Mikrostruktur des quantisierten O(2) Gittermodells

I n a u g u r a l - D i s s e r t a t i o n

zur

Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität zu Köln

vorgelegt von
Khaled Abu Qasem
aus Broqin/Westbank

Köln 2002

Berichterstatter: Prof. Dr. M.L. Ristig
Prof. Dr. F.W. Hehl

Tag der mündlichen Prüfung: 4. Juli 2002

„Gedruckt mit Unterstützung des Deutschen Akademischen Austauschdienstes"

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**
1.1 Motivation . . . 1
1.2 Kapitelübersicht . . . 3

2 Allgemeine Eigenschaften des Modells **5**
2.1 Das Modell und seine Interpretationen . . . 5
2.2 Symmetrien des Hamilton-Operators . . . 6
2.2.1 Gittertranslations-Symmetrie . . . 6
2.2.2 O(2)-Symmetrie . . . 7
2.2.3 Spiegelungen . . . 7
2.3 Der Ordnungsparameter . . . 8
2.4 Phasenübergänge . . . 10
2.4.1 Quanten-Phasenübergang im Grundzustand . . . 10
2.4.2 Phasenübergänge bei endlichen Temperaturen . . . 11

3 Molekularfeld-Näherung **13**
3.1 Grundzustände . . . 13
3.2 Elementare Anregungen . . . 14
3.3 Numerische Ergebnisse der Hartree-Näherung . . . 16

4 CBF-Formalismus **19**
4.1 Hartree-Jastrow Ansatz . . . 19
4.2 Funktional der Grundzustandsenergie . . . 20
4.3 Hypernetted-Chain Analyse . . . 26

5 CBF Optimierung **31**
5.1 Renormierte Hartree Gleichung . . . 32
5.2 Renormierte Schrödingergleichung . . . 38
5.3 PPA Gleichung . . . 43
5.4 Bestimmung der verallgemeinerten Verteilungsfunktion . . . 46
5.5 Optimale Elementaranregungen . . . 48
5.6 Die ungeordnete Phase . . . 51

6 Numerische Lösungsverfahren **55**
6.1 Lösungsverfahren für die Hartree Gleichung . . . 55
6.2 Iterationsverfahren zur CBF-Optimierung . . . 61
6.3 Lösung der Feynman-Gleichung . . . 63

7 Ergebnisse und Diskussion **65**
7.1 Optimaler Ordnungsparameter 65
7.2 Optimale Einteilchendichte 66
7.3 Phasen-Phasen Wahrscheinlichkeitsdichte 67
7.4 Grundzustandsenergie 68
7.5 Räumliche Verteilungsfunktion 70
7.6 Pseudopotential 71
7.7 Korrelationfunktion $G(\mathbf{n})$ 74
7.8 Die Strukturfunktion $S(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$ 76
7.9 Anregungsenergie 77
7.9.1 Ungeordnete Phase 79
7.9.2 Geordnete Phase 81
7.10 Strukturfunktion des Anregungszweiges 82

8 Schlußfolgerungen und Ausblick **85**
8.1 Schlußfolgerungen 85
8.2 Ausblick 86

Zusammenfassung

Wir haben das chirale O(2) Gittermodell, das sich als ein Quasispinsystem bzw. System von wechselwirkenden Rotoren verstehen und durch eine Gitteranordnung von Josephson Kontakten in zwei räumlichen Dimension realisieren läßt, im Rahmen der Theorie der korrelierten Basisfunktionen (CBF) für eine quantitative und qualitative Beschreibung der Eigenschaften seiner Quantenzustände und des Phasenübergangs untersucht. Ausgehend von einem Satz geeigneter korrelierter Testwellenfunktionen, der die korrelierten Grundzustände approximativ beschreiben kann, wurde der Erwartungswert des Hamiltonoperators als Funktion der Einteilchendichte $\rho(\varphi)$ und der winkelabhängigen Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ausgedrückt. Das gelingt mit Hilfe einer hypernetted-chain (HNC/0) Analyse. Durch Anwendung des Minimalprinzips werden zwei Euler-Lagrange Gleichungen, die renormierte Hartree Gleichung und die renormierte Schrödingergleichung, hergeleitet. Die Beschreibung der Elementaranregungen wird in der Feynman-Approximation behandelt, die zur Feynman Eigenwert-Gleichung führt. Numerische Rechnungen wurden auf einem einfachen quadratischen Gitter mit periodischen Randbedingungen durchgeführt. Mittels Iterationsverfahren lassen sich die numerischen optimierten Lösungen der Euler-Lagrange Gleichungen bestimmen und damit alle physikalischen Gleichgewichts-Größen. Vorgelegt werden Resultate für die Grundzustandsenergie pro Gitterpunkt, den Ordnungsparameter M_x, die Einteilchendichte, die Zweiteilchen-Funktionen , die Anregungsenergie und die Strukturfunktion des niedrigstliegenden Zweiges. Die numerischen Resultate zeigen, daß die Grundzustände für $0 \leq \lambda < \lambda_c$ eine geordnete (ferromagnetische bzw. supraleitende) Phase beschreiben, während für $\lambda > \lambda_c$ eine ungeordnete (paramagnetische bzw. normale) Phase vorliegt. Am kritischen Punkt des Kopplungsparameters $\lambda_c \simeq 3.1$ tritt ein Phasenübergang zweiter Ordnung auf. Das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktion $G(\mathbf{n})$ zeigt eine langreichweitige Ordnung. Sie strebt für $|\mathbf{n}| \to \infty$ zum Grenzwert M_x^2 in der geordneten Phase und fällt kurzreichweitig in der ungeordneten Phase ab. Dabei ist M_x der zugehörige Ordnungsparameter für die geordnete Phase, der die chirale bzw. O(2) Symmetriebrechung dieser Zustände beschreibt.

Summary

We have studied the properties of an O(2) chiral lattice model at zero temperature, that may be interpreted as a system of interacting spin rotors or can be realized through a configuration of two-dimensional Josephson junction arrays, within the framework of the Correlated Basis Function (CBF) theory for a quantitative and qualitative description of the physical properties of its quantum ground states and phase transition. Starting from an ansatz of a suitable set of correlated trial wave functions that describes approximately the correlated ground state we have expressed the expectation value of the Hamiltonian in terms of the single-particle density $\rho(\varphi)$ and the angle dependent two-particle distribution function $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$. This has been done with the help of the hypernetted-chain technique in the so-called HNC/0 approximation. By implementation of the minimum principle for the energy, two Euler-Lagrange equation are derived, the renormalized Hartree equation and the renormalized Schrödinger equation. The description of the elementary excitations is treated in Feynman approximation and leads to a Feynman eigen-value equation for the optimal wave functions of the excitations and their energies. The numerical calculations are performed for simple quadratic lattices with periodic boundary conditions. The optimal numerical solutions of both equations are determined by an iteration procedure and therewith all the physical equilibrium quantities of interest. The excitation energies and states are determined by the solution of the Feynman eigen-value equation. Presented are the ground state energy per lattice point, the order parameter M_x, the one-particle density, the two-particle functions, the excitation energy and the structure function of the low-lying excited mode. The numerical results show that the ground states for $0 \leq \lambda < \lambda_c$ describe an ordered (ferromagnetic or superconducting) phase while for $\lambda > \lambda_c$ they represent a disordered (paramagnetic or normal) phase. At the critical coupling parameter $\lambda_c \simeq 3.1$ occurs a second-order phase transition. The asymptotic behavior of the correlation function $G(\mathbf{n})$ displays long-range order. It approaches the limiting value M_x^2 in the ordered phase and decreases toward zero in the disordered phase. Thereby, the associated order parameter M_x characterising the ordered phase demonstrates the chiral and the O(2) symmetry-breaking in these ordered states.

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Das O(n) Gittermodell [1] ist ein Beispiel für stark-wechselwirkende Vielteilchensysteme. Dieses Modell beschreibt für $n = 2$ eine quantisierte Version des XY-Spingitters [2, 3] oder Systeme granularer supraleitender Netzwerke [4, 5, 6] bzw. Josephson Junction Arrays [7, 8, 9, 10]. In der Kern- und Mesonfeld-Theorie [11] ist das chirale O(n) Gittermodell von Interesse. Von besonderer Bedeutung ist das durch Phasenfluktuationen und Korrelationen verursachte Verhalten des Quantengrundzustands dieses Modells, das von der Stärke eines Kopplungsparameters abhängt [12, 13]. Dieser Parameter bestimmt die Stärke der Fluktuationen und Korrelationen und die Konkurrenz zwischen kinetischen und potentiellen Effekten des Modells. Die kinetische Energie wächst mit der Kopplungskonstanten, die eine ähnliche Rolle wie die Temperatur spielt und zu Fluktuationen der Phasen bzw. Winkel führt, welche den Verlust einer eventuellen langreichweitigen Ordnung verursachen können. Das O(2) Modell weist einen Grundzustand mit langreichweitiger Ordnung und spontaner O(2)- bzw. chiraler Symmetriebrechung für genügend kleine Werte des Kopplungsparameters auf. Am kritischen Kopplungsparameter verschwindet diese über einen Quanten-Phasenübergang zweiter Ordnung [14, 15, 16] und geht in einen ungeordneten Zustand über.

Im allgemeinen ist das kritische Verhalten der Vielteilchensysteme von der Stärke des Kopplungsparameters und damit der auftretenden Korrelationen abhängig. Eine möglichst genaue quantitative Beschreibung dieser Korrelationseffekte ist eine wichtige Aufgabe der Physik der kondensierten Materie [17]. Zur quantitativen Beschreibung des mikroskopischen Verhaltens dienen moderne Quantenvielteilchentheorien, wie z. B. die Theorie der korrelierten Basisfunktionen (CBF-Theorie) [18, 19, 20] und die "Coupled Cluster" (CCM) Methode [21, 22], die die im System vorhandenen Korrelationen berücksichtigen können.

Insbesondere erlaubt die CBF Theorie bei tiefen Temperaturen eine quantitative *ab-initio* Analyse des Grundzustandes und der Anregungszustände eines korrrelierten Quantensystems. Beispiele dafür sind Quantenflüssigkeiten [23, 24] wie flüssiges Helium und

Kernmaterie. Diese Theorie wurde z. B. mit großem Erfolg auf das U(1)-Gittereichmodell der Quantenelektrodynamik [25, 26] und auf das Ising Modell im äußeren Magnetfeld bzw. das dazu duale Z(2)-Modell [27] angewandt. Numerische Resultate dieser Anwendungen zeigen, daß die CBF Theorie das Potential hat, die physikalischen Eigenschaften für alle Werte des Kopplungsparameters mit großer Genauigkeit zu gewinnen, sofern man nicht zu nahe am Phasenübergang ist. Erfolg und Fähigkeit der CBF Theorie ermutigen uns deshalb, das O(2) Gittermodell in zwei räumlichen Dimension in einer systematische Analyse zu untersuchen. Das O(2) Modell ist von besonderem Interesse zur Untersuchung des kritischen Verhaltens und des Phasenübergangs in einer Vielzahl von Problemen und ihrer zugehörigen räumlichen Ordnungs-Unordnungsphänomene [28]. Insbesondere spielt das O(2) Modell eine wesentliche Rolle in der Theorie zweidimensionaler Systeme. Zum Beispiel wird es angewendet, um Ladungseffekte und induzierte Quantenfluktuationen in einem Netz von Josephson Kontakten zu beschreiben [29, 30]. Für Temperaturen $T > 0$ ist das Verhalten des O(2) Modells durch das Zusammenspiel von thermischen und Quantenfluktuationen bestimmt. Bei verschwindender Temperatur zeigt das Modell aufgrund der Konkurrenz der kinetischen und potentiellen Energiebeiträge ein außerordentlich reiches Verhalten.
Bei nicht-verschwindenden Temperaturen aber geringer Kopplung ergibt das Modell eine langreichweitige Ordnung, die einem ferromagnetischen bzw. supraleitenden Zustand entspricht. Bei Temperaturerhöhung zerstören dann langwellige Magnonen (Spinwellen) die langreichweitige Ordnung. Hierbei handelt es sich an der kritischen Temperatur $T = T_0$ um einen Kosterlitz-Thouless-Berezinskii (KTB) Phasenübergang[31, 32, 33]. An diesem Übergang lösen sich Wirbel der geordneten Tieftemperaturphase zu freien Wirbeln auf, was zur ungeordneten Hochtemperaturphase führt. Diese kann als quasiparamagnetisch bezeichnet werden, d.h. die Korrelationen sind kurzreichweitig und ihre Stärke fällt exponentiell mit dem Abstand ab.

