entartungen der Eigenzustände des Systems ist tatsächlich Diagonalität zu erreichen.
Der Ansatz hat noch folgende besondere Eigenschaft. Verschiedene Energieskalen werden verschieden schnell getrennt. Dies kann man auch aus dem Generator η in Gleichung 1.56 ablesen. Je größer die Differenz $\mathcal{H}_{ii} - \mathcal{H}_{jj}$ ist, desto stärker wird am Matrixelement $\mathcal{H}_{ij}$ "gedreht". In diesem Sinne hat der Wegnersche Ansatz ähnliche Eigenschaften wie die Renormierungsgruppe.
Ein technisches Problem ist aber, dass im Laufe des Flusses tatsächlich alle möglichen neuen Matrixelemente entstehen können. Neben den rechnerischen Komplikationen, die damit verbunden sind, wird auch die Interpretation der Gleichungen schwierig.

Mielkes Ansatz

Für Matrizen mit Bandstruktur schlug Mielke einen anderen Ansatz vor (s. Ref.[22]), der das zuletzt erwähnte Problem des Wegnerschen Ansatzes vermeidet.
Die Bandstruktur bedeutet hier, dass im Ausgangszustand $\mathcal{H}_{ij}$ außer der Diagonalen $\mathcal{H}_{ii}$ nur endlich viele Nebendiagonalen besetzt sind ($\mathcal{H}_{ij} = 0 \Leftrightarrow |i-j| > M$). Der für η vorgeschlagene Ansatz lautet

$$\eta_{ij} = \mathrm{sign}(i-j)\mathcal{H}_{ij} \ , \tag{1.59}$$

woraus für den Fluss der Matrixelemente folgt

$$\frac{d\mathcal{H}_{ij}}{dl} = -\mathrm{sign}(i-j)(\mathcal{H}_{ii} - \mathcal{H}_{jj})\mathcal{H}_{ij} + \sum_{k\neq i,j} (\mathrm{sign}(i-k) + \mathrm{sign}(j-k))\, \mathcal{H}_{ik}\mathcal{H}_{kj} \ . \tag{1.60}$$

Dieser Ansatz hat den entscheidenden Vorteil, dass er die Bandstruktur erhält, da die Terme in der Summe für $|i-j| > M$ aufgrund der Signum-Funktionen und der gegebenen Bandstruktur keinen Beitrag liefern. Die Struktur bleibt also auch während des Flusses die schon gegebene Bandstruktur. Zudem kann gezeigt werden, dass diese Wahl im Falle reeller, symmetrischer Matrizen abzählbar unendlicher Dimension mit nach unten beschränkten Spektrum in jedem Fall zu einem asymptotischen Fixpunkt in Diagonalform

führt.
Dies erkennt man, wenn man den Fluss der Diagonalelemente untersucht. Für sie gilt

$$\frac{d\mathcal{H}_{ii}}{dl} = 2\sum_{j\neq i} \mathrm{sign}(i-j)\mathcal{H}_{ij}\mathcal{H}_{ji} \quad . \tag{1.61}$$

Für endliche bzw. nach unten beschränkte abzählbar unendliche Systeme ordne man oBdA die Diagonalelemente der Größe nach und betrachte für ein beliebiges aber festes j

$$\frac{d}{dl}\sum_{i=1}^{j} \mathcal{H}_{ii} = -2\sum_{i=1}^{j}\sum_{k>j} \mathcal{H}_{ik}\mathcal{H}_{ki} < 0 \quad . \tag{1.62}$$

Man erkennt also ein Abfallen von $\sum_{i=1}^{j} \mathcal{H}_{ii}$ für jede Wahl von j. Da diese nach Voraussetzung nach unten durch das j-fache des tiefsten Eigenwertes beschränkt ist, kann $\sum_{i=1}^{j} \mathcal{H}_{ii}$ nicht beliebig abfallen. Daher gilt

$$\lim_{l\to\infty} \mathcal{H}_{ij}\mathcal{H}_{ji} = 0 \quad . \tag{1.63}$$

Folglich verschwinden die Außerdiagonalelemente asymptotisch und man erhält schließlich einen diagonalen Hamiltonoperator $\mathcal{H}_\infty$, ohne im Fluss die Ausgangsstruktur zu verkomplizieren.

Verallgemeinerung von Knetter und Uhrig

Im vorherigen Abschnitt hat man gesehen, wie leistungsfähig Mielkes Wahl von η ist. Die benötigte Ausgangstruktur ist aber sehr speziell und findet kaum physikalische Entsprechungen in Vielteilchensystemen.
Üblicher ist die Situation, dass der Hamiltonian bezüglich Blöcken zu bestimmten Quantenzahlen eine Art Bandstruktur, hier auch Blockbandstruktur genannt, besitzt. Das soll heißen, dass der zu diagonalisierende Operator die betreffende Quantenzahl nur um bestimmte, endliche Werte ändern kann. Eine solche Quantenzahl könnte beispielsweise eine Quasiteilchenzahl sein. Für eine solche Struktur haben Knetter und Uhrig in Ref.[16] eine Verallgemeinerung von Mielkes Wahl von η vorgeschlagen.
Sei $\mathcal{Q}$ der entsprechende Quantenzahloperator. Seien weiterhin die Zustände in einer Eigenbasis $|\psi_i\rangle$ dieses Operators ausgedrückt. So gilt

$$\mathcal{Q}|\psi_i\rangle = \mathcal{Q}_i|\psi_i\rangle \quad . \tag{1.64}$$

Seien auch die Operatoren in dieser Basis dargestellt, dann ist $\mathcal{H}_{ij}$ ein Matrixelement des Hamiltonians, das die Quantenzahl von j nach i ändert. Blockbandstruktur bedeutet in diesem Sinne, dass $\mathcal{H}_{ij} = 0 \Leftrightarrow |Q_i - Q_j| > M$ gilt.
Der Ansatz für η wird nun folgendermaßen gewählt

$$\eta_{ij} = \mathrm{sign}(\mathcal{Q}_i - \mathcal{Q}_j)\mathcal{H}_{ij} \tag{1.65}$$

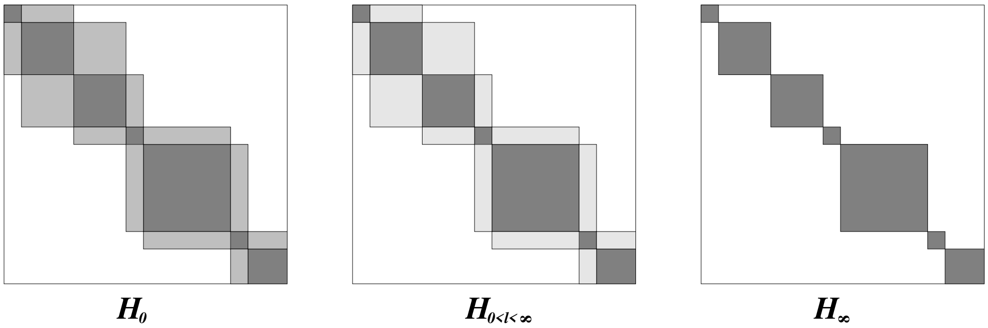


Abbildung 1.6.: Illustation: Renormierung eines blockbanddiagonalen Hamilonians nach Knetter und Uhrig - Die Blockbandstruktur bleibt erhalten

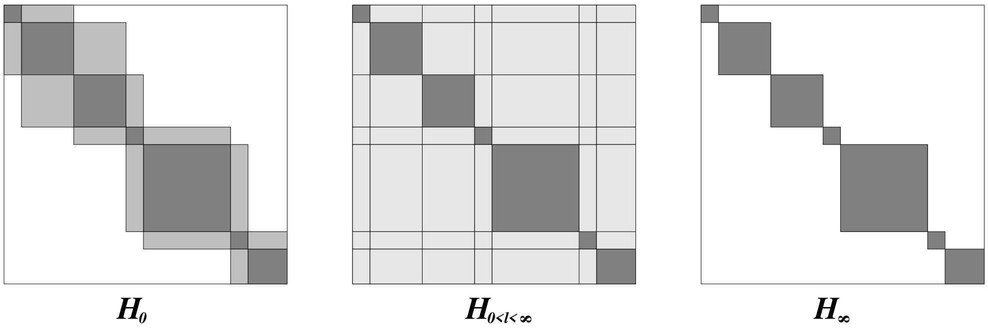


Abbildung 1.7.: Illustration: Renormierung eines blockbanddiagonalen Hamiltonians nach Wegner - Die Struktur verkompliziert sich im Fluss

Die Flussgleichung der Matrixelemente von $\mathcal{H}$ wird damit zu

$$\frac{d\mathcal{H}_{ij}}{dl} = -\mathrm{sign}(\mathcal{Q}_i - \mathcal{Q}_j)(\mathcal{H}_{ii}\mathcal{H}_{ij} - \mathcal{H}_{ij}\mathcal{H}_{jj}) + \sum_{k\neq i,j} (\mathrm{sign}(\mathcal{Q}_i - \mathcal{Q}_k) - \mathrm{sign}(\mathcal{Q}_j - \mathcal{Q}_k))\mathcal{H}_{ik}\mathcal{H}_{ki} \quad . \tag{1.66}$$

In dieser allgemeinen Form gilt die Differentialgleichung auch, wenn die $\mathcal{H}_{ij}$ ganze Untermatrizen des Hamiltonians sind, die die Quantenzahl von Q_j nach Q_i ändern. Insgesamt bleibt auch hier die Blockbandstruktur erhalten.
Ein Fixpunkt dieser Differentialgleichung ist erreicht, wenn

$$[\mathcal{Q}, \mathcal{H}] = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \eta = 0 \tag{1.67}$$

gilt. Dies bedeutet aber wegen Gleichung 1.65, dass entweder $Q_i = Q_j$ oder $\mathcal{H}_{ij} = 0$ gilt. Am Fixpunkt für $l \to \infty$ gibt es also keine Anteile des Hamiltonoperators mehr, die die Quantenzahl $\mathcal{Q}$ ändern. $\mathcal{Q}_i$ ist damit zu einer Erhaltunggröße geworden und der Hamiltonoperator besitzt blockdiagonale Struktur.
Konvergenzaussagen lassen sich zumindest bei abzählbar ∞-dimensionalen Hamiltonoperatoren völlig analog zum Mielkeschen Ansatz treffen. Für überabzählbare Systeme mit überabzählbar ∞-dimensionalen Untermatrizen $\mathcal{H}_{ij}$ sind derartige allgemeine Aussagen nicht bekannt.

Unter bestimmten Voraussetzungen kann im Falle der Konvergenz gefolgert werden, dass der der Zustand mit $\mathcal{Q}_{\mathrm{min.}} = 0$ Quasiteilchen der Grundzustand ist. Dazu muss gefordert werden, dass dieser Zustand bezüglich der Quantenzahl $\mathcal{Q}$ nicht entartet ist und dass alle Zustände mischen, also kein Zustand völlig vom Grundzustand abgekoppelt ist. Dazu betrachtet man den Fluss der Untermatrix $\mathcal{H}_{i0}$ nach Gleichung 1.66

$$\frac{d\mathcal{H}_{i0}}{dl} = -(\mathcal{H}_{ii}\mathcal{H}_{i0} - \mathcal{H}_{i0}E) + \sum_{k\neq i,j} (\mathrm{sign}(\mathcal{Q}_i - \mathcal{Q}_k) + \mathrm{sign}(\mathcal{Q}_j - \mathcal{Q}_k))\mathcal{H}_{ik}\mathcal{H}_{kj} \quad . \tag{1.68}$$

Dabei ist

$$E = \langle \psi_0 | \mathcal{H} | \psi_0 \rangle \tag{1.69}$$

das Quasiteilchenvakuum. $\mathcal{H}_{i0}$ stellt einfach einen Vektor dar. Nahe am Fixpunkt ist die Summe in Gleichung 1.68 gegenüber dem ersten Anteil zu vernachlässigen, da alle $\mathcal{H}_{ij}$ für $i \neq j$ gegen Null streben und in der Summe quadratisch auftreten. Somit gilt näherungsweise für große l

$$\frac{d\mathcal{H}_{i0}}{dl} = (E - \mathcal{H}_{ii})\mathcal{H}_{i0} \quad . \tag{1.70}$$

Damit also auch $\mathcal{H}_{i0}$ wie gefordert gegen Null geht, muss

$$(E - \mathcal{H}_{ii})(l \to \infty) \leq 0 \tag{1.71}$$

gelten. Also ist E die Grundzustandsenergie!
Die Voraussetzung haben in verschiedener Weise Bedeutung.

- Natürlich kann ein vollkommen abgekoppelter Zustand $\mathcal{H}_{ii}$ mit $\mathcal{H}_{i0} = 0$ für alle l eine beliebige, also auch tiefere Energie besitzen.

- Zustände mit mehr Quanten, als durch $\mathcal{H}_{i0}$ aufgrund der Blockbandstruktur geändert werden können ($i > M$), können auch tiefere Energie haben. Dies entspricht einem Phasenübergang 1. Ordnung. Bei einem Phasenübergang höherer Ordnung wäre zu erwarten, dass zunächst Zustande mit $i \leq M$ unter die Grundzustandsenergie fallen.

- Ist das Quasiteilchenvakuum bezüglich der Quantenzahl $\mathcal{Q}$ entartet, so lässt sich Gleichung 1.68 im Allgemeinen nicht aus Gleichung 1.66 ableiten, da $\mathcal{H}_{00}$ nicht mit $\mathcal{H}_{i0}$ vertauschen muss. Dieses Argument ist auch der Grund, weshalb man allgemein keine energetische Sortierung aller Zustände nach der Anzahl ihrer Quanten $\mathcal{Q}_i$ feststellen kann. Eine solche Folgerung wäre auch meistens physikalisch unzulässig.

Knetter und Uhrig spezialisierten den Ansatz für η nach Gleichung 1.65 auf Probleme mit äquidistantem Anregungsspektrum. In diesem Fall kann eine systematische "Störungsentwicklung" vorgenommen werden, die ohne explizite Integration der Differentialgleichung auf den effektiven Hamiltonoperator in beliebiger Ordnung der Anregungen führt.
Der Ansatz kann aber prinzipiell in voller Allgemeinheit verwendet werden - und so soll in der vorliegenden Arbeit vorgegangen werden.

Zur Interpretation der eingeführten Quantenzahl Q beziehungsweise des benutzten Quasiteilchbildes ist zu sagen, dass der zu wählende Quantenzahloperator von $\mathcal{H}$ im Fluss von l abhängt, da sich auch die Basis der Zustände ändert. Der Quantenzahloperator der Ausgangsform des Hamiltonians und der Form am Fixpunkt sind daher unterschiedlich. Man kann somit auch nur von einer effektiven Quantenzahl sprechen und muss dies bei der Interpretation der Ergebnisse berücksichtigen.

1.2.3. Ein instruktives Beispiel

Als Beispiel der Wirkungsweise der Flussgleichungsmethode sei folgender Hamiltonoperator betrachtet

$$\mathcal{H} = E + \omega\, b^\dagger b \; + \lambda \left(b^\dagger b^\dagger + b\; b \right) \quad . \tag{1.72}$$

Dabei seien $b^\dagger$, b bosonischen Auf- und Absteigeoperatoren mit der (positiven) Frequenz ω und die Nullpunktsenergie E sei $\frac{\omega}{2}$. Der Hamiltonian 1.72 wird standartmässig mit der Bogoliubov-Transformation diagonalisiert. Die Diagonalisierung kann aber auch mit den Flussgleichungen geschehen.
Die dazu benötigten Generatoren der FLussgleichungen im Sinne der verschiedenen Ansätze ergeben sich folgendermaßen.

- Für Wegners Ansatz wählt man

$$\mathcal{H}_d = \omega\, b^\dagger b \qquad \longrightarrow \qquad \eta_{\text{weg.}} = [\mathcal{H}_d, \mathcal{H}] = \underbrace{2\lambda\omega}_{\beta(\lambda,\omega)_{\text{weg.}}} \left(b^\dagger b^\dagger - b\; b \right) \quad . \tag{1.73}$$

- Es liegt aber auch (Block-)Banddiagonalität vor, da $b^\dagger b^\dagger$ bzw. bb die Quantenzahl um ± 2 ändert. Im Sinne Mielkes bzw. der Verallgemeinerung ergibt sich der Generator zu

$$\eta_{\text{miel.}} = \underbrace{\lambda}_{\beta(\lambda,\omega)_{\text{miel.}}} \left(b^\dagger b^\dagger - b\; b \right) \quad . \tag{1.74}$$

Die Zugänge unterscheiden sich nur im Vorfaktor $\beta(\lambda, \omega)$.
Nun ist $[\eta, \mathcal{H}]$ zu berechnen und das Ergebnis auf eine Form zu bringen, die einen Koeffizientenvergleich zuläßt. Dies ergibt sich hier direkt und das System bleibt geschlossen - es treten keine neuen Operatoren auf. Damit bewahren beide Zugänge die Blockbandstruktur, was hier aber an der Einfachheit des Problems liegt. Es gilt

$$\frac{d}{dl}\mathcal{H} = -4\beta(\lambda,\omega)\lambda - 8\beta(\lambda,\omega)\lambda\, b^\dagger b \; - 2\beta(\lambda,\omega)\omega \left(b^\dagger b^\dagger + b\; b \right) \tag{1.75}$$

Die Flussgleichungen lauten nun

$$\begin{aligned} \tfrac{d}{dl}E &= -4\beta(\lambda,\omega)\lambda \\ \tfrac{d}{dl}\omega &= -8\beta(\lambda,\omega)\lambda \quad \rightarrow \quad \tfrac{d}{dl}\omega^2 = -16\beta(\lambda,\omega)\lambda\omega \quad . \\ \tfrac{d}{dl}\lambda &= -2\beta(\lambda,\omega)\omega \quad \rightarrow \quad \tfrac{d}{dl}\lambda^2 = -4\beta(\lambda,\omega)\lambda\omega \end{aligned} \tag{1.76}$$

Es gibt eine Erhaltungsgrösse χ des Flusses

$$\omega^2 - 4\lambda^2 = \chi^2 = \text{const.} \quad . \tag{1.77}$$

Mit ihr läßt sich das Differentialgleichungssystem 1.76 entkoppeln.
Die Gleichungen 1.76 sollen speziell für $\beta_{\text{miel.}}$ gelöst werden. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \omega_l &= \chi \coth(2\chi l + \Phi) \\ \lambda_l &= \frac{\chi}{2\sinh(2\chi l + \Phi)} \\ \Phi &= \text{Artanh}\left(\frac{\chi}{\omega_0}\right) \quad . \end{aligned} \tag{1.78}$$

Die Flussgleichungen leisten nun das Gewünschte im Falle $|\lambda_0| \leq 2\omega_0$ und es folgt $\lim_{l\to\infty} \lambda = 0$. Damit ist schließlich[12]

$$\begin{aligned} \omega_\infty &= \sqrt{\omega_0^2 - 4\lambda_0^2} \\ E_\infty &= \tfrac{1}{2}\sqrt{\omega_0^2 - 4\lambda_0^2} \\ \mathcal{H}_\infty &= \sqrt{\omega_0^2 - 4\lambda_0^2}\, b^\dagger b \; + \tfrac{1}{2}\sqrt{\omega_0^2 - 4\lambda_0^2} \end{aligned} \tag{1.79}$$

und das System 1.72 ist diagonalisiert.
Man kann auch in voller Allgemeinheit berechnen, wie sich die Operatoren b bzw. $b^\dagger$ transformieren. Wie zu erwarten wird man die Bogoliubov-Transformation wiederfinden. Dazu betrachtet man die Operatoren

$$\mathcal{B}_l = A_l b^\dagger + B_l b \qquad \text{mit} \qquad \begin{array}{llll} A_0 = 1 & B_0 = 0 & \text{für} & b^\dagger \\ A_0 = 0 & B_0 = 1 & \text{für} & b \end{array} \quad . \tag{1.80}$$

$\mathcal{B}$ muss hier erweitert angesetzt werden, weil die Gleichungen sonst nicht geschlossen sind, was eine typische Situation bei der Methode der Flussgleichungen darstellt.
Man berechnet

$$\frac{d}{dl}\mathcal{B}_l = \left[\beta_l \left(b^\dagger b^\dagger - b\ b\right), A_l b^\dagger + B_l b\right] \tag{1.81}$$

und es folgt

$$\begin{array}{lll} \frac{d}{dl}A_l &=& -2\beta_l B_l \\ \frac{d}{dl}B_l &=& -2\beta_l A_l \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{lll} \frac{d}{dl}(A_l + B_l) &=& -2\beta_l(A_l + B_l) \\ \frac{d}{dl}(A_l - B_l) &=& 2\beta_l(A_l - B_l) \end{array} \quad . \tag{1.82}$$

Damit läßt sich A_l bzw. B_l integrieren und es ergibt sich für $l = \infty$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_\infty^\dagger &= \cosh(2\textstyle\int_0^\infty \beta_l dl) b^\dagger + \sinh(2\int_0^\infty \beta_l dl) b \\ \mathcal{B}_\infty &= \sinh(2\textstyle\int_0^\infty \beta_l dl) b^\dagger + \cosh(2\int_0^\infty \beta_l dl) b \end{aligned} \tag{1.83}$$

[12] Es gilt $\frac{d}{dl}E = \frac{d}{dl}\frac{1}{2}\omega$

mit

$$2\int_0^\infty \beta_{l,\mathrm{miel.}}\,\mathrm{d}l = \frac{1}{2}\mathrm{Artanh}\left(\frac{2\lambda_0}{\omega_0}\right) \quad . \tag{1.84}$$

Die Bogoliubovtransformation liegt somit durch die Flussgleichungen in einer kontinuierlichen Version vor[13].

[13] Auch der Wegnersche Ansatz für β hätte in diesem einfachen, im Parameterraum eindimensionalen Problem letztlich zum gleichen Ergebnis geführt.

2. Die abstrakte Struktur der Flussgleichungen

In diesem Kapitel soll zunächst der Generator der Flussgleichungen zur Behandlung des Modells

$$\mathcal{H} = -\tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(a_{i+1}^{\dagger}a_i + h.c.\right) + V\sum_{i=1}^{N}\left(n_i - \tfrac{1}{2}\right)\left(n_{i+1} - \tfrac{1}{2}\right) \quad . \tag{2.1}$$

gewählt werden. Es zeigt sich, dass der Hamiltonian in seiner normalgeordneten Darstellung bezüglich eines Teilchen-Loch-Bildes eine blockbanddiagonale Struktur hat, die den Ansatz nach Mielke, Knetter und Uhrig zum Ansatz der Wahl macht.
Danach wird die abstrakte Struktur der Flussgleichungen untersucht und erläutert, was den gewählten Ansatz im Sinne von eindimensionalen Fermionensystemen so besonders macht.
Da im Weiteren konsequent die normalgeordnete Darstellung von Operatoren verwendet wird, sollte man sich zunächst die wichtigsten Eigenschaften der Normalordnung vergegenwärtigen. Dazu dient in Kurzform der nächste Abschnitt. Details und weitere nützliche Aussagen finden sich in Anhang A.

2.1. Exkurs: Die Normalordnung

Die Normalordnung von Operatoren ist eine Darstellung von Operatorprodukten aus Erzeugern $c^{\dagger}$ und Vernichtern c, die ihre Wirkung in einem Quasiteilchenbild von Teilchen und Löcher besonders transparent macht. Dabei werden allgemein Erzeuger $b^{\dagger}$ und Vernichter b von Quasiteilchen definiert als

$$\begin{aligned} b_k^{\dagger} &= \begin{cases} c_k & \text{wenn} \quad |k| < k_F \\ c_k^{\dagger} & \text{wenn} \quad |k| > k_F \end{cases} \\ b_k &= \begin{cases} c_k^{\dagger} & \text{wenn} \quad |k| < k_F \\ c_k & \text{wenn} \quad |k| > k_F \end{cases} \quad . \end{aligned} \tag{2.2}$$

Ein normalgeordneter Operator hat eine Gestalt, in der alle Quasiteilchenerzeuger unter Berücksichtigung der Vertauschungsrelationen nach links bebracht wurden und Quasiteilchenvernichter demnach rechts stehen. Ein normalgeordneter Operator hat somit die Form

$$b_{k_1}^{\dagger}\dots b_{k_{l-1}}^{\dagger} b_{k_l}\dots b_{k_n} \quad . \tag{2.3}$$

Spezieller ist eine Fermionenzahl-erhaltende j-Teilchenwechselwirkung von der Struktur

$$\underbrace{\overbrace{b^\dagger b^\dagger \dots b^\dagger}^{(j+i)-\mathrm{mal}}\overbrace{b\ b\ \dots b}^{(j-i)-\mathrm{mal}}}_{2j-\mathrm{mal}} \quad . \tag{2.4}$$

Ein solcher Operator erhöht die Anzahl der Quasiteilchen um $2i$.
Ausgehend von einer gewöhnlichen j-Teilchenwechselwirkung wird ein normalgeordneter Operator auch durch eine Umklammerung mit Doppelpunkten notiert

$$: c^\dagger_{k_1} \dots c^\dagger_{k_j} c_{k'_j} \dots c_{k'_1} : \quad . \tag{2.5}$$

Die Wirkung eines normalgeordneten Operators auf Teilchen- oder Lochzustände ist leichter zu interpretieren.
Das Kalkül mit normalgeordneten Operatoren hingegen erfordert einige Vorsicht.
Für die Transformation zur normalgeordneten Darstellung sind sukzessive Vertauschungen notwendig, die sich jedoch in systematischer Weise ausdrücken lassen. Grundlegend dafür ist der Begriff des Pairings zweier Operatoren, welches folgendermaßen definiert ist

$$\underbracket{a b} = ab - :ab: \quad . \tag{2.6}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \underbracket{c^\dagger_k c^\dagger_{k'}} = \underbracket{c_k c_{k'}} &= 0 \\ \underbracket{c^\dagger_k c_{k'}} &= \delta_{kk'} n_k \\ \underbracket{c_k c^\dagger_{k'}} &= \delta_{kk'}(1 - n_k) \quad . \end{aligned} \tag{2.7}$$

Das *Wicksche Theorem für gewöhliche Produkte* zeigt, dass ein gewöhnliches Operatorprodukt äquivalent zu einer Summe von normalgeordneten Operatoren ist, bei denen sukzessive alle möglichen Pairings durchgeführt wurden, bis kein Pairing mehr möglich ist (s. Ref. [31]). Jede Kombination wird einfach gezählt und mit dem Vorzeichen der Vertauschungen bewertet, die notwendig sind, um die Operatoren nebeneinander zu bringen.

$$\begin{aligned} a_1 a_2 a_3 a_4 \dots a_{n-1} a_n \quad = \quad & : a_1 a_2 a_3 a_4 \dots a_{n-1} a_n : + \\ & \left.\begin{aligned} & : \underbracket{a_1 a_2} a_3 a_4 \dots a_{n-1} a_n : + \\ & : \underbracket{a_1 a_2 a_3} a_4 \dots a_{n-1} a_n : + \\ & \qquad \vdots \end{aligned}\right\} \textit{alle 1-fachen-Pairings} \\ & : a_1 a_2 a_3 a_4 \dots \underbracket{a_{n-1} a_n} : + \\ & \left.\begin{aligned} & : \underbracket{a_1 a_2} \underbracket{a_3 a_4} \dots a_{n-1} a_n : + \\ & \qquad \vdots \end{aligned}\right\} \textit{alle 2-fachen-Pairings} \\ & \qquad \vdots \\ & \textit{alle maximal möglichen Pairings} \end{aligned} \tag{2.8}$$

Die Pairings lassen sich (nach der Ermittlung des Vorzeichens aus den notwendigen Vertauschungen) als skalare Größen herausziehen.
Nun seien einige Eigenschaften normalgeordneter Operatorprodukte aufgelistet:

- Die Vertauschung zweier Operatoren in dem gewöhnlichen Produkt hat einzig einen Vorzeichenwechsel des normalgeordneten Produktes zur Folge. Es gilt also beispielsweise

$$: c^\dagger_{k_1} \dots c_{k_i} c^\dagger_{k_{i+1}} \dots c^\dagger_{k_n} : = - : c^\dagger_{k_1} \dots c^\dagger_{k_{i+1}} c_{k_i} \dots c^\dagger_{k_n} : \tag{2.9}$$

- Der Impulsübertrag und die Quasiteilchenzahländerung von $:\mathcal{A}:$ und $:\mathcal{B}:$ sind bei der Normalordnung von $:\mathcal{A}::\mathcal{B}:$ additiv. Dies ist prinzipiell klar, denn es darf ja nicht von der Schreibweise abhängen, wie sich Impulse oder Quasiteilchenzahlen übertragen. Man kann diese Eigenschaft aber auch explizit zeigen.

- Die Länge der entstehenden Wechselwirkungen aus der Normalordnung eines Kommutators $[:\mathcal{A}:, :\mathcal{B}:]$ lässt sich mit der Ordnung und Quasiteilchenänderung von $:\mathcal{A}:$ und $:\mathcal{B}:$ nach oben und unten abschätzen.

2.2. Ansatz und Struktur

2.2.1. Die Blockbandstruktur des Modells

Zunächst ist zu entscheiden, wie der Generator zu wählen ist. Dazu betrachte man den Hamiltonoperator eines Systems mit N Plätzen in seiner normalgeordneten Form[1]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_k -\left(1 + \tfrac{2V}{\pi}\right)\cos(k) \ : c^\dagger_k c_k : + \\ & \sum_{k,k',q} \tfrac{V}{N}\cos(q) \ : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k'-q} c_{k'} c_k : - \left(\tfrac{1}{\pi} + \tfrac{V}{2\pi}\right) N \ . \end{aligned} \tag{2.10}$$

Es sei nochmals erwähnt, dass normalgeordnete Operatoren nur auf Quasiteilchen im Sinne von Fermionen oberhalb der Fermikante und Löchern unterhalb wirken. Damit kann der Wechselwirkungsterm nur

- zwei Quasiteilchen umsetzen (vgl. Abbildung 2.1(a)),
- eine Quasiteilchen umsetzen und zwei erzeugen oder vernichten (vgl. Abbildung 2.1(b)) oder
- vier Quasiteilchen erzeugen oder vernichten (vgl. Abbildung 2.1(c)).

Die Quasiteilchenänderung also kann nur 0, ± 2 oder ± 4 sein und es liegt diesbezüglich eine Blockbandstruktur im Sinne des Flussgleichungsansatzes von Mielke, Knetter und Uhrig vor. In nächsten Abschnitt soll das formale Bild des Hamiltonians und seines Flusses nach diesem Ansatz entwickelt werden.

[1] Es wird der thermodynamische Limes $N \longrightarrow \infty$ benutzt. Weiter unten bei den numerischen Untersuchungen wird jedoch lediglich endliches N betrachtet. Daher sei die Dispersion auch für endliches N angegeben

$$\sum_k -\left(\cos(k) - \tfrac{2V}{N} \sum_{k'<k_F} \cos(k-k')\right) : c^\dagger_k c_k := \sum_k -\left(1 + \tfrac{2V}{N} \sum_{k'<k_F} \cos(k')\right) \cos(k) : c^\dagger_k c_k : \ .$$

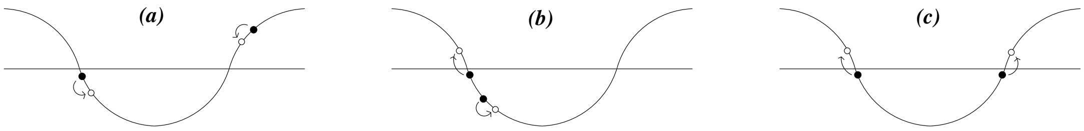


Abbildung 2.1.: Typische Prozesse der 2-Teilchen-Wechselwirkung. Schwarze Punkte entsprechen Teilchen, leere Löchern. Durch das Umsetzen wird ein Teilchen bzw. Loch vernichtet und anschließend ein Loch bzw. Teilchen erzeugt.