Die Mehrheit der Studien bei endlichen Temperaturen sind im Rahmen der Störungstheorie, der Molekularfeld-Näherung [34, 35] und harmonischer Aproximationen [36, 37] durchgeführt worden. Die Molekularfeld-Näherung [38, 39, 40, 41] gibt Hinweise darauf, daß Systeme für $\lambda \geq 4.0$ in zwei Dimensionen und $\lambda \geq 6.0$ in drei Dimensionen nicht mehr geordnet sind. Jedoch berücksichtigen konventionelle Methoden wie die Molekularfeld-Näherung und harmonische Modelle keine Teilchenkorrelationen und sind deshalb nur qualitativ. Während die harmonische Näherung auch die Phasenperiodizität verletzt, vernachlässigt die Molekularfeld-Näherung [42] räumliche Korrelationen und Kopplungseffekte der Gitterpunkte. Diese Theorien sind deshalb nicht befriedigend und liefern keine quantitativ korrekten Resultate. Eine Reihe von Arbeiten über das O(2) Rotormodell versucht, solche Korrelationen näherungsweise zu erfassen. Benutzt werden dafür verschiedene Methoden, wie störungstheoretische Entwicklungen in Potenzen der Kopplungsstärke [43], Renormierungsgruppen-Theorie [9], numerische Simulationen

[44, 45], Quantum-Spherical Approximations [46], u.a. Die Anwendung der letzteren Näherung ergibt z. B. einen Wert $\lambda_c \simeq 2.43$ für den kritischen Kopplungsparameter λ im zugrunde gelegten Hamilton-Operator auf einem einfachen Quadratgitter (siehe Kapitel 2, Gl.(2.2)), der vom kritischen Wert $\lambda_c = 4$ der Molekularfeld-Näherung [35, 42] wesentlich abweicht. Dritte-Ordnung Störungstheorie liefert zum Vergleich $\lambda_c \simeq 2.52$ [43]. Das Ziel der vorliegenden Analyse ist deshalb, diese Näherungen durch bessere zu ersetzen und das Modell im Rahmen der CBF Theorie zu untersuchen.
Nach einer Vorstudie des Modells in Molekularfeld-Näherung beginnt die Untersuchung mit der formalen Berechnung des Erwartungswertes des Hamiltonoperators bezüglich einer Vielteilchenwellenfunktion von Hartree-Jastrow Form. In Verbindung mit hypernetted-chain Gleichungen wird das Energiefunktional bestimmt. Das Variationsprinzip der Energie wird benutzt, um die Einteilchendichte und das Pseudopotential zu optimieren. Die Bestimmung der angeregten Zustände wird in Feynman-Näherung durchgeführt. Optimale physikalische Größen werden mit ihrer Hilfe berechnet.

1.2 Kapitelübersicht

Im Kapitel 2 wird das O(n) Gittermodell vorgestellt. Hier werden Eigenschaften wie Symmetrien, Ordnungsparameter und Anwendung des Modells erläutert. Im Kapitel 3 wird eine Molekularfeld-Analyse des Modells durchgeführt. Verschiedene physikalische Größen werden ausgewertet und mit Resultaten der Störungstheorie verglichen. Im Kapitel 4 wird die explizite Form eines korrelierten Grundzustands vom Hartree-Jastrow Typ vorgestellt. Der Erwartungswert des Hamilton-Operators bezüglich dieses korrelierten Zustands wird als Funktion der Einteilchendichte und der Zweiteilchen-Verteilungsfunktion angegeben. Mittels der HNC/0-Näherung werden die auftretenden reduzierten Dichtematrizen aus dem vorgegebenen korrelierten Grundzustand berechnet. Im Kapitel 5 wird durch Variation des Energiefunktionals bei festem Kopplungsparameter nach der Wurzel der Teilchendichte eine der Euler-Lagrange Gleichungen, die renormierte Hartree Gleichung, für die optimale Einteilchendichte und das zugehörige renormierte Hartree-Potential hergeleitet. Hergeleitet wird auch die zweite Euler-Lagrange Gleichung, die Paired-Phonon Gleichung (PPA), durch Variation des Energiefunktionals nach der Korrelationsfunktion. Schließlich wird der Formalismus zur Berechnung der Anregungsenergie vorgestellt und die angeregten Zustände in Feynman-Näherung bestimmt. Im Kapitel 6 werden die Lösungen der gekoppelten Euler-Lagrange Gleichungen untersucht, die den optimalen Zustand beschreiben. Hier wird das angewandte numerische Iterationsverfahren beschrieben. Im Kapitel 7 werden die numerischen Ergebnisse vorgestellt und diskutiert. Kapitel 8 beschließt die Arbeit mit einigen Schlußfolgerungen und einem Ausblick.

Kapitel 2

Allgemeine Eigenschaften des Modells

In diesem Kapitel wird das chirale O(n) Gittermodell vorgestellt und eine Einführung in das Verhalten des Modells gegeben. Die Merkmale dieses Vielteilchensystems, das eine langreichweitige Ordnung besitzen kann, kann durch makroskopische Größen beschrieben werden, aus denen sich viele Informationen gewinnen lassen. Dazu gehören z. B. der Ordnungsparameter, die Korrelationsfunktionen und Symmetrieeigenschaften, die sich in verschiedenen physikalischen Größen bemerkbar machen.

2.1 Das Modell und seine Interpretationen

Das chirale O(n) Gittermodell in zwei räumlichen Dimensionen läßt sich durch den Hamilton-Operator[1]

$$H = +\frac{1}{2}\sum_{ij}^{N} \Delta_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j) - \lambda \sum_{i}^{N} \left\{ \frac{\partial}{\partial \varphi_i} + (n-2)\cot\varphi_i \right\} \frac{\partial}{\partial \varphi_i} \tag{2.1}$$

beschreiben. Dieser Hamilton-Operator ist auf einem Quadratgitter mit den Gitterpunkten $i = 1, 2, ..., N$ und auf dem Winkelraum $\{\varphi_i\}$ mit $-\pi \leq \varphi_i \leq \pi$ definiert. Der Faktor λ ist der Kopplungsparameter, definiert auf dem Intervall $0 \leq \lambda \leq \infty$. Das Potential $\Delta_{ij} = \Delta(\mathbf{n})$ hängt nur vom relativen Abstand $\mathbf{n} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ der Gitterpunkte $i,\ j$ ab und gibt die Wechselwirkungsstärke zwischen den Spins der Gitterpunkte i und j.
Zur Beschreibung eines Pionenfeldes wird $n = 4$ gewählt, die Wahl $n = 2$ definiert das quantisierte O(2) Gittermodell (bzw. XY Modell), das zur Beschreibung des Verhaltens idealer Josephson Kontakte auf einem Gitter dienen kann. Der Hamilton-Operator lautet in diesem Fall [9, 39]

$$H = -\lambda \sum_{i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j)\,. \tag{2.2}$$

Die Variable φ_i charakterisiert die makroskopische Phase der Wellenfunktion auf der "Insel" i. Sie ist kanonisch konjugiert zum Zahloperator $\hat{l}_i = -i\partial/\partial\varphi_i$, der die Anzahl der Cooper-Paare auf der Insel i angibt. Diese zwei Operatoren erfüllen die Kommutator-

Relation $\left[\hat{l}_i, \hat{\varphi}_j\right] = -i\delta_{ij}$, die zur Unschärfe $\Delta\hat{l}\,\Delta\hat{\varphi} \geq 1$ führt.
Der Kopplungsparameter kann interpretiert werden durch $\lambda = 2DU/J$, wobei $U = e^2/2C_0$ die Ladungsenergie, J die Josephsonkopplung, C_0 die Eigenkapazität (Kapazität zu Grund) einer Insel auf einem D-dimensionalen Gitter sind. Der Kosinusterm in Gl. (2.2) kann als ein Drehmoment interpretiert werden, das diskrete Quanten (Bosonen) vom Gitterpunkt i zum Gitterpunkt j transportiert. Die Gesamtheit der Josephson Kontakte zeigt das Verhalten einer normalen Phase für große Werte des Kopplungsparameters und eine global-supraleitende Phase unterhalb einer kritischen Kopplungsstärke λ_c $(0 \leq \lambda \leq \lambda_c)$. Die Konkurrenz zwischen den Energien U and J bestimmt das Leitungsverhalten des Systems [47]. Im Grundzustand und für $U >> J$ sind die Ladungseffekte genügend groß, um die Cooper-Paare auf den einzelnen Inseln zu lokalisieren. Hier ist wegen der Unschärfe $\Delta l << 1$ und $\Delta\varphi >> 1$. Die Inselphasen sind unkorreliert und ein Suprastrom kann nicht wegen der Coulomb-Blockade entstehen. Damit ist in diesem Bereich das System der Josephson Kontakte in der normalen Phase.
Andererseits ist für $J >> U$ die Unschärfe $\Delta l >> 1$, d.h. die Zahl der Cooper-Paare auf einer Insel ist unbestimmt. Die Anordnung befindet sich deshalb in einem makroskopisch phasenkohärenten (global-supraleitenden) Zustand. Ist $U \approx J$, sind Phasenfluktuationen genügend stark und verursachen eine Zerstörung der Supraleitfähigkeit. Ein kontinuierlicher Phasenübergang zum normal-leitenden System ist die Folge. Dieses kritische Verhalten der Josephson Kontakte kann experimentell beobachtet werden, da die Kopplungskonstante λ experimentell geändert werden kann.
Der Hamilton-Operator (2.2) kann auch als eine Version des XY Spin-Modells interpretiert werden. In dieser Interpretation beschreibt das Modell dann die Dynamik wechselwirkender Rotoren bzw. Spins. Der Spinvektor $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y)$ am Gitterpunkt i hat die Länge $|\mathbf{S}_i| = 1$, seine Richtung in der XY-Gitterebene ist durch den Winkel φ_i festgelegt. Eine Drehung des Spins in der XY-Ebene wird durch den Drehimpuls-Operator $\hat{l}_i = -i\partial/\partial\varphi_i$ erzeugt. Die Stärke dieser Drehung wird durch den Kopplungsparameter λ geregelt. In dieser Spin-Interpretation läßt sich ein von Null verschiedener Ordnungsparameter als spontane Magnetisierung interpretieren. Am kritischen Wert λ_c besitzt das Modell einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Für $0 \leq \lambda < \lambda_c$ ist die geordnete Phase ein ferromagnetischer Zustand, für $\lambda > \lambda_c$ ist die ungeordnete Phase ein paramagnetischer Zustand, wenn wir den Spinvektor mit einem magnetischen Moment verbinden.

2.2 Symmetrien des Hamilton-Operators

2.2.1 Gittertranslations-Symmetrie

Der Hamilton-Operator (2.2) ist invariant unter Translationen im Gitter. Wegen Beschränkung auf "homogene" Systeme in dieser Untersuchung sind auch die Wellenfunk-

tionen gittertranslationsinvariant. Alle Einteilchenfunktionen sind damit unabhängig von allen Gitterpunkten. Beispiele dafür sind die Einteilchendichte und der Ordnungsparameter. Zweiteilchenfunktionen hängen dagegen vom relativen Abstand $\mathbf{n}$ zweier Gitterpunkte ab.

2.2.2 O(2)-Symmetrie

Der Hamilton-Operator (2.2) hat eine globale Symmetrie der Rotationgruppe O(2) (Rotationen in der XY Ebene) und ist invariant gegenüber simultanen Drehungen ϑ aller Winkel φ_i um eine vertikale feste Achse. Er ist *nicht* invariant unter individuellen *lokalen* Drehungen um einzelne Gitterpunkte. Diese Drehungen werden durch eine unitäre globale Transformation

$$U(\vartheta) = e^{i\vartheta \sum\limits_i \hat{l}_i} = e^{i\vartheta \hat{L}} \tag{2.3}$$

erzeugt. Die Erzeugende $\hat{L} = \sum\limits_i \hat{l}_i$ der Drehungen vertauscht mit dem Hamilton-Operator (2.2):

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}, H\right] &= -\lambda\Big[\sum_k \hat{l}_k, \sum_i \hat{l}_i\Big] + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ij}\Big[\sum_k \hat{l}_k, \cos(\varphi_i - \varphi_j)\Big]\,, \\
&= \frac{i}{2}\sum_k \left(\sum_j \Delta_{kj}\sin(\varphi_k - \varphi_j) - \sum_i \Delta_{ik}\sin(\varphi_i - \varphi_k)\right), \\
&= \frac{i}{2}\sum_k \left(\sum_j \Delta_{kj}\sin(\varphi_k - \varphi_j) - \sum_j \Delta_{jk}\sin(\varphi_j - \varphi_k)\right) = 0\,.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Dementsprechend gelten die folgenden Beziehungen,

$$\Big[U(\vartheta), H\Big] = 0, \quad H' = U(\vartheta) H U^{-1}(\vartheta) = H \quad \text{und} \qquad i\frac{d}{dt}\hat{L} = \Big[\hat{L}, H\Big] = 0\,.$$

Wegen der Vertauschbarkeit (2.4) ist offensichtlich, daß H unter O(2) Rotationen ein invarianter Operator und $\hat{L}$ eine Erhaltungsgröße ist. Wir merken an, daß H nicht invariant unter *lokalen* Drehungen ist, d.h. $[\hat{l}_i, H] \neq 0$. Wir werden im Folgenden deshalb zunächst symmetrisierte Zustände untersuchen, die die gleiche Symmetrie des Hamilton-Operators besitzen und danach solche, die die O(2) Symmetrieeigenschaften brechen. Brechung der Gittertranslationssymmetrie wird nicht zugelassen, da wir nur "homogene" Systeme betrachten wollen.