2.2.2. Die Flussgleichungen im allgemeinen Fall

Sei $\mathcal{T}_i^{(j)}\{\mathcal{A}\}$ allgemein als normalgeordneter j-Fermionen-Wechselwirkungsanteil eines Operators $\mathcal{A}$ definiert, der die Anzahl der Quasiteilchen um i ändert. Die Änderung der Quasiteilchenanzahl durch einen Operator kann dabei mit der Teilchendichte n_k freier Fermionen über

$$f(A_{k_1 k_2 \ldots k_n k'_n \ldots k'_2 k'_1} : c^\dagger_{k_1} c^\dagger_{k_2} \ldots c^\dagger_{k_n} c_{k'_n} \ldots c_{k'_2} c_{k'_1} :) = -2 \sum_{i=1}^{n} (n_{k_i} - n_{k'_i}) \qquad (2.11)$$

ermittelt werden. Es gilt also $f \in \{2i | i \in \mathcal{N} \wedge i \leq n\}$.
Das ursprüngliche Modell stellt sich jetzt abstrakt als

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \mathcal{T}_0^{(0)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_0^{(1)}\{\mathcal{H}_0\} + \\ &\quad \mathcal{T}_{+4}^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_{+2}^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_0^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_{-2}^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_{-4}^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} \end{aligned} \qquad (2.12)$$

dar. Dabei ist $\mathcal{T}_0^{(2)}$ die 2-Quasiteilchen-Wechselwirkung. Wenn Quasiteilchenzahl-ändernde Prozesse $\mathcal{T}_{i\neq 0}^{(2)}$ ignoriert werden, ist $\mathcal{T}_0^{(0)}$ die Grundzustandsenergie und $\mathcal{T}_0^{(1)}$ die Dispersion (genauer deren Operatoren).
Ganz allgemein hätte ein System N spinloser Fermionen in einer Dimension mit beliebig hohen Wechselwirkungstermen die Form

$$\mathcal{H} = \sum_{j=0}^{N} \sum_{i=-j}^{+j} \mathcal{T}_{2i}^{(j)}\{\mathcal{H}\} \quad . \qquad (2.13)$$

Dazu sei bemerkt, dass aufgrund der Hermitezität von $\mathcal{H}$ natürlich $\mathcal{T}_{2i}^{(j)\dagger}\{\mathcal{H}_0\} = \mathcal{T}_{-2i}^{(j)}\{\mathcal{H}_0\}$ gilt.

Der Ansatz für den Generator

Der allgemeine Ansatz für η für einen Hamiltonian der Form 2.13 nach Mielke, Knetter und Uhrig ist

$$\begin{aligned}\eta\{\mathcal{H}\} &= \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=-j}^{+j} \operatorname{sign}\left(f\left(\mathcal{T}_{2i}^{(j)}\{\mathcal{H}\}\right)\right)\mathcal{T}_{2i}^{(j)}\{\mathcal{H}\} \\ &= \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=-j}^{+j} \operatorname{sign}(2i)\,\mathcal{T}_{2i}^{(j)}\{\mathcal{H}\} \\ &= \sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{+j} \mathcal{T}_{2i}^{(j)}\{\mathcal{H}\} - h.c. \ . \end{aligned} \tag{2.14}$$

Die Frage ist, welche Struktur damit prinzipiell aus obigem $\mathcal{H}_0$ entstehen kann. Es ist also zu untersuchen, welche Operatoren aus einem Kommutator der Form $[\mathcal{T}_{2i}^{(j)}\{\mathcal{H}\}, \mathcal{T}_{2i'}^{(j')}\{\mathcal{H}\}]$ entstehen können.

Die Struktur

Da sich die Quasiteilchen-Änderungen im Produkt zweier normalgeordneter Operatoren addieren, weiß man direkt, dass der Kommutator die Quasiteilchenzahl um $2(i+i')$ ändert.

$$[\mathcal{T}_{2i}^{(j)}, \mathcal{T}_{2i'}^{(j')}] \longrightarrow \mathcal{T}_{2i+2i'}^{(j'')} \tag{2.15}$$

Genau dies ist die Eigenschaft, die den verallgemeinerten Ansatz von Mielke, Knetter und Uhrig für η Blockbandstruktur-erhaltend macht. Weil zweite Quantisierung benutzt wird, können Operatoren $\mathcal{T}_{2i}^{j}$ im Sinne von Unterräumen mit $2i$ Quasiteilchen $\mathcal{Q}_{2i}$ natürlich Anteil mehrerer Blöcke sein (vgl. Abbildung 2.2.2)

Man kann die allgemeine Form des hier betrachteten Modells im Fluss direkt angeben. Sie ist

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_l &= \mathcal{T}_0^{(0)}\{\mathcal{H}_l\} + \mathcal{T}_0^{(1)}\{\mathcal{H}_l\} + \\ & \sum_{j=2}^{N} \mathcal{T}_{+4}^{(j)}\{\mathcal{H}_l\} + \mathcal{T}_{+2}^{(j)}\{\mathcal{H}_l\} + \mathcal{T}_{0}^{(j)}\{\mathcal{H}_l\} + \mathcal{T}_{-2}^{(j)}\{\mathcal{H}_l\} + \mathcal{T}_{-4}^{(j)}\{\mathcal{H}_l\} \ . \end{aligned} \tag{2.16}$$

Weiterhin kann man noch feststellen, dass die Ordnung j'' der Wechselwirkungen aus dem Kommutator (Gleichung 2.15) nach oben und unten beschränkt ist. Zumindest ein Pairing zwischen den Operatoren des Kommutators ist notwendig, sonst verschwindet der Kommutator. Daher gilt:

$$j'' \leq j + j' - 1 \ . \tag{2.17}$$

Es können auch nicht beliebig viele Pairings gebildet werden (s. Anhang A). Dies führt dazu, dass j'' nach unten beschränkt ist

$$j'' \geq \frac{1}{2}\min\left\{ \begin{array}{l} j+i+j'-i'+|(j-i)-(j'+i')| \\ j-i+j'+i'+|(j'-i')-(j+i)| \end{array} \right\} \ . \tag{2.18}$$

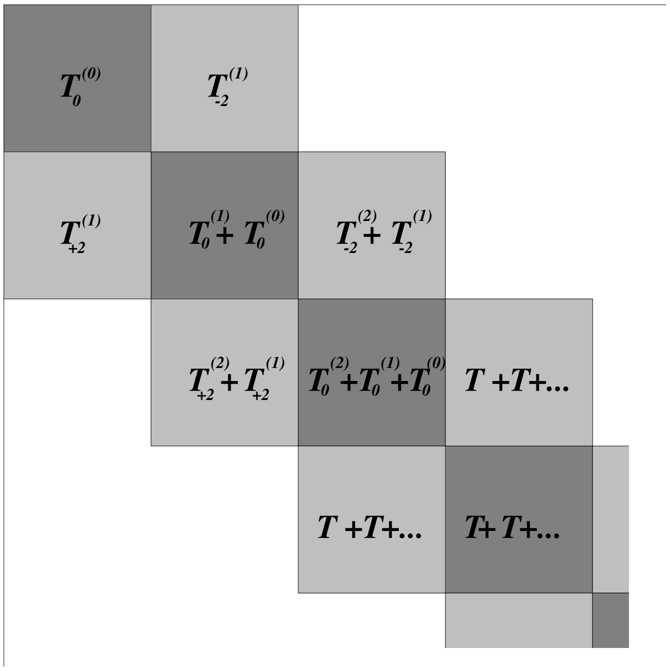


Abbildung 2.2.: Schema der Blockbandstruktur eines normalgeordneten Hamiltonoperators mit j-Teilchen-Wechselwirkungen $\mathcal{T}_i^{(j)}$, die die Quasiteilchenzahl um höchstens ± 2 ändern können.

Dies lässt sich auch im Bild der Unterräume zu verschiedenen Quasiteilchen verstehen. Zwar können Operatoren in 2. Quantisierung auf viele solche Unterräume wirken, ihr Fluss ist dennoch nicht beliebig von anderen Operatoren abhängig. Der Grundzustandsenergieoperator $\mathcal{T}_0^{(0)}$ wirkt z.B. in allen Diagonalelementen, jedoch tritt die Grundzustandsenergie nur im Grundzustand isoliert auf. Der Grundzustand kann wiederum nur via $\mathcal{T}_{+4}^{(2)}$-Operatoren (speziell: $: c_{+k}^\dagger c_{-k}^\dagger c_{-K} c_{+K} :$ mit $|k| > k_F$ und $|K| < k_F$) mit anderen Unterräumen verbunden werden. In der infinitesimalen unitären Transformation muss also alles von diesen Operatoren bestimmt sein.
Mit den Bedingungen 2.17 und 2.18 ist es möglich zu analysieren, welche Anteile des Kommutators $[\eta, \mathcal{H}]$ zum Fluss von $\mathcal{T}_{2i}^{(j)}\{\mathcal{H}\}$ prinzipiell beitragen.

Struktur und Lösungsmethode

Die abstrakten Flussgleichungen mit dem Generator nach Gleichung 2.14 stellen im thermodynamischen Limes ein ∞-dimensionales System gekoppelter autonomer gewöhnlicher Differentialgleichungen dar. Überträgt man die Koeffizienten der verschiedenen Operatoren in einen Vektor $\vec{y}$, so kann man auch schreiben

$$\frac{d}{dl} y_i = \sum_{jk} a^i_{jk} y_j y_k \quad . \tag{2.19}$$

Dabei sind die a^i_{jk} konstante Koeffizienten, die sich systematisch aus dem Kommutator ergeben. Bei Konvergenz der Methode wird für $l \to \infty$ ein Fixpunkt erreicht - eben $\mathcal{H}_{\text{eff}}$. Die

- ∞-Dimensionalität des Problems und die
- Nichtlinearität der Differentialgleichungen

erschweren eine analytische Lösung des Systems enorm. Es kann sein, dass eine solche Lösung möglich ist. Schließlich ist das hier betrachtete Problem mit anderen Methoden komplett integrabel. Dieser Weg soll aber nicht beschritten werden. Vielmehr sollen die Differentialgleichungen numerisch integriert werden.
Einerseits erfordert die numerische Integration notwendigerweise eine Beschränkung in der Dimensionalität des Problems, also die Wahl eines endlichen, aber hinreichend großen Systems mit N Gitterplätzen. Andererseits ist es auch dann technisch nicht machbar, alle möglichen entstehenden Operatoren zu berücksichtigen. Immerhin wächst die Anzahl der Koeffizienten einer impulserhaltenden j-Teilchen-Wechselwirkung prinzipiell mit N^{2j-1}. Daher wird man sich auf gewisse Terme beschränken müssen.
Für die numerische Integration wird das Runge-Kutta-Verfahren mit adaptive Schrittweitenbestimmung benutzt. Es ist zwar algorithmisch recht aufwendig und führt zu langen Rechenzeiten, jedoch ist es gerade Problemen mit unbekannten Funktionsverläufen gut angepasst. Das Runge-Kutta-Verfahren ist ein numerisches Standardverfahren und wird in vielen Lehrbüchern besprochen (beispielsweise in Ref.[32]). Die Realisierung, die hier verwendet wird, ist eine objektorientierte Adaption des Programmes aus Ref.[33].

2.3. Das Besondere des Ansatzes

Der gewählte Ansatz für η nach Gleichung 2.14 erscheint aufgrund der Blockbandstruktur des Modells natürlich. Allerdings kann man nicht genug unterstreichen, dass sich die Vorstellung von Quasiteilchen gegenüber freien Fermionen nicht *ändert. Das Bild von Teilchen oder Löchern ist dasselbe wie im nicht-wechselwirkenden Fall. Eine solche Sichtweise ist der Sprache der Fermiflüssigkeitstheorie zuzuordnen. Mit diesem Ansatz soll dann durch eine kontinuierliche Transformation ein effektives Modell erzeugt werden, das Luttingerflüssigkeitsverhalten reproduziert. Nach den gängigen Überlegungen, die im ersten Kapitel vorgestellt wurden, ist das ein Widerspruch.*
Dies ist aber genau der Kern der vorliegenden Arbeit. Hat dieser Ansatz in einer Dimension Erfolg, so ist dies eine Grundlage für eine übergreifende Beschreibungsweise von wechselwirkenden Fermionenmodellen in beliebigen Dimensionen.

3. Die Gleichungen in strukturerhaltender Näherung

In diesem Kapitel werden die Flussgleichungen in “strukturerhaltender” Näherung untersucht. Strukturerhaltend bedeutet dabei, dass die Wirkungen der Terme $\mathcal{T}_0^{(0)}$, $\mathcal{T}_0^{(1)}$ und $\mathcal{T}_{2i}^{(2)}$ mitgenommen werden, ohne die entstehenden $\mathcal{T}_{2i}^{(3)}$-Terme zu berücksichtigen. Die Differentialgleichungen dieser Terme sind damit in der Ordnung V^2 richtig beschrieben.
Bei der strukturerhaltenden Näherung hat man es bei einer Systemgrösse N im Allgemeinen mit N^3 2-Teilchen-Wechselwirkungen zu tun. Um die Anzahl der unabhängigen Koeffizienten zu verringern, werden die Symmetrien untersucht. Dann wird eine Parametrisierung vorgestellt, die diese Symmetrien besonders transparent macht und sich gut zu einer systematischen Auswertung des Kommutators eignet.
Anschließend werden die Flussgleichungen der Koeffizienten angegeben und numerisch gelöst. Es zeigt sich, dass trotz der Näherungen für nicht zu große Kopplungen V schon gute Resultate erzielt werden können. Ein Problem ist jedoch, dass die Differentialgleichungen nicht für alle Kopplungsstärken konvergieren. Dies wird bei der Analyse des Falles $N = 4$ verständlich. Dieser Fall weist auch den Weg zu möglichen Verbesserungen.

3.1. Symmetrie und Parametrisierung

Das Modell

$$\mathcal{H} = \underbrace{-N\left(\frac{1}{\pi} + \frac{V}{2\pi}\right)}_{E} + \sum_k \underbrace{-\left(1 + \frac{2V}{\pi}\right)\cos(k)}_{\varepsilon_k} :c_k^\dagger c_k: + \frac{1}{N}\sum_{k,k',q} \underbrace{V\cos(q)}_{\Gamma_{k,k',q}} :c_{k+q}^\dagger c_{k'-q}^\dagger c_{k'} c_k: \quad . \tag{3.1}$$

besitzt zahlreiche Symmetrien.
Prinzipiell gibt es

- einen 0-Teilchenoperator-Koeffizienten E (*Grundzustandsenergie*),
- N Koeffizienten ε_k der 1-Teilchen-Operatoren (*Dispersion*) und
- N^3 2-Teilchenoperator-Koeffizienten Γ_{kKq} (*Vertexfunktion*)

Eine Berücksichtigung aller Symmetrien und die Wahl einer geeigneten Parametrisierung reduziert inbesondere die Anzahl der unabhängigen Koeffizienten der Vertexfunktion.
Aus der Physik des Systems folgen die Symmetrien

- Hermitezität $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger$,
- Inversionssymmetrie (alle Impulse $k \leftrightarrow -k$),
- Teilchen-Loch-Symmetrie ($c_k^\dagger \leftrightarrow -c_{k+\pi}$) wegen halber Füllung ($k_F = \frac{\pi}{2}$) und
- 2π-Periodizität der Impulse wegen der periodischen Randbedingungen.

Zudem liefert die Notation der Normalordnung einen

- Vorzeichenwechsel bei Vertauschung zweier Operatoren im normalgeordneten Produkt, wodurch derselbe Prozess beschrieben wird (*"Notationssymmetrie"*). Es handelt sich um eine Redundanz der Notation (vgl. hierzu Gleichung 2.9) .

In der gewählten Konvention $:c^\dagger c^\dagger c\ c\ :$ sind also noch zwei Antisymmetrien versteckt. Diese sind jedoch noch nicht in der Vertexfunktion $\Gamma_{k,k',q}$ offensichtlich. So gilt z.B. $\Gamma_{k,k',q} \neq -\Gamma_{k,k',k'-k-q}$.
Um die physikalischen Symmetrien des Systems gut handhabbar zu machen, wird umparametrisiert

$$\begin{aligned} \Gamma_{k,k',q} :c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k'-q} c_{k'} c_k : \quad &\rightarrow \quad \Gamma_{k,q,Q} :c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c_{k-Q} c_{k+Q} : \\ \Gamma_{k,k',q} = V\cos(q) \quad &\rightarrow \quad \Gamma_{k,q,Q} = V\cos(q-Q) \quad . \end{aligned} \tag{3.2}$$

Dabei ist zu beachten, dass man so in der Summation doppelt zählt. Die Vertexfunktion Γ ist nämlich nun periodisch in einer Verschiebung aller Impulse um π. Einer der Parameter k,q oder Q sollte daher statt $[-\pi, \pi)$ nur $[0, \pi)$ durchlaufen oder die Summe muss insgesamt durch 2 geteilt werden. Hier laufe k nur von $[0, \pi)$. Der Parameter k stellt jetzt den Schwerpunkt der vernichteten bzw. erzeugten Fermionen dar.
In der gewählten Parametrisierung bedeutet Hermitezität für die Vertexfunktion

$$\Gamma_{k,q,Q} = \Gamma_{k,Q,q} \quad . \tag{3.3}$$

Die Inversionssymmetrie impliziert

$$\Gamma_{kqQ} = \Gamma_{-k,-q,-Q} \tag{3.4}$$

und die Teilchen-Loch-Symmetrie hat

$$\Gamma_{k,q,Q} = \Gamma_{k,q+\pi,Q+\pi} = \Gamma_{k+\pi,q,Q} \tag{3.5}$$

zur Folge.
Die Notationssymmetrie hingegen ergibt sich nicht automatisch. Sie überträgt sich nur summarisch auf die Koeffizienten Γ. Mehrere Operatoren haben diesselbe Wirkung und in der Gesamtwirkung zählt nur die Summe dieser Operatoren. Man kann also umsummierem

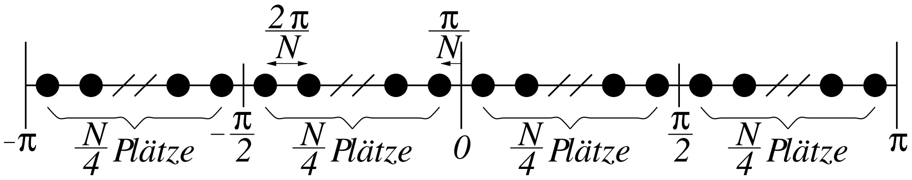


Abbildung 3.1.: Konfiguration der N Gitterplätze

und ersetzt dann

$$
\begin{aligned}
\tilde{\Gamma}_{k,q,Q} : c^{\dagger}_{k+q} c^{\dagger}_{k-q} c_{k-Q} c_{k+Q} : \ &= \ \frac{1}{4} \times \{ \\
&\quad \Gamma_{k,q,Q} : c^{\dagger}_{k+q} c^{\dagger}_{k-q} c_{k-Q} c_{k+Q} : - \\
&\quad \Gamma_{k,-q,Q} : c^{\dagger}_{k-q} c^{\dagger}_{k+q} c_{k-Q} c_{k+Q} : - \\
&\quad \Gamma_{k,q,-Q} : c^{\dagger}_{k+q} c^{\dagger}_{k-q} c_{k+Q} c_{k-Q} : + \\
&\quad \Gamma_{k,-q,-Q} : c^{\dagger}_{k-q} c^{\dagger}_{k+q} c_{k+Q} c_{k-Q} : \\
&\quad \} \\
&= \ \frac{1}{4} \{ \Gamma_{k,q,Q} - \Gamma_{k,-q,Q} - \Gamma_{k,q,-Q} + \Gamma_{k,-q,-Q} \} \times \\
&\quad : c^{\dagger}_{k+q} c^{\dagger}_{k-q} c_{k-Q} c_{k+Q} : \ .
\end{aligned} \tag{3.6}
$$

Damit erhält man im betrachteten Modell konkret

$$
\Gamma_{k,q,Q} = V \cos(q - Q) \rightarrow \Gamma_{k,q,Q} = V \sin(q) \sin(Q) \ . \tag{3.7}
$$

Damit ist die Notationssymmetrie in der Vertexfunktion offensichtlich geworden und prägt sich in

$$
\Gamma_{k,q,Q} = -\Gamma_{k,-q,Q} \tag{3.8}
$$

$$
\Gamma_{k,q,Q} = -\Gamma_{k,q,-Q} \tag{3.9}
$$

aus.

Die N Gitterplätze werden gemäß Abbildung 3.1 verteilt. Dafür muss $N \in \{4n | n \in \mathcal{N}\}$ gelten. Diese Konfiguration erlaubt eine eindeutige Normalordnung und eine einheitliche Ausnutzung der Symmetrien.

Die Parameter k, q und Q der Vertexfunktion Γ_{kqQ} sind in dieser Konfiguration aus folgender Menge zu wählen

$$
\left\{ (k,q,Q) \middle| \begin{array}{c} \left(k \in \left\{\frac{2\pi n}{N} | n \in \{0,1,\ldots,\frac{N}{2}-1\}\right\} \wedge (q,Q) \in \left\{\frac{2\pi n}{N} | n \in \{\frac{1}{2},\frac{3}{2},\ldots,N-\frac{1}{2}\}\right\}\right) \\ \vee \\ \left(k \in \left\{\frac{2\pi n}{N} | n \in \{\frac{1}{2},\frac{3}{2},\ldots \frac{N}{2}-\frac{1}{2}\}\right\} \wedge (q,Q) \in \left\{\frac{2\pi n}{N} | n \in \{0,1,\ldots,N-1\}\right\}\right) \end{array} \right\} \tag{3.10}
$$

Der Erfolg der vollständig ausgenutzten Symmetrien ist eine Reduktion von N^3 auf nur noch

$$
\frac{N^3}{32} + \frac{N^2}{8} + \frac{N}{4} \tag{3.11}
$$

von Null verschiedene, unabhängige Γ_{kqQ}. Bei den Symmetrien der Notation muss man sich klar machen, dass sie im Gegensatz zu den physikalischen unter unitären Transformationen nicht erhalten bleiben müssen. Man muss gegebenenfalls "nachsymmetrisieren".
In der Dispersion gibt es wegen der Inversions- und der Teilchen-Loch-Symmetrie nur $\frac{N}{4}$ unabhängige Variablen. Damit hat man zusammen mit der Grundzustandsenergie

$$\frac{N^3}{32} + \frac{N^2}{8} + \frac{N}{2} + 1 \tag{3.12}$$

Variablen.

3.2. Die Ableitung der strukturerhaltenden Näherung

Um glatt interpolieren zu können und nahe am thermodynamischen Limes zu sein, braucht man möglichst viele Kettenplätze. Entsprechend wächst aber auch die Anzahl der unabhängigen Variablen. Nimmt man beispielsweise ein System mit 48 Kettenplätzen, so hat man 12 unabhängige Parameter der Dispersion, aber insgesamt schon rund 3756 unabhängige Parameter der Vertexfunktion. Beschränkt man sich darauf, deren Fluss zu untersuchen, so ist dies schon mit beträchtlichem numerischen Aufwand verbunden. Dabei ist das Problem weniger eines der Speicherkapazität als vielmehr eines der Laufzeit.
Daher werden die Flussgleichungen in einer Näherung abgeleitet, die alle Terme der Ausgangsstruktur 3.1 (also $\mathcal{T}_0^{(0)}$, $\mathcal{T}_0^{(1)}$ und $\mathcal{T}_{2i}^{(2)}$) mitnimmt, aber höhere Terme vernachlässigt. Konkret bedeutet dies, dass die entstehenden 3-Teilchenterme $\mathcal{T}_{2i}^{(3)}$ unberücksichtigt bleiben. Damit werden auch keine höheren Terme erzeugt und die Struktur 3.1 bleibt im Fluss erhalten. Daher wird diese Näherung als strukturerhaltend bezeichnet.
Diese Näherung nimmt alle Anteile der Differentialgleichungen von der Ordnung V^2 mit und ist damit also auch im Sinne eine Störungstheorie systematisch. Insbesondere werden die Anteile der Differentialgleichung für die Grundzustandsenergie vollständig berücksichtigt.

Die Flussgleichungen

Für die Flussgleichungen benötigt man eine Funktion, die die Quasiteilchenänderung durch einen 2-Teilchen-Operator : $c^\dagger_{k+q}c^\dagger_{k-q}c_{k-Q}c_{k+Q}$: zählt. Sie ist nach Gleichung 2.11 durch

$$S_{k,q,Q} = -\text{sign}\left(n_{k+q} + n_{k-q} - n_{k-Q} - n_{k+Q}\right) \tag{3.13}$$

gegeben. Die Symmetrien dieser Funktion sind direkt ablesbar. $\eta_{kqQ} = S_{kqQ}\Gamma_{kqQ}$ ist antisymmetrisch gegen Vorzeichenwechsel in q oder Q. Damit ist auch hier die Notationssymmetrie vorhanden.
Nun muss der Kommutator $[\eta, \mathcal{H}]$ berechnet und ein Koeffizientenvergleich vorgenommen werden. Eine detaillierte Durchführung der Berechnungen ist in Anhang B gegeben.

Die Flussgleichungen der Koeffizienten des Hamiltonians haben in der strukturerhaltenden Näherung folgende Gestalt

- Für die **Grundzustandsenergie pro Platz** gilt

$$\frac{dE/N}{dl} = \frac{8}{N^3} \sum_{k\in[0,\pi),qQ\in[-\pi,\pi)} (1-2\,n_{k+Q})\, n_{k+q}\, n_{k-q}\, S_{k,q,Q}\, \Gamma_{k,q,Q}{}^2 \quad . \tag{3.14}$$

- Für die **Dispersion** gilt

$$\frac{d\varepsilon_k}{dl} = \frac{8}{N^2} \sum_{qQ\in[-\pi,\pi)} (\,(1-2\,n_{k+Q-q})\, n_{k-2q} + n_{k+Q-q}\, n_{k-Q-q})\, S_{k-q,q,Q}\, \Gamma_{k-q,q,Q}{}^2 \quad . \tag{3.15}$$

- Für den Fluss der **2-Teilchen-Wechselwirkung** gilt

$$\begin{aligned}
\frac{d\Gamma_{k,q,Q}}{dl} = {} & \\
& (\,\varepsilon_{k+Q} + \varepsilon_{k-Q} - \varepsilon_{k-q} - \varepsilon_{k+q}\,)\, S_{k,q,Q}\, \Gamma_{k,q,Q} - \\
& \frac{1}{N} \sum_{p\in[-\pi,\pi)} 4n_p \times \\
& \qquad \{ \\
& \qquad \Phi_{\frac{k+q+p}{2},\frac{k+q-p}{2},\frac{k-q-p}{2}-Q|\frac{k+Q+p}{2},\frac{k-Q-p}{2}-q,\frac{k+Q-p}{2}} + \\
& \qquad \Phi_{\frac{k-q+p}{2},\frac{k-q-p}{2},\frac{k+q-p}{2}+Q|\frac{k-Q+p}{2},\frac{k+Q-p}{2}+q,\frac{k-Q-p}{2}} - \\
& \qquad \Phi_{\frac{k+q+p}{2},\frac{k+q-p}{2},\frac{k-q-p}{2}+Q|\frac{k-Q+p}{2},\frac{k+Q-p}{2}-q,\frac{k-Q-p}{2}} - \\
& \qquad \Phi_{\frac{k-q+p}{2},\frac{k-q-p}{2},\frac{k+q-p}{2}-Q|\frac{k+Q+p}{2},\frac{k-Q-p}{2}+q,\frac{k+Q-p}{2}} \\
& \qquad \} + \\
& \qquad 2(1-2n_p)\, \Phi_{k,q,p-k|k,p-k,Q}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

mit

$$\Phi_{k,q,Q|\tilde{k},\tilde{q},\tilde{Q}} = (S_{k,q,Q} - S_{\tilde{k},\tilde{q},\tilde{Q}})\, \Gamma_{k,q,Q}\, \Gamma_{\tilde{k},\tilde{q},\tilde{Q}} \tag{3.17}$$

Unberücksichtigt bleibt die Entstehung der 3-Teilchen-Wechselwirkung, die sich beispielsweise folgendermaßen darstellen lässt

$$\frac{d}{dl}A_{k,q,Q,q',Q'} = -\frac{4}{N^2}\Gamma_{k-q-Q',q,Q}\Gamma_{k,q',Q'}(S_{k-q-Q',q,Q} - S_{k,q',Q'}) \ , \tag{3.18}$$

wenn $A_{k,q,Q,q',Q'}$ der Koeffizient des Operators

$$: c^\dagger_{k+q'} c^\dagger_{k-q'} c^\dagger_{k-2q-Q'} c_{k+Q'} c_{k-q-Q-Q'} c_{k-q+Q-Q'} : \tag{3.19}$$

ist. Es lässt sich bestimmt eine Parametrisierung der $\mathcal{T}^{(3)}_{2i}$-Terme finden, die die vorhandenen Symmetrien transparent macht. Hier wird sie jedoch nirgends benötigt. Es sieht aus, als ob sich der Fluss dieser Terme aus einem einzigen Paar von $\mathcal{T}^{(2)}_{2i}$-Anteilen bestimmen ließe. Eine Einführung der Notationssymmetrie in $A_{k,q,Q,q',Q'}$ würde deutlich machen, dass dem nicht so ist.

Bemerkungen

- Die Differentialgleichungen sind in der Ordnung $\mathcal{O}(V^2)$ vollständig. Terme aus Operatoren von $\mathcal{T}^{(j>2)}_{2i}$ entstehen erst quadratisch aus den $\mathcal{T}^{(2)}_{2i}$ und sind somit von der Ordnung $\mathcal{O}(V^2)$. Ihre Rückwirkung sind gemäß einer Analyse der möglichen Operatorkombinationen durch die Abschätzung 2.18 von der Ordnung $\mathcal{O}(V^{k>2})$.

- Die quadratische Struktur des Flusses von E und ε_k lässt sich leicht verstehen. Schließlich sind diese Anteile in einer Matrixschreibweise Elemente, die tatsächlich auf der Diagonalen stehen. Bei einer infinitesimalen Drehung des Operators sollten daher Außerdiagonalelemente quadratisch ankoppeln.
  Aus diesem Grund gibt es auch keine weiteren Anteile in der Differentialgleichung der Grundzustandsenergie. An den Grundzustand koppeln nur $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 4}$ Terme an und diese müssen somit die Differentialgleichungen vollständig bestimmen.

- Es gibt 2×8 mögliche Pairings, die auf die Dispersionsanteile führen und dann zusammengefasst werden können. Dass der Vorfaktor des Flusses der Dispersionskoeffizienten nur 8 ist, liegt daran, dass bei der Summation über $q, Q \in [-\pi, \pi)$ wieder doppelte Zählungen auftreten.

- Die vier Anteile in der geschweiften Klammer von 3.16 könnten beim Koeffizientenvergleich auch zusammengefasst werden. Sie sind jedoch alle einzeln nötig, um die Notationssymmetrie nicht zu zerstören.

3.3. Numerische Ergebnisse

Zur Integration der Differentialgleichungen 3.14-3.16 wird das Runge-Kutta-Verfahren mit adaptiver Schrittweitenbestimmung in Anlehnung an Ref.[33] verwendet. Zwar ist dieser Algorithmus recht aufwendig, da für jeden Schritt das System 6-mal ausgewertet werden muss, doch ist er gerade unbekannten Funktionsverläufen und eventuellen Divergenzen oder Unstabilitäten angepasst. Für eine nähere Erläuterung des Runge-Kutta-Verfahrens siehe Ref.[32].

Schema des Programms Die Koeffizienten E, ε_k und Γ_{kqQ} werden auf einen Vektor y_i abgebildet. Vor der Integration werden unter Ausnutzung sämtlicher Symmetrien die konstanten Koeffizienten des Differentialgleichungssystems a^i_{jk} gemäß Gleichung 2.19 berechnet und in einer Liste gespeichert. Die Koeffizienten entsprechen rationalen Zahlen, wobei im Nenner Potenzen der Systemgröße zu finden sind. Im Zähler stehen ganze Zahlen, die sich aus den Kommutatoren mit den entsprechenden Kontraktionen ergeben.
Daraufhin wird integriert. Da numerisch nicht bis $l \to \infty$ gelaufen werden kann, braucht man ein Abbruchkriterium. Falls das System divergent ist, wird an den auftretenden Divergenzen abgebrochen. Im konvergenten Fall kann man abbrechen, wenn die Quasiteilchenzahl-ändernden Operatoren allesamt unter einen bestimmten Wert gefallen sind. Man kann sich auch daran orientieren, dass ein Fixpunkt erreicht werden soll. Dann ist abzubrechen, wenn sich die Koeffizienten nicht mehr ändern. Im benutzten Algorithmus wird abgebrochen, wenn Grundzustandsenergie und Dispersion im floating-Bereich (relative Änderung $< 10^{-6}$) konstant sind.

Das Vorgehen im weiteren Kapitel ist folgendermaßen:
Nachdem man sich einen qualitativen Eindruck von der Wirkung der Flussgleichungen gemacht hat, wird zunächst der Bereich bestimmt, in dem das Differentialgleichungssystem asymptotisch gegen einen Fixpunkt konvergiert. Es wird sich zeigen, dass dieser Bereich aufgrund der Näherung für $N \to \infty$ auf $V < 0.75$ beschränkt ist. Allerdings treten auch schon vorher ab $N = 56$ numerische Probleme auf. Damit stellt sich $N = 48$ als das größte System heraus, das noch verlässlich numerisch behandelt werden kann. Für diese Systemgröße wird die Grundzustandsenergieabsenkung $\Delta E(V)$ dargestellt und dem exakten Resultat gegenübergestellt. Dann wird die Dispersion berechnet, die Fermigeschwindigkeit bestimmt und eine Möglichkeit präsentiert, wie sich die Impulsverteilung ermitteln lässt. Daraus kann der Luttinger-Exponent α bestimmt werden. Zuletzt werden die Ergebnisse noch mit den Ergebnissen aus der konstruktiven Bosonisierung verglichen.