2.2.3 Spiegelungen

Der Hamilton-Operator ist auch invariant unter Spiegelungen sowohl an der x-Achse als auch an der y-Achse, d.h. er besitzt eine Reflexionssymmetrie bezüglich der Operationen P^x und P^y mit $P^x(x,y) = (x,-y) =: (\varphi \to -\varphi)$ und $P^y(x,y) = (-x,y) =: (\varphi \to$

$\pi - \varphi$). Die Spiegelsymmetrie an der y-Achse impliziert die chirale Symmetrie des O(n) Gittermodells.

2.3 Der Ordnungsparameter

Die dynamischen Eigenschaften des Modells (2.2) sind durch die Phasenoperatoren $\hat{\varphi}_i$ und die zugehörigen Operatoren $\hat{l}_i$ bestimmt. Der Ordnungsparameter, der die makroskopische Ordnung des Systems beschreibt, wird als Erwartungswert des Operators $\sum_i e^{i\hat{\varphi}_i}$ definiert, der durch Richtung und Betrag charakterisiert wird. Wir schreiben

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \frac{1}{N}\sum_i < e^{i\hat{\varphi}_i} > = \frac{1}{N}\sum_i \Big(< \cos\hat{\varphi}_i > + i < \sin\hat{\varphi}_i > \Big), \\ &= \frac{1}{N}\sum_i \Big(M_x^i + iM_y^i\Big) = \frac{1}{N}\sum_i |\mathbf{M}_i|\; e^{i\alpha_i}. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Der Winkel α_i stellt die mittlere Ausrichtung des Spins $\mathbf{M}_i$ am Punkt i dar und $|\mathbf{M}_i|$ seinen Betrag. In einem "inhomogenen" System hängen $|\mathbf{M}_i|$ und α_i vom Gitterpunkt i ab. Sie ändern sich von Gitterpunkt zu Gitterpunkt, so daß sie ortsabhängig werden, $\alpha_i = \alpha(\mathbf{r}_i)$ bzw. $\mathbf{M}_i = \mathbf{M}(\mathbf{r}_i)$. In unserem Fall hängen diese beide Größen wegen der angenommenen Erhaltung der Translationssymetrie nicht vom Ortsvektor $\mathbf{r}_i$ des Gitterpunkts i ab, sondern sind durch eine Konstante gegeben,

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \frac{1}{N}\sum_i |\mathbf{M}(\mathbf{r}_i)|\; e^{i\alpha(\mathbf{r}_i)} = |\mathbf{M}|\; e^{i\alpha} \\ &= M_x + iM_y\,. \end{aligned} \tag{2.6}$$

Der Grundzustand hat die Symmetrie

$$\Psi(\{-\varphi\}) = \Psi(\{\varphi\})\,, \tag{2.7}$$

d.h. es besteht Reflexionssymmetrie bezüglich der Operation $P_x : (\varphi \to -\varphi)$. Wegen dieser Eigenschaft des Grundzustands verschwindet der Erwartungswert des Sinusanteils des Feldoperators $e^{i\varphi_i}$ bzw. die Komponente M_y, denn:

$$\begin{aligned} < \Psi|\sin\hat{\varphi}|\Psi > &= < \Psi|P_x^{-1}P_x \sin\hat{\varphi} P_x^{-1}P_x|\Psi > = - < \Psi|P_x^{-1}\sin\hat{\varphi}P_x|\Psi >, \\ &= - < \Psi|\sin\hat{\varphi}|\Psi > = 0\,. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Dagegen kann die Reflexionsymmetrie des Grundzustands bezüglich der Operation P_y : $(\varphi \to \pi - \varphi)$ (chirale Symmetrie) gebrochen werden. In diesem Fall ist

$$\begin{aligned} M_x &= < \Psi|\cos\hat{\varphi}|\Psi >, \\ &= < \Psi|P_y^{-1}P_y \cos\hat{\varphi} P_y^{-1}P_y|\Psi >, \end{aligned}$$

$$= \; - < \Psi | P_y^{-1} \cos\hat{\varphi} P_y | \Psi > \neq 0 \,, \tag{2.9}$$

i.e. $P_y|\Psi > \neq |\Psi >$. Der Ordnungsparameter ist dann durch $M_x =< \cos\hat{\varphi} > \neq 0$ gegeben. Er gibt die mittlere Orientierung der Phasen in X Richtung. Für $M_x = 1$ richten sich alle Phasen parallel zur X-Achse aus.
Da die Phasenfluktuationen mit wachsender Kopplung λ zunehmen, verringert sich die Wahrscheinlichkeit für eine parallele Ausrichtung. Am kritischen Punkt λ_c ist diese Wahrscheinlichkeit so klein, daß das System in einen ungeordneten Zustand übergeht. Dieser Grundzustand ist invariant gegenüber Drehungen um eine Achse, d.h. er ist richtungsunabhängig.
Im Gegensatz zu dieser Phase ist der Grundzustand der geordneten Phase richtungsabhängig und bricht deshalb die Invarianz des Hamilton-Operators gegenüber der O(2) Symmetrie.
Ein einfaches Argument zeigt diesen Sachverhalt mathematisch formal: Der Grundzustand ist durch einen nicht-verschwindenden Ordnungsparameter M_x charakterisiert. Daraus folgt

$$\begin{aligned}
M &= < \Psi | \, e^{i\hat{\varphi}_i} \, | \Psi > \qquad\qquad \text{mit} < \Psi | \Psi >= 1 \,, \\
&= < \Psi | \Big(U^{-1}(\vartheta) U(\vartheta) \Big) \, e^{i\hat{\varphi}_i} \, \Big(U^{-1}(\vartheta) U(\vartheta) \Big) | \Psi > \,, \\
&= < \Psi | U^{-1}(\vartheta) \Big(U(\vartheta) \, e^{i\hat{\varphi}_i} \, U^{-1}(\vartheta) \Big) U(\vartheta) | \Psi > \,, \\
&= < \tilde{\Psi} | \Big(U(\vartheta) \, e^{i\hat{\varphi}_i} \, U^{-1}(\vartheta) \Big) | \tilde{\Psi} > \,, \\
&= < \tilde{\Psi} | \Big(e^{i\vartheta \hat{L}} \, e^{i\hat{\varphi}_i} \, e^{-i\vartheta \hat{L}} \Big) | \tilde{\Psi} > \,, \\
&= < \tilde{\Psi} | e^{i\hat{\varphi}_i} \; e^{-i\vartheta} | \tilde{\Psi} > \,, \\
&= e^{-i\vartheta} < \tilde{\Psi} | \, e^{i\hat{\varphi}_i} \, | \tilde{\Psi} > \,,
\end{aligned} \tag{2.10}$$

bzw.

$$M \;=\; e^{-i\vartheta} < \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} > \tilde{M} \qquad , \tilde{M} = \frac{< \tilde{\Psi} | e^{i\hat{\varphi}_i} | \tilde{\Psi} >}{< \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} >} \,. \tag{2.11}$$

Wäre $|\Psi >$ invariant bei Drehungen, dann müßte $|\tilde{\Psi} >= const \, |\Psi >$ sein, also müßte folgen $\tilde{M} = M$ und damit

$$e^{i\vartheta} =< \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} > \,.$$

Da $< \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} >$ reell ist, kann diese Gleichung nur für $\vartheta = 0, 2\pi, ...$ erfüllt sein. Also ist die Annahme $|\tilde{\Psi} > \sim |\Psi >$ widersprüchlich und es gilt $|\tilde{\Psi} > \neq |\Psi >$.

2.4 Phasenübergänge

2.4.1 Quanten-Phasenübergang im Grundzustand

Eine gemeinsame Eigenschaft der durch Gl. (2.2) beschriebenen Systeme ist das Auftreten eines kontinuierlichen Phasenüberganges zweiter Ordnung am kritischen Kopplungsparameter, der durch eine spontane O(2) Symmetriebrechung charakterisiert ist [49]. Dieser Phasenübergang trennt Grundzustände mit unterschiedlichen Symmetrien: eine geordnete (ferromagnetische bzw. supraleitende) Phase mit niedrigerer Symmetrie verglichen mit den erhaltenen Symmetrien des Hamilton-Operators und eine ungeordnete (paramagnetische bzw. normale) Phase mit gleicher Symmetrie zum Hamilton-Operator. Der Hamilton-Operator besitzt eine globale O(2)-Symmetrie und ist invariant unter den Operationen P_x, P_y und ist rotations- und spiegelungsinvariant. Der ungeordnete Grundzustand besitzt die volle Symmetrie des Hamilton-Operators, während die geordnete Phase die Symmetrie des Hamilton-Operators bricht. Die geordnete Phase mit gebrochener O(2)-Symmetrie wird durch einen von Null verschiedenen Ordnungsparameter M_x charakterisiert, dessen Wert vom Kopplungsparameter λ stetig abhängt. Für $\lambda = 0$ nimmt M_x den Wert 1 an, da die Fluktuationen der Phase bzw. des Winkels verschwinden (Abb. 2.1).
Für $\lambda > 0$ nimmt der Ordnungsparameter M_x mit zunehmendem Kopplungsparame-

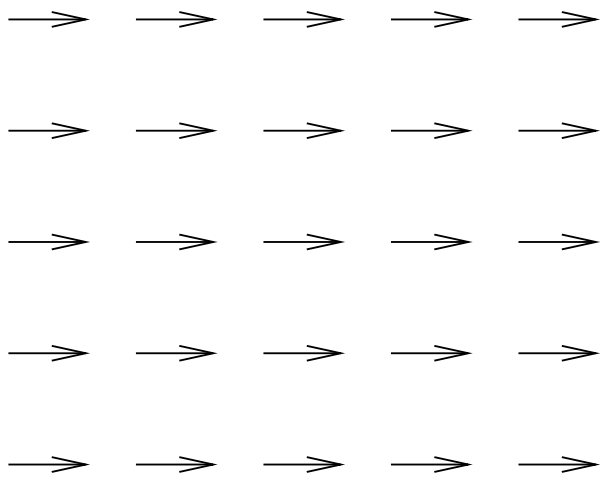


Abbildung 2.1: Die Abbildung zeigt den Gundzustand der geordneten Phase des XY-Spin Modells im Grenzfall $\lambda = 0$ mit Ordnungsparameter $M_x =< cos\hat{\varphi} >= 1$.

ter ab und verschwindet am kritischen Kopplungsparameter λ_c. Für $\lambda > \lambda_c$ handelt es sich dann um ungeordnete Zustände, wo die Spins bzw. lokalen Phasen unabhängig voneinander sind. Der Zustand ist deshalb paramagnetisch bzw. normal.

2.4.2 Phasenübergänge bei endlichen Temperaturen

Bei endlichen Temperaturen kann eine inhomogene Änderung des Grundzustands auftreten. Aufgrund lokaler thermischer Fluktuationen können sich die Phasen (bzw. Winkel) φ lokal ändern, $\varphi_i = \varphi(\mathbf{r}_i)$, so daß eine ungleichmäßige Orientierung der Phasen entstehen kann. Diese können die langreichweitige Ordnung des Zustands zerstören, indem sie eine quasi-langreichweitige Ordnung etablieren, bei der die räumliche Korrelationsfunktion algebraisch mit dem Relativabstand abnimmt [50]. Topologische De-

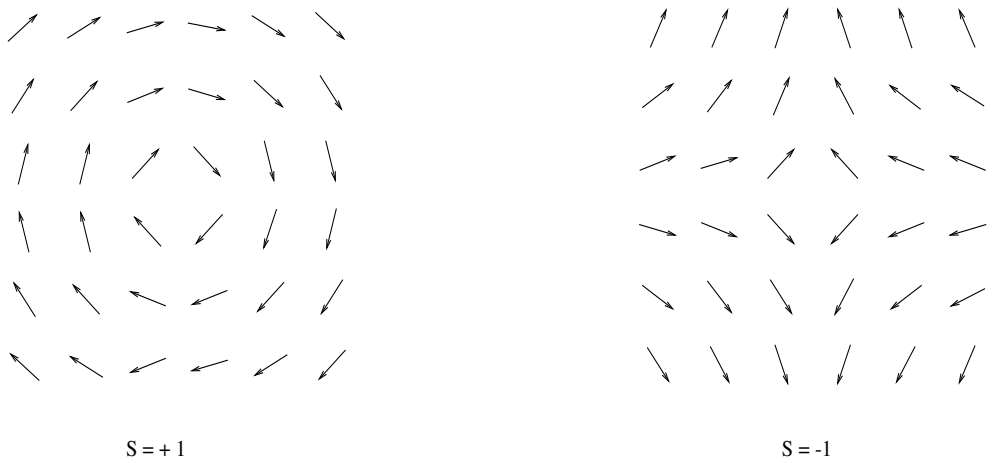


Abbildung 2.2: Wirbel-Konfigurationen der lokalen Phasen $\varphi(\mathbf{r}_i)$ auf einem zweidimensionalen Gitter mit "Ladungen" +1 (links) und -1 (rechts). Die Phase $\varphi(\mathbf{r}_i)$ ändert sich bei Umlauf um den Wirbelkern um $\pm 2\pi$.

fekte in der Form von Wirbeln (Abb. 2.2) können bei Temperaturerhöhung gebildet werden, wenn $\varphi(\mathbf{r}_i)$ eine Singularität hat. Solche Anregungen ermöglichen dann einen kontinuierlichen Kosterlitz-Thouless Phasenübergang, bei dem Defektpaare (gepaarte Wirbel) sich auflösen und freie Wirbel entstehen. In dieser Hochtemperaturphase fällt die Korrelationsfunktion exponentiell mit dem Abstand $|\mathbf{r}|$ ab, und verschwindet die quasi-langreichweitige Ordnung des Systems.