3.3.1. Typische Wirkung der Flussgleichungen

Die typische Wirkung der Flussgleichungen wird in Abbildung 3.2 illustriert. Man sieht dort sehr deutlich, wie durch die Transformation die Quasiteilchenzahl-verändernden Prozesse immer stärker unterdrückt werden, bis sie schließlich allesamt 0 sind.
Denselben Effekt zeigen auch eindimensionale Schnitte durch die Vertex-Funktion Γ_{kqQ} (Abbildungen 3.3(a)-(f)). Die dargestellten Schnitte vermitteln auch einen quantitativen

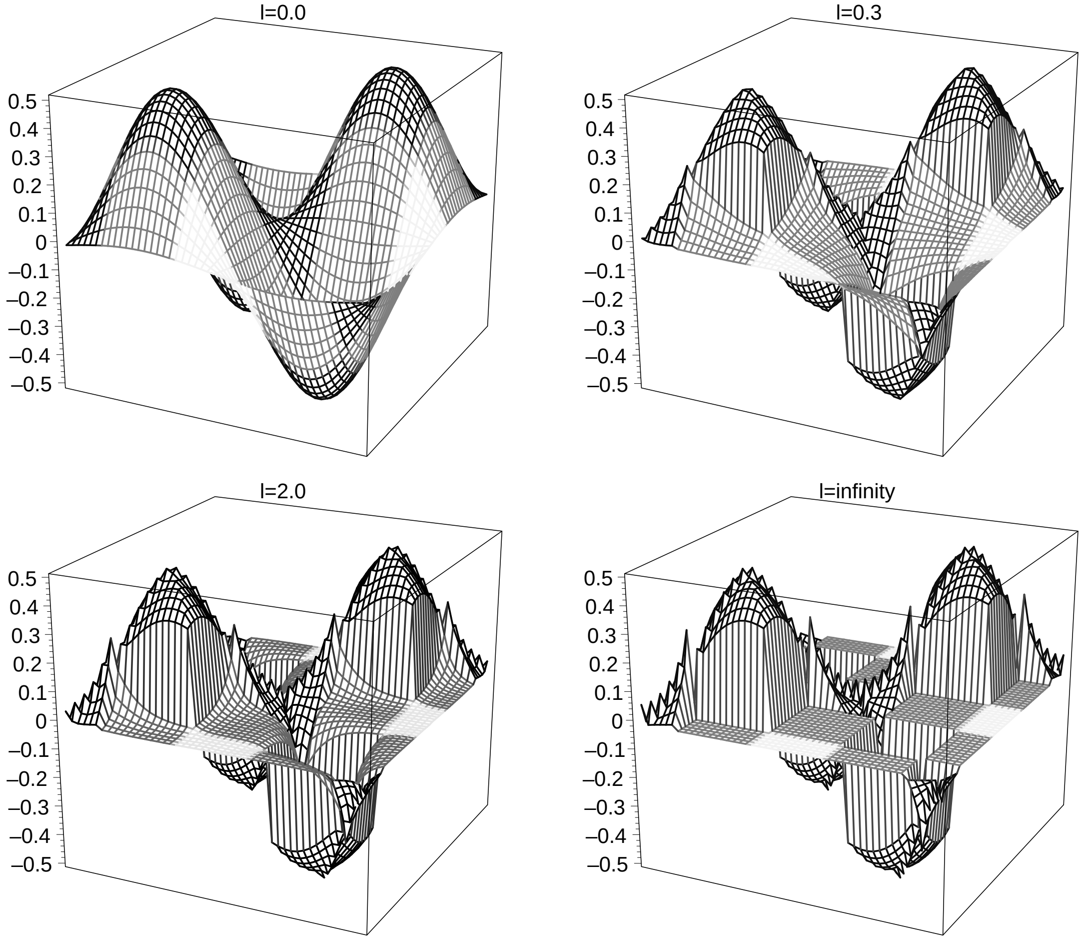


Abbildung 3.2.: Zweidimensionale Schnitte durch die Vertexfunktion Γ_{kqQ} bei $k = \pi/4$ und Systemgrösse $N = 48$ und $V = 0.5$ für verschiedene Werte des Flussparameters l. q und Q sind je aus $[-\pi, \pi]$. Die schwarzen Bereiche sind Bereiche aus $\mathcal{T}_0^{(2)}$, die grauen aus $\mathcal{T}_{\pm 2}^{(2)}$ und die hellen aus $\mathcal{T}_{\pm 4}^{(2)}$.

Eindruck der Wirkung der Flussgleichungen. Man vergleiche zu der jeweiligen Beschreibung die Diagramme aus Abbildung 3.3.

(a) Die Prozesse Γ_{0qq}, die für keinen Wert von q die Quasiteilchenzahl verändern, wachsen allesamt an. Zudem sieht man ein divergentes Verhalten nahe $q = \frac{\pi}{2}$. Dies sind genau die Prozesse, die zwei Quasiteilchen von gegenüberliegenden Plätzen nahe der Fermikante entfernen und direkt wieder besetzen. Das divergente Verhalten ist sehr gut mit $\Gamma_{0qq} \approx -0.007q^2 - 0.266 \ln ||q| - 0.5| - 0.125$ beschreibbar und daher lässt sich eine logarithmische Divergenz vermuten.

(b) Ein anderes Verhalten zeigen die Prozesse $\Gamma_{0qq+\pi}$. Diese ändern für alle q die Quasiteilchenzahl um 4 und müssen daher allesamt auf 0 gebracht werden. Dies geschieht auch, wobei die Prozesse mit $q \sim \frac{\pi}{2}$ am langsamsten abfallen. Sie sind aber sozusagen "Nachbarn" im Parameterraum der in (a) betrachteten divergenten Prozesse. Die langsam abfallenden Prozesse aus (b) haben die Indizes $(0, \frac{\pi}{2} \pm \delta, \frac{3\pi}{2} \pm \delta) \simeq (0, \frac{\pi}{2} \pm \delta, \frac{\pi}{2} \mp \delta)$ und die divergenten Prozesse aus (a) sind $(0, \frac{\pi}{2} \pm \delta, \frac{\pi}{2} \pm \delta)$.

(c) Interessant sind auch die Prozesse $\Gamma_{k, \frac{2\pi 11.5}{48} - k, \frac{2\pi 12.5}{48} - k}$. Dieses sind Prozesse zu unterschiedlichen Teilchenpaarschwerpunkten k, die gemeinsam haben, dass ein Quasiteilchen direkt unterhalb der Fermikante auf einen Platz direkt überhalb gesetzt wird. Der andere Prozess ergibt sich aus dem Schwerpunkt. Dabei wird für alle Werte von k die Quasiteilchenzahl geändert - bis auf den Prozess mit $k = \frac{\pi}{2}$, der nur einen Austausch beschreibt. Er ist in der gewählten Parametrisierung und in dieser Diskretisierung der Prozess, der der Umklappstreuung $c^\dagger_{\frac{\pi}{2}-\delta} c^\dagger_{-\frac{\pi}{2}+\delta} c_{-\frac{\pi}{2}-\delta} c_{\frac{\pi}{2}+\delta}$ entspricht! Der Umklappprozess, der bei $l = 0$ sehr klein war, wird verstärkt.

(d) Die nächste Abbildung zeigt Prozesse $\Gamma_{k, \frac{2\pi 7.5}{48} - k, \frac{2\pi 6.5}{48} - k}$, die ähnlich strukturiert sind, nur dass der "festgehaltene" Prozess weiter von der Fermikante entfernt stattfindet und mehr Prozesse am Ende des Flusses noch einen endlichen Wert haben dürfen. Auch hier ist der Prozess, der einen reinen Austausch beschreibt bei $l = \infty$ am stärksten und fällt in seinem Verhalten neben den anderen auf. Welcher Natur das Hervortreten des Prozesses genau ist, kann in dieser Auflösung nur vermutet werden. Möglich ist es, dass hier im kontinuierlichen Falle eine Divergenz vorliegt, die nur aufgrund der Diskretisierung endliches Gewicht bewahrt.

(e) Hier sind $\Gamma_{k \frac{2\pi 4.5}{48}, \frac{2\pi 19.5}{48}}$-Terme dargestellt. Es variiert also nur der Schwerpunkt k. Zu Beginn der Transformation sind daher alle Prozesse gleich stark. Zum Ende sind jedoch einige wegtransformiert und der Funktionsverlauf wird gekrümmt und geknickt und an Grenzen unterschiedlicher Quasiteilchenzahländerung unstetig.

(f) Diese Unstetigkeiten sind gut auch im letzten Diagramm zu sehen.

Alles in allem wird durch diese Schnitte deutlich, wie reichhaltig die Struktur des Flusses ist. Es dürfte entsprechend schwierig sein, einen passenden Ansatz für eine analytische Lösung der Flussgleichungen zu finden.

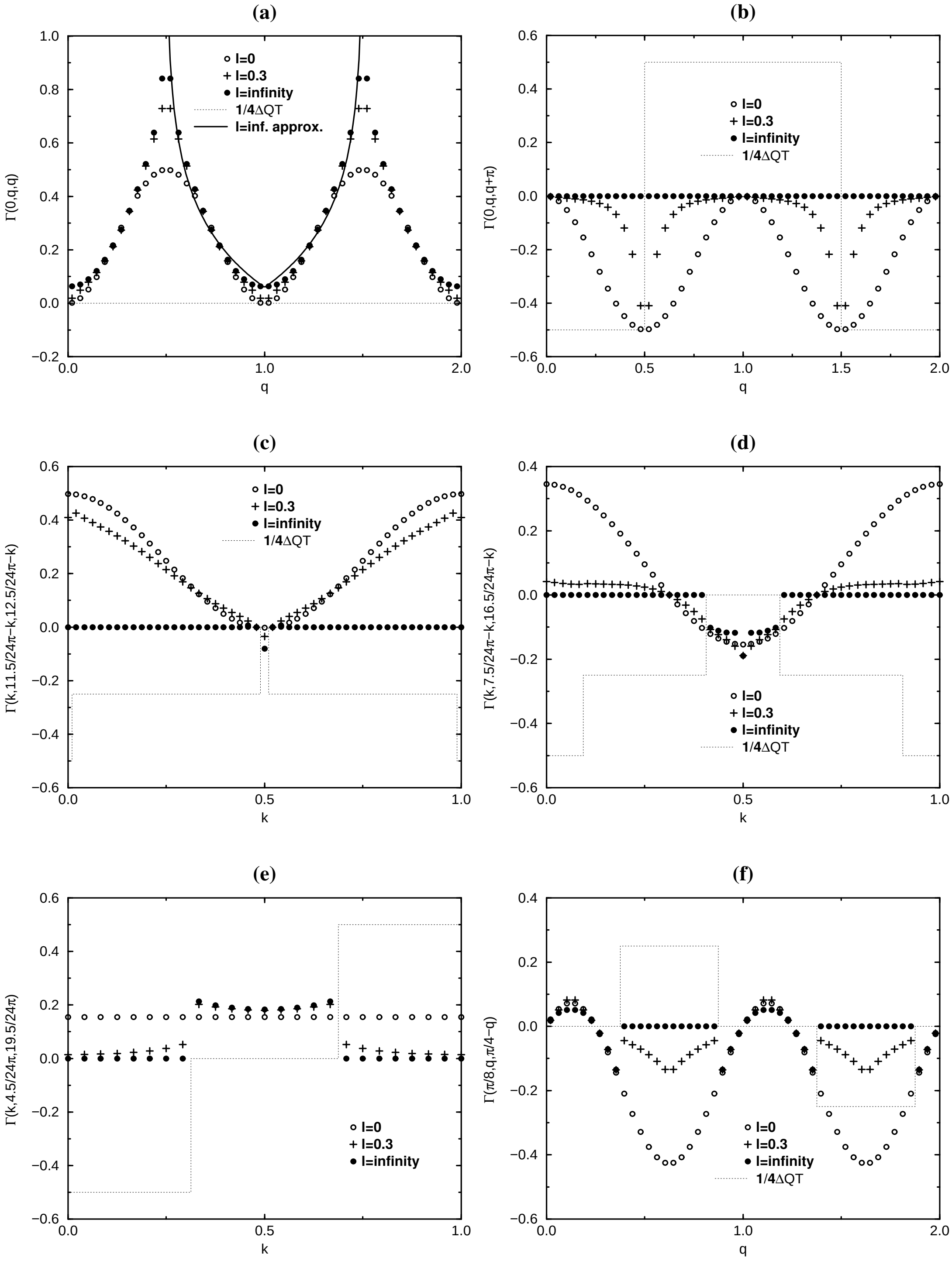


Abbildung 3.3.: Einige typische eindimensionale Schnitte durch die Vertexfunktion Γ_{kqQ} im Laufe des Flusses wie in Abbildung 3.2. ΔQT beschreibt die Quasiteilchenzahländerung der Prozesse. Alle Impulse sind in Einheiten von π angegeben.

3.3.2. Bereich asymptotischer Konvergenz

Es zeigt sich, dass das Differentialgleichungssystem für alle Systemgrößen N nur bis zu einem endlichen $V_{\mathrm{krit.,N}}$ asymptotisch konvergiert. Dieses $V_{\mathrm{krit.,N}}$ fällt mit wachsender Systemgröße monoton. Zur Analyse des (numerisch nicht erreichbaren) Grenzfalles $N \to \infty$ bietet es sich an, $V_{\mathrm{krit.,N}}$ gegen $1/N$ darzustellen (s. Abbildung 3.4).

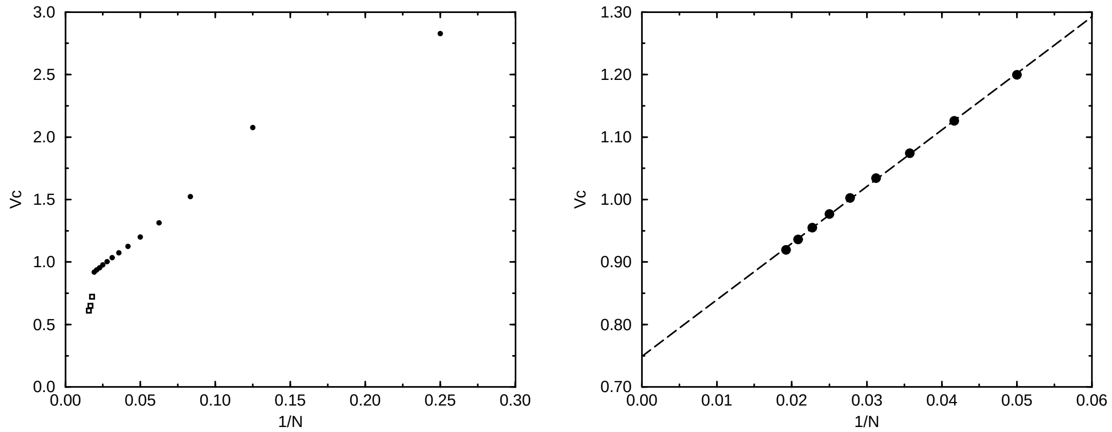


Abbildung 3.4.: Darstellung von $V_{\mathrm{krit.,N}}$ gegen $1/N$ zur Extrapolation von $V_{\mathrm{krit.,N}}$. Links: Gesamtüberblick (Leere Punkte entsprechen Integrationen mit numerischen Problemen). Rechts: Bereich $N = 20 \ldots 52$ mit angepasster Gerade $V_{\mathrm{crit.,N}} \approx 9.06/N + 0.75$

Der Verlauf von $V_{\mathrm{krit.,N}}$ legt es nahe, dass ein endliches $V_{\mathrm{krit.,\infty}}$ existiert, das näherungsweise durch lineare Extrapolation festgestellt werden kann. Der Zusammenhang kann im Bereich $N = 20 \ldots 52$ sehr gut linear beschrieben werden. Die Abweichungen ab $N = 56$ haben keine systematisch nachvollziehbare Struktur. Ein logarithmisches oder algebraisches Verhalten ist nicht zu erkennen. Vielmehr scheint es sich hier um numerische Probleme zu handeln. Dies kann daran liegen, dass für V nahe $V_{\mathrm{krit.,N}}$ der Abfall der $\mathcal{T}^{(2)}_{2i\neq 0}$ immer langsamer vonstatten geht. Dies drückt sich in einer mit V anwachsenden Laufzeit und einem Abbruch bei immer größerem l aus. Je länger jedoch integriert werden muss, umso stärker sammeln sich numerische Fehler wie Rundungsfehler und systematische Fehler des Runge-Kutta-Verfahrens an. Dies kann dazu führen, dass die Integration schon vor dem eigentlichen $V_{\mathrm{krit.,N}}$ divergiert.
Ein weiteres Indiz für numerische Probleme bei der Integration großer Systeme sind Dispersionen nahe $V_{\mathrm{krit.,N}}$. Sie haben unphysikalische Gestalt. Dies ist später in der Dispersion von $N = 48$ bei größeren V auch schon erkennbar (vgl. Abbildung 3.6).
Aus diesen Gründen werden im Folgenden Resultate für $N \leq 48$ untersucht.

3.3.3. Grundzustandsenergieabsenkung

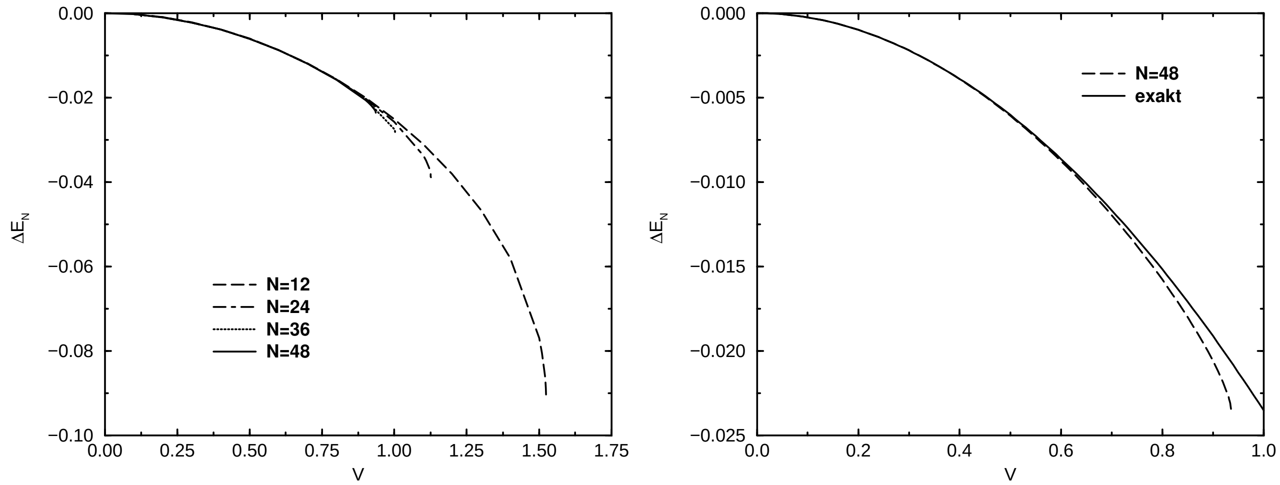


Abbildung 3.5.: Flussgleichungsergebnis der Grundzustandsenergieabsenkung für N=48 in Abhängiggkeit von V im Vergleich mit anderen Systemgrößen (links) und im Vergleich zum exakten Ergebnis (rechts)

In Abbildung 3.5 sind Verläufe der Grundzustandsenergieabsenkung in Abhängigkeit von V für verschiedene Systemgrössen N als ΔE_N dargestellt. Auch hier sieht man die unterschiedlichen $V_{\text{krit.},N}$ einerseits im Abbruch der Funktionsverläufe. $\Delta E_N(V)$ divergiert für $V \to V_{\text{krit.},N}$ mit einem algebraischen Verhalten[1] gegen $-\infty$. Systematisch erscheint eine immer stärkere Krümmung der Funktionen ins Negative mit wachsender Systemgröße.
Im Vergleich des detaillierten Verlaufes von $\Delta E_{48}(V)$ mit dem exakten Ergebnis nach Gleichung 1.31 zeigt sich für kleinere V eine hervorragende Übereinstimmung der Grundzustandsenergieabsenkung (siehe Abbildung 3.5). Sogar bei $V = 0.5$ ist die relative Abweichung vom exakten Ergebnis kleiner als 1%! Auch kommt das divergente Verhalten erst nahe $V_{\text{krit.},48} \approx 0.9361$ zum Tragen. Vorher ist der Verlauf wenig gekrümmt.

[1]Eine genauere Analyse dieses Problems findet sich im nächsten Abschnitt.

3.3.4. Dispersion, Fermigeschwindigkeit, Impulsverteilung

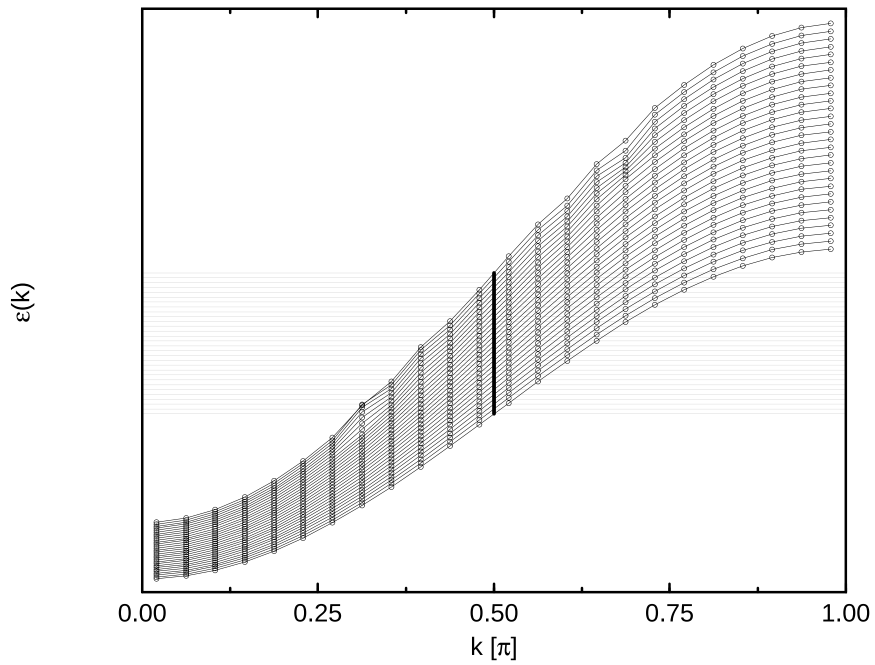


Abbildung 3.6.: 3d-Darstellung der Dispersion in Einheiten von π. Es sind die Dispersionen für $V = 0.03, 0.06, \dots, 0.9$ dargestellt und hintereinandergelegt. Dies erlaubt einen Blick von oben auf die Entwicklung der Dispersion.

Bei der Dispersion ist zu untersuchen, ob und gegebenenfalls wie unterhalb $V_{\text{krit.},N}$ die ursprüngliche $-(1 + E_F(N))\cos(k)$-Funktion renormiert wird. Dabei ist $E_F(N)$ die Fockkonstante

$$E_F(N) = \frac{2V}{N} \sum_{|k|<k_F} \cos(k) \quad \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} \quad \frac{2V}{\pi} \quad . \tag{3.20}$$

In Abbildung 3.6 sind Dispersionen für $N = 48$ in Abhängigkeit von V dargestellt. Man sieht für kleinere V ein $-\nu^* \cos(k)$-ähnliches Verhalten. Für grössere V (ab etwa $V > 0.7$) ist jedoch deutlich ein “Knick” in der Dispersion abseits k_F erkennbar. Die Frage ist, ob dies eine Folge der Näherung oder ein numerisches Artefakt ist.
Der Knick kann systematisch sein. So ist es möglich, dass die Dispersion in der 2-Teilchen-Näherung im kontinuierlichen Falle eine Divergenz enthält. Auf Grund der Diskretisierung würde diese allmählich mit wachsendem Gewicht sichtbar. Es ist jedoch zu erwarten, dass sich ein solches Verhalten mit wachsendem V verstärkt und nicht wieder abschwächt. Daher betrachte man hier das Auftreten des Knickes als numerisches Problem.

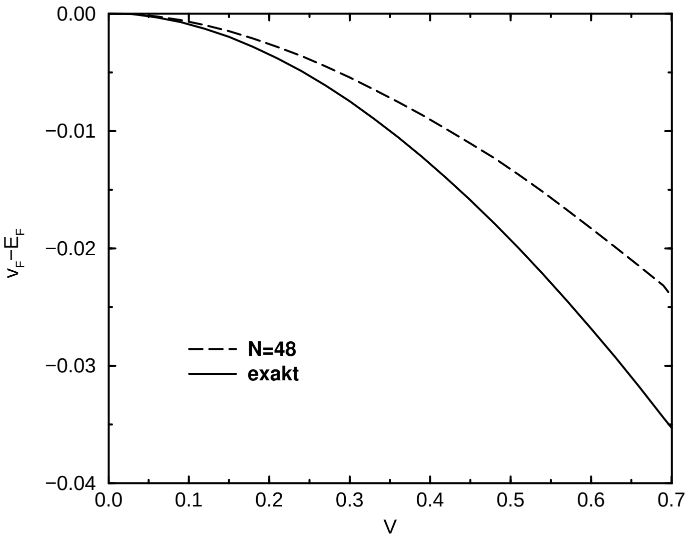


Abbildung 3.7.: Korrektur zum linearen Term $\nu_{\mathrm{F,lin.}}$ der Renormierung von ν_{F}

Renormierung der Fermigeschwindigkeit

Die Fermigeschwindigkeit wird ermittelt, indem über die gesamte Dispersion eine Anpassung mit einer cos-Funktion vorgenommen und die Steigung bei $\frac{\pi}{2}$ bestimmt wird. Da die Renormierung im Wesentlichen von der linearen Fockkorrektur $E_F(N)$ bestimmt ist, wird dieser Anteil abgezogen. Abbildung 3.7 zeigt den Verlauf des nichtlinearen Anteils im Vergleich zum exakten Ergebnis. Es wird nur der numerisch verlässliche Teil gezeigt.
Man erkennt, dass die Dispersion über den gesamten Bereich zu flach wiedergegeben wird. Für kleine V sind die Abweichungen sehr gering. Weiterhin zeigt eine Untersuchung des Verhaltens größerer Systeme für kleine V, dass auch finite-size-Effekte eine Rolle spielen. Dazu extrapoliert man den Wert für $N \to \infty$ aus den Werten für $N = 72$ bzw. $N = 96$ mittels einer Darstellung über $1/N$ (vgl. Abbildung 3.8). Aus den Werten lässt sich der Fall $N \to \infty$ grob abschätzen.

V	exakt	$N = 48$	$N = 72$	$N = 96$	$N = \infty$,extrapol.
0.09	-.73554850e-3	-.545e-3	-.615e-3	-.645e-3	ca. -.73e3
0.18	-.28280540e-2	-.129e-2	-.233e-2	-.244e-2	ca. -.27e2

Tabelle 3.1.: Werte für $\tilde{\nu}_{\mathrm{F}} - E_F(N)$ im Vergleich

Es zeigt sich, dass der exakte Wert im Rahmen der Ungenauigkeiten für $V = 0.09$ wiedergegeben wird und dass das numerische Ergebnis für $V = 0.18$ leicht zu hoch liegt.

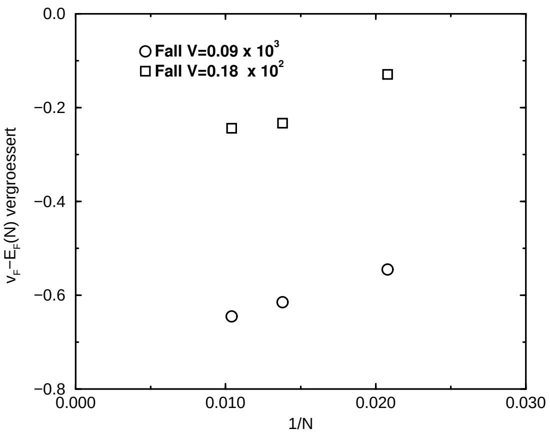


Abbildung 3.8.: Zur Extrapolation der nichtlinearen Korrektur der Renormierung der Fermigeschwindigkeit für $N \to \infty$

Berechnung der Impulsverteilung durch Funktionalableitung

Gemeinhin ist es aufwendig, aus den Flussgleichungen die Erwartungswerte anderer Operatoren als die des Hamiltonoperators selbst zu berechnen. Im Allgemeinen muss dazu nämlich auch der Operator transformiert werden (vgl. Gleichung 1.50). Die Berechnung der Impulsverteilung ist jedoch ohne größere Erweiterungen des Algorithmus numerisch möglich. Es besteht folgender einfacher Zusammenhang, wie er durch partielle Ableitung des Hamiltonoperators zu erhalten ist

$$\frac{\partial E}{\partial \varepsilon_k} = \langle : c_k^\dagger c_k : \rangle_0 \tag{3.21}$$

Es genügt also, ε_k zu variieren und die Variation der Grundzustandsenergie durch Integration der Differentialgleichungen zu ermitteln. Daraus erhält man die Quasiteilchendichte oder auch die Teilchendichte. Es zeigt sich, dass das Runge-Kutta-Verfahren die Auswirkung der Variation von ε_k mit hoher Genauigkeit auflösen kann. Es genügt eine Abweichung, von $10^{-3}\varepsilon_k$ um Effekte in der Grundzustandsenergie zu sehen, und $\frac{\Delta E}{\Delta \varepsilon_k}$ ist dann mit einem Fehler $\leq 10^{-5}$ linear. In Abbildung 3.9 ist nun die Impulsverteilung für $V = 0.6$ bei $N = 48$ dargestellt. Man sieht das typische Abfallen der Teilchendichte zum Fermiimpuls k_F hin. Es wird allerdings noch nicht deutlich, welcher Natur dieser Abfall ist. Dazu wird mit einem Luttingeransatz

$$n_k \simeq \frac{1}{2} - C_1 \mathrm{sign}(k - k_F)|k - k_F|^\alpha - C_2(k - k_F) \tag{3.22}$$

bzw. Fermiansatz

$$n_{k<k_F} = \frac{1 + Z_{k_F}}{2} + C_1 \ln\left(\frac{|k-k_F|}{\pi}\right)\frac{|k-k_F|}{\pi} + C_2\frac{|k-k_F|}{\pi} \tag{3.23}$$

approximiert. Die freien Parameter werden aus den drei der Fermikante nächsten Impulsen bestimmt.

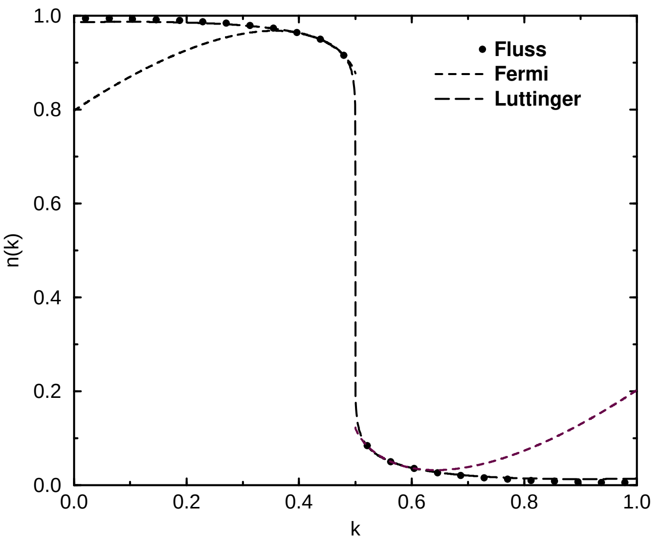


Abbildung 3.9.: Impulsverteilung bei N = 48 und V = 0.6 angenähert durch Luttinger- bzw. Fermiflüssigkeitsverhalten.

Der Luttingeransatz ermöglicht eine wesentlich größere Übereinstimmung als der Fermiflüssigkeitsansatz (vgl Abbildung 3.9). Die Annahme, dass sich das System wie eine Luttingerflüssigkeit verhält, wird bestätigt, wenn der Luttingerparameter α für verschiedene V und N berechnet und gegen das exakte Ergebnis nach Gleichung 1.38 aufzuftragen wird (s. Abbildung 3.10).
Das berechnete $\alpha(V)$ zeigt neben der guten Übereinstimmung mit dem exakten Resultat für kleine V auch einen sehr glatten Verlauf. Dies ist ein Indiz für die Zuverlässigkeit der Methode.
Qualitativ sind die Verläufe von $\alpha(V)$ für die verschiedenen N ähnlich. Je grösser das System wird, desto tiefer liegen jedoch die Werte. Auch hier kann man den $N = \infty$ Wert wie oben näherungsweise extrapolieren.

V	exakt	$N = 24$	$N = 36$	$N = 48$	$N = \infty$,extrapol.
0.025	.124693e-3	.1102022e-3	.1078196e-3	.1070367e-3	ca. .105e-3
0.05	.491381e-3	.4349874e-3	.4255507e-3	.4223590e-3	ca. .415e-3

Tabelle 3.2.: Werte für α im Vergleich

Man erhält also aus den Flussgleichungen für kleine V einen um einige Prozent zu kleinen Luttingerexponenten α. Dies kann an der Flussgleichungsmethode in der strukturerhaltenden Näherung, aber auch an der indirekten Art und Weise liegen, wie α aus der Impulsverteilung bestimt wird.
Insgesamt wird α aber über weite Bereiche von V sehr gut wiedergegeben.