Kapitel 3

Molekularfeld-Näherung

Näherungsweise läßt sich ein wechselwirkendes Vielteilchensystem wie das zu untersuchende O(2) Gittermodell durch analytische und numerische Verfahren behandeln. Dazu gehören Störungsentwicklungen und Molekularfeld-Näherungen.
In Molekularfeld-Approximation werden Korrelationen zwischen den einzelnen Konstituenten des Systems vollständig vernachlässigt. In diesem Fall wird der zugehörige Vielteilchen-Hamilton-Operator auf eine Summe von effektiven Einteilchenoperatoren reduziert. Der Einfluss der Teilchen-Teilchen Wechselwirkung wird hierbei durch ein mittleres Feld beschrieben. Trotz dieser Beschränkungen kann man damit einige qualitative Informationen über das Verhalten des Phasendiagramms eines Systems gewinnen.

3.1 Grundzustände

In Molekularfeld-Näherung wird als N-Teilchen-Testwellenfunktion $|\Psi_o>$ ein Produkt aus normierten Einteilchenfunktionen $|\psi_i>$ angenommen: $|\Psi_o> = \prod_i^N |\psi_i>$. Der Erwartungswert des Hamilton-Operators (2.2) bezüglich des zugehörigen Grundzustandes berechnet sich dann zu

$$E/N \;=\; -\lambda < \psi|\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}|\psi > +D(1- < \psi|\cos\varphi|\psi >^2), \tag{3.1}$$

wobei D die räumliche Dimensionalität des Systems angibt. Für quadratische Gitter ist $D = 2$. Minimierung des Erwartungswertes (3.1) bezüglich der Funktionen $|\psi_i>$ ergibt als Euler-Lagrange Gleichung die Hartree-Gleichung

$$-\Big(\lambda\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + 4M_x\cos\varphi\Big)\psi(\varphi) = \mu\,\psi(\varphi)\,. \tag{3.2}$$

Der Lagrange-Multiplikator μ ist so zu wählen, daß die Normierungsbedingung $< \Psi_o|\Psi_o >= 1$ erfüllt ist. Gleichung (3.2) wird numerisch gelöst und die Komponente des Ordnungsparameters M_x und die Energie μ als Funktionen des Kopplungsparameters werden selbstkonsistent bestimmt. Die Grundzustandsenergie folgt aus dem Energiefunktional

(3.1) zu

$$E/N = 2(1+M_x^2)+\mu\,. \tag{3.3}$$

Ist $\lambda = 0$ dann ergibt sich $M_x = 1$, $\mu = -4$ und $E/N = 0$. Im Grenzfall des "strong-coupling limit", $\lambda \to 0$, haben wir [41] in $\mathcal{O}(\sqrt{\lambda})$

$$\begin{aligned} M_x &= 1-\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\lambda}{2}}\,, \qquad \mu = -4+3\sqrt{\frac{\lambda}{2}}\,, \\ E/N &= \sqrt{2\lambda}\,, \qquad \psi(\varphi)\propto e^{-\frac{k}{2}\varphi^2}, \quad \text{mit } k=\sqrt{\frac{2M_x}{\lambda}}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Eine Störungsentwicklung am kritischen Punkt $\lambda = \lambda_c$ zeigt, daß $\lambda_c = 4$ ist. Im Grenzfall $(\lambda_c - \lambda) \to 0$ erhält man:

$$\begin{aligned} M_x^2 &\cong \frac{2}{7}(\lambda_c-\lambda), \quad \mu \cong -\frac{4}{7}(\lambda_c-\lambda), \quad \omega_1 = 4-\frac{3}{7}(\lambda_c-\lambda), \\ E/N &\cong 2-\frac{1}{7}(\lambda_c-\lambda)^2, \qquad \psi(\varphi)\cong 1+\sqrt{\frac{1}{7}(\lambda_c-\lambda)}\cos\varphi. \end{aligned} \tag{3.5}$$

In der ungeordneten Phase $\lambda > \lambda_c$ verschwindet der Ordnungsparameter, $M_x = 0$, und die optimalen Einteilchenzustände sind $|\psi_i>= 1/\sqrt{2\pi}$ wegen $<\Psi_o|\Psi_o>= 1$. Aus dem Energieerwartungswert (3.3) ergibt sich die minimale Energie zu $E/N = 2$ für alle $\lambda \geq 4$. Im Grenzfall des "weak-coupling limit", $\lambda \to \infty$, ergibt sich in Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung:

$$E/N = D-\frac{D}{4\lambda} = 2-\frac{1}{2\lambda} \qquad \text{für } D=2\,. \tag{3.6}$$

3.2 Elementare Anregungen

Zur näherungsweisen Beschreibung der Anregungszustände kann man den verallgemeinerten Dichtefluktuationsoperator

$$\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\}) = \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}\frac{1}{\psi(\varphi_{\mathbf{r}_i})}\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_{\mathbf{r}_i}) \tag{3.7}$$

einführen [23, 25]. Die Quantenzahlen $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ sind durch den Wellenvektor der ersten Brillouinzone des reziproken Gitters gegeben, $\psi(\varphi_{\mathbf{r}_i})$ sind die Einteilchenzustände in Hartree-Näherung. Wegen der angenommenen räumlichen Translationsinvarianz hängen die lokalen Einteilchenzustände $\psi(\varphi_{\mathbf{r}_i})$ nicht vom Abstandsvektor $\mathbf{r}_i$ ab. Die Funktion $\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_{\mathbf{r}_i}) \equiv \Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi)$ muß die Bedingung

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\psi(\varphi)\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi)d\varphi = 0 \tag{3.8}$$

erfüllen [26]. Der α-Zweig der elementaren Anregungszustände

$$|\Psi_{\mathbf{k}}>= \varrho_\alpha(\mathbf{k})\,|\Psi_o> \tag{3.9}$$

liefert damit die Dispersionsbeziehung

$$\omega_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_\alpha}{S_\alpha(\mathbf{k})}\,. \tag{3.10}$$

Die Strukturfunktion $S_\alpha(\mathbf{k})$ ist gegeben durch den Ausdruck

$$S_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{<\Psi_o|\varrho^\dagger_\alpha(\mathbf{k})\varrho_\alpha(\mathbf{k})|\Psi_o>}{N(1-M_x^2)<\Psi_o|\Psi_o>}\,. \tag{3.11}$$

Der Zähler ε_α in Gl. (3.10) ist die Hartree-Einteilchenenergie

$$\begin{aligned}
\varepsilon_\alpha &= \frac{<\Psi_o|[\varrho^\dagger_{\mathbf{k}},[H,\varrho_{\mathbf{k}}]]|\Psi_o|>}{2N(1-M_x^2)<\Psi_o|\Psi_o|>} \\
&= -\frac{\lambda}{N}\Big(1-M_x^2\Big)^{-1}\sum_i \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_i \psi^2(\varphi_i)\frac{\partial\varrho^\dagger_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})}{\partial\varphi_i}\frac{\partial\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})}{\partial\varphi_i} \\
&= -\lambda\Big(1-M_x^2\Big)^{-1}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \varrho^\dagger_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\Big(\psi^2(\varphi_1)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})\Big)\,.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Wegen der Orthogonalität (3.8) und der Normierung $<\Phi_\alpha|\Phi_\beta>=\delta_{\alpha\beta}$ nimmt die Strukturfunktion die einfache Form an:

$$\begin{aligned}
S_\alpha(\mathbf{k}) &= \frac{1}{1-M_x^2} \\
&= \Big(1-M_x^2\Big)^{-1}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi\,\Phi^*_\alpha(\varphi)\Phi_\alpha(\varphi)\,.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Minimierung von ω_α bezüglich der Funktion $\Phi_\alpha(\varphi)$, ergibt die folgende einfache Feynman Gleichung:

$$-\frac{\lambda}{\psi(\varphi)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi^2(\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\Phi_\alpha(\varphi)}{\psi(\varphi)} = \omega_\alpha\Phi_\alpha(\varphi)\,. \tag{3.14}$$

Mit Hilfe der Hartree Gleichung erhalten wir weiter

$$\begin{aligned}
-\frac{\lambda}{\psi(\varphi)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi^2(\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\Phi_\alpha(\varphi)}{\psi(\varphi)} &= -\lambda\Big(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-\frac{1}{\psi(\varphi)}\frac{\partial^2\psi(\varphi)}{\partial\varphi^2}\Big)\Phi_\alpha(\varphi) \\
&= -\Big(\lambda\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+4M_x\cos(\varphi)+\mu\Big)\Phi_\alpha(\varphi)\,.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Damit schreibt sich die Gl. (3.14) in der Form

$$-\Big(\lambda\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+4M_x\cos(\varphi)+\mu\Big)\Phi_\alpha(\varphi) = \omega_\alpha\Phi_\alpha(\varphi)\,. \tag{3.16}$$

Lösung dieser Differential-Gleichung gibt die Eigenwerte ω_α und die Eigenfunktionen Φ_α.
Die Anregungsenergie (3.10) hängt offensichtlich wegen Ergebnis (3.13) in dieser Näherung nicht von $\mathbf{k}$ ab. Am kritischen Parameter $\lambda = \lambda_c = 4$ ist $\omega_1(\mathbf{k}) = \lambda_c = 4$. Im Grenzfall $\lambda \to 0$ erhalten wir mit dem Störungsergebnis (3.4) aus der Feynman Gleichung (3.14) für $\lambda \to 0$ die Relation

$$2\sqrt{2\lambda}\,\varphi\frac{\partial\Phi_\alpha(\varphi)}{\partial\varphi} - \lambda\frac{\partial^2\Phi_\alpha(\varphi)}{\partial\varphi^2} = \omega_\alpha\Phi_\alpha(\varphi)\,, \tag{3.17}$$

bzw. in niedrigster Ordnung

$$2\sqrt{2\lambda}\,\varphi\frac{\partial\Phi_\alpha(\varphi)}{\partial\varphi} = \omega_\alpha\Phi_\alpha(\varphi)\,. \tag{3.18}$$

Mit $\Phi_1(\varphi) \sim \varphi e^{-\frac{k}{2}\varphi^2}$ erhalten wir fuer den niedrigsten Anregungszweige $\alpha = 1$

$$\omega_1(\mathbf{k}) = 2\sqrt{2\lambda} + \mathcal{O}(\lambda)\,. \tag{3.19}$$

Im ungeordneten Zustand mit $M_x = 0$ reduziert sich Gl. (3.16) auf

$$-\lambda\frac{\partial^2\Phi_\alpha(\varphi)}{\partial\varphi^2} = \omega_\alpha\Phi_\alpha(\varphi)\,. \tag{3.20}$$

Die Lösungen sind gegeben durch $\Phi_\alpha(\varphi) \sim e^{i\alpha\varphi}$ bzw. $e^{-i\alpha\varphi}$ mit $\alpha = n = 1, 2, 3, ...$ Die zugehörigen Eigenwerte und Strukturfunktionen sind damit

$$S_n(\mathbf{k}) \;=\; 1, \qquad\qquad \omega_n(\mathbf{k}) = n^2\lambda\,. \tag{3.21}$$

Gleichung (3.11) der Hartree-Näherung zeigt uns, daß die berechneten Größen keine Korrelationen enthalten. Das trifft aber nicht zu in der Physik eines wechselwirkenden Vielteilchensystems, dessen Zustände korrelationsabhängig sind. Moderne Vielteilchenverfahren wie die CBF-Theorie stellen nun eine Möglichkeit dar, die mikroskopische Struktur der korrelierten Systemzustände zu behandeln und damit die Teilchenwechselwirkung zu berücksichtigen, worauf wir in den Kapiteln 4 und 5 eingehen werden.

3.3 Numerische Ergebnisse der Hartree-Näherung

Im Rahmen der Hartree Approximation wurden numerische Ergebnisse für den Ordnungsparameter M_x, den Lagrangeparameter μ und die Energie E als Funktion von λ berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. (3.1) dargestellt. Die Grundzustände für $0 \leq \lambda < \lambda_c = 4$ beschreiben eine geordnete Phase, während für $\lambda > \lambda_c = 4$ eine ungeordnete Phase vorliegt. Am kritischen Punkt $\lambda_c = 4$ (in Hartree-Näherung) tritt ein Phasenübergang zweiter Ordnung auf. Die Einteilchen-Grundzustandswellenfunktion, die zugehörige Energie und die Anregungsenergie als auch der Ordnungsparameter wur-

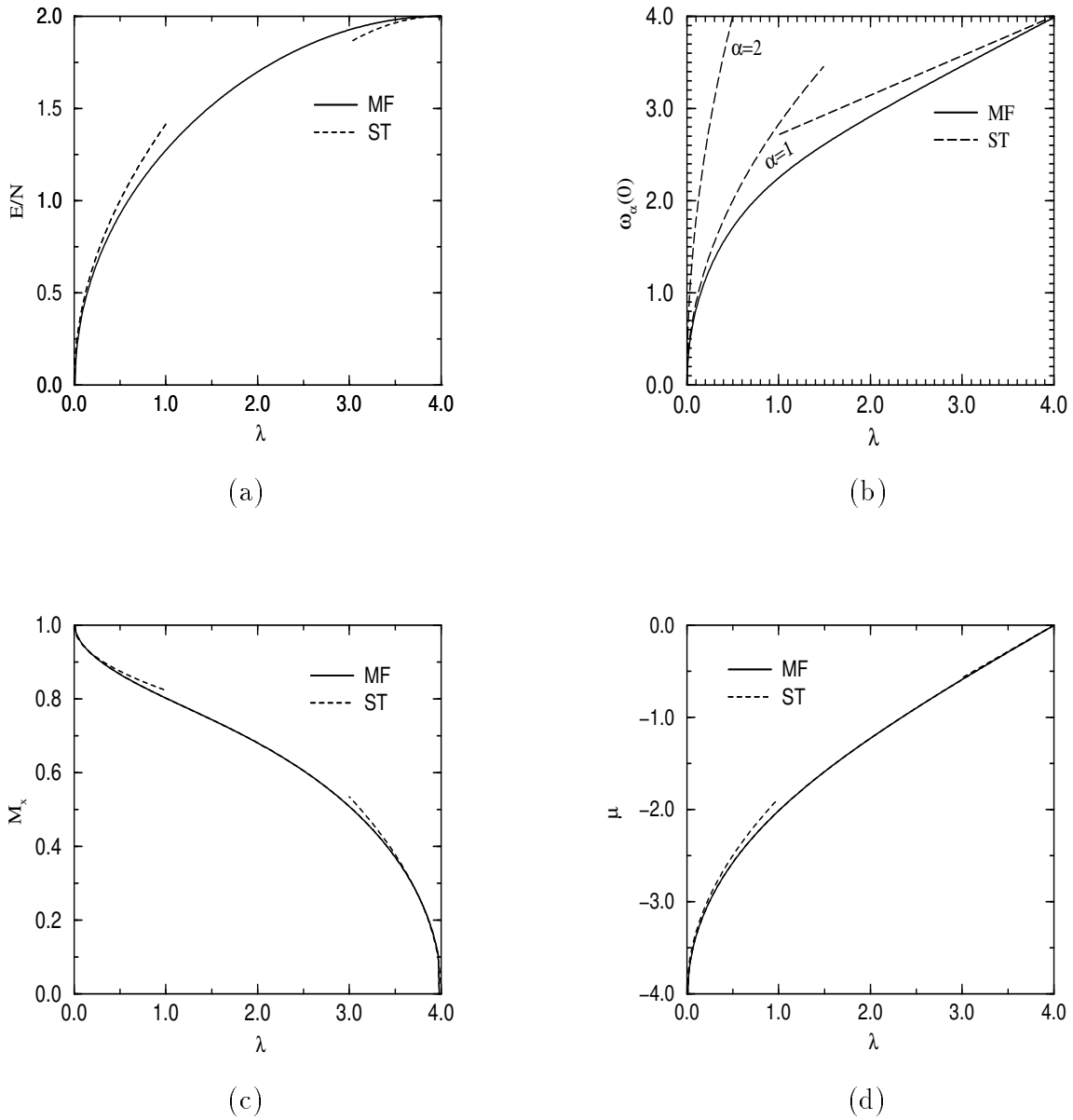


Abbildung 3.1: Ergebnisse für die optimalen Größen (a) Gitterenergie E/N, (b) Anregungsenergie $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ bei $\mathbf{k} = 0$, (c) Ordnungsparameter M_x, (d) Lagrangeparameter μ als Funktion des Kopplungsparameters λ, in Molekularfeld-Näherung. Die durchbrochenen Kurven zeigen die Ergebnisse in niedrigster nichtverschwindender Ordnung der Störungstheorie.

den für beide Phasen berechnet. Die Ergebnisse der Störungstheorie in den Bereichen $\lambda \to 0$ und $\lambda \to \lambda_c$ sind zum Vergleich mit den Resultaten der Molekularfeldtheorie in Abb. (3.1) eingezeichnet. In diesen Grenzfällen stimmen die Hartree-Resultate mit den Störungstermen überein. Sie geben dadurch einen Hinweis auf die Richtigkeit der numerischen Behandlungen der Molekularfeldgleichungen (3.1)-(3.3), (3.10) und (3.21).

Kapitel 4

CBF-Formalismus

Für eine mikroskopische Analyse des Grundzustands des O(2) Modells wird die Theorie der korrelierten Basisfunktionen (CBF) angewandt. Ausgehend von einem geeigneten Testgrundzustand, der von Einteilchen- bzw. Zweiteilchen-Korrelationen abhängt, und durch Anwendung der Hypernetted-Chain Gleichungen (in HNC/0-Näherung) wird das Energiefunktional des Hamilton-Operators durch die Diagonalelemente der reduzierten Ein- und Zwei-Teilchen Dichtematrix ausgedrückt. Diese Diagonalelemente werden durch das Minimalprinzip für die Energie optimal bestimmt. Sie ergeben sich als Lösungen der zugehörigen Euler-Lagrange Gleichungen für die lokale Einteilchendichte und die Paarverteilungsfunktion.

4.1 Hartree-Jastrow Ansatz

Der Grundzustand eines korrelierten Vielteilchensystems wie des O(2) Modells wird durch einen Hartree-Jastrow Ansatz [27, 51] genähert,

$$|\Psi >= \Omega \ \exp\Big\{\frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{k},\alpha} u_\alpha(\mathbf{k})\varrho^\dagger_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi_{\mathbf{r}_i}\})\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi_{\mathbf{r}_j}\})\Big\}|\Psi_\circ > \ . \tag{4.1}$$

Der Dichtefluktuations-Operator $\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi_{\mathbf{r}_i}\})$ in Gl. (4.1) ist explizit gegeben durch

$$\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\}) = \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi_{\mathbf{r}_i})}}\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_{\mathbf{r}_i})\,. \tag{4.2}$$

Der Zustand $|\Psi_\circ >$ ist das N-fache Produkt aus Einteilchenzuständen und der Index α charakterisiert einen Satz von weiteren Quantenzahlen. Wegen der angenommenen räumlichen Gittertranslationsinvarianz hängen die lokalen Einteilchenfunktionen nicht vom Abstandsvektor $\mathbf{r}_i$ ab. Sie hängen nur von der Variablen φ_i ab. Ansatz (4.1) kann auch geschrieben werden als ein Ausdruck im Orts- und Winkelraum

$$\frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{k},\alpha} u_\alpha(\mathbf{k})\,\varrho^\dagger_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi_i\})\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi_j\}) = \frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{k},\alpha} u_\alpha(\mathbf{k})\sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)}$$

$$\times \frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi_i)\rho(\varphi_j)}} \Phi_\alpha^\dagger(\varphi_i)\, \Phi_\alpha(\varphi_j)\,,$$

$$= \frac{1}{4} \sum_\alpha \sum_{ij} u_\alpha(\mathbf{n}_{ij}) \frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi_i)\rho(\varphi_j)}} \Phi_\alpha^\dagger(\varphi_i)\, \Phi_\alpha(\varphi_j)\,,$$

$$= \frac{1}{4} \left[\sum_i u(\mathbf{0}, \varphi_i) + \sum_{i \neq j} u(\mathbf{n}_{ij}; \varphi_i, \varphi_j) \right]. \tag{4.3}$$

Damit können wir den Exponenten in Gl. (4.1) als Summe über Ein- und Zwei-Teilchen Pseudo-Potentiale in Analogie zur Theorie des flüssigen Heliums schreiben. Dabei wird der Einteilchenanteil dem Einteilchenzustand $|\Psi_\circ>$ zugeschlagen. Das Pseudo-Potential $u(\mathbf{n}; \varphi_i, \varphi_j)$ besitzt die Eigenschaften:

$$u(\mathbf{n}, \varphi_i, \varphi_j) = u(-\mathbf{n}, \varphi_i, \varphi_j)\,, \tag{4.4}$$

$$u(\mathbf{n}, \varphi_i, \varphi_j) = u(\mathbf{n}, \varphi_j, \varphi_i)\,, \tag{4.5}$$

$$u(\mathbf{n}, \varphi_i, \varphi_j) = u(\mathbf{n}, -\varphi_i, -\varphi_j)\,, \tag{4.6}$$

wobei $\mathbf{n}$ der Relativvektor $(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$ ist.

4.2 Funktional der Grundzustandsenergie

Wir berechnen nun den Erwartungswert des Hamiltonoperators H bezüglich des korrelierten Zustands (4.1) und erhalten

$$E/N = \frac{<\Psi|H|\Psi>}{N<\Psi|\Psi>} = 2 - \frac{\lambda}{N} \sum_i \frac{<\Psi|\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}|\Psi>}{<\Psi|\Psi>} + \frac{1}{2N} \sum_{i \neq j} \Delta_{ij} \frac{<\Psi|\cos(\varphi_i - \varphi_j)|\Psi>}{<\Psi|\Psi>}\,. \tag{4.7}$$

Unter Anwendung der Jackson-Feenberg Identität [23]

$$\Psi \bigtriangledown^2 \Psi = \frac{1}{4}(\bigtriangledown^2 \Psi^2 + \Psi^2 \bigtriangledown^2 \ln \Psi^2) \tag{4.8}$$

können wir die erste Summe in Gl. (4.7) umschreiben auf

$$-\frac{\lambda}{N} \sum_i \frac{<\Psi|\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}|\Psi>}{<\Psi|\Psi>} =$$

$$-\frac{\lambda}{4N<\Psi|\Psi>} \frac{1}{(2\pi)^N} \int d\varphi_1 ... d\varphi_N \sum_i \Big(\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2} \Psi^2 + \Psi^2 \frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2} \ln \Psi^2 \Big)\,. \tag{4.9}$$

Da Ψ^2 periodisch ist, folgt weiter

$$-\frac{\lambda}{N}\sum_i \frac{<\Psi|\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}|\Psi>}{<\Psi|\Psi>} = -\frac{\lambda}{2N<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^N}\int d\varphi_1...d\varphi_N\Psi^2\sum_i\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}\ln\Psi\,. \tag{4.10}$$

Da nun

$$\ln\Psi = \ln\Omega + \frac{1}{2}\sum_{i<j}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j) + \ln\Psi_\circ \tag{4.11}$$

und $\Psi_\circ = \prod_i^N |\psi_i>$ gilt, wobei $|\psi_i>$ Einteilchenzustände sind, folgt

$$\begin{aligned}
&-\frac{\lambda}{2N<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^N}\int d\varphi_1...d\varphi_N\sum_i\Psi^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi_{i'}^2}\ln\Psi\\
&\quad= -\frac{\lambda}{2N<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^N}\int d\varphi_1...d\varphi_N\Psi^2\sum_i\frac{\partial^2}{\partial\varphi_{i'}^2}\Big(\ln\Omega\\
&\qquad\qquad +\frac{1}{2}\sum_{i<j}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)+\sum_i\ln\psi_i\Big)\,.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Wir nutzen die Beziehung

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi_{i'}^2}\sum_{i<j}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j) = \sum_{\substack{j\\ i<j}}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)+\sum_{\substack{i\\ i<j}}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_j^2}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j) \tag{4.13}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial\varphi_{i'}^2}\sum_{i<j}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j) &= \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_{i'}^2}\sum_{i\neq j}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)\,,\\
&= \frac{1}{2}\sum_{\substack{j\\ j\neq i}}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}\big(u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)+u(\mathbf{n};\varphi_j,\varphi_i)\big) = \frac{1}{2}\sum_{\substack{j\\ j\neq i}}\big(\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_j^2}\big)u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)
\end{aligned} \tag{4.14}$$

aus und schreiben für (4.12)

$$\begin{aligned}
&-\frac{\lambda}{2N<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^N}\sum_i\int d\varphi_1...d\varphi_N\ \Psi^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi_{i'}^2}\ln\Psi\\
&\quad= -\frac{\lambda}{2<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^N}\int d\varphi_1...d\varphi_N\ \Psi^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\ln\psi_1\\
&\qquad -\frac{\lambda}{8N<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^N}\sum_{i\neq j}\int d\varphi_1...d\varphi_N\ \Psi^2(\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_j^2})u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)\,,\\
&\quad= -\frac{\lambda}{2}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\rho(\varphi_1)\,\frac{\partial^2(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1^2}\\
&\qquad -\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\,\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big\{\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2}\Big\}u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,.
\end{aligned} \tag{4.15}$$