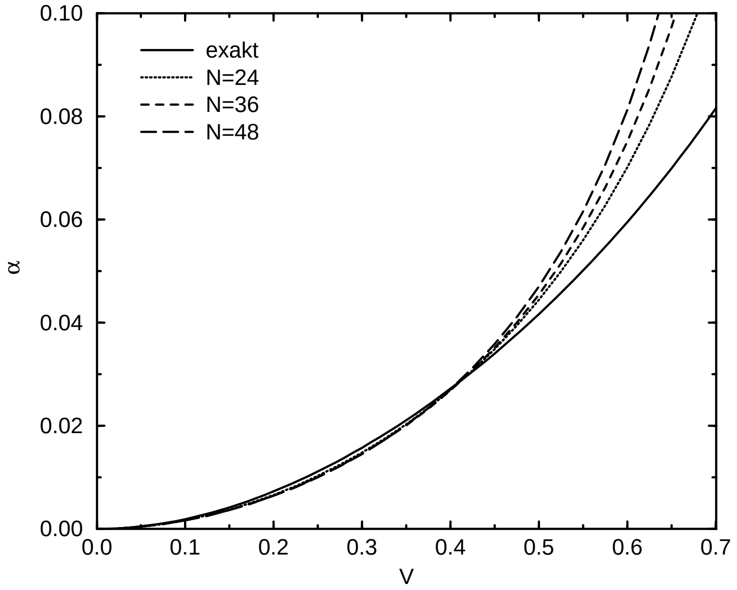


Abbildung 3.10.: Vergleich der $\alpha(V)$: exakte Lösung und nummerische Lösungen zu verschiedenen Systemgrössen

Vergleich mit den Bosonisierungsresultaten

Als weiterer Vergleichsmaßstab dienen die Ergebnisse, die aus der Standardmethode für eindimensionale Fermiflüssigkeiten, der Bosonisierung, gewonnen wurden.

Analytisch stimmen die Bosonisierungsergebnisse für die renormierte Fermigeschwindigkeit v_F nur in $\mathcal{O}(V)$ mit den exakten Resultaten überein. Die wesentliche Korrektur ist jedoch von der Ordnung V^2. Die Flussgleichungsergebnisse geben diese Korrekturen über den gesamten untersuchten Bereich besser wieder (vgl. Abbildung 3.11).

Der Exponent α wird durch die Bosonisierung in Ordnung V^2 richtig beschrieben. Für kleine V liefert die Bosonisierung bessere Ergebnisse als die Flussgleichungen. Der Exponent α wird aber mit den Flussgleichungen indirekt über die Impulsverteilung berechnet. Möglicherweise ist dies die Ursache. Im Verlauf des exakten Ergebnisses wird die nächste Ordnung V^3 schon für kleinere V wichtig (vgl. Abbildung 3.12 und Gleichung 1.44). Dieses Verhalten kann für nicht zu große V wesentlich besser von den Flussgleichungen wiedergegeben werden. Auch wächst das exakte Resultat für $V \to 1$ mit einer Wurzelsingularität gegen 0.25. Diese starke Krümmung kann man auch in den Flussgleichungsresultaten sehen, auch wenn die Singularität zu früh auftritt. Die Bosonisierung gibt ein solches Verhalten nicht wieder.

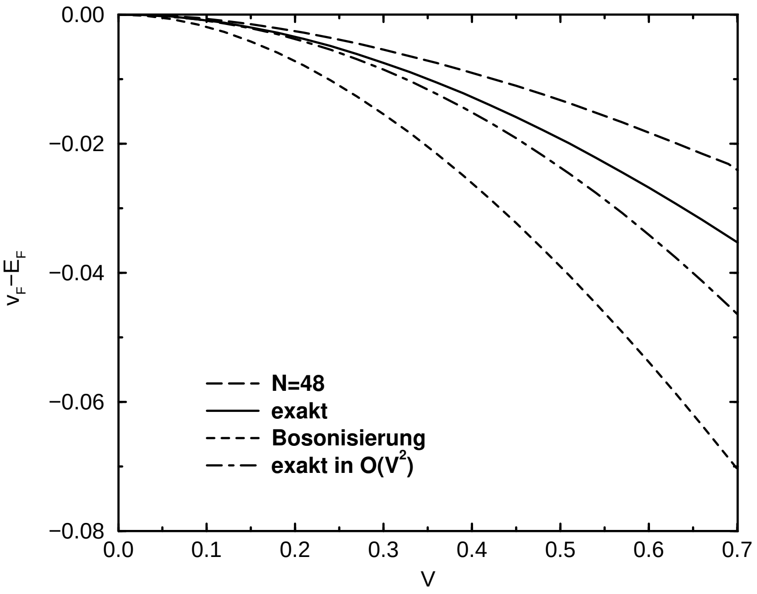


Abbildung 3.11.: Vergleich der verschiedenen Lösungen zum nichtlinearen Anteil des renormierten ν_{F}

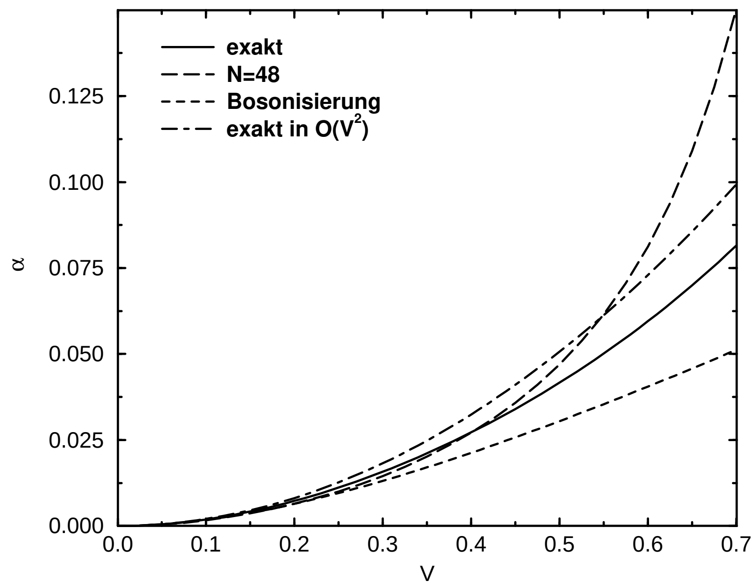


Abbildung 3.12.: Vergleich der verschiedenen Lösungen zu $\alpha(V)$

3.4. Analyse anhand des 4-Platz-Modells

Um die Wirkungsweise der Flussgleichungen besser zu verstehen und einen Eindruck zu bekommen, warum die Gleichungen ab einem bestimmten V divergieren, ist es lehrreich, das Modell mit $N = 4$ Kettenplätzen zu untersuchen. Im Modell mit nur vier Plätzen gibt es bei halber Füllung $\binom{4}{2} = 6$ verschiedene Zustände. Aufgrund der zahlreichen Symmetrien des Systems und der Notation gibt es weiterhin nur ein unabhängiges ε_k und fünf unabhängige $\Gamma_{k,q,Q}$ (s. 3.11). Diese seien repräsentiert durch

$$
\begin{aligned}
\varepsilon &= \varepsilon_{\frac{\pi}{4}} & \varepsilon(0) &= -\tfrac{V+\sqrt{2}}{2} \\
\gamma &= \Gamma_{0,\frac{3\pi}{4},\frac{\pi}{4}} & \gamma(0) &= \tfrac{V}{2} \\
\nu_1 &= \Gamma_{0,\frac{\pi}{4},\frac{\pi}{4}} & \nu_1(0) &= \tfrac{V}{2} \\
\nu_2 &= \Gamma_{\frac{\pi}{4},\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}} & \nu_2(0) &= V \\
\nu_3 &= \Gamma_{\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{4},\frac{\pi}{4}} & \nu_3(0) &= \tfrac{V}{2} \\
\nu_4 &= \Gamma_{\frac{\pi}{2},\frac{3\pi}{4},\frac{\pi}{4}} & \nu_4(0) &= \tfrac{V}{2}\ .
\end{aligned}
\tag{3.24}
$$

Der Anfangswert der Grundzustandsenergie sei 0.
Nur der Prozess γ ist dabei Quasiteilchenzahl-ändernd (und zwar um vier Quasiteilchen) und trägt zu η bei.
Sei nun $|0\rangle$ das Fermionenvakuum. Die möglichen Zustände des System bei halber Füllung sind dann

$$
\begin{aligned}
|1\rangle &= c^\dagger_{\frac{\pi}{4}} c^\dagger_{-\frac{\pi}{4}}|0\rangle & &\textit{(0 QT, K=0)} \\
|2\rangle &= c^\dagger_{\frac{3\pi}{4}} c^\dagger_{-\frac{3\pi}{4}}|0\rangle & &\textit{(4 QT, K=0)} \\
|3\rangle &= c^\dagger_{\frac{3\pi}{4}} c^\dagger_{\frac{\pi}{4}}|0\rangle & &\textit{(2 QT, K=}\pi\textit{)} \\
|4\rangle &= c^\dagger_{-\frac{3\pi}{4}} c^\dagger_{-\frac{\pi}{4}}|0\rangle & &\textit{(2 QT, K=}\pi\textit{)} \\
|5\rangle &= c^\dagger_{\frac{3\pi}{4}} c^\dagger_{-\frac{\pi}{4}}|0\rangle & &\textit{(2 QT, K=}\tfrac{\pi}{2}\textit{)} \\
|6\rangle &= c^\dagger_{\frac{\pi}{4}} c^\dagger_{-\frac{3\pi}{4}}|0\rangle & &\textit{(2 QT, K=}-\tfrac{\pi}{2}\textit{)}
\end{aligned}
\tag{3.25}
$$

mit *QT* als Anzahl der Quasiteilchen und *K* als Gesamtimpuls des Zustandes.
In Matrixschreibweise mit obiger Basis gilt explizit

$$
\mathcal{H} = \begin{pmatrix}
E & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\gamma & E-4\varepsilon+2\nu_1-2\nu_2-2\nu_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & E-2\varepsilon-\nu_2 & -\nu_4 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -\nu_4 & E-2\varepsilon-\nu_2 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & E-2\varepsilon-\nu_3 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E-2\varepsilon-\nu_3
\end{pmatrix}
\tag{3.26}
$$

und offensichtlich

$$\eta = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \tag{3.27}$$

Der Hamiltonoperator ist impulserhaltend, weshalb es keine Matrixelemente zwischen $|5\rangle$ oder $|6\rangle$ und irgendeinem anderen Zustand geben kann. $|3\rangle$ und $|4\rangle$ haben denselben Impuls, aber auch diesselbe Anzahl der Quasiteilchen. Daher werden dort die Übergangsmatrixelemente (also ν_4) nicht renormiert. Es bleibt also einzig das Subsystem zwischen $|1\rangle$, $|2\rangle$ als dasjenige übrig, auf welches die Transformation wirkt.

Ungenäherte analytische Lösung Zuerst soll die Differentialgleichung $\frac{d}{dl}\mathcal{H} = [\eta, \mathcal{H}]$ mit den obigen Matrizen gelöst werden. Man sieht direkt, dass sich die Aufgabe bei dem hier gewählten Generator auf die Diagonalisierung einer 2×2-Matrix mit nur zwei verschiedenen Variablen reduziert. Man betrachte also die Untermatrix im $|1\rangle$, $|2\rangle$-System

$$\mathcal{H}_{\text{red}} = \begin{pmatrix} E & \gamma \\ \gamma & E - 4\varepsilon + 2\nu_1 - 2\nu_2 - 2\nu_3 \end{pmatrix} . \tag{3.28}$$

Indem man $\mathcal{E} = E - 2\varepsilon + \nu_1 - \nu_2 - \nu_3$ und $\delta = -2\varepsilon + \nu_1 - \nu_2 - \nu_3$ mit $\delta(0) = \sqrt{2}$ wählt, kann man einen diagonalen Anteil extrahieren

$$\mathcal{H}_{\text{red}} = \begin{pmatrix} \mathcal{E} & 0 \\ 0 & \mathcal{E} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\delta & \gamma \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} . \tag{3.29}$$

Der zu bildende Kommutator wirkt sich nur auf die zweite Matrix aus. Man erhält als Flussgleichung

$$\frac{d\mathcal{H}_{\text{red}}}{dl} = \begin{pmatrix} -2\gamma^2 & -2\gamma\delta \\ -2\gamma\delta & 2\gamma^2 \end{pmatrix} , \tag{3.30}$$

und daraus

$$\begin{aligned} \frac{d\delta}{dl} &= 2\gamma^2 \\ \frac{d\gamma}{dl} &= -2\delta\gamma . \end{aligned} \tag{3.31}$$

Mit $c^2 = \delta^2 + \gamma^2 = \frac{8+V^2}{4}$, welches im Fluss konstant ist, lassen sich die Differentialgleichungen entkoppeln. Die Gleichungen werden gelöst von

$$\begin{aligned} \delta(l) &= c \tanh(2c(l+\chi)) \\ \gamma(l) &= \frac{c}{\cosh(2c(l+\chi))} . \end{aligned} \tag{3.32}$$

Dabei ist $\chi = \frac{1}{2c}\operatorname{arctanh}(\frac{\delta(0)}{c})$ reell, da $0 \leq \frac{\delta(0)}{c} \leq 1$.
Man sieht also, dass

$$\begin{aligned} \lim_{l\to\infty} \delta(l) &= c = \sqrt{\delta(0)^2 + \gamma(0)^2} \\ \lim_{l\to\infty} \gamma(l) &= 0 \ . \end{aligned} \tag{3.33}$$

Diese Lösung hätte man natürlich direkt auch aus 3.29 ablesen können - das Vorgehen hier sollte vielmehr ein einfaches Beispiel für die Wirkung der Flussgleichungen geben und einen späteren Vergleich ermöglichen.
Es sei noch die Absenkung des Grundzustandes angegeben werden, die sich zu

$$\Delta E = -(\delta(\infty) - \delta(0)) = \sqrt{2} - \sqrt{\frac{8+V^2}{4}} \tag{3.34}$$

ergibt.

Lösung der genäherten Flussgleichungen Die Flussgleichungen bei Beschränkung auf Zweiteilchenwechselwirkungsterme gemäß der Gleichungen 3.14, 3.15 und 3.16 lauten

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dl} &= -2\gamma^2 & \frac{d\varepsilon}{dl} &= -2\gamma^2 \\ \frac{dv_1}{dl} &= -2\gamma^2 & \frac{d\gamma}{dl} &= 2\gamma\,(2\varepsilon - v_1 + v_2 + v_3) \\ \frac{dv_2}{dl} &= 2\gamma^2 & \frac{dv_3}{dl} &= 2\gamma^2 \\ \frac{dv_4}{dl} &= 0 \end{aligned} \quad . \tag{3.35}$$

Setzt man die Flüsse aus Gleichung 3.35 nun in die Matrix 3.26 ein und vergleicht mit den exakten Flüssen nach Gleichung 3.30, so erkennt man, dass alles richtig wiedergegeben wird - bis auf den Fluss von $\mathcal{H}_{22}$, den Fluss des Zustandes mit 4 Quasiteilchen. Dieses Matrixelement müsste nach dem vorherigen mit $2\gamma^2$ wachsen. Stattdessen fällt es jedoch mit $-6\gamma^2$ ab. Anstatt dass sich die Lücke zwischen dem Grundzustand und der Anregung erhöht, wird sie unterdrückt.
Dies ist unerwünscht, aber nicht verwunderlich. Schließlich sind höhere als Zweiteilchenwechselwirkungen vernachlässigt worden. Es können aber durchaus höhere Wechselwirkungen auftreten, denn die Operatoren werden normalgeordnet dargestellt und entsprechen damit Quasiteilchenwechselwirkungen. Der 2-Teilchenzustand, der fehlerhaft wiedergegeben wird, besitzt vier Quasiteilchen. Eine genaue Analyse, welche Operatoren zu berücksichtigen wären, findet sich weiter unten.
Nun wird das Differentialgleichungssystem 3.35 gelöst, um die Auswirkungen der Näherung zu quantifizieren.
Definiert man $\delta = -2\varepsilon + v_1 - v_2 - v_3$ mit $\delta(0) = \sqrt{2}$ genau wie oben, so erhält man die

Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}\frac{d\delta}{dl} &= -2\gamma^2 \\ \frac{d\gamma}{dl} &= -2\delta\gamma \ .\end{aligned} \tag{3.36}$$

Die Struktur ist also bis auf das Vorzeichen der Ableitung von γ diesselbe wie in Gleichung 3.31. Dies hat jedoch Konsequenzen für den Definitionsbereich der Lösungen und damit für die Fortsetzbarkeit nach $l \to \infty$. Die Konstante zur Entkopplung dieses Systems ist $c^2 = \delta^2 - \gamma^2 = \frac{8-V^2}{4}$ (also $-$ statt $+$). Die Lösungen sind jetzt abhängig vom Vorzeichen von c^2.
Für $V < \sqrt{8}$ ($\to c^2 > 0$) gilt

$$\begin{aligned}\delta(l) &= -c\tanh(2c(l+\chi)) \\ \gamma(l) &= c\sqrt{1+\tanh(2c(l+\chi))^2} \\ \chi &= \frac{1}{2c}\operatorname{arctanh}(-\frac{\delta(0)}{c}) \ .\end{aligned} \tag{3.37}$$

für $V = \sqrt{8}$ ($\to c^2 = 0$)

$$\begin{aligned}\delta(l) &= -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{8}l-1} \\ \gamma(l) &= -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{8}l-1} \ .\end{aligned} \tag{3.38}$$

und für $V > \sqrt{8}$ ($\to c^2 > 0$) und mit $\tilde{c}^2 = -c^2$ schließlich

$$\begin{aligned}\delta(l) &= \tilde{c}\tan(2\tilde{c}(l+\chi)) \\ \gamma(l) &= \tilde{c}\sqrt{1+\tan(2\tilde{c}(l+\chi))^2} \\ \chi &= \frac{1}{2\tilde{c}}\arctan(\frac{\delta(0)}{\tilde{c}}) \ .\end{aligned} \tag{3.39}$$

Die Lösungen sind also nur im Falle $V < \sqrt{8}$ bis nach $l \to \infty$ fortsetzbar und asymptotisch konvergent. Dort gilt

$$\begin{aligned}\lim_{l\to\infty}\delta(l) &= c = \sqrt{\delta(0)^2 - \gamma(0)^2} \\ \lim_{l\to\infty}\gamma(l) &= 0 \ .\end{aligned} \tag{3.40}$$

Die Grundzustandsenergieabsenkung ergibt sich damit zu

$$\Delta E = -\sqrt{2} + \sqrt{\frac{8-V^2}{4}} \ . \tag{3.41}$$

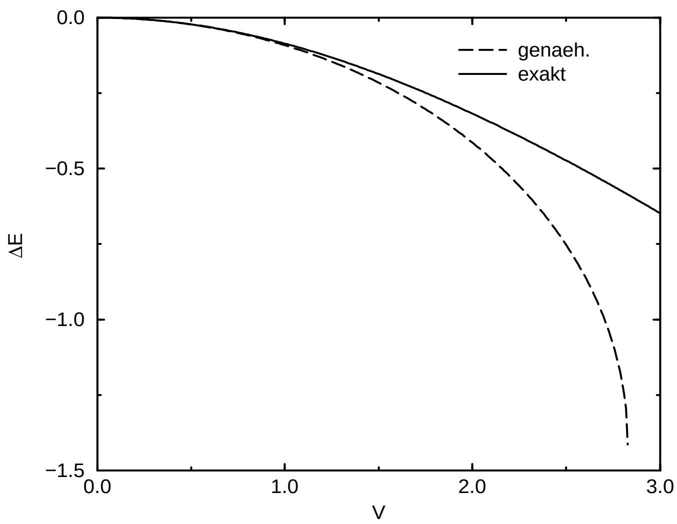


Abbildung 3.13.: Ergebnisse für die Grundzustandsenergieabsenkung, N=4

Aus den Lösungen wird deutlich, warum die Gleichungen ab $V = \sqrt{8}$ nicht mehr bis $l \to \infty$ fortsetzbar sind. Ab $V = \sqrt{8}$ durchläuft die Lücke 2δ nämlich die Null. Damit dreht sich aber auch das Bild von Teilchen und Löchern um, ohne dass sich dies im Generator η wiederspiegeln würde. Der Hamiltonian wird dann immer stärker von einer diagonalen Form weggedreht. Die verschwindende Lücke destabilisiert also das System. Dies ist aber nur ein Artefakt der Näherung.

Vergleich der Lösungen Tatsächlich ist der gemachte Fehler in der Grundzustandsenergie nur von der Ordnung V^4. Eine Taylorentwicklung beider Ergebnisse für die Grundzustandsenergie ergibt

$$\begin{aligned} \Delta E_{exakt} &\simeq -\sqrt{2}\left(\frac{V^2}{16} - \frac{V^4}{512} + \mathcal{O}(V^6)\right) \\ \Delta E_{gen.} &\simeq -\sqrt{2}\left(\frac{V^2}{16} + \frac{V^4}{512} + \mathcal{O}(V^6)\right) \quad . \end{aligned} \tag{3.42}$$

(Siehe auch Abbildung 3.13).

Notwendige Erweiterung im 4-Platz-Modell In der genäherten Version der Flussgleichungen fällt das Matrixelement $\mathcal{H}_{22}$ mit $-6\gamma^2$ ab, anstatt mit $2\gamma^2$ zu wachsen. Dies liegt an der Vernachlässigung höherer als 2-Teilchen-Wechselwirkungen. Im 4-Platz-Modell treten aber maximal weitere $\mathcal{T}_0^{(3)}$-Terme auf. Dies kann man sich folgendermaßen klarmachen. Ein Term $\mathcal{T}_0^{(3)}$ tritt nur in $\mathcal{H}_{22}$ auf. Nur dort sind schließlich genug Quasiteilchen (nämlich vier) vorhanden, auf die ein solcher Operator wirken kann. Wären noch $\mathcal{T}_{2i\neq 0}^{(3)}$ vorhanden, so müßten diese in $\mathcal{H}_{12}$ bzw. $\mathcal{H}_{21}$ stehen und hätten die Form (mit Quasiteilchenoperatoren):

$$\begin{aligned} &\mathrm{b}^\dagger\mathrm{b}\ \mathrm{b}\ \mathrm{b}\ \mathrm{b}\ \mathrm{b} \quad \text{in} \quad \mathcal{H}_{12} \\ &\mathrm{b}^\dagger\mathrm{b}^\dagger\mathrm{b}^\dagger\mathrm{b}^\dagger\mathrm{b}^\dagger\mathrm{b} \quad \text{in} \quad \mathcal{H}_{21}\,. \end{aligned} \tag{3.43}$$

Man sieht direkt, dass dabei mehr als vier Quasiteilchen vernichtet oder erzeugt werden. Dies ist nicht möglich. Daher treten also nur $\mathcal{T}_0^{(3)}$-Terme auf.
Daraus folgt auch, dass keine $\mathcal{T}_0^{(4)}$-Operatoren entstehen. Der Generator η besteht schließlich nur aus $\mathcal{T}_{2i\neq 0}^{(2)}$-Anteilen. Ein $\mathcal{T}_{2i}^{(4)}$-Term müßte also aus einem Kommutator $[\mathcal{T}_0^{(3)}, \mathcal{T}_{2i\neq 0}^{(2)}]$ entstehen. Der Nettoeffekt wäre aber ein $\mathcal{T}_{2i\neq 0}^{(4)}$. Dies geht aber aus analogen Gründen nicht, aus denen auch keine $\mathcal{T}_{2i\neq 0}^{(3)}$-Terme vorhanden sein konnten.
Weiterhin ist es nur ein einziger vernachlässigter Operator der Form $\mathcal{T}_0^{(3)}$. Da solche Terme nur in $\mathcal{H}_{22}$ stehen, müssen sie sich alle über Symmetrien aufeinander zurückführen lassen. Dieser eine Prozess $\mathcal{T}_0^{(3)}$ liegt in vier verschiedenen Gestalten vor, welche im Matrixfluss je 2γ aufsammeln (vgl. 3.18). Dies führt dann aber genau zu der gewünschten Korrektur von 8γ - die Lösung wird dann exakt.

Fazit Die Vernachlässigung höherer Terme in den Flussgleichungen führt zu einer Verminderung der Energielücken. Damit destabilisiert sich der gesamte Fluss der Hamiltonians ab einem gewissen V. Zur Stabilisierung der Flussgleichungen sind also Terme notwendig, die die Lücken erhöhen bzw. die Quasiteilchen-ändernden Prozesse stärker unterdrücken.

4. Erweiterung der Gleichungen

Die Untersuchung des 4-Platz-Modells zeigt, dass wegen der Vernachlässigung höherer Wechselwirkung sich schließende Lücken für das divergente Verhalten der Flussgleichungen ab einem bestimmten V verantwortlich sind. Erste Aufgabe einer Erweiterung um die Berücksichtigung höherer Terme ist somit, die Quasiteilchenzahl-ändernden Prozesse stärker zu unterdrücken und so eine Schliessung der Lücken zu vermeiden. Weiterhin sollen natürlich die physikalischen Größen quantitativ besser wiedergegeben werden.
3-Teilchen-Wechselwirkungen sollten dies leisten. Die Anzahl dieser Wechselwirkungsterme wächst jedoch mit N^5. Daher ist es hier technisch nicht möglich, alle diese Terme zu berücksichtigen. Um dennoch eine Unterdrückung der Quasiteilchenzahl-ändernden 2-Teilchen-Wechselwirkungen zu erreichen, wird im Folgenden eine minimale Näherung motiviert und abgeleitet. Diese Abschnitte sind naturgemäß eher technischer Natur.
Es zeigt sich anschliessend, dass diese vorgestellte Erweiterung zwar die Flussgleichungen stabilisiert, aber die Physik schlechter als die bisherige Rechnung wiedergibt.

4.1. Prinzipielle Überlegungen

Anhand des 4-Platz-Problems konnte analysiert werden, wie die einfachste Näherung zur Divergenz des Differentialgleichungssystems ab einem $V_{\mathrm{krit.,N}}$ führt. Letztlich wurden Lücken geschlossen, die sich eigentlich aufweiten sollten. Interessiert man sich nur für die niedrigsten Anregungen, so sollte ein solches Verhalten durch eine zusätzliche Berücksichtigung von $\mathcal{T}_{2i}^{(3)}$-Termen wesentlich abgeschwächt, wenn nicht gar vermieden werden, wie dies im 4-Platz-Modell der Fall ist. Die technischen Schwierigkeiten einer numerischen Integration sind jedoch erheblich. Unter Ausnutzung aller Symmetrien[1] sollte die Anzahl der 3-Teilchen-Terme wie $N^5/288 + \mathcal{O}(N^4)$ mit der Systemgröße anwachsen. Nimmt man weiterhin an, dass ± 0-, ± 2-, ± 4-, ± 6-Quasiteilchenzahl-verändernde Terme näherungweise in gleicher Zahl vorkommen, so reduziert sich die Anzahl der Variablen weiter um einen Faktor 3/4, da ± 6-Prozesse nicht in der Blockbandstruktur enthalten sind. Bei der oben untersuchten Systemgröße von $N = 48$ hat das Differentialgleichungssystem 192-mal mehr Variablen.
Ziel dieses Abschnittes ist es die Systematik einer Erweiterung um $\mathcal{T}_{2i}^{(3)}$-Terme genauer zu untersuchen und damit einen pragmatischen Ansatz zur Begrenzung der zusätzlichen Variablen zu motivieren.

[1] Hermitezität, Inversionssymmetrie, Teilchen-Loch-Symmetrie, Notationsymmetrie $\simeq 2 \times 2 \times 2 \times (3!)^2 =$ 288-fache Reduktionsmöglichkeit

Systematik der 3-Teilchen-Terme

Die Beziehungen aus Gleichung 2.18 lassen keine beliebigen Operatorkombinationen zu, die auf den Fluss der ursprünglichen Struktur

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= \mathcal{T}_0^{(0)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_0^{(1)}\{\mathcal{H}_0\} + \\ &\quad \mathcal{T}_{+4}^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_{+2}^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_0^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_{-2}^{(2)}\{\mathcal{H}_0\} + \mathcal{T}_{-4}^{(2)}\{\mathcal{H}_0\}\end{aligned} \tag{4.1}$$

wirken. Man kann die Systematik nun so erweitern, dass man nur Kommutatoren von Operatoren berücksichtigt, die sich entweder aus zwei schon ursprünglich bei $\mathcal{H}(l=0)$ existenten Anteilen (also $\mathcal{T}_{2i}^{(0\ldots2)}$) oder aus einem ursprünglich existenten und einem im ersten Schritt bei $\mathcal{H}(l=dl)$ entstehenden Anteil (also $\mathcal{T}_{2i}^{(0\ldots3)}$) zusammensetzt. Aufgrund der Abschätzung gemäß Gleichung 2.18 ist den Differentialgleichungen der Grundzustandsenergie, der Dispersions- und der $\mathcal{T}_0^{(2)}$-Anteile dann nichts hinzuzufügen. Im zweiten Schritt entstehende $\mathcal{T}_{2i}^{(4)}$ haben in dieser Systematik keine Rückwirkungen und können außer Acht gelassen werden. Die anderen Anteile sind um Kommutatoranteile aus folgenden Kombinationen zu erweitern

$$\begin{aligned}\left(\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)},\mathcal{T}_0^{(3)}\right),\left(\mathcal{T}_{\mp2}^{(2)},\mathcal{T}_{\pm4}^{(3)}\right),\left(\mathcal{T}_{\pm4}^{(2)},\mathcal{T}_{\mp2}^{(3)}\right) &\quad \text{für} \quad \mathcal{T}_{\pm2}^{(2)} \\ \left(\mathcal{T}_{\pm4}^{(2)},\mathcal{T}_0^{(3)}\right) &\quad \text{für} \quad \mathcal{T}_{\pm4}^{(2)} \\ \left(\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)},\mathcal{T}_{\mp2}^{(3)}\right),\left(\mathcal{T}_{\pm4}^{(2)},\mathcal{T}_{\mp4}^{(3)}\right) &\quad \text{für} \quad \mathcal{T}_0^{(3)} \\ \left(\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)},\mathcal{T}_0^{(3)}\right),\left(\mathcal{T}_{\mp2}^{(2)},\mathcal{T}_{\pm4}^{(3)}\right),\left(\mathcal{T}_{\pm4}^{(2)},\mathcal{T}_{\mp2}^{(3)}\right) &\quad \text{für} \quad \mathcal{T}_{\pm2}^{(3)} \\ \left(\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)},\mathcal{T}_{\pm2}^{(3)}\right),\left(\mathcal{T}_{\pm4}^{(2)},\mathcal{T}_0^{(3)}\right) &\quad \text{für} \quad \mathcal{T}_{\pm4}^{(3)} .\end{aligned} \tag{4.2}$$

Aus oben genannten Gründen ist es im Rahmen dieser Arbeit nicht das Ziel, diese Systematik vollständig zu realisieren. Es gibt aber ein Argument für weitere Näherungen. Die $\mathcal{T}_{2i\neq0}^{(3)}$ sind anfangs 0 und sollen im effektiven Modell wieder 0 sein. Man kann also annehmen, dass diese Terme für nicht zu großes V im Laufe des Flusses nur kleine Werte annehmen und dies auch nur für kleine Intervalle von l. Daher werden auch sie vernachlässigt. Es werden also nur $\mathcal{T}_0^{(3)}$-Terme betrachtet.

Der wesentliche Vorteil dieser Näherung ist, dass die $\mathcal{T}_0^{(3)}$-Terme nicht in η auftreten. Damit ergibt sich die dann schon wesentlich übersichtlichere Struktur der Kombinationen

$$\begin{aligned}\left(\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)},\mathcal{T}_0^{(3)}\right) &\quad \textit{für} \quad \mathcal{T}_{\pm2}^{(2)} \\ \left(\mathcal{T}_{\pm4}^{(2)},\mathcal{T}_0^{(3)}\right) &\quad \textit{für} \quad \mathcal{T}_{\pm4}^{(2)}\end{aligned} \tag{4.3}$$

Der Fluss der $\mathcal{T}_0^{(3)}$-Terme ist nur von den Kombinationen

$$\left(\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)},\mathcal{T}_{\mp2}^{(2)}\right),\left(\mathcal{T}_{\pm4}^{(2)},\mathcal{T}_{\mp4}^{(2)}\right) \tag{4.4}$$

bestimmt.
Bildet man nun die Koeffizienten der $\mathcal{T}^{(2)}_{2i\neq 0}$ auf einen Vektor ab und bezeichnet man seine Einträge einzeln mit $\Gamma_{2i\neq 0, j=1..n_i}$, findet man folgende Darstellung

$$\frac{d}{dl}\begin{pmatrix} \Gamma_{+2,1} \\ \dots \\ \Gamma_{+2,i_2} \\ \Gamma_{-2,1} \\ \dots \\ \Gamma_{-2,i_{-2}} \\ \Gamma_{+4,1} \\ \dots \\ \Gamma_{+4,i_4} \\ \Gamma_{-4,1} \\ \dots \\ \Gamma_{-4,i_{-4}} \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{d}{dl}\begin{pmatrix} \Gamma_{+2,1} \\ \dots \\ \Gamma_{+2,i_2} \\ \Gamma_{-2,1} \\ \dots \\ \Gamma_{-2,i_{-2}} \\ \Gamma_{+4,1} \\ \dots \\ \Gamma_{+4,i_4} \\ \Gamma_{-4,1} \\ \dots \\ \Gamma_{-4,i_{-4}} \end{pmatrix}}_{\text{strukt.erh.Näh.}} + \begin{pmatrix} \boxed{M^{+2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{M^{-2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{M^{+4}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \boxed{M^{-4}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_{+2,1} \\ \dots \\ \Gamma_{+2,i_2} \\ \Gamma_{-2,1} \\ \dots \\ \Gamma_{-2,i_{-2}} \\ \Gamma_{+4,1} \\ \dots \\ \Gamma_{+4,i_4} \\ \Gamma_{-4,1} \\ \dots \\ \Gamma_{-4,i_{-4}} \end{pmatrix} \tag{4.5}$$

Die Einträge in den Untermatrizen M^{2i} bestehen aus lauter $\mathcal{T}^{(3)}_0$-Koeffizienten, die zusammen mit $\mathcal{T}^{(2)}_{2i}$ auf den Fluss eines anderen $\mathcal{T}^{(2)}_{2i}$ wirken. Dass dabei einige Bereiche leer sind, liegt einfach an der Additivität der Quasiteilchenänderung.
Bis hierhin ist noch nicht viel gewonnen. Wird das Differentialgleichungssystem für $N = 48$ durch die Erweiterung zunächst ungefähr 192-mal grösser, so ist durch die Beschränkung auf $\mathcal{T}^{(3)}_0$-Terme eine weitere Reduktion um einen Faktor $\frac{1}{3}$ möglich. Also ist die Anzahl der Variablen etwa 64-mal grösser. Im Rahmen der gegebenen technischen Möglichkeiten ist das nicht realisierbar.
Die weiteren Überlegungen werden daher darauf abzielen, weiter zu approximieren, indem mehrere ähnliche $\mathcal{T}^{(3)}_0$-Terme summarisch beschrieben werden. Dabei steht inbesondere der Effekt der Unterdrückung der $\mathcal{T}^{(2)}_{2i\neq 0}$-Anteile im Vordergrund.

4.2. Ableitung der vereinfachten Erweiterung

Darstellungsweise

Für den Kalkül wird es nützlich sein, die Operatoren wirklich in einer normalgeordneten Sprache mit Quasiteilchenoperatoren $b^\dagger$ und b wie in Gleichung 2.3 zu beschreiben. Die für die Erweiterung wesentlichen Operatoren haben nun die Darstellung

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_0^{(3)}\text{-Terme} &\sim b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k'_3} b_{k'_2} b_{k'_1} \\
\mathcal{T}_{\pm 4}^{(2)}\text{-Terme} &\sim b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b^\dagger_{k_4} \quad \text{bzw.} \quad b_{k_4} b_{k_3} b_{k_2} b_{k_1} \qquad (4.6)\\
\mathcal{T}_{\pm 2}^{(2)}\text{-Terme} &\sim b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k_4} \quad \text{bzw.} \quad b_{k_4} b_{k_3} b_{k_2} b^\dagger_{k_1} \ . \qquad (4.7)
\end{aligned}$$

Wegen der Impulserhaltung ist natürlich ein Impuls durch die Wahl aller anderen jeweils festgelegt. Es seien in den obigen $\mathcal{T}^{(2)}$-Termen je drei Impulse festgelegt und mit einem neuen Index $i = \{k_1, k_2, k_3\}$ beschrieben. Die normalgeordnete Schreibweise ist aber mehrdeutig, was durch eine Sortierung $k_1 < k_2 < k_3$ im Bereich $[-\pi, \pi)$ behoben wird.
Wenn man sich auf die drei Erzeuger bzw. Vernichter in $\mathcal{T}_{\pm 2}^{(2)}$ verständigt, sind die Terme von $\mathcal{T}_{\pm 2}^{(2)}$ auf diese Art eindeutig festgelegt. Die Terme von $\mathcal{T}_{\pm 4}^{(2)}$ können hingegen auf vier Arten dargestellt werden: $i = \{k_1, k_2, k_3\}$, $i = \{k_1, k_2, k_4\}$, $i = \{k_1, k_4, k_3\}$ und $i = \{k_4, k_2, k_3\}$.

Die Erweiterung in dieser Darstellung

$[\mathcal{T}_0^{(3)}, \mathcal{T}_{2i>0}^{(2)}]$-Kommutatoren ergeben nun

$$\begin{aligned}
\left[b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k'_3} b_{k'_2} b_{k'_1}, b^\dagger_{k'_1} b^\dagger_{k'_2} b^\dagger_{k'_3} b^\dagger_{k_4}\right] &= -b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b^\dagger_{k_4} + \underbrace{\mathcal{T}_{+4}^{(j>2)}}_{\text{bleiben unberücksichtigt}} \\
\left[b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k'_3} b_{k'_2} b_{k'_1}, b^\dagger_{k'_1} b^\dagger_{k'_2} b^\dagger_{k'_3} b_{k_4}\right] &= -b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k_4} + \underbrace{\mathcal{T}_{+2}^{(j>2)}}_{\text{bleiben unberücksichtigt}} \qquad (4.8)
\end{aligned}$$

Für $[\mathcal{T}_0^{(3)}, \mathcal{T}_{2i<0}^{(2)}]$-Kommutatoren ergibt sich dasselbe mit umgekehrtem Vorzeichen, da η antihermitesch ist.
$[\mathcal{T}_{+4}^{(2)}, \mathcal{T}_{-4}^{(2)}]$-Kommutatoren haben die Form

$$\left[b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b^\dagger_{k_4}, b_{k_4} b_{k'_3} b_{k'_2} b_{k'_1}\right] = b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k'_3} b_{k'_2} b_{k'_1} + \underbrace{\mathcal{T}_0^{j<3}}_{\text{wurden schon berücksichtigt}} \ . \qquad (4.9)$$

Hier ist zu beachten, dass mit dem hier benutzten Ordnungsprinzip der 3-Teilchenterm auf der rechten Seite aus 16 verschiedenen Kombinationen von 2-Teilchenoperatoren mit Indizes i, j entstehen kann, je nachdem was jeweils k_4 ist. Unabhängig davon ist die Summe der Impulse von $i = \{k_1, k_2, k_3\}$ gleich der Summe der Impulse von $i' = \{k'_1, k'_2, k'_3\}$.
Zum Schluss sind noch die $[\mathcal{T}_{+2}^{(2)}, \mathcal{T}_{-2}^{(2)}]$-Kommutatoren zu untersuchen. Auch hier gibt es

mehrere Kombinationsmöglichkeiten, die auf denselben 3-Teilchenterm führen. *Eine* davon ist

$$\left[b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k_4}, b^\dagger_{k_4} b_{k'_3} b_{k'_2} b_{k'_1}\right] = b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k'_3} b_{k'_2} b_{k'_1} + \underbrace{\mathcal{T}_0^{j<3}}_{\text{wurden schon berücksichtigt}} \quad . \tag{4.10}$$

Diese spezielle Kombination, bei der Erzeuger bzw. Vernichter zu k_4 gepairt werden, tritt mit der verwendeten Sortierung genau einmal auf. Außerdem ist auch hier die Summe der Impulse von $i = \{k_1, k_2, k_3\}$ gleich der Summe der Impulse von $i' = \{k'_1, k'_2, k'_3\}$.
Betrachtet man nur diese Art der Pairings, kann man mit der Indizierung i die Abbildung auf Vektoren nach Gleichung 4.5 vornehmen[2].
Die Abbildung entspricht der Vorschrift

$$\begin{array}{lclcll} b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b^\dagger_{k_4} & \text{bzw.} & b_{k_4} b_{k_3} b_{k_2} b_{k_1} & \to & \vec{u}_i & \vec{u}_j = \vec{u}_i^\dagger \\ b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k_4} & \text{bzw.} & b^\dagger_{k_4} b_{k_3} b_{k_2} b_{k_1} & \to & \vec{v}_i & \vec{v}_j = \vec{v}_i^\dagger \end{array} \tag{4.11}$$

Auch die $\mathcal{T}_0^{(3)}$-Terme können im Sinne der Matrixstruktur vom vorherigen Abschnitt eindeutig als Matrixelemente M_{ij} mit diesen Indizes $i = \{k_1, k_2, k_3\}$, $j = \{k'_1, k'_2, k'_3\}$ und demselben Ordnungsprinzip notiert werden

$$b^\dagger_{k_1} b^\dagger_{k_2} b^\dagger_{k_3} b_{k'_3} b_{k'_2} b_{k'_1} \quad \to \quad M_{ij}^{u,v} \quad . \tag{4.12}$$

Hier sind wegen der Erhaltung der Summe der Impulse der Indizes i und j, nur solche i und j zu gleichem Gesamtimpuls möglich. Dies legt $k_1^i + k_2^i + k_3^i = k_1^j + k_2^j + k_3^j$ fest. In diesem Sinne wird M_{ij} eine Blockstruktur aufgeprägt.
Die Erweiterung der 2-Teilchenterme hat folgende Form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl} u_i &= -\sum_j M_{ij}^u u_j \\ \frac{d}{dl} v_i &= -\sum_j M_{ij}^v v_j \quad . \end{aligned} \tag{4.13}$$

Hier ist die Blockstruktur von M_{ij} in der Summation über j zu beachten.
Für die 3-Teilchenterme gilt wiederum

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl} M_{ij}^u &= u_i u_j \\ \frac{d}{dl} M_{ij}^v &= v_i v_j \quad . \end{aligned} \tag{4.14}$$

[2]Auch hier ist wieder die vierfache Darstellung eines $\mathcal{T}_{\pm 4}^{(2)}$ zu berücksichtigen.

Ansatz

Zunächst wird anstelle der M ein Vektor $\vec{r}^u = M^u\vec{u}$ bzw. $\vec{r}^v = M^v\vec{v}$ betrachtet. Für einen solchen Vektor gibt es auch eine Darstellung $\vec{r}^u = D^u\vec{u}$ bzw. $\vec{r}^v = D^v\vec{v}$ mit diagonalen Matrizen $D^{u,v} = (d_i^{u,v})$. Die Änderung der Vektoren r ist

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dl}r_i^u &= \sum_j \frac{d}{dl}\left(M_{ij}^u u_j\right) = \sum_j \left(\frac{d}{dl}M_{ij}^u\right)u_j + M_{ij}^u\left(\frac{d}{dl}u_j\right) \\
&= \frac{d}{dl}\left(d_i^u u_i\right) = \left(\frac{d}{dl}d_i^u\right)u_i + d_i^u\left(\frac{d}{dl}u_i\right) \\
\frac{d}{dl}r_i^v &= \sum_j \frac{d}{dl}\left(M_{ij}^v v_j\right) = \sum_j \left(\frac{d}{dl}M_{ij}^v\right)v_j + M_{ij}^v\left(\frac{d}{dl}v_j\right) \\
&= \frac{d}{dl}\left(d_i^v v_i\right) = \left(\frac{d}{dl}d_i^v\right)v_i + d_i^v\left(\frac{d}{dl}v_i\right) \quad . \qquad (4.15)
\end{aligned}$$

Die wesentliche Näherung besteht nun darin das jeweils zweite Produkt zu vernachlässigen.
Systematisch lässt sich das damit begründen, dass $\left(\frac{d}{dl}M_{ij}^u\right)u_j$ bzw. $\left(\frac{d}{dl}d_i^u\right)u_i$ von der Ordnung V^3 sind, während $M_{ij}^u\left(\frac{d}{dl}u_j\right)$ bzw. $d_i^u\left(\frac{d}{dl}u_i\right)$ von der Ordnung V^4 sind.
Zudem ist dies technisch zweckmässig, da nicht die volle Information über M^u berücksichtigt werden soll (für die $\vec{v}$ gilt dies analog).
Damit erhält man aus Gleichung 4.15

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dl}r_i^u &= \sum_j \left(\frac{d}{dl}M_{ij}^u\right)u_j) = \left(\frac{d}{dl}d_i^u\right)u_i \\
\frac{d}{dl}r_i^v &= \sum_j \left(\frac{d}{dl}M_{ij}^v\right)v_j = \left(\frac{d}{dl}d_i^v\right)v_i \quad . \qquad (4.16)
\end{aligned}$$

Behandlung der d^u und der Erweiterung für $\mathcal{T}_{\pm 4}^{(2)}$ Mit dem obigen Ansatz ergibt sich auf elegante Art der Fluss der d^u. Ein Vergleich der verbliebenen Anteile unter Berücksichtigung von Gleichung 4.14 liefert

$$\sum_j \left(\frac{d}{dl}M_{ij}^u = u_i u_j\right)u_j = \left(\sum_j u_j^2\right)u_i = \left(\frac{d}{dl}d_i^u\right)u_i \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dl}d_i^u = \sum_j u_j^2 \quad . \qquad (4.17)$$

Hier ist wieder die Beschränkung auf Indizes j zu beachten, die denselben Gesamtimpuls wie i repräsentieren müssen. Die Beschränkung führt dazu, dass sich alle d_i^u mit demselben k aus $i = \{k_1 + k_2 + k_3 = k\}$ gleich verhalten. Damit gibt es nur N verschiedene d_i^u und man kann sie durch den Gesamtimpuls k zum Index i als d_k^u klassifizieren[3].

[3] Mit denselben Argumenten wie bei der Dispersion sind es aufgrund der Inversionssymmetrie und der Teilchen-Loch-Symmetrie tatsächlich sogar nur $\frac{N}{4}$.

Damit ist der zusätzliche Aufwand letztlich ein sehr geringer.
Es ist nun zu untersuchen, was diese Erweiterung für den Fluss der entsprechenden Kopplungskonstanten Γ_{kqQ} der $\mathcal{T}^{(2)}_{2i\neq 0}$-Prozesse bedeutet. Diese wurden um $d^u_i \nu_i$ erweitert. Man erinnere sich daran, dass vier verschiedene ν_i ein und denselben $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 4}$-Prozess repräsentieren und dass jeder der vier Impulse gepairt werden kann. Es gibt damit auch vier zusätzliche Anteile zum Fluss und zwar unter Berücksichtigung der Vorzeichen in η

$$\frac{d}{dl}\Gamma_{kqQ} = \text{"wie bisher"} - \left(d^u_{k+q} + d^u_{k-q} + d^u_{k-Q} + d^u_{k+Q}\right)\Gamma_{kqQ} \quad . \tag{4.18}$$

Der Fluss der d^u ist

$$d^u_k = \frac{4}{N^2} \sum_{kqQ|\Gamma_{KqQ}\in\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 4}} \Gamma^2_{KqQ}\left(\delta_{k,K+q} + \delta_{k,K-q} + \delta_{k,K-Q} + \delta_{k,K+Q}\right) \quad . \tag{4.19}$$

Auch hier ist auf die Abzählung der Vielfachheit der Darstellung zu achten.
Wichtig ist die Tatsache, dass die Gleichungen für die d_u intensiv sind. Zwar läuft die Impulssumme über 3 Impulse, so dass man $\mathcal{O}(N^3)$ Terme erwartet, wegen der δ-Funktionen sind es letztlich nur $\mathcal{O}(N^2)$ Terme. Damit verhält sich die Änderung von d^u wie $\mathcal{O}(N^0)$.

Behandlung der d^ν und der Erweiterung für $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$ Hier wurde willkürlicher vorgegangen. Bei den Kommutatoren wurde nur eines von vier möglichen Pairings untersucht. Das Besondere an diesem Pairing war, dass bei Termen, die daraus entstanden, die Struktur $\frac{d}{dl}M^\nu_{ij} = \nu_i\nu_j$ wie bei M^u_{ij} entstand. Damit kann alles analog zum Obigen abgeleitet werden. Auch dieser Ansatz führt zu einer stärkeren Unterdrückung der $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$-Terme, was erwünscht ist.
Als physikalisches Argument kann man anführen, dass es auf eine allzu detaillierte Beschreibung dieser Terme nicht ankommt. Man kann davon ausgehen, dass die im Sinne der Bosonisierung relevanten Prozesse an der Fermikante nahezu 0 sind (vgl. Abbildung 2.1(b)) und so das Niederenergieverhalten kaum beeinflussen.
Mit dieser Art der Beschreibung lässt sich die Erweiterung der Flussgleichungen analog zur Erweiterung der $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 4}$-Prozesse ableiten. Jedoch kommt es zu keinen Mehrdeutigkeiten in der Schreibweise. Es ist aber zu berücksichtigen, welches Quasiteilches gepairt wurde, also welches Quasiteilchen im Sinne von Gleichung 4.10 den Impuls k_4 trägt. Die Erweiterung hat die Gestalt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl}\Gamma_{kqQ} &= \text{"wie bisher"} - \Gamma_{kqQ} d^\nu_K \\ &\text{mit} \\ K = k+q \quad &\text{wenn} \quad c^\dagger_{k+q} = b_{k_4} \\ K = k-q \quad &\text{wenn} \quad c^\dagger_{k-q} = b_{k_4} \\ K = k-Q \quad &\text{wenn} \quad c_{k-Q} = b_{k_4} \\ K = k+Q \quad &\text{wenn} \quad c_{k+Q} = b_{k_4} \quad . \end{aligned} \tag{4.20}$$

Für die d_k^ν gilt

$$d_k^\nu = \frac{4}{N^2} \sum_{kqQ|\Gamma_{KqQ}\in\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)}} \Gamma_{KqQ}^2 \Delta_{k,K} \quad . \tag{4.21}$$

Hier bezieht sich $\Delta_{k,K}$ auf diesselbe Einschränkung von K wie in Gleichung 4.20.

Fazit

Die zusätzlichen Gleichungen stellen in gewisser Weise eine minimale Erweiterung der Flussgleichungen dar. Sie führen in jedem Fall zu einer Unterdrückung der Quasiteilchenzahl-ändernden $\mathcal{T}_{2i\neq0}^{(2)}$-Terme und werden die Flussgleichungen somit stabilisieren.
Die wesentliche Näherung ist die Vernachlässigung der jeweils zweiten Summen in Gleichung 4.15. Dadurch konnte die Erweiterung statt mit $M^{u,v}$ mit diagonalen Matrizen $D^{u,v}$ gebildet werden.
Für die Erweiterung des Flusses der $\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)}$ war es zudem nötig, sich auf einen bestimmten Anteil zu beschränken, der zu einer übersichtlichen Struktur führt. Diese Näherung ist eher willkürlich und geschah im Wesentlichen aus technischen Gründen. Sie führt jedoch zu der gewünschten Unterdrückung der der $\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)}$-Prozesse.
Es zeigt sich, dass sich die $d_i^{u,v}$ für Indizes i, die denselben Impulssummen k entsprechen, alle gleich verhalten. Es gibt aber nur N Gesamtimpulse k. Weiterhin ist wegen Inversions- und Teilchen-Loch-Symmetrie wie bei der Dispersion die Anzahl der unterschiedlichen $d_k^{u,v}$ wieder auf $\frac{1}{4}$ reduziert. Insgesamt sind also nur $2 \times \frac{N}{4} = \frac{N}{2}$ weitere Terme zu beachten.

Anwendung auf das 4-Platz-Modell

Da es keine $\mathcal{T}_{\pm2}^{(2)}$-Terme gibt, bleiben die Variablen d_k^ν offensichtlich konstant 0. Zu beachten ist aber der Fluss der d_k^u, der sich auf den Fluss von $\gamma = \Gamma_{0,\frac{3\pi}{4},\frac{\pi}{4}}$ auswirkt. Dies sind $d^u_{\frac{3\pi}{4}}, d^u_{-\frac{\pi}{4}}, d^u_{-\frac{\pi}{4}}$ und $d^u_{-\frac{3\pi}{4}}$. Sie sind wegen der Inversionssymmetrie und der Teilchen-Loch-Symmetrie alle gleich und werden mit τ bezeichnet. Dieses τ fließt mit

$$\frac{d}{dl}\tau = 2\gamma^2 \tag{4.22}$$

und der Fluss von γ ist um

$$\left.\frac{d}{dl}\gamma\right|_{\text{erw.}} = -4\tau\gamma \tag{4.23}$$

zu erweitern. Man definiere das δ aus der 4-Platz-Analyse in $\delta_{\text{einf.}}$ um

$$\delta = -2\varepsilon + \nu_1 - \nu_2 - \nu_3 + 2\tau = \delta_{\text{einf.}} + 2\tau \quad . \tag{4.24}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl}\gamma &= 2\delta_{\text{einf.}}\gamma - 4\tau\gamma = -2\delta\gamma \\ \frac{d}{dl}\delta &= \frac{d}{dl}\delta_{\text{einf.}} + 2\frac{d}{dl}\tau = -2\gamma^2 + 4\gamma^2 = 2\gamma^2 \quad . \end{aligned} \tag{4.25}$$

Da $\tau(0) = 0$ ist, hat sich an den Anfangswerten nichts geändert und alles ist so wie bei der exakten Lösung des 4-Platz-Modells. Dieser Fall ist also mit den erweiterten Flussgleichungen exakt beschrieben.
Die Näherungen, die zur Ableitung der Erweiterung vorgenommen wurden, bedeuten in diesem Fall aber keine Einschränkung. Die vier möglichen Prozesse aus $\mathcal{T}_0^{(3)}$ sind aufgrund der Symmetrien im 4-Platz-Modell wirklich allesamt gleich zu behandeln.

4.3. Numerische Ergebnisse

In diesem Unterkapitel wird numerisch untersucht, welche Auswirkungen die Erweiterung in größeren Systemen hat. Dabei ist wegen der Unterdrückung der $\mathcal{T}^{(2)}_{2i\neq 0}$-Anteile eine Stabilisierung der Flussgleichungen, also ein größeres $V_{\mathrm{krit.,N}}$, zu erwarten. Eine solche Stabilisierung bestätigt, dass die Schlussfolgerungen aus dem 4-Platz-Modell auf größere Systeme übertragbar sind. Eine Erweiterung um $\mathcal{T}^{(3)}_{0}$-Anteile behindert die Schliessung der Lücken der niedrig liegenden Anregungen, die das Konvergenzverhalten der Flussgleichungen maßgeblich beeinflussen.
Eine wichtige Frage ist, ob die Erweiterung ausreicht, auch die quantitativen physikalischen Ergebnisse zu verbessern.
Es wird sich zeigen, dass Erweiterung das Konvergenzverhalten verbessert, insgesamt aber zu grob ist, um die Physik quantitativ besser zu beschreiben.

4.3.1. Bereich asymptotischer Konvergenz

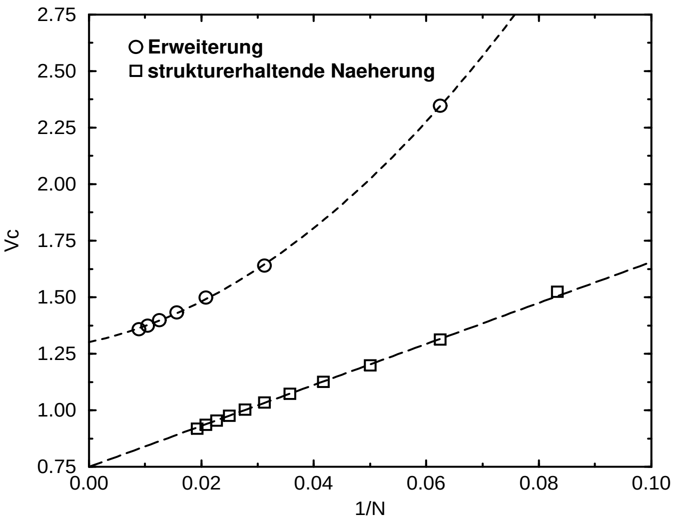


Abbildung 4.1.: Das Verhalten von $V_{\mathrm{N,krit.}}$ der erweiterten Flussgleichungen im Vergleich zur strukturerhaltenden Näherung

Neben dem Fall $\mathrm{N} = 4$, der exakt gelöst wurde, konvergiert auch der Fall $\mathrm{N} = 8$ für alle V. Für größere Systeme ist dies nicht mehr der Fall. Dennoch wird der Konvergenzbereich insgesamt vergrössert.
$V_{\mathrm{krit.,N}}$ lässt sich im Bereich $\mathrm{N} = 16 \ldots 112$ mit $V_{\mathrm{krit.,N}} \approx 1.30 + 5.35/\mathrm{N} + 181.82/\mathrm{N}^2$ gut approximieren (s. Abbildung4.1). Die kritische Wechselwirkung $V_{\mathrm{krit.,N}}$ ist somit für alle N um einiges höher als bei der strukturerhaltenden Näherung und bleibt für $\mathrm{N} \to \infty$ mit $V_{\mathrm{krit.,\infty}} \approx 1.3$ über $V = 1$, dem Punkt des Phasenüberganges der exakten Lösung. Die erwartete Stabilisierung findet also statt.

Ein anderer positiver Effekt ist, dass die Unterdrückung der Quasiteilchenzahl-ändernden $\mathcal{T}^{(2)}_{2i\neq0}$-Prozesse die Gleichungen viel schneller konvergieren lässt. Der Abfall dieser Prozesse wird derart beschleunigt, dass numerisch bis zu weit geringeren Werten von l als in der strukturerhaltenden Näherung integriert werden muss, bis das Ergebnis als der gesuchte Fixpunkt angesehen werden kann.
Damit ist das bisherige numerische Hauptproblem, die Laufzeit der Integration, kleiner geworden. Man kann also mit der Erweiterung deutlich größere Systeme behandeln und damit eine wesentlich bessere Auflösung der Dispersion erreichen. Hier wurden die Fälle $N = 16, 32, \ldots, 112$ berechnet.
Der Fall $N = 112$ hat 45556 Variablen, die im Runge-Kutta-Verfahren 6-fach gespeichert werden müssen, und deutlich mehr Vorfaktoren und Indizes, die für das Differentialgleichungssystem gespeichert werden müssen (ca. $(3 \times 112) \times 45556$ zusätzliche Konstanten). Bei solchen Systemgrößen wird auch der Speicherplatz zu einem begrenzenden Faktor.

4.3.2. Physikalische Größen

Die physikalischen Größen wurden detailliert für $N = 96$ berechnet. Es wird schnell deutlich, dass über die Stabilisierung hinaus nicht viel gewonnen wurde.

Grundzustandsenergie In Abbildung 4.2 sieht man, dass die Grundzustandsenergieabsenkung, die zuvor für weite Bereiche von V etwas zu stark wiedergegeben wurde, nun zu schwach ist. Problematisch ist, dass die relative Abweichung vom exakten Ergebnis schlechter wird.
Dass die Grundzustandsenegie nicht soweit abfällt wie erwünscht, liegt daran, dass durch die grobe Beschreibung die $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm4}$-Terme[4] zu *stark* gedämpft werden. Selbst für kleine V sind die Ergebnisse der Erweiterung schlechter.

$N = 48$ $V = 0.1$	Grundzustandsenergieabsenkung
exakt	-0.00025021
strukt.-erh. Näherung	-0.00025005
Erweiterung	-0.00024943

Tabelle 4.1.: Ergebnisse der Grundzustandsenergieabsenkung im Vergleich

Damit erweist sich die Vereinfachung in Gleichung 4.15 als unzureichend.
Zwar wirken die vernachlässigten Terme nur in $\mathcal{O}(V^4)$. Allerdings beinhalten sie destabilisierende Terme in nicht zu vernachlässigender Anzahl und verändern die Flussgleichungen in komplexer Weise. Der vernachlässigte Anteil ist also wichtiger, als angenommen.

Dispersion Es ist zu erwarten, dass die Beschreibung der mit $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm2}$ zusammenhängenden Erweiterung noch schlechter ausfällt. Bei dieser Erweiterung wurde ziemlich willkürlich vorgegangen, indem nur bestimmte Pairing-Möglichkeiten berücksichtigt wurden, um eine

[4] An die Grundzustandsenegie greifen nur derartige Terme quadratisch an.

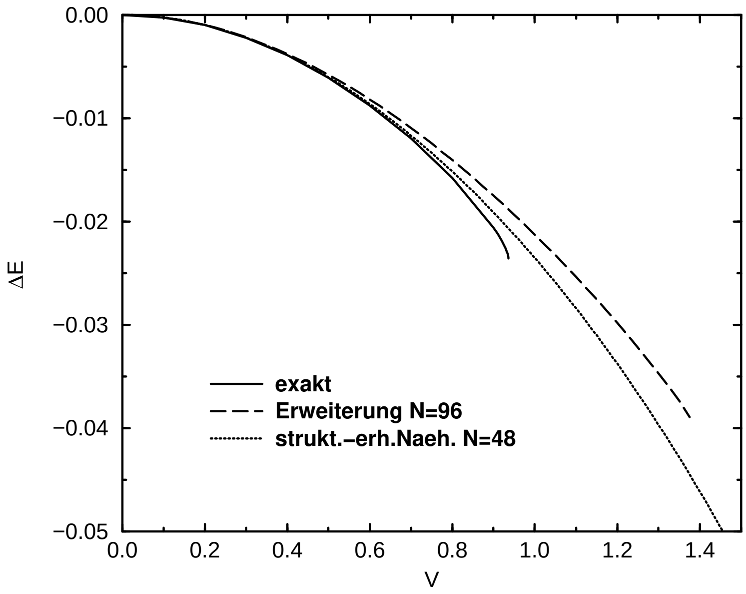


Abbildung 4.2.: Die Grundzustandsenergieabsenkung im Vergleich

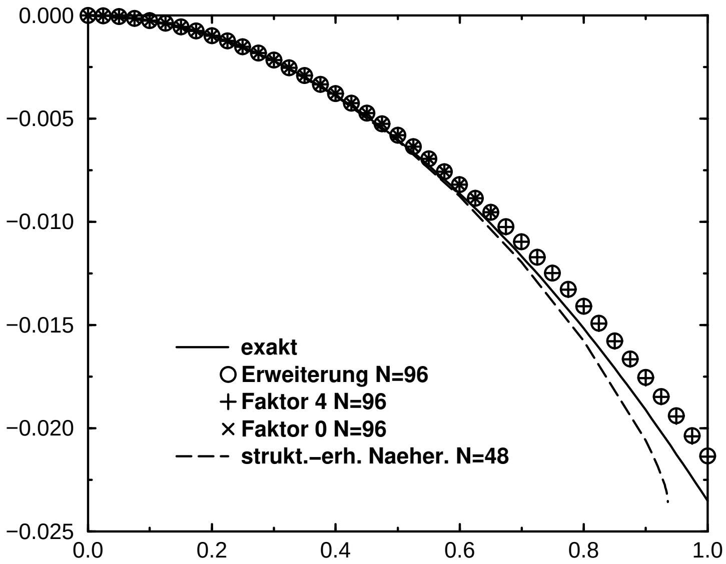


Abbildung 4.3.: Die Grundzustandsenergieabsenkung im Vergleich. Es sind zusätzlich verschiedene Erweiterungen von $\mathcal{T}_{\pm 2}^{(2)}$ um einen Faktor x dargestellt (s.unten): Bis auf den Konvergenzbereich ist kein Unterschied zu erkennen.

möglichst starke Unterdrückung der $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$-Prozesse zu bewirken.

Um die Auswirkungen des veränderten $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$-Flusses zu untersuchen, betrachte man die Dispersion, in deren Fluss $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$-Terme direkt ankoppeln. In den Abbildungen 4.4 und 4.5 sind einige Dispersionen für $N = 48$ bzw. $N = 96$ und verschiedene V dargestellt. Es zeigt sich ein sehr unphysikalisches Verhalten. Bei großen V baut sich keine Lücke auf, sondern eine “negative Lücke” entsteht und bleibt im Fluss stabil. Das physikalische System ist damit instabil gegen Addition eines Quasiteilchens.
Das Vorzeichen der Differenzen der Dispersionskonstanten ist aber für den Fluss aller $\mathcal{T}^{(2)}_{2i\neq 0}$ und damit für die Stabilität der Gleichungen wichtig (vlg. Gleichung 3.16). Offensichtlich wird durch die Erweiterung insgesamt “überstabilisiert”.
Man könnte nun beschließen, die d^{ν}_{k} ganz zu vernachlässigen. Zwar ändert dies nicht viel an der Grundzustandsenergie, führt aber auch ansonsten nicht zum erwünschten Ergebnis (s. Abbildung 4.3). Zudem nimmt der Konvergenzbereich ab. Dies ist auch zu erwarten, da die $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$ ohne Unterdrückung schneller divergieren können.
Bewertet man hingegen die drei Kontraktionen, die bislang bei den d^{ν}_{k} vernachlässigt wurden, wie die schon betrachtete, so fügt man einen Faktor 4 zu der Erweiterung der $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$ hinzu. An dem Verhalten der Grundzustandsenergie ändert dies nichts (s. Abbildung 4.3). Die “negative Lücke” öffnet sich wegen der stärkeren Unterdrückung der $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$-Prozesse nicht so schnell (s. Abbildung 4.7). Die Tendenz zur Bildung negativer Lücken ist aber weiterhin erkennbar.