In Gl. (4.15) haben wir die Einteilchendichte

$$\rho(\varphi_1) = \frac{1}{<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^{N-1}}\int d\varphi_2...d\varphi_N\ \Psi^2 \tag{4.16}$$

eingeführt, die die Eigenschaften besitzt

$$\begin{aligned} \rho(\varphi) &> 0, \\ \rho(\varphi) &= \rho(-\varphi), \\ \int d\varphi\,\rho(\varphi) &= 1\,. \end{aligned} \tag{4.17}$$

Ebenso ist in Gl. (4.15) die winkelabhängige Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ benutzt worden. Sie ist definiert durch

$$\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \frac{1}{<\Psi|\Psi>(2\pi)^{N-2}}\int d\varphi_3...d\varphi_N\ \Psi^2\,. \tag{4.18}$$

Wichtige Eigenschaften dieser Funktion sind die folgenden:

$$g(\mathbf{0},\varphi_1,\varphi_2) = 0\,, \tag{4.19}$$

$$g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) > 0\,, \tag{4.20}$$

$$g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = g(-\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,, \tag{4.21}$$

$$g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_1)\,, \tag{4.22}$$

$$g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = g(\mathbf{n};-\varphi_1,-\varphi_2)\,. \tag{4.23}$$

Für die Normierung gilt

$$\int\ d\varphi_2\ \rho(\varphi_2)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = 1\,. \tag{4.24}$$

Durch Anwendung der Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY) Beziehung [52]

$$\begin{aligned} \rho(\varphi_1) &= \frac{1}{<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^{N-1}}\int d\varphi_2...d\varphi_N\ \Psi^2\,, \\ &= \frac{1}{<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^{N-1}}\int d\varphi_2...d\varphi_N\ \Big(e^{\frac{1}{2}\sum\limits_{i<j}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)}\Big)^2\Big|\prod_i\psi_i\Big|^2 \end{aligned} \tag{4.25}$$

für die Einteilchendichte $\rho(\varphi_1)$ können wir die Ableitung der Dichte nach dem Winkel folgern

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\varphi_1}\rho(\varphi_1) = \frac{1}{<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^{N-1}}\int d\varphi_2...d\varphi_N\Bigg\{ & e^{\sum\limits_{i<j}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)}\ 2\prod_i\psi_i\prod_{i\neq 1}\psi_i\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\psi_1 \\ & +\Big|\prod_i\psi_i\Big|^2 e^{\sum\limits_{i<j}u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)}\sum_{\substack{j\\ j\neq 1}}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_j)\Bigg\}\,, \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{<\Psi|\Psi>}\frac{1}{(2\pi)^{N-1}}\int d\varphi_2...d\varphi_N\Big\{e^{\sum\limits_{i<j} u(\mathbf{n};\varphi_i,\varphi_j)}\, 2\,\Psi_\circ^2\,\frac{\partial}{\partial\varphi_1}(\ln\psi_1)$$

$$+\Psi^2\sum_{\substack{j\\ j\neq 1}}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_j)\Big\},$$

$$= 2\,\rho(\varphi_1)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}(\ln\psi_1)+\rho(\varphi_1)\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}. \tag{4.26}$$

Gl. (4.26) erlaubt, die Ableitung des Logarithmus $\ln\psi_1$ in die Form zu bringen

$$\frac{\partial}{\partial\varphi_1}(\ln\psi_1)=\frac{1}{2}\Big\{\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}-\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\frac{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\Big\}. \tag{4.27}$$

Eine partielle Integration ergibt dann die Beziehung

$$-\frac{\lambda}{2}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\rho(\varphi_1)\frac{\partial^2(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1^2}=-\frac{\lambda}{2}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\Big\{\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\Big(\rho(\varphi_1)\frac{\partial(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)$$

$$-\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\,\frac{\partial(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1}\Big\}=\frac{\lambda}{2}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\,\frac{\partial(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1}. \tag{4.28}$$

Einsetzen von Ergebnis (4.27) im Integranden der Gl. (4.28) ergibt

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\,\frac{\partial(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1} &= \frac{1}{2}\Big\{\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\Big(\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2\\ &- \frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\,\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\frac{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\Big\}.\end{aligned} \tag{4.29}$$

Zur Berechnung des Integrals (4.28) mit Hilfe von (4.29) führen wir eine partielle Integration durch:

$$-\frac{\lambda}{2}\frac{1}{2\pi}\int\, d\varphi_1\rho(\varphi_1)\frac{\partial^2(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1^2}=\frac{\lambda}{2}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\,\frac{\partial(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1},$$

$$=\frac{\lambda}{4}\Big\{\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\Big(\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2$$

$$-\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int\, d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_2)\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\frac{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\Big\},$$

$$=\frac{\lambda}{4}\Big\{\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\Big(\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2-\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\,\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)$$

$$\times g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\Big(\rho(\varphi_1)\frac{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\Big)-\frac{\partial^2 u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1^2}\Big]\Big\},$$

$$=\frac{\lambda}{4}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\Big(\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2$$

$$+\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2 \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2) g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[D(1)+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\Big]u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,,$$

$$=\frac{\lambda}{4}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\Big(\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2+\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2$$

$$\times\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[D(1)+D(2)+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2}\Big]u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{4.30}$$

Ergebnis (4.30) setzen wir in Gl. (4.15) ein und erhalten

$$-\frac{\lambda}{N}\sum_i\frac{<\Psi|\frac{\partial^2}{\partial\varphi_i^2}|\Psi>}{<\Psi|\Psi>}$$

$$=-\frac{\lambda}{2}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\rho(\varphi_1)\frac{\partial^2(\ln\psi_1)}{\partial\varphi_1^2}-\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)$$

$$\times g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big\{\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2}\Big\}u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,,$$

$$=\frac{\lambda}{4}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\Big(\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2+\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2$$

$$\times\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[D(1)+D(2)\Big]u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{4.31}$$

In Gl. (4.31) haben wir zur Abkürzung den Differential-Operator $D(\varphi_i)\equiv D(i)$ eingeführt:

$$D(\varphi_i)=-\frac{1}{\rho(\varphi_i)}\frac{\partial}{\partial\varphi_i}\rho(\varphi_i)\frac{\partial}{\partial\varphi_i}\,. \tag{4.32}$$

Dieser ist hermitisch

$$\int d\varphi\rho(\varphi)\,f(\varphi)\,D(\varphi)\,g(\varphi)=\int d\varphi\rho(\varphi)\,g(\varphi)\,D(\varphi)\,f(\varphi) \tag{4.33}$$

und es gilt

$$\int d\varphi\rho(\varphi)\,f(\varphi)\,D(\varphi)\,g(\varphi)=\int d\varphi\rho(\varphi)\,\partial_\varphi\,g(\varphi)\,\partial_\varphi\,f(\varphi)\,, \tag{4.34}$$

denn:

$$-\int d\varphi\;\rho\;f\,D(\varphi)\,g=\int d\varphi\,f\,\partial_\varphi\Big(\rho\;\partial_\varphi\;g\Big)\,,$$

$$=\int d\varphi\,\partial_\varphi\Big(f\;\rho\;\partial_\varphi\;g\Big)-\int d\varphi\Big(\partial_\varphi\;f\Big)\;\rho\;\Big(\partial_\varphi\;g\Big)\,,$$

$$=-\int d\varphi\Big(\partial_\varphi\;f\Big)\;\rho\;\Big(\partial_\varphi\;g\Big)\,,$$

$$=-\int d\varphi\Big(\partial_\varphi\;g\Big)\,\rho\;\Big(\partial_\varphi\;f\Big)\,,$$

$$= -\int d\varphi\, \partial_\varphi \left(g\, \rho\, \partial_\varphi\, f\right) + \int d\varphi\, g\, \partial_\varphi \left(\rho\, \partial_\varphi\, f\right),$$
$$= \int d\varphi\, g\, \partial_\varphi \left(\rho\, \partial_\varphi\, f\right) \;=\; -\int d\varphi\, \rho\, g\, D(\varphi)\, f\,. \tag{4.35}$$

Der Ausdruck für die potentielle Energie kann auch geschrieben werden:

$$\frac{1}{2N}\sum_{i\neq j}\Delta_{ij}\frac{<\Psi|\cos(\varphi_i-\varphi_j)|\Psi>}{<\Psi|\Psi>}$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\Delta(\mathbf{n})\,\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\; \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\cos(\varphi_1-\varphi_2)\,. \tag{4.36}$$

Damit ergibt sich für die Energie pro Gitterpunkt:

$$E/N \;=\; 2+\frac{\lambda}{4}\frac{1}{2\pi}\int\, d\varphi_1\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\Big(\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1\, d\varphi_2\; \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\; v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,, \tag{4.37}$$

mit dem Jackson-Feenberg Potential

$$v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \frac{\lambda}{4}\Big[D(1)+D(2)\Big]u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{4.38}$$

Die Komponente $v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ beschreibt das Teilchen-Teilchen Potential $\Delta(\mathbf{n})\cos(\varphi_1-\varphi_2)$. Eine Umformung des ersten Integrals in Gl. (4.37),

$$\frac{\lambda}{4}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\Big(\frac{\partial\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2 = \frac{\lambda}{4}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\rho(\varphi_1)\Big(\frac{\partial\ln\rho(\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\Big)^2,$$
$$= \lambda\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\Big(\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\sqrt{\rho(\varphi_1)}\Big)^2,$$
$$= \lambda\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\Big(\sqrt{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\sqrt{\rho(\varphi_1)}\Big) - \lambda\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\sqrt{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\sqrt{\rho(\varphi_1)}\,,$$
$$= -\lambda\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\sqrt{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\sqrt{\rho(\varphi_1)}\,, \tag{4.39}$$

führt uns dann zum Ergebnis

$$E/N \;=\; 2-\lambda\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\sqrt{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\sqrt{\rho(\varphi_1)}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int\, d\varphi_1 d\varphi_2\; \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\; v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{4.40}$$

Das Energiefunktional Gl. (4.40) ist exakt für den Ansatz (4.1). Der Zusammenhang zwischen dem Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und der winkelabhängigen Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ist in geschlossener Form mittels der HNC Gleichungen gegeben. Unter Vernachlässigung aller elementaren Diagramme erhalten wir die

so-genannte HNC/0-Approximation [53, 54]. Der Satz dieser HNC/0-Gleichungen läßt sich durch die direkte Korrelationsfunktion $X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und die Funktion $N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ausdrücken und erlaubt ihre Berechnung und die der Funktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ bei vorgegebenem Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$.

4.3 Hypernetted-Chain Analyse

Um das Minimalprinzip für die Grundzustandsenergie anzuwenden, fassen wir die Größen $\rho(\varphi)$ und $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ als unabhängige Funktionen auf und eliminieren das Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ mit Hilfe einer Hypernetted-Chain Analyse [55]. Die HNC-Gleichungen (in der HNC/0-Näherung) lauten:

$$g(\mathbf{0},\varphi_1,\varphi_2) = 0\,, \tag{4.41}$$

$$g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = 1 + X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,, \tag{4.42}$$

$$X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = e^{\left\{u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\right\}} - N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - 1\,, \tag{4.43}$$

$$\begin{aligned} N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) &= \sum_{\mathbf{m}} \frac{1}{(2\pi)} \int d\varphi_3 \rho(\varphi_3) X(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) \\ &\quad \times \Big(X(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2) + N(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2) \Big)\,. \end{aligned} \tag{4.44}$$

Das Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ hat die Eigenschaft

$$\frac{1}{2\pi} \int d\varphi_2\, \rho(\varphi_2)\, u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = 0\,. \tag{4.45}$$

Deswegen ist es vorteilhaft, zwei Funktionen $X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und $N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ zu definieren, die die Funktionen $X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und $N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ersetzen und in Analogie zu Gl. (4.45) die Bedingungen erfüllen:

$$\frac{1}{2\pi} \int d\varphi_2\, \rho(\varphi_2)\, X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = 0\,, \tag{4.46}$$

$$\frac{1}{2\pi} \int d\varphi_2\, \rho(\varphi_2)\, N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = 0\,. \tag{4.47}$$

Die Nutzung der Eigenschaften der Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$, Gln. (4.19) und (4.24), führt zu den Relationen

$$\frac{1}{2\pi} \int d\varphi_2\, \rho(\varphi_2) \Big(g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - 1 \Big) = -\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}} \tag{4.48}$$

und

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_1\, d\varphi_2\, \rho(\varphi_1)\, \rho(\varphi_2) \Big(g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - 1 \Big) = -\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\,. \tag{4.49}$$

Wir haben:

$$\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\,\rho(\varphi_2)\Big(X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)=-\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\,, \tag{4.50}$$

$$\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1\,d\varphi_2\,\rho(\varphi_1)\,\rho(\varphi_2)\Big(X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)=-\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\,, \tag{4.51}$$

bzw.

$$X(\mathbf{n};\varphi_1)+N(\mathbf{n};\varphi_1)=-\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\,, \tag{4.52}$$

$$X(\mathbf{n};\varphi_2)+N(\mathbf{n};\varphi_2)=-\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\,, \tag{4.53}$$

$$X(\mathbf{n})+N(\mathbf{n})=-\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\,. \tag{4.54}$$