Luttingerexponent α Dass auch der Luttingerexponent α der Impulsverteilung schlecht wiedergegeben wird, ist nach der Untersuchung der Dispersion zu erwarten. Abbildung 4.8 zeigt den Verlauf für verschiedene V. Die Funktion gibt die exakten Resultate nur noch für sehr kleine V korrekt wieder. Der weitere Verlauf der Funktion entspricht nicht mehr dem der exakten Lösung. Allerdings fällt auf, wie wenig Einfluss der konkrete Ansatz für die Erweiterung des Flusses der $\mathcal{T}^{(2)}_{\pm 2}$ hat.
Man lernt hieraus, wie empfindlich sich $\alpha(V)$ verhält. In diesem Lichte betrachtet, erscheint das Ergebnis aus der strukturerhaltenden Näherung wiederum als sehr gut und wenig zufällig.

Fazit

Die Erweiterung der strukturerhaltenden Flussgleichungen um eine globale Beschreibung von $\mathcal{T}^{(3)}_{0}$-Prozessen bringt tatsächlich die erwünschte Stabilisierung des Konvergenzverhaltens. Die Beschreibung ist allerdings zu grob. Die Erweiterung führt zu einer Überstabilisierung der Flussgleichungen, die zum Beispiel die Grundzustandsenergie schlechter wiedergibt und die Bildung negativer Lücken zulässt.
Die strukturerhaltende Näherung ist in diesem Lichte schon sehr gut und kann nicht in einfacher Weise verbessert werden.

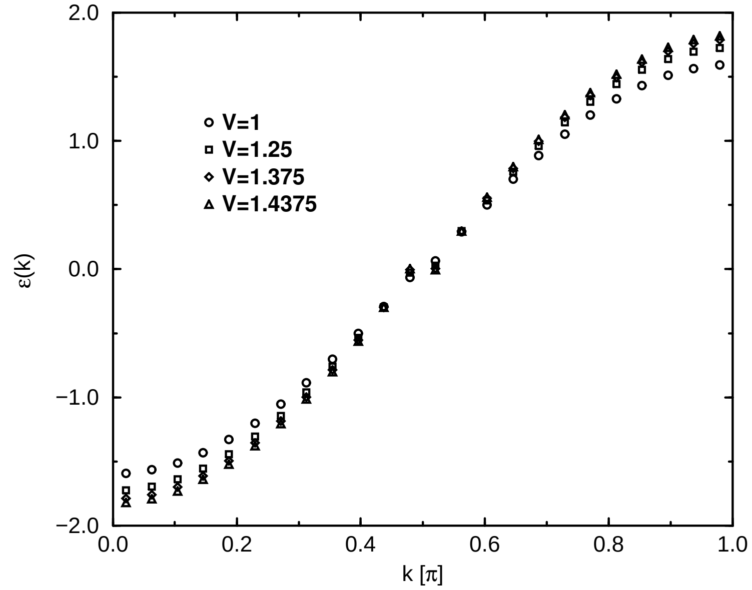


Abbildung 4.4.: Verhalten der Dispersion für verschiedene V bei $N = 48$: Auffällig ist die unphysikalische Unstetigkeit nahe k_F

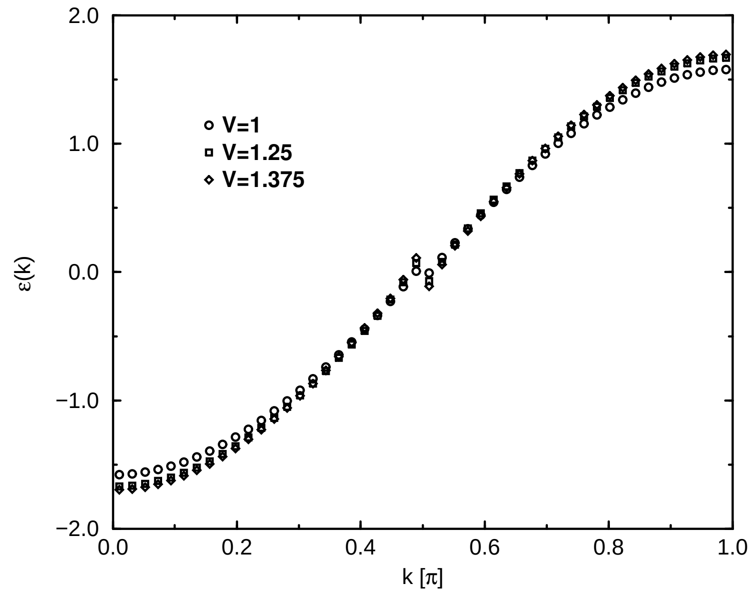


Abbildung 4.5.: Verhalten der Dispersion für verschiedene V bei $N = 96$: Es tut sich tatsächlich eine negative Lücke auf

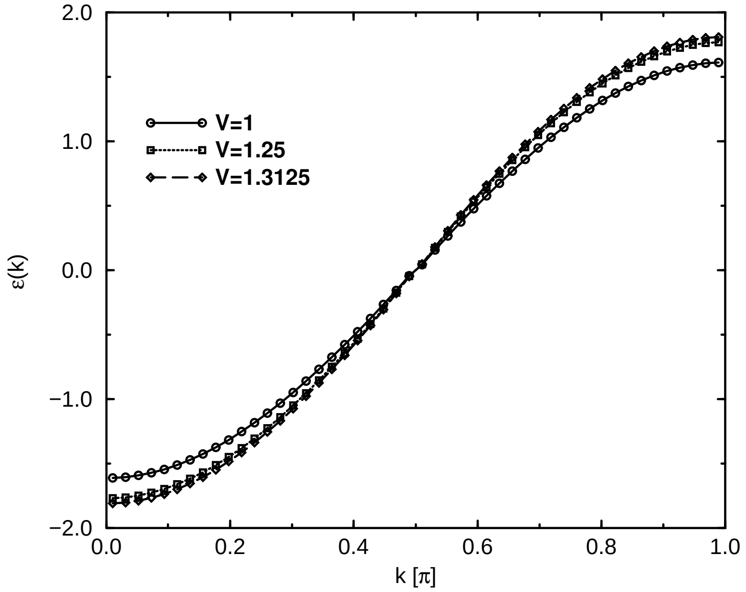


Abbildung 4.6.: Dispersion für verschiedene V bei N = 96 mit zusätzlichem "Faktor 4".

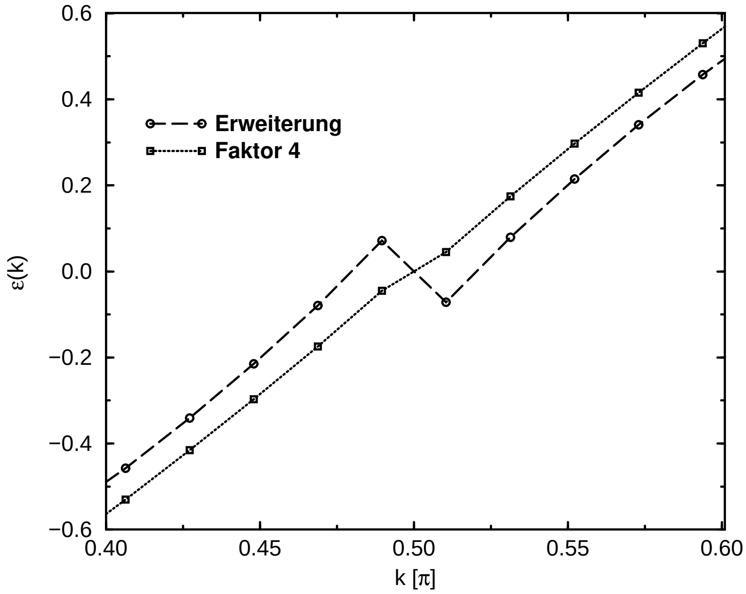


Abbildung 4.7.: Ausschnitt der Dispersion bei V = 1.25 und N = 96 für verschiedene Erweiterungen: Auch beim "Faktor 4" ist die Tendenz zur starken Abflachung sichtbar.

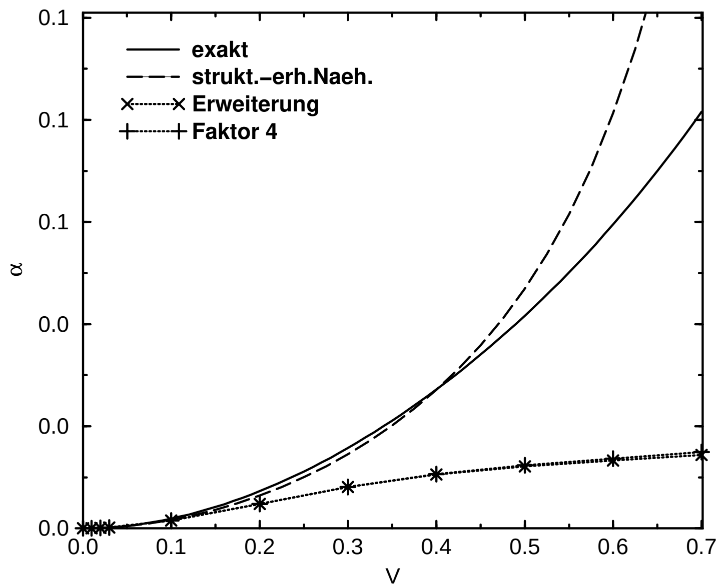


Abbildung 4.8.: Der Verlauf des Luttinger-Exponenten α: Schon für kleine V geht die Krümmung in die falsche Richtung

Diskussion und Ausblick

Zusammenfassende Diskussion

In der vorliegenden Arbeit wird ein Modell spinloser Fermionen auf einer Kette mit kontinuierlichen unitären Transformationen, die durch die Flussgleichungsmethode gegeben sind, untersucht. Die Fermionen haben eine abstoßende Nächste-Nachbar-Wechselwirkung und es wird halbe Füllung vorausgesetzt. Das Verhalten des Modells kann bei $T = 0$ im thermodynamischen Limes mit dem Bethe-Ansatz exakt bestimmt werden. Als eindimensionales Modell zeigt das System Luttingerflüssigkeitsverhalten, was sich insbesondere in einer stetigen Impulsverteilung ausdrückt. Die exakten Lösungen stellen einen Prüfstein für die Flussgleichungsergebnisse dar.
Der Generator η der Flussgleichungen wird nach dem Ansatz von Mielke, Knetter und Uhrig gewählt, der die Blockbandstruktur des Hamiltonians im Teilchen-Loch-Bild nutzt. Damit orientiert sich der Generator der Flussgleichungen an Quasiteilchen gemäß der Fermiflüssigkeitstheorie. Ziel der Untersuchung ist es, mit diesem Generator das Luttingerflüssigkeitsverhalten des Modells wiederzugeben.
Die bisherigen theoretischen Untersuchungsmethoden für Luttinger- bzw. Fermiflüssigkeiten sind nicht auf den jeweils anderen Fall übertragbar. Man muss gewissermaßen die Information über das qualitative Verhalten des wechselwirkenden Systems in die Methode stecken, um die richtigen Ergebnisse zu erhalten. Funktioniert der gewählte Ansatz für die kontinuierlichen unitären Transformationen auch in einer Dimension, indem er Luttingerflüssigkeitsverhalten reproduziert, so stellt er einen hervorragenden Kandidaten für eine einheitliche Beschreibung dar.
In der vorliegenden Arbeit werden die Flussgleichungen zunächst in strukturerhaltender Näherung abgeleitet. Diese Näherung ist systematisch durch die Wechselwirkung V kontrolliert und gibt die Differentialgleichungen der beschriebenen Größen bis zur Ordnung V^2 exakt wieder. Die abgeleiteten Differentialgleichungen werden für endliche Systeme mit N Kettenplätzen numerisch integriert.
Es zeigt sich, dass die Näherung dazu führt, dass das Verfahren nur bis zu einem gewissen $V_{\text{krit.},N}$ konvergiert. Dieser Bereich bleibt für $N \to \infty$ endlich. Der kritische Wert $V_{\text{krit.},\infty}$ ist ungefähr 0.75 und liegt damit unterhalb des exakt bekannten Phasenübergangs des Systems von der Metall- in die Isolator-Phase bei $V = 1$.
Für nicht zu große V (V nicht zu nahe an $V_{\text{krit.},N}$) erhält man sehr gute Werte für die Grundzustandsenergie und die Dispersion bzw. die Renormierung der Fermigeschwindigkeit v_F. Insbesondere sind die Werte, die man für v_F erhält, quantitativ besser, als die Ergebnisse, die man aus einer konstruktiven Bosonisierung (der Standardmethode für Luttingerflüssigkeiten) erhält.

Desweiteren kann man ohne besonderen Mehraufwand die Impulsverteilung berechnen. Daraus lässt sich der Luttingerexponent α der Impulsverteilung

$$n_k \simeq \frac{1}{2} - C_1 \mathrm{sign}(k-k_F)|k-k_F|^\alpha - C_2(k-k_F) \quad . \tag{4.26}$$

näherungsweise bestimmen. Auch diese Ergebnisse sind in weiten Bereichen von V quantitativ nahe der exakten Lösung und zeigen einen systematischen Verlauf. Die Flussgleichungen geben also tatsächlich Luttingerflüssigkeitsverhalten wieder. Im Vergleich zu den Resultaten der Bosonisierung sind auch hier die Flussgleichungsergebnisse besser. Gewisse Ungenauigkeiten der Flussgleichungsergebnisse für α liegen vermutlich an der indirekten Bestimmung dieser Größe über Fits.
Die Beschränkung des Konvergenzbereichs der Flussgleichungen kann anhand der Untersuchung des 4-Platz-Modells verstanden werden. Durch die Beschränkung auf 0-, 1- und 2-Teilchenwechselwirkungen tendieren Anregungslücken des Systems dazu, sich zu schließen. Dies sollte durch die Berücksichtigung höherer Wechselwirkungen abgeschwächt werden. In der Arbeit wird daher eine Erweiterung um 3-Teilchen-Wechselwirkungen abgeleitet. Da eine detaillierte Untersuchung dieser Wechselwirkungen technisch extrem aufwendig ist, werden sie summarisch beschrieben, wobei besonders stabilisierende Terme betrachtet werden. Dazu sind weitreichende Näherungen notwendig.
Tatsächlich wird durch die Erweiterung der Konvergenzbereich vergrößert und die Analyse des 4-Platz-Modells erweist sich als richtig. Allerdings werden die physikalischen Größen nun schlechter wiedergegeben und es treten sogar negative Energielücken auf. Die Untersuchung des Luttingerexponenten α zeigt, dass die Physik nicht mehr richtig wiedergegeben wird. Es erweist sich, dass die summarische Behandlung der 3-Teilchenterme das System *zu* sehr stabilisiert.
Insgesamt ist festzustellen, dass die Flussgleichungen in strukturerhaltender Näherung die Physik des Systems als Luttingerflüssigkeit für nicht zu große Werte von V sehr gut reproduzieren. Zudem sind die Resultate auch besser als die Ergebnisse einer konstruktiven Bosonisierung. Damit ist es gelungen, mit einem Ansatz, der sich der Quasiteilchensprache der Fermiflüssigkeiten bedient, eine Luttingerflüssigkeit zu beschreiben. Die Flussgleichungen sind somit ein äußerst vielversprechender Kandidat für eine einheitliche Beschreibung wechselwirkender Fermionensysteme in verschiedenen Dimensionen. Hervorzuheben ist, dass die kontinuierliche unitäre Transformation mit dem Generator η die dazugehörige Landausche Quasiteilchenabbildung von freien Zuständen auf Quasiteilchenzustände realisiert. Die Existenz einer solchen Abbildung wurde bislang immer nur vorausgesetzt, bisher aber noch nie nichtperturbativ konstruiert.
Weshalb könnte der Flussgleichungsmethode gelingen, was dem pertubartiven Zugang zur Landauschen Fermiflüssigkeitstheorie versagt bleibt?
Die Störungstheorie ist eine Methode, bei der gestörte Zustände systematisch auf ungestörte Zustandsvektoren projiziert werden. Aus diesen Projektionen ergibt sich, wie die ungestörten Zustände zu verändern sind, um ein effektives Bild der Teilchen zu bekommen. Die Basis des Zustandsraumes wird dabei jedoch nicht verändert. Steht ein gestörter Zustand senkrecht auf dem ungestörten ($\psi_{\mathrm{eff.}} \perp \psi_0$), so kann dies prinzipiell nicht durch die Störungsrechnung nachvollzogen werden. Dies ist in eindimensionalen Modellen mit

verschwindender Quasiteilchenamplitude an der Fermikante Z_{k_F} der Fall.
Demgegenüber ist die Flussgleichungsmethode eine Methode der kontinuierlichen Drehung des Hamiltonoperators hin zu einem effektiven Bild. Dabei wird auch die Basis der Zustände verändert. Es ist somit möglich, dass sich Basiszustände und damit die Darstellungen der entsprechenden Teilchen fundamental verändern. Die spezielle Anordnung der Ausgangszustände spielt eine geringere Rolle. Hierin liegt vermutlich der wesentliche Grund für den Erfolg der Flussgleichungsmethode als effizientes Werkzeug zur Untersuchung des Modells.

Ausblick

Für eine Darstellung größerer Systeme in der strukturerhaltenden Näherung wäre es notwendig, die numerischen Probleme, die ab der Systemgröße $N = 56$ auftreten, genauer zu analysieren und zu beheben. Eine numerische Verbesserung und die Untersuchung größerer Systeme macht eine genauere Abschätzung des Konvergenzbereiches der strukturerhaltenden Näherung möglich.
Weiterhin könnte man durch eine günstigere Behandlung der 3-Teilchenwechselwirkungen Verbesserungen des Konvergenzverhaltens und der physikalischen Ergebnisse erreichen und somit die genauen Auswirkungen der strukturerhaltenden Näherung studieren.
Da für das Modell bei $T = 0$ umfassende exakte Lösungen vorliegen, wäre es aufschlußreich, zu weiteren Resultaten (Spektren, Dynamik) bei dem untersuchten Modell zu gelangen. Dazu wird man das Transformationsverhalten von allgemeinen Operatoren untersuchen müssen.
Sehr interessant dürfte es sein, das Modell zu erweitern. Beispielsweise könnte man Spins einführen oder andere Füllungen betrachten und somit untersuchen, wie leistungsfähig der Ansatz für allgemeine eindimensionale Systeme ist. Zusammen mit der Untersuchung dynamischer Grössen könnte man zum Beispiel feststellen, ob es zu dem typischen Phänomen der Spin-Ladungstrennung kommt.
Der Ausgangspunkt der vorliegenden Arbeit ist die Frage, ob der Ansatz für den Generator η der kontinuierlichen unitären Transformationen nach Mielke, Knetter und Uhrig ein dimensionsunabhängiges Werkzeug zur Untersuchung von Fermionensystemen liefert. Daher ist es letztlich unerlässlich, mit dem Ansatz auch höherdimensionale Systeme zu untersuchen. Besonders spannend ist dabei eine Untersuchung des Übergangs von einer Kette zu einem zweidimensionalen Gitter. Die Frage, wie dieser Übergang genau zu verstehen ist, ist bislang ungeklärt.

A. Die Normalordnung

Die Algebra der normalgeordneten Operatorprodukte ist aufgrund der implizit auftretenden Produkte niederer Ordnung und gewisser Uneindeutigkeiten in der Notation nicht unbedingt offensichtlich. Da in der gesamten Arbeit intensiv Gebrauch von der Normalordnung gemacht wird und einige Aussagen so in der Literatur nicht zu finden sind, werden hier wichtige Eigenschaften detailliert erläutert.

A.1. Die Bildung normalgeordneter Operatoren

Die Normalordnung eines Produktes fermionischer Operatoren

$$c^\dagger_{k_1} c^\dagger_{k_2} c_{k_3} \dots c^\dagger_{k_{n-1}} c_{k_n} \rightarrow :c^\dagger_{k_1} c^\dagger_{k_2} c_{k_3} \dots c^\dagger_{k_{n-1}} c_{k_n}: + \dots\,, \tag{A.1}$$

notiert durch die Doppelpunkte, hat den Zweck, die Operatoren in einer Form darzustellen, deren Wirkung auf Quasiteilchen (also Löcher unterhalb der Fermikante und Fermionen darüber) direkt erkenntbar ist (siehe auch Ref.[31]).

Definition der Normalordnung

Nach Ref.[31] ist die

> *"Normalordnung eines Produktes von Teilchen und Lochoperatoren ... definiert als Umordnung des Produktes derart, dass alle Vernichtungs-Operatoren rechts stehen, multipliziert mit dem Signum der dazu nötigen Permutationen."*

Dabei ist ein Erzeugungsoperator in der Sprache der Quasiteilchen

$$b^\dagger_k = \quad c_k \Leftrightarrow |k| < k_F \;\text{ bzw. }\; c^\dagger_k \Leftrightarrow |k| > k_F \tag{A.2}$$

und ein Vernichtungsoperator

$$b_k = \quad c^\dagger_k \Leftrightarrow |k| < k_F \;\text{ bzw. }\; c_k \Leftrightarrow |k| > k_F. \tag{A.3}$$

Das Besondere an normalgeordneten Operatoren ist, dass man ihnen schnell ansieht, auf welche Zustände sie wirken. Ein Operator, der Quasiteilchenvernichter enthält, kann so nur auf einen Zustand wirken, in dem das entsprechende Quasiteilchen angeregt ist. Auf das Teilchen-Loch-Vakuum wirkt er zum Beispiel nicht.

Eine besondere algebraische Eigenschaft ist, dass sich unter der Normalordnung alle Operatoren zwischen den Doppelpunkten wie antivertauschende Objekte verhalten. Das bedeutet wiederum, dass die Vertauschung zweier Operatoren in einem normalgeordneten Produkt zwar ein Vorzeichen liefert, letztenendes aber auf denselben Gesamtoperator hinausläuft. Beispielsweise gilt für $|k|, |m| > k_F$ und $|m| < k_F$

$$\begin{aligned} :c_k c_l c_m^\dagger: &= c_l c_m^\dagger c_k \\ \text{oder auch} &= -c_m^\dagger c_l c_k \\ &= -\ :c_l c_k c_m^\dagger: \ . \end{aligned}$$

Allgemein gilt zusätzlich, dass die Normalordnung linear ist, dass also für Operatorprodukte A, B gilt

$$:\alpha A + \beta B: = \alpha :A: + \beta :B: \ . \tag{A.4}$$

Definition des Parings

Um aus einem gewöhnlichen Operatorprodukt seine normalgeordnete Form generieren zu können, brauchen man den Begriff des Pairings. Das Pairing zweier einzelner Fermioperatoren a, b wird notiert per unterlegter Klammer und ist definiert als

$$\underbrace{ab} = ab - :ab: \tag{A.5}$$

Das Pairing antivertauschender Operatoren ist also nur für nicht-vertauschende Operatoren von Null verschieden. Deutlicher wird die Wirkung eines Pairing, wenn man den Vakuumerwartungswert berechnet. Dann gilt

$$\begin{aligned} \langle \underbrace{c_k^\dagger c_{k'}^\dagger} \rangle = \langle \underbrace{c_k c_{k'}} \rangle &= 0 \\ \langle \underbrace{c_k^\dagger c_{k'}} \rangle &= \delta_{kk'} n_k \\ \langle \underbrace{c_k c_{k'}^\dagger} \rangle &= \delta_{kk'}(1 - n_k) \ . \end{aligned} \tag{A.6}$$

Dabei sind n_k die Teilchendichten des Vakuums.

Das Pairing ist damit eine Operation, die von der Reihenfolge der zu pairenden Operatoren abhängt und ein Skalar zurückliefert.

Es sei noch angegeben, wie normalgeordnete Produkte, die Pairings enthalten, definiert sind. Es gilt

$$\begin{aligned} &: a_1 \ldots a_{n-1} a_n \overbrace{a_{n+1} \ldots a_{m-1}}\, a_m a_{m+1} \ldots a_N : \ = \\ (-1)^{(m-n-1)}\ &\underbrace{a_n a_m} : a_1 \ldots a_{n-1} a_{n+1} \ldots a_{m-1} a_{m+1} \ldots a_N : \end{aligned} \tag{A.7}$$

Das Vorzeichen gibt an, wieviele Permutationen innerhalb des Produktes notwendig sind, um die beiden zu pairenden Operatoren nebeneinander zu bringen. Sind mehrere Pairings vorhanden, so kann man diese nach und nach gemäß obiger Vorschrift aus dem Produkt herausziehen.

Das Wicksche Theorem für gewöhnliche Produkte

Die Antwort auf die Frage, wie man nun aus einem gewöhnlichen Produkt seine normalgeordnete Form erhält, gibt das Wicksche Theorem. Dieses wird ausführlich in vielen Lehrbüchern bewiesen (unter anderem auch in Ref.[31]). Es lautet, wenn a allgemein für fermionische Erzeuger oder Vernichter steht

$$\begin{aligned} a_1 a_2 a_3 a_4 \dots a_{n-1} a_n &= \,: a_1 a_2 a_3 a_4 \dots a_{n-1} a_n : + \\ & \left.\begin{aligned} &: \underbrace{a_1 a_2} a_3 a_4 \dots a_{n-1} a_n : + \\ &: \underbrace{a_1 a_2 a_3} a_4 \dots a_{n-1} a_n : + \\ &\quad\vdots \\ &: a_1 a_2 a_3 a_4 \dots \underbrace{a_{n-1} a_n} : + \end{aligned}\right\} \textit{alle 1-fachen-Pairings} \\ & \left.\begin{aligned} &: \underbrace{a_1 a_2} \underbrace{a_3 a_4} \dots a_{n-1} a_n : + \\ &\quad\vdots \end{aligned}\right\} \textit{alle 2-fachen-Pairings} \\ &\quad\vdots \\ &\textit{alle maximal möglichen Pairings} \end{aligned} \tag{A.8}$$

Damit hat man also eine explizite Vorschrift, wie aus gewöhnlichen Produkten normalgeordnete zu bilden sind. Man kann sich daraus auch die umgekehrte Konstruktion ableiten. Zum Beweis des Wickschen Theorems wird von folgendem Lemma Gebrauch gemacht, dass auch unten nochmals Anwendung findet (vgl. Ref.[31])

$$\begin{aligned} : a_1 a_2 \dots a_n : a_N &= \,: a_1 a_2 \dots a_n a_N : + \\ & \sum_{i=1}^{n} : a_1 \dots \underbrace{a_i \dots a_n a_N} : \end{aligned} \tag{A.9}$$

A.2. Produkte normalgeordneter Operatoren

Im Folgenden wird geklärt, wie sich normalgeordnete Operatoren im Zusammenspiel verhalten. Ihre Addition ist wegen der Linearität klar. Interessanter ist die Frage, wie die Normalordnung eines Produktes zweier normalgeordneter Operatoren aussieht. Im Allgemeinen wird ein Produkt solcher Operatoren nicht normalgeordnet sein. Es bedarf einer Verallgemeinerung von Wicks Theorem. Es zeigt sich, dass im Sinne von Wicks Theorem Pairings nur zwischen den unterschiedlichen normalgeordneten Operatoren zu bilden sind. Die nächste Frage wird sein, welches Verhalten bezüglich Quasiteilchenänderung und Impulsübertrag ein solches Produkt besitzt. Wie zu erwarten übertragen sie sich additiv.

Beschränkung der notwendigen Pairings

In diesem Abschnitt wird untersucht, wie

$$: A :: B : \tag{A.10}$$

normalgeordnet wird. Im Prinzip geschieht dies in derselben Weise wie in Wicks Theorem. Die notwendigen Pairings beschränken sich jedoch auf Pairings zwischen einzelnen Anteilen aus A und solchen aus B.
Seien

$$\begin{aligned} A &= \; : a_1 a_2 \ldots a_{n-1} a_n : \\ B &= \; : b_1 b_2 \ldots b_{m-1} b_m : \;, \end{aligned} \tag{A.11}$$

so bedeutet dies

$$\begin{aligned}
&: a_1 a_2 \ldots a_{n-1} a_n :: b_1 b_2 \ldots b_{m-1} b_m : \;= \\[1em]
&\quad : a_1 a_2 \ldots a_{n-1} a_n b_1 b_2 \ldots b_{m-1} b_m : \\
&\left.\begin{array}{l}
+ : a_1 a_2 \ldots a_{n-1} a_n b_1 b_2 \ldots b_{m-1} b_m : \\
+ : a_1 a_2 \ldots a_{n-1} a_n b_1 b_2 \ldots b_{m-1} b_m : \\
\qquad\qquad \vdots \\
+ : a_1 a_2 \ldots a_{n-1} a_n b_1 b_2 \ldots b_{m-1} b_m :
\end{array}\right\} \textit{alle 1-fachen-Pairings zw. } a\textit{'s und } b\textit{'s} \\
&\left.\begin{array}{l}
+ : a_1 a_2 \ldots a_{n-1} a_n b_1 b_2 \ldots b_{m-1} b_m : \\
\qquad\qquad \vdots \\
+ : a_1 a_2 \ldots a_{n-1} a_n b_1 b_2 \ldots b_{m-1} b_m :
\end{array}\right\} \textit{alle 2-fachen-Pairings zw. } a\textit{'s und } b\textit{'s} \\
&\qquad\qquad \vdots \\
&\qquad \textit{alle } \min(n, m)\textit{-fachen Pairings zw. } a\textit{'s und } b\textit{'s} \qquad .
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Beweis mittels Induktion über m

Man nehme den Operator $A =: a_1 a_2 \dots a_n :$ wie oben und führe eine Induktion in der Länge m des Operators $B =: b_1 b_2 \dots b_m :$ durch.

Induktionsanfang m=1,2 Da ein einzelner Operator trivialerweise selbst normalgeordnet ist, gilt nach Lemma A.9 der Fall $m = 1$ direkt. Für die Induktion ist noch der Fall $m = 2$ zu zeigen

$$
\begin{aligned}
&: a_1 a_2 \dots a_n :: b_1 b_2 : = \\[1em]
&: a_1 a_2 \dots a_n : b_1 b_2 - \underbracket{b_1 b_2} = \\
&(: a_1 a_2 \dots a_n : b_1)\, b_2 - : a_1 a_2 \dots a_n : \underbracket{b_1 b_2} \overset{m=1}{=} \\
&(: a_1 a_2 \dots a_n b_1 : + \textstyle\sum_{i=1}^{n} : a_1 \dots \underbracket{a_i \dots a_n b_1} :) b_2 - \\
&: a_1 a_2 \dots a_n \underbracket{b_1 b_2} : \overset{m=1}{=} \\
&: a_1 a_2 \dots a_n b_1 b_2 : + \\
&\textstyle\sum_{i=1}^{n} : a_1 \dots \underbracket{a_i \dots a_n b_1 b_2} : + \\
&: a_1 \dots a_i \dots a_n \underbracket{b_1 b_2} : - : a_1 \dots a_i \dots a_n \underbracket{b_1 b_2} : + \\
&\textstyle\sum_{i=1}^{n} : a_1 \dots \underbracket{a_i \dots a_n b_1} b_2 : + \\
&\textstyle\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1, i \neq j}^{n} : a_1 \dots \underbracket{a_j \dots \underbracket{a_i \dots a_n b_1} b_2} : = \\[1em]
&: a_1 a_2 \dots a_n b_1 b_2 : + \\
&\textit{alle 1-fachen Pairings zw. } a\textit{'s und } b\textit{'s} + \\
&\textit{alle 2-fachen Pairings zw. } a\textit{'s und } b\textit{'s} \quad , \qquad \text{(A.13)}
\end{aligned}
$$

was genau der Behauptung für $m = 2$ entspricht.

Induktionsschritt Sei vorausgesetzt, der Satz gölte für m und $m-1$ mit $m \geq 2$, so folgt, dass er auch für $m+1$ gilt. Dazu stellt man nach dem Lemma A.9 B folgendermaßen dar

$$
: b_1 \dots b_m B_{m+1} : = : b_1 \dots b_m : B_{m+1} - \textit{alle (1-fachen) Pairings zw. } b\textit{'s und } B_{m+1} \quad . \qquad \text{(A.14)}
$$

Somit ist zunächst

$$
\begin{aligned}
&: a_1 a_2 \dots a_n :: b_1 b_2 \dots b_m B_{m+1} : = \\
&\underbrace{: a_1 a_2 \dots a_n :: b_1 b_2 \dots b_m : B_{m+1}}_{(*)} - \\
&\underbrace{: a_1 a_2 \dots a_n : \times \textit{alle Pairings zw. } b\textit{'s und } B_{m+1}}_{(**)} : \quad . \qquad \text{(A.15)}
\end{aligned}
$$

Für $(*)$ gilt nun

$$
\begin{aligned}
&(*) \overset{\text{Satz für m}}{=} \\
&\textit{alle 1-fachen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s} \times B_{m+1} + \\
&\textit{alle 2-fachen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s} \times B_{m+1} + \\
&\dots \\
&\textit{alle maximal möglichen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s} \times B_{m+1} \\
&\\
&\overset{\text{Lemma für bel. n}}{=} \\
&: a_1 \dots a_n b_1 \dots b_m B_{m+1} : + \\
&\textit{alle Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } B_{m+1} + \\
&\textit{alle 1-fachen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s} + \\
&\textit{alle Pairings zw. } \mathfrak{b}\textit{'s und } B_{m+1} + \\
&\textit{alle 1-fachen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s und alle Pairings zw. verbliebenen } \mathfrak{a}\textit{'s und } B_{m+1} + \\
&\textit{alle 2-fachen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s} + \\
&\textit{alle 1-fachen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s und alle Pairings zw. verbleibenen } \mathfrak{b}\textit{'s und } B_{m+1} + \\
&\dots \\
&\textit{alle (max. mögl.-1)-fachen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s und alle Pairings zw. verbliebenen } \mathfrak{a}\textit{'s und } B_{m+1} + \\
&\textit{alle max. mögl. Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s} + \\
&\textit{alle (max. mögl.-1)-fachen Pairings zw. } \mathfrak{a}\textit{'s und } \mathfrak{b}\textit{'s und alle Pairings zw. verbleibenen } \mathfrak{b}\textit{'s und } B_{m+1} \quad .
\end{aligned}
\tag{A.16}
$$

Man sieht, dass $(*)$ alle Terme enthält, die für die Behauptung erforderlich sind, aber auch weitere Terme.
Für $(**)$ ist die Länge durch die Pairings zwischen den b's und dem B schon um 2 erniedrigt, so dass der Satz für $m-1$ greift

$$
\begin{aligned}
(**) \quad = \quad &\textit{alle Pairings zw. } \mathfrak{b}\textit{'s und } B_{m+1} \\
&\textit{alle Pairings zw. } \mathfrak{b}\textit{'s und } B_{m+1} \textit{ und alle 1-fachen Pairings zw. verbleibenen } \mathfrak{b}\textit{'s und } \mathfrak{a}\textit{'s} \\
&\textit{alle Pairings zw. } \mathfrak{b}\textit{'s und } B_{m+1} \textit{ und alle 2-fachen Pairings zw. verbleibenen } \mathfrak{b}\textit{'s und } \mathfrak{a}\textit{'s} \\
&\dots \\
&\textit{alle Pairings zw. } \mathfrak{b}\textit{'s und } B_{m+1} \textit{ und alle (max. mögl.-1)-fachen Pairings zw. verbleibenen } \mathfrak{b}\textit{'s und } \mathfrak{a}\textit{'s} \quad .
\end{aligned}
\tag{A.17}
$$

Man sieht also, dass die unerwünschten Anteile in $(*)$ gerade durch die Subtraktion von $(**)$ aufgehoben werden.
Damit gilt also der Satz auch für den Fall $m+1$.
q.e.d.

Additivität von Quasiteilchenänderung und Impulsübertrag

Der Algorithmus der Normalordnung ist nun in seiner Systematik klar. Dennoch sind die konkreten Wirkungen der resultierenden Operatoren nicht besonders transparent, da beim Normalordnen durch Pairings eine Vielzahl normalgeordneter Operatoren niedrigerer Länge gebildet werden. Durch die δ-Funktionen, die mit den Pairings auftreten, übertragen sich jedoch Quasiteilchenänderung und Impulsübertrag additiv auf alle resultierenden Operatoren.
Dies sei hier detailliert gezeigt.

Quasiteilchenzahländerung

Die wichtigste Eigenschaft der Algebra normalgeordneter Operatoren für die Flussgleichungen der verallgemeinerten Form nach Mielke, Knetter und Uhrig ist die Additivität der Quasiteilchenzahländerung. Um dies einzusehen, notiere man die Operatoren mit Quasiteilchen-Erzeugern $b^\dagger$ bzw. -Vernichtern b in ihrer normalgeordneten Form

$$b^\dagger_{K_1} b^\dagger_{K_2} \dots b^\dagger_{K_m} b_{k_n} b_{k_{n-1}} \dots b_{k_1} \quad . \tag{A.18}$$

Die Quasiteilchenzahländerung ist damit bestimmt durch

$$m - n \tag{A.19}$$

Beim Normalordnen eines Produktes zweier solcher Operatoren, sind sukzessive Pairings zwischen diesen Operatoren zu bilden. Wegen der Pairings gemäß der Gleichungen A.6 und der Definition der Quasiteilchenoperatoren sind jeweils nur Erzeuger und Vernichter zu gleichem Impuls zu pairen.

$$\begin{aligned} & b^\dagger_{K_1} \dots b^\dagger_{K_m} b_{k_n} \dots b_{k_1} b^\dagger_{K'_1} \dots b^\dagger_{K'_M} b_{k'_N} b_{k'_1} \quad = \\ & : b^\dagger_{K_1} \dots \underbrace{b^\dagger_{K_i} \dots b^\dagger_{K_m} b_{k_n} \dots b_{k_1} b^\dagger_{K'_1} \dots b^\dagger_{K'_M} b_{k'_N} \dots b}_{} {}_{k'_j} \dots b_{k'_1} : + \dots \quad . \end{aligned} \tag{A.20}$$

Das bedeutet aber, dass nur Quasiteilchenerzeuger zu solchen Impulsen abgepairt werden, zu denen ein Quasiteilchevernichter existiert. Der Nettoeffekt in der Quasiteilchenänderung der abgepairten Operatoren ist daher 0. Die Quasiteilchenänderung ist ingesamt

$$m - n + M - N \underbrace{- \sharp \text{ abgepairte } b^\dagger + \sharp \text{ abgepairte } b}_{=0} \tag{A.21}$$

Somit ist die Quasiteilchenänderung der vielen resultierenden normalgeordneten Operatoren jeweils gleich der Summe der Quasiteilchenänderung der Faktoren, aus denen sie gebildet wurden.

Impulsübertrag

Die Argumentation für die Additivität des Impulsübertrages ist ähnlich.
Der Impulsübertrag eines normalgeordneten Operators der Form

$$: c^\dagger_{K_1} c^\dagger_{K_2} \dots c^\dagger_{K_m} c_{k_n} c_{k_{n-1}} \dots c_{k_1} : \tag{A.22}$$

ist durch

$$\sum_i^m K_i - \sum_i^n k_i \tag{A.23}$$

gegeben.
Beim Normalordnen eines Produktes zweier solcher Operatoren, sind wieder sukzessive Pairings zwischen diesen Operatoren zu bilden. Es tragen generell nur Pairings zwischen $c_k^\dagger$'s und $c_{k'}$ bei.

$$\begin{aligned} &: c_{K_1}^\dagger \dots c_{K_m}^\dagger c_{k_n} \dots c_{k_1} :: c_{K'_1}^\dagger \dots c_{K'_M}^\dagger c_{k'_N} \dots c_{k'_1} := \\ &\dots + : c_{K_1}^\dagger \dots \underbrace{c_{K_i}^\dagger \dots c_{K_m}^\dagger c_{k_n} \dots c_{k_1} c_{K'_1}^\dagger \dots c_{K'_M}^\dagger c_{k'_N} \dots c}_{k'_j} \dots c_{k'_1} : + \dots \end{aligned} \tag{A.24}$$

Die Pairings liefern jedoch höchstens dann etwas von 0 verschiedenes, wenn $K_i = k'_j$ ist. In der Impulsbilanz der vielen resultierenden Operatoren

$$\begin{aligned} &\sum_i^m K - \sum_i^n k + \sum_i^M K'_i - \sum_i^N k'_i \\ &\underbrace{-\sum \Big(\text{Impulse der abgepaarten } c^\dagger \text{ - Impulse der abgepaarten } c\Big)}_{=0} \end{aligned} \tag{A.25}$$

hebt sich dies deshalb jeweils auf. Folglich ist die Impulsbilanz des normalgeordneten Produktes zweier normalgeordneter Operatoren die Summe der Impulsbilanzen der einzelnen Faktoren, aus denen es gebildet wurde.

A.3. Kommutatoren

In dieser Arbeit sind normalgeordnete Kommutatoren von normalgeordneten Operatoren von zentralen Bedeutung. Dabei sind die Art und Weise, wie Produkte von solchen Operatoren gebildet werden, und die Eigenschaften des Pairings auszunutzen. Dies beschränkt die möglichen entstehenden Operatoren in ihrer Struktur.
In diesem Abschnitt sollen wesentliche Eigenschaften eines Kommutators der Form

$$\left[A_{K_1 \dots K_m k_n \dots k_1} \underbrace{: c_{K_1}^\dagger \dots c_{K_m}^\dagger c_{k_n} \dots : c_{k_1} :}_{=C}, \; A'_{K'_1 \dots K'_{m'} k'_{n'} \dots k'_1} \underbrace{: c_{K'_1}^\dagger \dots c_{K'_{m'}}^\dagger c_{k'_{n'}} \dots : c_{k'_1} :}_{=C'} \right] \tag{A.26}$$

aufgezeigt werden.

Vorfaktoren der entstehenden Operatoren

Die Koeffizienten $A_{K_1 \dots K_m k_n \dots k_1}$ und $A'_{K'_1 \dots K'_{m'} k'_{n'} \dots k'_1}$ lassen sich aus dem Kommutator herausziehen. Der verbleibende zu kommutierende und dann normalzuordnende Rest besteht aus den Operatorprodukten. Dabei entstehen in jedem der beiden Anteile des Kommutators CC' und $-C'C$ bei der Normalordnung Pairings, die bis auf die Reihenfolge gleich sind.

$$\begin{aligned} \text{Normalordnung von } CC' &\rightarrow \ldots c^\dagger_{K_i} \ldots c_{k_j} \ldots c^\dagger_{K'_k} \ldots c_{k'_l} \ldots \\ \text{Normalordnung von } C'C &\rightarrow \ldots c^\dagger_{K'_k} \ldots c_{k'_l} \ldots c^\dagger_{K_i} \ldots c_{k_j} \ldots \quad . \end{aligned} \tag{A.27}$$

Der Rest des Produktes ist normalgeordnet. Daher können innerhalb dieses Restes die verbleibenden Operatoren vertauscht werden. Dabei ist nur auf die Vorzeichenänderung durch die Vertauschung und das Vorzeichen aus dem Pairing zu achten.
Man könnte aber auch in $C'C$ erst C' komplett ans C vorbeiziehen (wodurch man $(-1)^{m+n+m'+n'}$ erhielte), dann für jedes Paring einen weiteren Vorzeichenwechsel hinzugeben[1] und die Pairings umgekehrt wie in CC' auswerten.
Sind die Produkte auf diesselbe Form gebracht worden, so lassen sie sich zusammenfassen und das Vorzeichen, der Vorfaktor und der Operator ergeben sich in systematischer Weise.

$$\begin{aligned} &\text{sign(Pairings aus } CC') \times \\ &\left\{ c^\dagger_{K_i} c_{k'_j} c_{k_k} c^\dagger_{K'_l} \ldots - (-1)^{m+n+m'+n'} (-1)^{\#\text{Pairings}} c_{k'_j} c^\dagger_{K_i} c^\dagger_{K'_l} c_{k_k} \ldots \right\} \\ &\times : \text{Rest aus } CC' : \end{aligned} \tag{A.28}$$

Der Vorfaktor A.28 werde “Kommutatorvorfaktor” genannt.
Insgesamt ist es also ausreichend, nur CC' normalzuordnen und statt der Pairings die systematischen Vorfaktoren nach dieser Gleichung auszuwerten und ein entsprechendes Vorzeichen hinzuzufügen.
Was man direkt erkennen kann ist, dass zur Normalordnung des Kommutator zweier Operatoren gerader Länge[2] $m+n$ bzw. $m'+n' \in \{2\mathcal{N}\}$ immer zumindest ein Pairing zu bilden ist.

Länge der entstehenden Operatoren

Man kann auch die Länge der Operatoren, die bei der Normalordnung eines Kommutators zweier normalgeordneter Operatoren entstehen, nach unten abschätzen.
Hier sei auf Operatoren gerader Länge (s.oben) spezialisiert. Die Operatoren seien direkt in ihrer normalgeordneten Form mit den entsprechenden Quasiteilchenoperatoren $b^\dagger$, b angegeben

$$\underbrace{\overbrace{b^\dagger \ldots b^\dagger}^{j+i} \overbrace{b \ \ldots b}^{j-i}}_{2j} \tag{A.29}$$

[1] Dies versteht man folgendermaßen: die zu pairenden Operatoren dürfen nicht aneinander vorbeigezogen werden. Daher braucht man einen Vorzeichenwechsel, der dies rückgängig macht.
[2] Für fermionenzahlerhaltende Operatoren ist dies die Standardsituation

Die Länge sei also $2j$ und die Quasiteilchenänderung $2i$. Kommutiert man dieses Produkt nun mit einem anderen der Länge $2j'$ und der Quasiteilchenänderung $2i'$, so ergibt sich

$$
\begin{aligned}
&[\overbrace{a^\dagger \dots a^\dagger}^{j'+i'} \underbrace{a \ \dots a}_{j'-i'}, \overbrace{b^\dagger \dots b^\dagger}^{j+i} \underbrace{b \ \dots b}_{j-i}] \\
= \quad & \ \ a^\dagger \dots a^\dagger a \ \dots a \ b^\dagger \dots b^\dagger b \ \dots b \\
& - b^\dagger \dots b^\dagger b \ \dots b \ a^\dagger \dots a^\dagger a \ \dots a \\
= \quad & \ \ a^\dagger \dots a^\dagger [b^\dagger \dots b^\dagger, a \ \dots a \ ] b \ \dots b \\
& - b^\dagger \dots b^\dagger [a^\dagger \dots a^\dagger, b \ \dots b \ ] a \ \dots a \\
& - a^\dagger \dots a^\dagger \ b^\dagger \dots b^\dagger \ a \ \dots a \ \ b \ \dots b \quad (*) \\
& + a^\dagger \dots a^\dagger \ b^\dagger \dots b^\dagger \ a \ \dots a \ \ b \ \dots b \quad (**) \ .
\end{aligned}
\tag{A.30}
$$

Innerhalb der Erzeuger bzw. Vernichter darf nach Belieben unter Vorzeichenwechsel vertauscht werden, weshalb $(*)$ und $(**)$ sich aufheben[3].
Es sind noch die Kommutatoren in den anderen Summanden zu untersuchen. Hier können Vertauschungen auch Kronecker-δ's ergeben. Damit ist

$$
\begin{aligned}
[\underbrace{b^\dagger \dots b^\dagger}_{j'+i'}, \overbrace{a \ \dots a}^{j-i} \ ] &= \underbrace{c^\dagger \dots c^\dagger}_{\max\{j-i-(j'+i'),0\}} \quad \overbrace{c \ \dots c}^{\max\{j'+i'-(j-i),0\}} \quad + \textit{höhere Terme} \\
[\underbrace{a^\dagger \dots a^\dagger}_{j+i}, \overbrace{b \ \dots b}^{j'-i'} \ ] &= \underbrace{d^\dagger \dots d^\dagger}_{\max\{j+i-(j'-i'),0\}} \quad \overbrace{d \ \dots d}^{\max\{j'-i'-(j+i),0\}} \quad + \textit{höhere Terme} \ .
\end{aligned}
\tag{A.31}
$$

Insgesamt hat damit der kürzest mögliche Operator die Länge

$$
2j'' = \min \left\{ \begin{array}{l} j+i+j'-i'+|\,j-i-(j'+i')|, \\ j'+i'+j-i+|\,j'-i'-(j+i)| \end{array} \right\}
\tag{A.32}
$$

[3]Dies folgt auch schon aus dem entsprechenden Kommutatorvorfaktor.

B. Ausführliche Herleitung der Flussgleichungen in strukturerhaltender Näherung

Die Herleitung der Flussgleichungen 3.14, 3.15 und 3.16 kann als Fingerübung in der Berechnung normalgeordneter Operatoren und der Nutzung der Symmetrien des Systems verstanden werden.
Zu berechnen ist die Normalordnung von

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dl}H \quad &= \\
&\frac{1}{N^2}\sum_{kqQk'q'Q'} \Gamma_{kqQ} S_{k'q'Q'} \Gamma_{k'q'Q'} \\
&\qquad \left[: c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c_{k-Q} c_{k+Q} :, : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \right] \qquad \text{(B.1)} \\
&+\frac{1}{N}\sum_{kk'q'Q'} \varepsilon_k S_{k'q'Q'} \Gamma_{k'q'Q'} \\
&\qquad \left[: c^\dagger_k c_k :, : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \right] \quad . \qquad \text{(B.2)}
\end{aligned}$$

mit den in Kapitel 3 definierten Funktionen S_{kqQ} und Γ_{kqQ}.
Aufgrund der Aussagen über die Länge der entstehenden Operatoren (s. Gleichung A.32) lässt sich sofort folgern, dass

- aus Gleichung B.1 0-, 1-, 2- und 3-Quasiteilchenwechselwirkungen entstehen und
- aus Gleichung B.2 nur 2-Quasiteilchenwechselwirkungen.

B.1. 3-Teilchen-Wechselwirkungsanteil

Der Fluss der 3-Teilchen-Wechselwirkung wird wegen der Vielzahl der neuen Variablen vernachlässigt. Er ist aber verhältnismäßig leicht zu berechnen und werde daher als Beispiel in voller Länge abgeleitet.
Zum Fluss der 3-Quasiteilchenwechselwirkung trägt nur Gleichung B.2 bei. Es sind 2 Operatoren zu pairen. Dies kann auf 8 verschiedene Weisen geschehen. Nach den Überlegungen

zum Kommutatorvorfaktor (s. Gleichung A.28) reicht es aus, nur das Produkt

$$: c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c_{k-Q} c_{k+Q} :: c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \tag{B.3}$$

zu betrachten. Der Kommutatorvorfaktor ist

$$\underbrace{c^\dagger_k c_K} - (-1)^1 \underbrace{c_K c^\dagger_k} = \delta_{k,K} \quad . \tag{B.4}$$

Damit ist

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N^2} \sum_{kqQk'q'Q'} S_{k'q'Q'} \Gamma_{kqQ} \Gamma_{k'q'Q'} \times \\
&\{ \\
&-\delta_{k+q,k'-Q'} : c^\dagger_{k-q} c_{k-Q} c_{k+Q} c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'+Q'} : \\
&+\delta_{k+q,k'+Q'} : c^\dagger_{k-q} c_{k-Q} c_{k+Q} c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'-Q'} : \\
&+\delta_{k-q,k'-Q'} : c^\dagger_{k+q} c_{k-Q} c_{k+Q} c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'+Q'} : \\
&-\delta_{k-q,k'+Q'} : c^\dagger_{k+q} c_{k-Q} c_{k+Q} c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'-Q'} : \\
&-\delta_{k-Q,k'+q'} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c_{k+Q} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \\
&+\delta_{k-Q,k'-q'} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c_{k+Q} c^\dagger_{k'+q'} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \\
&+\delta_{k+Q,k'+q'} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c_{k-Q} c^\dagger_{k'-q'} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \\
&-\delta_{k+Q,k'-q'} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c_{k-Q} c^\dagger_{k'+q'} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \\
&\}
\end{aligned} \tag{B.5}$$

auszuwerten. Innerhalb der Normalordnung darf unter Vorzeichenwechsel kommutiert werden. Damit erhält man folgende Gestalt

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N^2} \sum_{kqQk'q'Q'} S_{k'q'Q'} \Gamma_{kqQ} \Gamma_{k'q'Q'} \times \\
&\{ \\
&-\delta_{k+q,k'-Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k-q} c_{k'+Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \\
&+\delta_{k+q,k'+Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k-q} c_{k'-Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \\
&+\delta_{k-q,k'-Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k+q} c_{k'+Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \\
&-\delta_{k-q,k'+Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k+q} c_{k'-Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \\
&+\delta_{k-Q,k'+q'} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c^\dagger_{k'-q'} c_{k+Q} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \\
&-\delta_{k-Q,k'-q'} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c^\dagger_{k'+q'} c_{k+Q} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \\
&-\delta_{k+Q,k'+q'} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c^\dagger_{k'-q'} c_{k-Q} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \\
&+\delta_{k+Q,k'-q'} : c^\dagger_{k+q} c^\dagger_{k-q} c^\dagger_{k'+q'} c_{k-Q} c_{k'-Q'} c_{k'+Q'} : \\
&\} \; .
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Da über alle Impulse summiert wird, kann man in den letzten vier Termen auch einen Bezeichnungswechsel $\{k, q, Q\} \leftrightarrow \{k', q', Q'\}$ vornehmen und erhält

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N^2} \sum_{kqQk'q'Q'} \left(S_{k'q'Q'} - S_{kqQ}\right) \Gamma_{kqQ}\Gamma_{k'q'Q'} \times \\
&\{ \\
&-\delta_{k+q,k'-Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k-q} c_{k'+Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \quad \text{(i)} \\
&+\delta_{k+q,k'+Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k-q} c_{k'-Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \quad \text{(ii)} \\
&+\delta_{k-q,k'-Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k+q} c_{k'+Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \quad \text{(iii)} \\
&-\delta_{k-q,k'+Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k+q} c_{k'-Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \quad \text{(iv)} \\
&\} \ .
\end{aligned} \tag{B.7}$$

Die Anteile des Vorfaktors $(S' - S)\Gamma\Gamma'$ haben folgende Symmetrien

$$\Gamma_{kqQ} = -\Gamma_{k-qQ} \qquad S_{kqQ} = S_{k-qQ} \tag{B.8}$$
$$\Gamma_{kqQ} = -\Gamma_{kq-Q} \qquad S_{kqQ} = S_{kq-Q} \ . \tag{B.9}$$

Damit lässt sich (ii) unter der Umbenennung $Q \leftrightarrow Q'$ in (i) überführen. Auf ähnliche Weise geht dies auch für (iii) und (iv). Schließlich hat man

$$\begin{aligned}
& -\frac{4}{N^2} \sum_{kqQk'q'Q'} \left(S_{k'q'Q'} - S_{kqQ}\right) \Gamma_{kqQ}\Gamma_{k'q'Q'} \times \\
&\qquad \delta_{k+q,k'-Q'} : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k-q} c_{k'+Q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \\
= & -\frac{4}{N^2} \sum_{k'qQq'Q'} \left(S_{k'q'Q'} - S_{k'-q-Q'qQ}\right) \Gamma_{k'-q-Q'qQ}\Gamma_{k'q'Q'} \times \\
&\qquad : c^\dagger_{k'+q'} c^\dagger_{k'-q'} c^\dagger_{k'-2q-Q'} c_{k'+Q'} c_{k'-q-Q-Q'} c_{k'-q+Q-Q'} : \ .
\end{aligned} \tag{B.10}$$

Wäre also die 3-Quasiteilchenwechselwirkung im Hamiltonoperator standardmäßig durch

$$A_{kqQq'Q'} : c^\dagger_{k+q'} c^\dagger_{k-q'} c^\dagger_{k-2q-Q'} c_{k+Q'} c_{k-q-Q-Q'} c_{k-q+Q-Q'} : \tag{B.11}$$

parametrisiert, so ergäbe der Koeffizientenvergleich den Fluss von $A_{kqQq'Q'}$ als

$$\frac{d}{dl} A_{kqQq'Q'} = -\frac{4}{N^2} \left(S_{kq'Q'} - S_{k-q-Q'qQ}\right) \Gamma_{k-q-Q'qQ}\Gamma_{kq'Q'} \ . \tag{B.12}$$

Zu beachten ist aber, dass dieser Ausdruck nicht antisymmetrisch gegenüber Vorzeichenwechseln in q,Q,q' oder Q' ist (vgl. Notationssymmetrie auf Kapitel 3). In diesem Sinne ist die Parametrisierung nicht optimal.

B.2. 2-Teilchen-Wechselwirkungsanteil

Zur Bestimmung des Flusses von Γ_{kqQ} sind Anteile aus B.1 und B.2 heranzuziehen.

Anteil aus Gleichung B.2 In Gleichung B.2 muss nur ein Pairing gebildet werden. Dies kann auf vier Arten geschehen. Der zusätzliche Vorfaktor aus dem Kommutator ist wieder ein Kronecker-δ. Die Sortierung und Benennung in Standardreihenfolge ergibt direkt

$$\frac{d}{dl}\Gamma_{kqQ}\Big|_{B.2} = S_{kqQ}\Gamma_{kqQ}\left(\varepsilon_{k-Q} + \varepsilon_{k+Q} - \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_{k-q}\right) \quad . \tag{B.13}$$

Anteil aus Gleichung B.1 In Gleichung B.1 müssen zwei Pairings gebildet werden. Dies kann auf 20 verschiedene Arten geschehen. Dabei gibt es drei Gruppen, die durch den Kommutator unterschiedliche zusätzliche Vorfaktoren erhalten.

1. 2 Anteile haben einen Faktor gemäß

$$\begin{aligned}
&c^\dagger_k c_K c^\dagger_{k'} c_{K'} - c_K c^\dagger_k c_{K'} c^\dagger_{k'} = \\
&c^\dagger_k c_K c^\dagger_{k'} c_{K'} - (\delta_{k,K} - c^\dagger_k c_K)(\delta_{k',K'} - c^\dagger_{k'} c_{K'}) = \\
&-\delta_{k,K}\delta_{k',K'} + \delta_{k,K} c^\dagger_{k'} c_{K'} + \delta_{k',K'} c^\dagger_k c_K = \\
&\delta_{k,K}\delta_{k',K'}(n_k + n_{k'} - 1)
\end{aligned} \tag{B.14}$$

2. 2 Anteile haben einen Faktor gemäß

$$\begin{aligned}
&c_K c^\dagger_k c_{K'} c^\dagger_{k'} - c^\dagger_k c_K c^\dagger_{k'} c_{K'} = \\
&-\delta_{k,K}\delta_{k',K'}(n_k + n_{k'} - 1)
\end{aligned} \tag{B.15}$$

3. 16 Anteile haben einen Faktor gemäß

$$\begin{aligned}
&c^\dagger_k c_K c_{K'} c^\dagger_{k'} - c_K c^\dagger_k c^\dagger_{k'} c_{K'} = \\
&c^\dagger_k c_K (\delta_{k',K'} - c^\dagger_{k'} c_{K'}) - (\delta_{k,K} - c^\dagger_k c_K) c^\dagger_{k'} c_{K'} = \\
&c^\dagger_k c_K \delta_{k',K'} - \delta_{k,K} c^\dagger_{k'} c_{K'} = \\
&-c^\dagger_k c_k c_{k'} c^\dagger_{k'} - c_k c^\dagger_k c^\dagger_{k'} c_{k'} = \\
&\delta_{k,K}\delta_{k',K'}(n_k - n_{k'}) \quad .
\end{aligned} \tag{B.16}$$

Die Anteile, vor denen die Vorfaktoren aus Gleichung B.15 stehen, lassen sich durch vorzeicheninvariantes Vertauschen in den Normalordnungen und Umbenennung

$\{k, q, Q\} \leftrightarrow \{k', q', Q'\}$ direkt in diesselbe Form wie die Anteile mit den Vorfaktoren aus Gleichung B.14 überführen.
Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^2} \sum_{kqQk'q'Q'} & \Gamma_{kqQ}\Gamma_{k'q'Q'} \left(S_{kqQ} - S_{k'q'Q'}\right) \times \\ & (1 - n_{k+q} - n_{k-q}) : c^{\dagger}_{k'+q'} c^{\dagger}_{k'-q'} c_{k-Q} c_{k+Q} : \times \\ & \{ \\ & -\delta_{k+q,K'-Q'}\delta_{k-q,K'+Q'} \\ & +\delta_{k+q,K'+Q'}\delta_{k-q,K'-Q'} \\ & \} \ . \end{aligned} \tag{B.17}$$

Im zweiten Produkt der δ's benenne man um $\{q', Q'\} \leftrightarrow \{-q', -Q'\}$. Dann ist dieser Anteil gleich dem ersten, da dass Vorzeichen wegen der Vertauschung im normalgeordneten Operator umgekehrt wird. Durch $\{q, Q\} \leftrightarrow \{-q, -Q\}$ lässt sich wiederum der Faktor $(1 - n_{k+q} - n_{k-q})$ auf $(1 - 2n_{k+q})$ reduzieren. Nun sind die beiden δ's auszuwerten

$$\begin{aligned} \delta_{k+q,k'-Q'} \leftrightarrow k + q = k' - Q' & \qquad \delta_{k-q,k'+Q'} \leftrightarrow k - q = k' + Q' \\ & \Rightarrow \\ q = -Q' & \qquad k = k' \ . \end{aligned} \tag{B.18}$$

Die Ergebnisse aus Gleichung B.18 sind in Gleichung B.17 einzusetzen und ein Koeffizientenvergleich ergibt

$$\left.\frac{d}{dl}\Gamma_{kqQ}\right|_{\text{B.1, B.14 \& B.15}} = -\frac{1}{N}\sum_{p} 2\left(1 - 2n_{k-p}\right)\Gamma_{kpQ}\Gamma_{kqp}\left(S_{kpQ} - S_{kqp}\right) \ . \tag{B.19}$$

Oder auch, mit $p \leftrightarrow k - p$ und der Hermitezität $\Gamma_{kqQ} = \Gamma_{kQq}$ bzw. Antihermitezität $\eta_{kqQ} = -\eta_{kQq}$, wie im Gleichung 3.16 angegeben

$$\left.\frac{d}{dl}\Gamma_{kqQ}\right|_{\text{B.1, B.14 \& B.15}} = \frac{1}{N}\sum_{p} 2\left(1 - 2n_{p}\right)\Gamma_{kqp-k}\Gamma_{kp-kQ}\left(S_{kqp-k} - S_{kp-kQ}\right) \ . \tag{B.20}$$

Wichtig ist, dass alle Symmetrien (insbesondere die Notationssymmetrie), die Γ hat, auch hier wieder vorhanden sind.

Nun ist zu untersuchen, was sich aus den 16 Anteilen gemäß Gleichung B.16 ergibt.