Anhand der Gleichungen (4.52)-(4.54) sehen wir, daß die Funktionen $X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und $N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ durch

$$X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;=\; X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;-\;X(\mathbf{n};\varphi_1)\;-\;X(\mathbf{n};\varphi_2)+X(\mathbf{n})\,, \tag{4.55}$$

$$N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;=\; N(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;-\;N(\mathbf{n};\varphi_1)\;-\;N(\mathbf{n};\varphi_2)+N(\mathbf{n}) \tag{4.56}$$

ausgedrückt werden können. Für die Funktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ gilt

$$g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)=1\;-\;\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\;+\;X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;+\;N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{4.57}$$

Da $g(\mathbf{0},\varphi_1,\varphi_2)=0$ erhalten wir schließlich

$$g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;=\; \Big(1\;-\;\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\Big)\Big(1\;+\;X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;+\;N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)\,, \tag{4.58}$$

$$X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;=\; \Big(1\;-\;\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\Big)\Big[e^{\left\{u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\right\}}-1\Big]-N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,, \tag{4.59}$$

$$\begin{aligned} N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;=\; & \sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{(2\pi)}\int d\varphi_3\rho(\varphi_3)X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) \\ & \times\Big(X'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)+N'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)\Big)\,. \end{aligned} \tag{4.60}$$

Wir eliminieren nun das Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ in der Korrelationsenergie

$$\begin{aligned} E_c/N &= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\;g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\ &\quad\times\Big[v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\frac{\lambda}{4}\Big(D(1)+D(2)\Big)u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big]\,, \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\;g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\ &\quad\times\Big[v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\frac{\lambda}{4}\Big(D(1)+D(2)\Big)\Big\{\ln\;g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big\}\Big]\,. \end{aligned} \tag{4.61}$$

Wir merken an, daß gilt

$$
\begin{aligned}
& g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\, D(1)\ \ln\ g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&\quad = -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\,\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\left(\rho(\varphi_1)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\ln g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\right), \\
&\quad = -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\partial_{\varphi_1}\,\left(\rho(\varphi_1)\,\partial_{\varphi_1}\,\ln g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\right), \\
&\quad = -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\partial_{\varphi_1}\left(\rho(\varphi_1)\,\frac{1}{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\partial_{\varphi_1}\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\right), \\
&\quad = -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\frac{1}{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\,\partial_{\varphi_1}\left(\rho(\varphi_1)\,\partial_{\varphi_1}\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\right) \\
&\qquad -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\rho(\varphi_1)\,\partial_{\varphi_1}\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\frac{-\partial_{\varphi_1}\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)^2}\,, \\
&\quad = D(1)\ \ g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + (2\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\partial_{\varphi_1}\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)})^2\frac{1}{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\,, \\
&\quad = D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + 4\Big(\partial_{\varphi_1}\,\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\Big)^2
\end{aligned}
\tag{4.62}
$$

und

$$
\begin{aligned}
& \frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)D(1)\ \ln g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&\quad = \ \frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \qquad (4.63) \\
&\qquad +\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\ \ 4.\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2, \\
&\quad = \ \frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\ \Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2. \qquad (4.64)
\end{aligned}
$$

Mit Gl. (4.34) haben wir dann

$$
\begin{aligned}
& \frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\ \Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2 \\
&= \frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\ \int\ d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\ \sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}D(1)\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)} \qquad (4.65)
\end{aligned}
$$

und

$$
-\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\int\frac{1}{(2\pi)^2}\ \int\ d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)D(1)N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)
$$

$$= -\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2 \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\,\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\,. \tag{4.66}$$

Mit diesen Ergebnissen schreiben wir die Korrelationsenergie (4.61) als

$$\begin{aligned}
E_c/N &= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2 \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\
&\times\Big[v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\frac{\lambda}{4}\Big(D(1)+D(2)\Big)\Big\{\ln\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big\}\Big]\,,\\
&= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2 \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\; v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\
&+\frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2 \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\Big[\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2+\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_2}\Big)^2\Big]\\
&-\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2 \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\Big[\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\\
&\qquad\qquad + \frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_2}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_2}\Big]\,,
\end{aligned} \tag{4.67}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
E_c/N \;=\; \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\; \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\;\Big[g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\; v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\
+\lambda\, F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big]\,.
\end{aligned} \tag{4.68}$$

Die Funktion F ist darin gegeben durch

$$\begin{aligned}
F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;=\; &\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2+\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_2}\Big)^2\\
&-\frac{1}{4}\Big\{\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\;+\;\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_2}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_2}\Big\}\,.
\end{aligned} \tag{4.69}$$

Unter Benutzung von Gln. (4.33) und (4.34) folgt

$$\begin{aligned}
F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;=\; &\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\Big[D(1)+D(2)\Big]\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\\
&-\frac{1}{4}\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[D(1)+D(2)\Big]N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,.
\end{aligned} \tag{4.70}$$

Das Energiefunktional lautet schließlich

$$
\begin{aligned}
E/N &= 2 - \lambda \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_1 \sqrt{\rho(\varphi_1)}\ \frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2}\ \sqrt{\rho(\varphi_1)} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}\neq 0} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_1 d\varphi_2\, \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2) \left[g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\ v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \lambda F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \right] . \quad (4.71)
\end{aligned}
$$

Um das Minimalprinzip der Energie zur Optimierung anzuwenden, gehen wir von dieser Gleichung (4.71) aus.

Kapitel 5

CBF Optimierung

Um die optimalen Funktionen $\rho(\varphi)$ und $g(\mathbf{n},\varphi_1,\varphi_2)$ zu bestimmen, nutzen wir das Minimalprinzip für die Energie E/N und konstruieren die zugehörigen Euler-Lagrange Gleichungen. Zunächst bilden wir die Variation der Energie ausgehend von der Gleichung (4.71):

$$\begin{aligned}
(\delta E)/N &= -2\lambda\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1 \delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\sqrt{\rho(\varphi_1)} \\
&\quad +\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\ \delta\rho(\varphi_1)\ \rho(\varphi_2)\ g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\ v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&\quad +\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\ \rho(\varphi_1)\ \rho(\varphi_2)\ \delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\ v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&\quad +\lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\ \delta\rho(\varphi_1)\ \rho(\varphi_2)\ F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&\quad +\frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\, \rho(\varphi_1)\ \rho(\varphi_2)\ \delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \qquad (5.1)
\end{aligned}$$

Die Variation der Funktion $F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$, Gl. (4.69), ergibt

$$\begin{aligned}
\delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) &= 4\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\ \frac{\partial\delta\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1} \\
&\quad -\frac{1}{2}\frac{\partial\delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\ \frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1} \\
&\quad -\frac{1}{2}\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\ \frac{\partial\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\,. \qquad (5.2)
\end{aligned}$$

Mit der Definition (4.70) erhalten wir

$$\begin{aligned}
\delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) &= 2\,\delta\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\Big[D(1)+D(2)\Big]\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)} \\
&\quad -\frac{1}{4}\ \delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[D(1)+D(2)\Big]N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)
\end{aligned}$$

$$-\frac{1}{4}\, g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[D(1)+D(2)\Big]\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.3}$$

5.1 Renormierte Hartree Gleichung

Da die Funktionen $\rho(\varphi)$ und $g(\mathbf{n},\varphi_1,\varphi_2)$ unabhängig variiert werden können, erhalten wir zwei Euler-Lagrange Gleichungen. Die Funktionalableitung der Energie nach der Wurzel der Dichte, $\sqrt{\rho(\varphi_1)}$, bei festgehaltener Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ mit der Nebenbedingung $\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\rho(\varphi_1)=1$ liefert die renormierte Hartree Gleichung

$$\delta\left(\frac{E}{N}\bigg|_g \;-\; \mu\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\;\rho(\varphi_1)\right)=0 \tag{5.4}$$

mit dem Lagrange-Parameter μ. Zur Gewinnung expliziter Ausdrücke für Gl. (5.4) variieren wir die Energie pro Gitterpunkt (4.71) nach der Größe $\sqrt{\rho(\varphi_1)}$:

$$\begin{aligned}\frac{\delta}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}}\bigg|_g\frac{E}{N} &= -2\lambda\;\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\sqrt{\rho(\varphi_1)}\\ &+\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\,\rho(\varphi_2)\;g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\\ &+\lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\;\rho(\varphi_2)\;F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\\ &-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_2\,d\varphi_3\;\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)\;\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)}{\partial\varphi_2}\;\frac{\partial}{\partial\varphi_2}\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}}\,.\end{aligned} \tag{5.5}$$

Unter Benutzung von Gl. (4.70) erhalten wir weiter

$$\begin{aligned}\frac{\delta}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}}\bigg|_g\frac{E}{N} &= -2\lambda\;\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\sqrt{\rho(\varphi_1)}\\ &+\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\,\rho(\varphi_2)\;g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\\ &+\lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\;\rho(\varphi_2)\;F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\\ &-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_2 d\varphi_3\;\rho(\varphi_2)\;\rho(\varphi_3)\;g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)\;D(3)\;\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}}\,.\end{aligned} \tag{5.6}$$

Die Funktionalableitung der Funktion $N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)$, die die Knotendiagramme erfaßt, nach der Wurzel $\sqrt{\rho(\varphi_1)}$ kann mit Hilfe der Ornstein-Zernike-Relation berechnet werden [56]. Diese Relation ist identisch mit der Chain-Gleichung

$$N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3) = \sum_{\mathbf{m}} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_3 \rho(\varphi_1) X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1) \times \Big(X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) + N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) \Big) . \tag{5.7}$$

Wir können diese Gleichung im $\mathbf{k}$-Raum unter Benutzung der Fourier-Transformierten

$$X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2) = \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2), \tag{5.8}$$

$$N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2) = \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) , \tag{5.9}$$

$$X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2) , \tag{5.10}$$

$$N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2) \tag{5.11}$$

und der Identitäten

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{n}-\mathbf{n}')} = N\,\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}') , \tag{5.12}$$

$$\sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{n}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} = N\,\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \tag{5.13}$$

schreiben:

$$\begin{aligned}
N'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_3) &= \sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{n}} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_1 \rho(\varphi_1) X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1) \\
&\qquad \times \Big(X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) + N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) \Big) , \\
&= \sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_1 \rho(\varphi_1)\, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{n}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{n}-\mathbf{m})} X'(\mathbf{k}';\varphi_2,\varphi_1) \\
&\qquad \times \Big(X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) + N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) \Big) , \\
&= \sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_1 \rho(\varphi_1)\, \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}').\mathbf{n}}\, e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{m}} X'(\mathbf{k}';\varphi_2,\varphi_1) \\
&\qquad \times \Big(X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) + N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) \Big) , \\
&= \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_1 \rho(\varphi_1)\, X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1) \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{m}} \Big(X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) + N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3) \Big).
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Die Ornstein-Zernike Beziehung hat deshalb im $\mathbf{k}$-Raum die bequemere Form

$$N'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_3) = \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_1 \rho(\varphi_1)\; X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1) \Big(X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3) + N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3) \Big). \tag{5.15}$$

Damit ist die Funktionalableitung dieser Gleichung gegeben durch

$$\begin{aligned}\delta N'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_3) &= \frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\Big\{\delta\rho(\varphi_1)X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\\ &+ \rho(\varphi_1)\delta X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\\ &+ \rho(\varphi_1)X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\;\delta S(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big\}. \end{aligned} \tag{5.16}$$

Wir haben in Gl. (5.16) die Chain-Gleichung (4.58) und die Definition der winkelabhängigen Zweiteilchen-Strukturfunktion

$$S(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2) = 1+\sum_{\mathbf{n}=0} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}}\Big(g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-1+\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}\Big) \tag{5.17}$$

benutzt. Wir setzen nun die Variation $\delta X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$ in Gl. (5.16) ein, also erhalten wir

$$\begin{aligned}\delta N'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_3) = \frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\Big\{&\delta\rho(\varphi_1)X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\\ &+\rho(\varphi_1)\Big(\delta S(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)-\delta N'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big)\Big(X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\\ &+\rho(\varphi_1)X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\;\delta S(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big\}, \end{aligned} \tag{5.18}$$

bzw.