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{N^2} \sum_{kqQk'q'Q'} & \Gamma_{kqQ}\Gamma_{k'q'Q'}S_{k'q'Q'} \times \\
& \{ \\
& -\delta_{k+q,k'-Q'}\delta_{k-Q,k'+q'}\left(n_{k+q}-n_{k-Q}\right) : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'-q'}c_{k+Q}c_{k'+Q'} : \quad (A) \\
& -\delta_{k+q,k'+Q'}\delta_{k+Q,k'+q'}\left(n_{k+q}-n_{k+Q}\right) : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'-q'}c_{k-Q}c_{k'-Q'} : \quad (B) \\
& -\delta_{k-q,k'-Q'}\delta_{k-Q,k'-q'}\left(n_{k-q}-n_{k-Q}\right) : c^\dagger_{k+q}c^\dagger_{k'+q'}c_{k+Q}c_{k'+Q'} : \quad (C) \\
& -\delta_{k-q,k'+Q'}\delta_{k+Q,k'-q'}\left(n_{k-q}-n_{k+Q}\right) : c^\dagger_{k+q}c^\dagger_{k'+q'}c_{k-Q}c_{k'-Q'} : \quad (D) \\
& +\delta_{k+q,k'-Q'}\delta_{k-Q,k'-q'}\left(n_{k+q}-n_{k-Q}\right) : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'+q'}c_{k+Q}c_{k'+Q'} : \quad (a1) \\
& -\left((a1)\ \text{mit}\ \{kqQ\}\leftrightarrow\{k'q'Q'\}\right) \quad (a2) \\
& +\delta_{k+q,k'-Q'}\delta_{k+Q,k'+q'}\left(n_{k+q}-n_{k+Q}\right) : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'-q'}c_{k-Q}c_{k'+Q'} : \quad (b1) \\
& -\left((b1)\ \text{mit}\ \{kqQ\}\leftrightarrow\{k'q'Q'\}\right) \quad (b2) \\
& -\delta_{k+q,k'-Q'}\delta_{k+Q,k'-q'}\left(n_{k+q}-n_{k+Q}\right) : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'+q'}c_{k-Q}c_{k'+Q'} : \quad (c1) \\
& +\left((c1)\ \text{mit}\ \{kqQ\}\leftrightarrow\{k'q'Q'\}\right) \quad (c2) \\
& -\delta_{k+q,k'+Q'}\delta_{k-Q,k'-q'}\left(n_{k+q}-n_{k-Q}\right) : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'+q'}c_{k+Q}c_{k'-Q'} : \quad (d1) \\
& +\left((d1)\ \text{mit}\ \{kqQ\}\leftrightarrow\{k'q'Q'\}\right) \quad (d2) \\
& +\delta_{k+q,k'+Q'}\delta_{k+Q,k'-q'}\left(n_{k+q}-n_{k+Q}\right) : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'+q'}c_{k-Q}c_{k'-Q'} : \quad (e1) \\
& -\left((e1)\ \text{mit}\ \{kqQ\}\leftrightarrow\{k'q'Q'\}\right) \quad (e2) \\
& +\delta_{k-q,k'-Q'}\delta_{k+Q,k'-q'}\left(n_{k-q}-n_{k+Q}\right) : c^\dagger_{k+q}c^\dagger_{k'+q'}c_{k-Q}c_{k'+Q'} : \quad (f1) \\
& -\left((f1)\ \text{mit}\ \{kqQ\}\leftrightarrow\{k'q'Q'\}\right) \quad (f2) \\
& \} \ . \qquad \text{(B.21)}
\end{aligned}
$$

(A)-(D) lassen sich per $q \leftrightarrow -q$, $Q \leftrightarrow -Q$, $q' \leftrightarrow -q'$ und $Q' \leftrightarrow -Q'$ schnell aufeinander zurückführen. Wie sich (a2)-(f2) in (a1)-(f1) transformieren lassen, ist bereits angedeutet. Mit $q \leftrightarrow -q$, $Q \leftrightarrow -Q$, $q' \leftrightarrow -q'$ und $Q' \leftrightarrow -Q'$ lassen sich (b)-(f) ebenfalls in (a) überführen. Wertet man nun die Kronecker-δ's aus und benennt in (a) q' in $-q'$, so bleibt nur ein Term übrig

$$
\begin{aligned}
-\frac{16}{N^2} \sum_{kqQk'q'Q'} & \Gamma_{kqQ}\Gamma_{k'q'Q'}S_{k'q'Q'} \times \\
& \delta_{k+q,k'-Q'}\delta_{k-Q,k'+q'}\left(n_{k+q}-n_{k'+q'}\right) : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'-q'}c_{k+Q}c_{k'+Q'} : \ .
\end{aligned}
\qquad \text{(B.22)}
$$

Man sieht direkt, dass man auch

$$
\begin{aligned}
\frac{16}{N^2} \sum_{kqQk'q'Q'} & \Gamma_{kqQ}\Gamma_{k'q'Q'}\left(S_{kqQ}-S_{k'q'Q'}\right) \times \\
& \delta_{k+q,k'-Q'}\delta_{k-Q,k'+q'}n_{k+q} : c^\dagger_{k-q}c^\dagger_{k'-q'}c_{k+Q}c_{k'+Q'} :
\end{aligned}
\qquad \text{(B.23)}
$$

schreiben kann. Mittels der δ's werden k' und q' eliminiert und der anschließende Koeffizientenvergleich führt auf

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dl}\Gamma_{kqQ}\Big|_{B.1,B.16} = \\
&\frac{16}{N}\sum_p n_p \times \\
&\Gamma_{\frac{k+q+p}{2},\frac{k+q-p}{2},\frac{k-q-p}{2}-Q}\Gamma_{\frac{k+Q+p}{2},\frac{k-Q-p}{2}-q,\frac{k+Q-p}{2}} \times \\
&\left(S_{\frac{k+q+p}{2},\frac{k+q-p}{2},\frac{k-q-p}{2}-Q} - S_{\frac{k+Q+p}{2},\frac{k-Q-p}{2}-q,\frac{k+Q-p}{2}}\right) \quad . \qquad \text{(B.24)}
\end{aligned}$$

Dieser Beitrag ist jedoch problematisch, da er die Notationssymmetrie nicht erhält. Da es sich um keine physikalische Symmetrie handelt, ist dies nicht weiter verwunderlich. Soll das Ergebnis jedoch auch weiterhin im Fluss in dieser Form ableitbar sein, so müssen die Symmetrien nachträglich wieder erzeugt werden.

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dl}\Gamma_{kqQ}\Big|_{B.1,B.16} = \\
&\frac{4}{N}\sum_p n_p \times \\
&\{ \\
&\quad +\Gamma_{\frac{k+q+p}{2},\frac{k+q-p}{2},\frac{k-q-p}{2}-Q}\Gamma_{\frac{k+Q+p}{2},\frac{k-Q-p}{2}-q,\frac{k+Q-p}{2}} \times \\
&\quad\quad \left(S_{\frac{k+q+p}{2},\frac{k+q-p}{2},\frac{k-q-p}{2}-Q} - S_{\frac{k+Q+p}{2},\frac{k-Q-p}{2}-q,\frac{k+Q-p}{2}}\right) \\
&\quad -(q \leftrightarrow -q) \\
&\quad -(Q \leftrightarrow -Q) \\
&\quad +(q, Q \leftrightarrow -q, -Q) \quad . \qquad \text{(B.25)}
\end{aligned}$$

Mit den Gleichungen B.13, B.20 und B.25 ist der Fluss der 2-Teilchenwechselwirkung komplett.

B.3. Dispersionsanteil

Für die Dispersion müssen in Gleichung B.1 drei Pairings gebildet werden. Dabei sind 16 Kombinationen möglich. Der Kommutatorvorfaktor nach Gleichung A.28 ist

$$\begin{aligned}
&\underbrace{c^\dagger_{k_1} c_{K_1}}\, \underbrace{c^\dagger_{k_2} c_{K_2}}\, \underbrace{c_{K_3} c^\dagger_{k_3}} + \underbrace{c_{K_1} c^\dagger_{k_1}}\, \underbrace{c_{K_2} c^\dagger_{k_2}}\, \underbrace{c^\dagger_{k_3} c_{K_3}} = \\
&\delta_{k_1,K_1}\delta_{k_2,K_2}\delta_{k_3,K_3}\left(n_{k_1}n_{k_2} + n_{k_3}\left(1 - n_{k_1} - n_{k_2}\right)\right) \quad . \qquad \text{(B.26)}
\end{aligned}$$

Alle Anteile lassen sich mit den Operationen $q \leftrightarrow -q$, $Q \leftrightarrow -Q$, $q' \leftrightarrow -q'$ und $Q \leftrightarrow -Q'$, sowie $\{q, Q\} \leftrightarrow \{Q, q\}$ und $\{q', Q'\} \leftrightarrow \{Q', q'\}$ ineinander überführen. Damit bleibt nur ein

Anteil auszuwerten

$$\frac{16}{N^2}\sum_{kqQk'q'Q'} \Gamma_{kqQ}\Gamma_{k'q'Q'}S_{k'q'Q'} \times$$
$$\delta_{k+q,k'-Q'}\delta_{k-q,k'+Q'}\delta_{k-Q,k'+q'} \times$$
$$\left(n_{k+q}n_{k-q} + n_{k-Q}\left(1 - n_{k+q} - n_{k-q}\right)\right) : c^\dagger_{k'-q'}c_{k+Q} : \quad . \tag{B.27}$$

Man eliminiere $k' = k$ und $Q' = -q$ und $q' = -Q$. Dann ergibt der Koeffizientenvergleich den Fluss von ε_k

$$\frac{d}{dl}\varepsilon_k = \frac{16}{N^2}\sum_{qQ} S_{k-qqQ}{\Gamma_{k-qqQ}}^2 \times$$
$$\left(n_{k-q+Q}n_{k-q-Q} + n_{k-2q}\left(1 - 2n_{k-q+Q}\right)\right) \quad . \tag{B.28}$$

Hierbei ist darauf zu achten, dass einer der Impulse q und Q auf $[0,\pi)$ eingeschränkt werden muss. Ansonsten würde man z.B. mit $\{q, Q\} \leftrightarrow \{q+\pi, Q+\pi\}$ doppelt zählen. Anstelle dieser Einschränkung kann auch ein Faktor $\frac{1}{2}$ hinzugegeben werden.

$$\frac{d}{dl}\varepsilon_k = \frac{8}{N^2}\sum_{qQ} S_{k-qqQ}{\Gamma_{k-qqQ}}^2 \times$$
$$\left(n_{k-q+Q}n_{k-q-Q} + n_{k-2q}\left(1 - 2n_{k-q+Q}\right)\right) \quad . \tag{B.29}$$

B.4. Grundzustandsenergieanteil

Der Grundzustandsenergiefluss wird nur von Gleichung B.1 bestimmt. Es sind alle Operatoren zu pairen, also sind vier Pairings nötig. Dies ist auf vier verschiedene Arten möglich. Die zusätzlichen Kommutatorfaktoren nach Gleichung A.28 haben alle dieselbe Gestalt und zwar

$$\underbrace{c^\dagger_{k_1}c_{\kappa_1}}\underbrace{c^\dagger_{k_2}c_{\kappa_2}}\underbrace{c_{\kappa_3}c^\dagger_{k_3}}\underbrace{c_{\kappa_4}c^\dagger_{k_4}} - \underbrace{c_{\kappa_1}c^\dagger_{k_1}}\underbrace{c_{\kappa_2}c^\dagger_{k_2}}\underbrace{c^\dagger_{k_3}c_{\kappa_3}}\underbrace{c^\dagger_{k_4}c_{\kappa_4}} =$$

$$\delta_{k_1,\kappa_1}\delta_{k_2,\kappa_2}\delta_{k_3,\kappa_3}\delta_{k_4,\kappa_4} \times$$
$$\left(n_{k_1}n_{k_2}\left(1 - n_{k_3} - n_{k_4}\right) - n_{k_3}n_{k_4}\left(1 - n_{k_1} - n_{k_2}\right)\right) \quad . \tag{B.30}$$

Die verschiedenen Anteile lassen sich ohne Weiteres ineinander transformieren und vereinfachen, wodurch nur

$$\Gamma_{kqQ}\Gamma_{k'q'Q'}S_{k'q'Q'} \times$$
$$\delta_{k+q,k'+Q'}\delta_{k-q,k'-Q'}\delta_{k-Q,k'-q'}\delta_{k+Q,k'+q'} \times$$
$$\left(n_{k+q}n_{k-q}\left(1 - n_{k-Q} - n_{k+Q}\right)\right) \tag{B.31}$$

auszuwerten ist. Die Kronecker δ's führen dazu, dass $k = k'$, $q = q'$ und $Q = Q'$ gilt. Damit ergibt sich der Fluss der Grundzustandsenergie als

$$\frac{d}{dl}E = \frac{8}{N^2}\sum_{kqQ} S_{kqQ}{\Gamma_{kqQ}}^2\left(n_{k+q}n_{k-q}\left(1 - 2n_{k+Q}\right)\right) \quad . \tag{B.32}$$

Mit den Gleichungen B.13, B.20, B.25, B.29 und B.32 sind die Flussgleichungen in der strukturerhaltenden Näherung komplett.

C. Allgemeine Flussgleichung normalgeordneter Fermionenzahl-erhaltender Hamiltonoperatoren

Das vorangegangene Kapitel hat deutlich gemacht, wie mühsam eine Auswertung des Flussgleichungskommutators und der entsprechende Koeffizientenvergleich “zu Fuß” ist. Andererseits war zu erkennen, dass im Wesentlichen die Hermitezität von $\mathcal{H}$ bzw. die Antihermitezität von η und die Wahl der Parametrisierung, die die Antisymmetrien der Normalordnung auf die Koeffizienten überträgt, ein Zusammenfassen der Terme ermöglichte.

Dies ist kein Zufall. Tatsächlich kann man bei entsprechender Antisymmetrisierung der Koeffizienten ganz allgemein eine Formel für einen Koeffizientenvergleich aus der Normalordnung von $[\eta, \mathcal{H}]$ angeben, wenn η und $\mathcal{H}$ die Fermionenzahl erhalten. Seien

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_n \sum_{\substack{k_1 \dots k_n \\ k'_1 \dots k'_n}} \mathcal{H}^{k_1 \dots k_n}_{k'_1 \dots k'_n} : c^\dagger_{k_1} \dots c^\dagger_{k_n} c_{k'_n} \dots c_{k'_1} : \\ \eta &= \sum_n \sum_{\substack{k_1 \dots k_n \\ k'_1 \dots k'_n}} \eta^{k_1 \dots k_n}_{k'_1 \dots k'_n} : c^\dagger_{k_1} \dots c^\dagger_{k_n} c_{k'_n} \dots c_{k'_1} : \end{aligned} \tag{C.1}$$

Hermitezität bzw. Antihermitezität drücken sich wie folgt aus

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{k_1 \dots k_n}_{k'_1 \dots k'_n} &= \mathcal{H}^{k'_1 \dots k'_n}_{k_1 \dots k_n} \\ \eta^{k_1 \dots k_n}_{k'_1 \dots k'_n} &= -\eta^{k'_1 \dots k'_n}_{k_1 \dots k_n} \end{aligned} \tag{C.2}$$

Die Antisymmetrisierung der Koeffizienten bezieht sich nur auf Redundanzen in der Notation, die sich durch die Möglichkeit zur Vertauschung unter Vorzeichenwechsel zweier Operatoren in einem normalgeordneten Produkt ergeben (Notationssymmetrie). Die Notationssymmetrie muss im Allgemeinen mit den Permutationen σ und σ' künstlich eingeführt werden

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}^{k_1 \dots k_n}_{k'_1 \dots k'_n} &= \frac{1}{n!^2} \sum_{\sigma\sigma'} \operatorname{sign}\sigma \operatorname{sign}\sigma' \, \mathcal{H}^{\sigma_{k_1} \dots \sigma_{k_n}}_{\sigma'_{k'_1} \dots \sigma'_{k'_n}} \\ \tilde{\eta}^{k_1 \dots k_n}_{k'_1 \dots k'_n} &= \frac{1}{n!^2} \sum_{\sigma\sigma'} \operatorname{sign}\sigma \operatorname{sign}\sigma' \, \eta^{\sigma_{k_1} \dots \sigma_{k_n}}_{\sigma'_{k'_1} \dots \sigma'_{k'_n}} \end{aligned} \tag{C.3}$$

Ist die Notationssymmetrie eingeführt, so gilt für alle i und j

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{k_1\ldots k_i k_{i+1}\ldots k_n}_{k'_1\ldots k'_j k'_{j+1}\ldots k'_n} &= -\mathcal{H}^{k_1\ldots k_{i+1} k_i\ldots k_n}_{k'_1\ldots k'_j k'_{j+1}\ldots k'_n} &= -\mathcal{H}^{k_1\ldots k_i k_{i+1}\ldots k_n}_{k'_1\ldots k'_{j+1} k'_j\ldots k'_n} \\ \eta^{k_1\ldots k_i k_{i+1}\ldots k_n}_{k'_1\ldots k'_j k'_{j+1}\ldots k'_n} &= -\eta^{k_1\ldots k_{i+1} k_i\ldots k_n}_{k'_1\ldots k'_j k'_{j+1}\ldots k'_n} &= -\eta^{k_1\ldots k_i k_{i+1}\ldots k_n}_{k'_1\ldots k'_{j+1} k'_j\ldots k'_n} \end{aligned} \tag{C.4}$$

Diese Darstellungsweise hat mehrere Vorteile.

- Die Anzahl unterschiedlicher Koeffizienten wird für jede Länge n der Operatoren um den Faktor $n!^2$ gegenüber nicht-antisymmetrisierten Darstellung verringert.
- Hat der Operator keine Wirkung, weil Fermionen doppelt erzeugt $c^\dagger_k c^\dagger_k$ (oder vernichtet) werden, so ist auch der dazugehörige Koeffizienten wegen der gleichen Indizes k 0.
- Ein gleichzeitiges Umsortieren von Operatoren im normalgeordneten Produkt ($\rightarrow$ Vorzeichenwechsel) und den dazugehörigen Indizes im entsprechenden Koeffizienten ($\rightarrow$ Vorzeichenwechsel) bleibt insgesamt wirkungslos bezüglich auf das Vorzeichen.

Der letzte Punkt ist der Grund dafür, warum sich *strukturell* gleiche Pairingarten durch Umbennenung der Impuls alle aufeinander zurückführen lassen. Eine *Struktur* ist dabei das Abpairen von N Erzeugern $c^\dagger$ und M Vernichtern c von η mit M Vernichtern c und N Erzeugern $c^\dagger$ in $\mathcal{H}$. N und M sind beide kleiner als die Ordnung der Anteile von η bzw. $\mathcal{H}$. Es gibt jeweils

$$G(n,m,N,M) = \frac{n!}{(n-N)!}\binom{m}{M} \times \frac{n!}{(n-M)!}\binom{m}{N} \tag{C.5}$$

Terme ein und derselben Struktur. Man beachte, dass G symmetrisch gegen Vertauschungen von n und m bzw. N und M ist. Der verbleibende Operator hat die Länge $n+m-(N+M)$. Er sei repräsentiert durch

$$\begin{aligned} &(-1)^{n(N+M)+NM+M}\ G(n,m,N,M)\ F^{Q_1\ldots Q_N}_{Q'_1\ldots Q'_M} \\ &\eta^{Q_1\ldots Q_N k_{N+1}\ldots k_n}_{Q'_1\ldots Q'_M k'_{M+1}\ldots k'_n}\quad \mathcal{H}^{Q'_1\ldots Q'_M K_{M+1}\ldots K_m}_{Q_1\ldots Q_N K'_{N+1}\ldots K'_m} \\ &: c^\dagger_{k_{N+1}}\ldots c^\dagger_{k_n} c^\dagger_{K_{M+1}}\ldots c^\dagger_{K_m} c_{K'_m}\ldots c_{K'_{N+1}} c_{k'_n}\ldots c_{k'_{M+1}} : \ . \end{aligned} \tag{C.6}$$

Dabei ist

$$F^{Q_1\ldots Q_N}_{Q'_1\ldots Q'_M} = \prod_{i=1}^{N} n_{Q_i} \times \prod_{i=1}^{M}(1-n_{Q'_i}) - (-1)^{N+M}\prod_{i=1}^{N}(1-n_{Q_i}) \times \prod_{i=1}^{M} n_{Q'_i} \ . \tag{C.7}$$

der Kommutator-Vorfaktor nach Gleichung A.28. Man beachte

$$F^{Q_1\ldots Q_N}_{Q'_1\ldots Q'_M} = \begin{cases} 1 & \text{wenn alle } |Q_i| > k_F \text{ und } |Q'_j| < k_F \\ (-1)^{N+M+1} & \text{wenn alle } |Q_i| < k_F \text{ und } |Q'_j| > k_F \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \ . \tag{C.8}$$

Für den Kommutator-Vorfaktor gilt so

$$F^{Q_1\dots Q_N}_{Q'_1\dots Q'_M} = (-1)^{N+M+1} F^{Q'_1\dots Q'_M}_{Q_1\dots Q_N} \quad . \tag{C.9}$$

Das globale Vorzeichen in Gleichung C.6 ergibt sich aus den Pairings $(+)$ und den anschließenden Vertauschungen innerhalb der Normalordnung $((-1)^{(n-M)(m-M)+(n-M)(m-N)})$.
Es lässt sich noch weiter zusammenfassen. Bei der Summation über alle Impulse und alle N und M tritt ein korrespondierender Term auf. Korrespondierend soll bedeuten, dass weiterhin η von der Ordnung n und $\mathcal{H}$ von der Ordnung m ist, dass aber M Erzeuger von η mit M Vernichtern von $\mathcal{H}$ gepairt werden und N Vernichter von η mit N Erzeugern von $\mathcal{H}$.
Nun benennt man alle k um in die entsprechenden k', alle K in K' und alle Q in Q'. Der übriggebliebene Operator

$$: c^\dagger_{k'_{M+1}} \dots c^\dagger_{k'_n} c^\dagger_{K'_{N+1}} \dots c^\dagger_{K'_m} c_{K_m} \dots c_{K_{M+1}} c_{k_n} \dots c_{k_{N+1}} : \tag{C.10}$$

ist einfach der hermitesche konjugierte Anteil zum vorangegangenen Operator und liefert denselben Beitrag.
Nun nutzt man die Hermitezität der Koeffizienten von $\mathcal{H}$ und die Antihermitezität der Koeffizienten von η ($\rightarrow$ weiteres Vorzeichen (-1)) und dreht F um ($\rightarrow$ Vorzeichen $(-1)^{N+M+1}$).
Damit ist das gesamte Vorzeichen des korrespondierenden Terms

$$(-1)^{N+M}(-1)^{n(N+M)+NM+N} = (-1)^{n(N+M)+NM+M} \tag{C.11}$$

also dasselbe Vorzeichen wie im ursprünglichen Koeffizienten.
Es reicht also M auf $M < N$ zu beschränken und einen weiteren Faktor 2 hinzuzugeben.
Der Anteil $M = N$ bleibt ohne zusätzlichen Vorfaktor bestehen.
Der Kommutator kann insgesamt dargestellt werden als

$$
\begin{aligned}
&[\eta, \mathcal{H}] = \\
&\sum_{nm} \sum_{N=1}^{\min\{n,m\}} \\
&\quad \sum_{\substack{M=2N-1-\min\{2N-1,n,m\} \\ 0<M<N-1}} \quad \sum_{\substack{Q_1 \ldots Q_M \\ Q'_1 \ldots Q'_{2N-1-M}}} \quad \sum_{\substack{k_{M+1} \ldots k_n \\ k'_{2N-M} \ldots k'_n}} \quad \sum_{\substack{K_{2N-M} \ldots K_m \\ K'_{M+1} \ldots K'_m}} \\
&\qquad 2(-1)^{n+M+1} F^{Q_1 \ldots Q_M}_{Q'_1 \ldots Q'_{2N-1-M}} G(n, m, 2N-1-M, M) \\
&\qquad \eta^{Q_1 \ldots Q_M k_{M+1} \ldots k_n}_{Q'_1 \ldots Q'_{2N-1-M} k'_{2N-M} \ldots k'_n} \mathcal{H}^{Q'_1 \ldots Q'_{2N-1-M} K_{2N-M} \ldots K_m}_{Q_1 \ldots Q_M K'_{M+1} \ldots K'_m} \\
&\qquad : c^\dagger_{k_{M+1}} \ldots c^\dagger_{k_n} c^\dagger_{K_{2N-M}} \ldots c^\dagger_{K_m} c_{K'_m} \ldots c_{K'_{M+1}} c_{k'_n} \ldots c_{k'_{2N-M}} : \\
&\qquad + \\
&\quad \sum_{\substack{M=2N-\min\{2N,n,m\} \\ 0<M<N-1}} \quad \sum_{\substack{Q_1 \ldots Q_M \\ Q'_1 \ldots Q'_{2N-1-M}}} \quad \sum_{\substack{k_{M+1} \ldots k_n \\ k'_{2N-M} \ldots k'_n}} \quad \sum_{\substack{K_{2N-M} \ldots K_m \\ K'_{M+1} \ldots K'_m}} \\
&\qquad 2(-1)^{n+M} F^{Q_1 \ldots Q_M}_{Q'_1 \ldots Q'_{2N-M}} G(n, m, 2N-M, M) \\
&\qquad \eta^{Q_1 \ldots Q_M k_{M+1} \ldots k_n}_{Q'_1 \ldots Q'_{2N-M} k'_{2N+1-M} \ldots k'_n} \mathcal{H}^{Q'_1 \ldots Q'_{2N-M} K_{2N+1-M} \ldots K_m}_{Q_1 \ldots Q_M K'_{M+1} \ldots K'_m} \\
&\qquad : c^\dagger_{k_{M+1}} \ldots c^\dagger_{k_n} c^\dagger_{K_{2N+1-M}} \ldots c^\dagger_{K_m} c_{K'_m} \ldots c_{K'_{M+1}} c_{k'_n} \ldots c_{k'_{2N+1-M}} : \\
&\qquad + \qquad (\textit{wenn } N \textit{ gerade}) \\
&\qquad \sum_{\substack{Q_1 \ldots Q_N \\ Q'_1 \ldots Q'_N}} \quad \sum_{\substack{k_{N+1} \ldots k_n \\ k'_{N+1} \ldots k'_n}} \quad \sum_{\substack{K_{N+1} \ldots K_m \\ K'_{N+1} \ldots K'_m}} \\
&\qquad F^{Q_1 \ldots Q_N}_{Q'_1 \ldots Q'_N} G(n, m, N, N) \\
&\qquad \eta^{Q_1 \ldots Q_N k_{N+1} \ldots k_n}_{Q'_1 \ldots Q'_N k'_{N+1} \ldots k'_n} \mathcal{H}^{Q'_1 \ldots Q'_N K_{N+1} \ldots K_m}_{Q_1 \ldots Q_N K'_{N+1} \ldots K'_m} \\
&\qquad : c^\dagger_{k_{N+1}} \ldots c^\dagger_{k_n} c^\dagger_{K_{N+1}} \ldots c^\dagger_{K_m} c_{K'_m} \ldots c_{K'_{N+1}} c_{k'_n} \ldots c_{k'_{N+1}} : \qquad \text{(C.12)}
\end{aligned}
$$

Diese Formel lässt nun einen Koeffizientenvergleich zu. Dabei muss man jedoch Vorsicht walten lassen. Zur Ableitung der Formel war schließlich die Notationssymmetrie der Koeffizienten von η und $\mathcal{H}$ vorausgesetzt. Ihre Existenz ist von der Art des Koeffizientenvergleichs abhängig und muss nicht erhalten bleiben. Man kann sie aber wie für η und $\mathcal{H}$ erzeugen. Allerdings besteht die geforderte Notationssymmetrie schon bezüglich der Impulse, die zu η oder $\mathcal{H}$ gehören. Es müssen also nur noch alle Permutationen *zwischen* den ungepairten Erzeugerimpulsen bzw. Vernichterimpulsen von η und $\mathcal{H}$ berücksichtigt werden.

Sind N Erzeuger und M Vernichter aus einem Produkt eines Operators n-ter mit einem Operator m-ter Ordnung abgepairt, so gibt es

$$\begin{aligned} g(n,m,N,M) \quad = \quad & \left(\sum_{i}^{\min\{n-N,m-M\}} \binom{n-N}{i}\binom{m-M}{i} \right) \times \\ & \left(\sum_{i}^{\min\{n-M,m-N\}} \binom{n-M}{i}\binom{m-N}{i} \right) \end{aligned} \tag{C.13}$$

derartige Vertauschungsmöglichkeiten. Zusammen mit $G(n,m,N,M)$ ergibt sich der Vorfaktor

$$\mathcal{G}(n,m,N,M) = \begin{cases} 2g(n,m,N,M)G(n,m,N,M) & \text{wenn} \quad N < M \wedge N, M < n, m \\ g(n,m,N,M)G(n,m,N,M) & \text{wenn} \qquad\qquad N = M \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{C.14}$$

vor der Summe der eingeschränkten Permutationen.
Der entsprechend eingeschränkte Permutationsoperator sei mit $\sigma^{(k\ldots k|K\ldots K)}_{(k'\ldots k'|K'\ldots K')}$ bezeichnet. Damit gilt insgesamt

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dl}\mathcal{H}^{k_1\ldots k_N}_{k'_1\ldots k'_N} = \\ & \sum_{\substack{n,m \\ n+m+1\geq N}} \; \sum_{\max\{0,n-N,m-N\}\leq M\leq \frac{n}{2}} \; \sum_{\substack{Q_1\ldots Q_M \\ Q'_1\ldots Q'_{n+m-N-M}}} \\ & \qquad (-1)^{n+m+nmM+nNM+nM+mM+N+NM} \times \\ & \qquad F^{Q_1\ldots Q_M}_{Q'_1\ldots Q'_{n+m-N-M}} \; \mathcal{G}(n,m,M,n+m-N-M) \times \\ & \qquad \sum_{\sigma^{(k_1\ldots k_{n-M}|k_{n-M+1}\ldots k_N)}_{(k'_1\ldots k'_{N+M-m}|k'_{N+M-m+1}\ldots k'_N)}} \operatorname{sign}\sigma \\ & \qquad \eta^{Q_1\ldots Q_M \sigma_{k_1}\ldots\sigma_{k_{n-M}}}_{Q'_1\ldots Q'_{n+m-N-M}\sigma_{k'_1}\ldots\sigma_{k'_{N+M-m}}} \mathcal{H}^{Q'_1\ldots Q'_{n+m-N-M}\sigma_{k_{n-M+1}}\ldots\sigma_{k_N}}_{Q_1\ldots Q_M\sigma_{k'_{n+m-N-M+1}}\ldots\sigma_{k'_N}} \end{aligned} \tag{C.15}$$

Dies ist die *allgemeine Flussgleichung normalgeordneter fermionenzahlerhaltender Hamiltonoperatoren*[1] für beliebige Ansätze des Generators η. Diese allgemeine Formel eignet

[1] Natürlich könnte man mit dem Wissen über die Funktion F die Summation über die Q_i und Q'_j stark einschränken und weiterhin eine Analyse mit der Wahl von η nach Mielke, Knetter und Uhrig vornehmen.

sich insbesondere dazu, die Berechnung der Flussgleichungen einem Rechner zu übertragen oder allgemeine Analysen der Ansätze von η zu machen.
Trotz der vielen Indizes in Gleichung C.15 ist die Grundaussage einfach. Alle zu bildenden Pairings derselben Anzahl zu pairender Erzeuger und Vernichter in η bzw. $\mathcal{H}$ lassen sich gleich behandeln, wenn man entsprechende kombinatorische Vorfaktoren hinzugibt und anschließend wieder die Notationssymmetrie einführt.

Literaturverzeichnis

[1] L.D.Landau *Sov.Phys.-JETP* **3**, 101 (1957)

[2] S.Tomanaga *Prog.Theor.Phys.* **5**, 544 (1950)

[3] J.M.Luttinger *J.Math.Phys.* **4**, 1154 (1963)

[4] A.Luther I.Peschel *Phys. Rev. B* **9**, 2911 (1974)

[5] F.D.M.Haldane *Phys.Rev.Lett.* **45**, 1358 (1980)

[6] D.Pines P.Nozière *The Theory of Quantum Liquids*, *New York: W.A.Benjamin* (1966)

[7] C.M.Varma Z.Nussinov W.v.Saarloos *Preprint: subm. Rep.on Phys.* (2001)

[8] J.Voit *Rep.Prog.Phys.* **58**, 977 (1995)

[9] R.M.Noack F.Gebhard *Phys.Rev.Lett.* **82**, 1915 (1999)

[10] A.A.Abrikosov L.P.Gorkov I.Dzialoshinsky *Methods of Quantum field Theory in Statistical Physics*, *New Jersey: Prentice-Hall* (1963)

[11] A.Luther I.Peschel *Phys.Rev. B* **12**, 3908 (1975)

[12] D.C.Mattis *J.Math.Phys.* **15**, 609 (1974)

[13] J.v.Delft H.Schoeller *Ann.Phys.* **7**, 225 (1998)

[14] P.Kopietz *Lect.Not.Phys.* **m48** (1997)

[15] F.Wegner *Ann.Phys.* **3**, 83 (1994)

[16] C.Knetter G.Uhrig *Eur.Phys.J. B* **13**, 209 (2000)

[17] C.N.Yang C.P.Yang *Phys.Rev.* **150**, 321 (1966)

[18] F.D.M.Haldane *Phys.Rev.Lett.* **47**, 1840 (1981)

[19] G.Uhrig *Aachen: Dissertation* (1994)

[20] R.Shankar *Int.J.Mod.Phys. B* **4**, 2271 (1990)

[21] J.D.Johnson S.Krinsky B.M.McCoy *Phys.Rev. B* **8**, 2526 (1973)

[22] A.Mielke *Euro.Phys.J. B* **5**, 605 (1998)

[23] P.Lenz F.Wegner *Nuc.Phys. B* **482**, 693 (1994)

[24] A.Mielke *Ann.Phys.* **6**, 218 (1997)

[25] A.Mielke *Europhys.Lett.* **40**, 195 (1997)

[26] C.Knetter K.P.Schmidt M.Grüninger G.S.Uhrig *cond-mat 0106077* (2001)

[27] R.Nicodemus *Heidelberg: Diplomarbeit* (1995)

[28] A.Kabel F.Wegner *Z.Phys. B* **103**, 555 (1997)

[29] A.Kehrein *Phys.Rev.Lett.* **83**, 4914 (1999)

[30] A.Kehrein *Nucl.Phys. B* **592**, 512 (2001)

[31] E.Gross E.Runge *Vielteilchentheorie*, *Stuttgart: Teubner* (1986)

[32] J.Stoer R.Burlisch *Einführung in die numerische Mathematik* **2**, *Berlin, Heidelberg, New York: Springer* (1973)

[33] W.H.Press et al. *Numerical Recipes For C*, *Cambridge: CUP* (1992)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich besonders Herrn Priv.-Doz. Dr. Uhrig für das interessante Thema und seinen unermüdlichen Einsatz als Betreuer der vorliegenden Arbeit danken. Er hatte stets ein offenes Ohr für meine Fragen, auch in Zeiten, in denen er selbst vielbeschäftigt war. Auch danke ich ihm als dem Referenten dieser Arbeit. Dabei schließe ich Herrn Prof. Freimuth als meinen Koreferenten ein.

Weiterhin bin ich der gesamten Gruppe von Herrn Prof. Müller-Hartmann für die angenehme Atmosphäre dankbar, in der diese Arbeit entstehen konnte.

Meiner Familie, meiner Freundin Julia und meinen Freunden möchte ich für die schöne Zeit danken, wohlwissend, dass sie von dieser Arbeit höchstens diesen Abschnitt lesen werden. Ihr Verständnis und ihre Hilfe waren trotzdem größer, als sie selbst vermuten würden.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass die vorliegende Arbeit von mir selbständig verfasst wurde und dass ich außer den angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel benutzt habe.

Köln, am 19. Juni 2001

(Caspar Heidbrink)