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\delta N'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(\delta(\varphi_1-\varphi_3)+\rho(\varphi_1)\Big(X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\Big)\\ &\quad=\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\Big\{\delta\rho(\varphi_1)X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\\ &\quad+\rho(\varphi_1)\,\delta S(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\\ &\quad+\rho(\varphi_1)X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\,\delta S(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big\}. \end{aligned} \tag{5.19}$$

Wir multiplizieren die Gleichung (5.19) beiderseits mit $\sqrt{\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)}$ und benutzen die folgenden Definitionen

$$\begin{aligned}\tilde{g}(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3) &= \sqrt{\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)}g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)\,,\\ \tilde{X}'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3) &= \sqrt{\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)}X'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)\,,\\ \tilde{N}'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3) &= \sqrt{\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)}N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)\,. \end{aligned} \tag{5.20}$$

Es folgt dann für (5.19)

$$\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\delta\tilde{N}'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(\delta(\varphi_1-\varphi_3)+\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)+\tilde{N}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_1 \Big\{ 2\sqrt{\rho(\varphi_2)}\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)} X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3) + \tilde{N}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big)$$

$$+\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\Big(\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3) + \tilde{N}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big) + \tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\,\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\Big\}. \tag{5.21}$$

In Matrix-Schreibweise hat diese Gleichung die Form

$$\delta\tilde{N}' * \Big(1 + \tilde{X}' + \tilde{N}'\Big) \;=\; K * \Big(\tilde{X}' + \tilde{N}'\Big) + \delta\tilde{S} * \Big(\tilde{X}' + \tilde{N}'\Big) + \tilde{X}' * \delta\tilde{S}\,. \tag{5.22}$$

Die Matrix K in Gl. (5.22) ist gegeben durch

$$K = 2\sqrt{\rho(\varphi_2)}\,\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}\,X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.23}$$

Da wir die Variation der nodalen Funktion bei fester Funktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ durchführen, können wir Gl. (5.22) vereinfachen zu

$$\delta\tilde{N}' * \Big(1 + \tilde{X}' + \tilde{N}'\Big) = K * \Big(\tilde{X}' + \tilde{N}'\Big)\,. \tag{5.24}$$

Mit Hilfe der Ornstein-Zernike Relation, die in Matrixform geschrieben werden kann als

$$\tilde{N}' = \tilde{X}' * \Big(\tilde{X}' + \tilde{N}'\Big)\,, \tag{5.25}$$

erhalten wir die folgenden beiden Identitäten

$$\tilde{X}' + \tilde{N}' = \tilde{X}' * \Big(1 + \tilde{X}' + \tilde{N}'\Big)\,, \tag{5.26}$$

$$\Big(1 - \tilde{X}'\Big) * \Big(1 + \tilde{X}' + \tilde{N}'\Big) = 1\,. \tag{5.27}$$

Gleichungen (5.26) und (5.27) ergeben sich durch beiderseitige Addition von $\tilde{X}'$ bzw. Eins zur Gleichung (5.25). Wir multiplizieren Gleichung (5.24) mit $\Big(1 + \tilde{X}' + \tilde{N}'\Big)^{-1}$, wenden Gln. (5.26), (5.27) an und erhalten

$$\delta\tilde{N}' = K * \tilde{X}'\,. \tag{5.28}$$

Diese Gleichung kann in expliziter Integralform geschrieben werden

$$\delta\tilde{N}'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_3) = 2\sqrt{\rho(\varphi_2)}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\,\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\,, \tag{5.29}$$

bzw.

$$\sqrt{\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)}\;\delta N'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_3) = \sqrt{\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1$$

$$\times\, 2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\,X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3)\,. \tag{5.30}$$

Daraus folgen die Beziehungen

$$\frac{\delta N'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_3)}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}} = 2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\;X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\;X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_3) \tag{5.31}$$

und

$$\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}} = 2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\;\sum_{\mathbf{m}} X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1)\;X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\,. \tag{5.32}$$

Wir können das letzte Integral in Gleichung (5.6) in der Form schreiben

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int\; d\varphi_2 d\varphi_3\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)\;g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)D(3)\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}}\\
&\quad=\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_2\,d\varphi_3\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)\Big(g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)-g(\mathbf{0};\varphi_2,\varphi_3)\Big)\\
&\qquad\times D(3)\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}}\,,\\
&\quad=2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\sum_{\mathbf{n}\,\mathbf{m}}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_2\,d\varphi_3\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)\,g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)\\
&\qquad\times D(3)\Big(X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1)\;X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\,.
\end{aligned} \tag{5.33}$$

In Gl. (5.33) haben wir nun die Wirkung des Operators D auf das Produkt $\tilde{X}'*\tilde{X}'$ zu berechnen. In Kurzschreibweise finden wir:

$$\begin{aligned}
D(1)X'(12)\,X'(13) &= \frac{-1}{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\left(\rho(\varphi_1)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}X'(12)\,X'(13)\right),\\
&=\frac{-1}{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\left\{\rho(\varphi_1)X'(12)\frac{\partial X'(13)}{\partial\varphi_1}+\rho(\varphi_1)X'(13)\frac{\partial X'(12)}{\partial\varphi_1}\right\},\\
&=\frac{-1}{\rho(\varphi_1)}\left\{X'(12)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\rho(\varphi_1)\frac{\partial X'(13)}{\partial\varphi_1}+\rho(\varphi_1)\frac{\partial X'(12)}{\partial\varphi_1}\frac{\partial X'(13)}{\partial\varphi_1}\right.\\
&\quad\left.+X'(13)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\rho(\varphi_1)\frac{\partial X'(12)}{\partial\varphi_1}+\rho(\varphi_1)\frac{\partial X'(12)}{\partial\varphi_1}\frac{\partial X'(13)}{\partial\varphi_1}\right\},\\
&=X'(12)\,D(1)\,X'(13)+X'(13)\,D(1)\,X'(12)-2\,\frac{\partial X'(12)}{\partial\varphi_1}\,\frac{\partial X'(13)}{\partial\varphi_1}\,.
\end{aligned} \tag{5.34}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}
&D(3)\Big(X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1)X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\\
&\qquad\qquad= X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1)D(3)X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\,.
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Durch Benutzung der Gleichungen (5.33), (5.35), (4.58) und (4.60) folgt

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_2 d\varphi_3 \rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)\, g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)\, D(3)\, \frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}} \\
&\quad = \sum_{\mathbf{n}\,\mathbf{m}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_2 d\varphi_3 \rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)\; g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3) \\
&\qquad \times X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1) D(3) X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\, 2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\,, \\
&\quad = \sum_{\mathbf{n}\,\mathbf{m}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_2 d\varphi_3 \rho(\varphi_2)\rho(\varphi_3)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1) \\
&\qquad \times \Big(1+\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}} + X'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3) + N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_3)\Big) D(3) X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\, 2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\,, \\
&\quad = \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_3 \rho(\varphi_3) \sum_{\mathbf{m}} N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\, D(3)\, X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\, 2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\,. \qquad (5.36)
\end{aligned}$$

Mit diesem Ergebnis können wir Gl. (5.6) in die Form bringen

$$\begin{aligned}
\frac{\delta}{\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)}}\bigg|_g \frac{E}{N} &= -2\lambda\, \frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\sqrt{\rho(\varphi_1)} \\
&+ \sum_{\mathbf{n}\neq 0} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_2\, \rho(\varphi_2)\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\; 2\sqrt{\rho(\varphi_1)} \\
&+ \lambda \sum_{\mathbf{n}\neq 0} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_2\, \rho(\varphi_2)\; F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\; 2\sqrt{\rho(\varphi_1)} \\
&- \frac{\lambda}{4} \sum_{\mathbf{m}} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_3\; \rho(\varphi_3)\; N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\, D(3)\, X'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_1)\; 2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\,. \qquad (5.37)
\end{aligned}$$

Als Endergebnis folgt damit aus Gl. (5.4) die renormierte Hartree-Gleichung für die Wurzel der Teilchendichte,

$$\left[-\lambda\, \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + v_d(\varphi) + v_e(\varphi) \right] \sqrt{\rho(\varphi)} = \mu\sqrt{\rho(\varphi)}. \qquad (5.38)$$

Das renormierte Hartree-Potential $\Big[\, v_d(\varphi_1) + v_e(\varphi_1) \Big]$ ist zusammengesetzt aus den Komponenten

$$\begin{aligned}
v_d(\varphi_1) &= \sum_{\mathbf{n}\neq 0} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_2\, \rho(\varphi_2)\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2), \\
v_e(\varphi_1) &= \lambda \sum_{\mathbf{n}\neq 0} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_2\, \rho(\varphi_2)\; F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&\quad - \frac{\lambda}{4} \sum_{\mathbf{m}} \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_3\; \rho(\varphi_3)\; N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\, D(3)\, X'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_1). \qquad (5.39)
\end{aligned}$$

Ausgehend von einem geeigneten Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ zusammen mit den Hypernetted-Chain Gleichungen (in HNC/0-Näherung) ermöglicht Gleichung (5.38) dann

eine optimale Bestimmung der Einteilchendichte $\rho(\varphi)$.

5.2 Renormierte Schrödingergleichung

Die Euler-Lagrange Gleichung für die optimale Paarverteilungsfunktion gewinnen wir aus der Variation des Energiefunktionals nach der Funktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ bei fester Dichte $\rho(\varphi)$. Ausführen der Variation gibt:

$$\left.\frac{\delta E}{N}\right|_\rho = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\,\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)$$
$$\times\Big\{\delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\lambda\,\delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big\}\,. \tag{5.40}$$

Durch Einsetzen der Variation von $\delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ aus Gl. (5.3) erhalten wir damit

$$\begin{aligned}\left.\frac{\delta E}{N}\right|_\rho \;=\;& \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\rho(\varphi_1)\;\rho(\varphi_2)\;\Big\{\delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\ &+2\,\lambda\,\delta\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\Big[D(1)+D(2)\Big]\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\\ &-\frac{\lambda}{4}\,\delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[D(1)+D(2)\Big]N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\ &-\frac{\lambda}{4}\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[D(1)+D(2)\Big]\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big\}.\end{aligned} \tag{5.41}$$

Die Variation nach der Wurzel $\sqrt{g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}$ ergibt weiter

$$\begin{aligned}&\frac{\delta E/N}{\delta\sqrt{g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}} = \frac{1}{2}\rho(\varphi_1)\;\rho(\varphi_2)\;\Big(2\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\,v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\ &+2\,\lambda\Big[D(1)+D(2)\Big]\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\\ &-\frac{\lambda}{4}\,2\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\Big[D(1)+D(2)\Big]N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)\\ &-\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4\rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\Big[D(3)+D(4)\Big]\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta\sqrt{g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}}\,.\end{aligned} \tag{5.42}$$

Die Funktionalableitung der nodalen Funktion $N'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)$ nach der Wurzel $\sqrt{g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}$ bei fester Teilchendichte $\rho(\varphi)$ gewinnen wir aus Gleichung (5.22) durch Variation,

$$\delta\tilde{N}'*\Big(1+\tilde{X}'+\tilde{N}'\Big)=\tilde{X}'*\delta\tilde{S}+\delta\tilde{S}*\Big(\tilde{X}'+\tilde{N}'\Big)\,. \tag{5.43}$$

Mit Gln. (5.26) und (5.27) läßt sich Gl. (5.43) auch schreiben

$$\delta\tilde{N}' \;=\; \tilde{X}'*\delta\tilde{S}*\Big(1-\tilde{X}'\Big)+\delta\tilde{S}*\tilde{X}'\,,$$

$$= \quad \delta\tilde{S} * \tilde{X}' + \tilde{X}' * \delta\tilde{S} - \tilde{X}' * \delta\tilde{S} * \tilde{X}' \,, \tag{5.44}$$

bzw.

$$\delta\tilde{N}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_4) = \frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1 \Big\{ \delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_4)$$
$$+\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\,\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_4) - \tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\,\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)\,\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_4)\Big\}\,. \tag{5.45}$$

Da die Ableitung nach $\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$ ausgeführt werden soll, wird Gleichung (5.45) so umgeformt, daß auf der rechten Seite auch nur $\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$ auftritt. Mit der Dirac δ-Funktion gelangen wir zu folgendem Ausdruck:

$$\begin{aligned}
\delta\tilde{N}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_4) &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\, \delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_1)\,\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_4)\;\delta(\varphi_2-\varphi_3) \\
&+ \frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\, \tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\;\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)\;\delta(\varphi_2-\varphi_4) \\
&+ \frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\;\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\,\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)\,\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_4)\,.
\end{aligned} \tag{5.46}$$

Für die Funktionalableitung nach $\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$ ergibt sich deshalb

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\tilde{N}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta\tilde{S}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)} &= \tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_4)\;\delta(\varphi_2-\varphi_3) \\
&+\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\;\delta(\varphi_2-\varphi_4) \\
&-\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\,\tilde{X}'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_4)\,.
\end{aligned} \tag{5.47}$$

Wir gehen nun von (den Tilde-Größen) Gl. (5.47) zur Variationsableitung

$$\frac{\sqrt{\rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)}\,\delta N'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_4)}{\sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}\,\delta S(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)} = \Big\{\sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_4)}\,X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_4)\;\delta(\varphi_2-\varphi_3)$$
$$+\sqrt{\rho(\varphi_3)\rho(\varphi_1)}\,X'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\,\delta(\varphi_2-\varphi_4)$$
$$-\sqrt{\rho(\varphi_3)\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\rho(\varphi_4)}X'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\,X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_4)\Big\} \tag{5.48}$$

über und erhalten

$$\begin{aligned}
\frac{\delta N'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta S(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)} &= \rho(\varphi_1)\;X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_4)\delta(\varphi_2-\varphi_3) \\
&+\rho(\varphi_1)\;X'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\delta(\varphi_2-\varphi_4) \\
&-\;\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\,X'(\mathbf{k};\varphi_3,\varphi_1)\,X'(\mathbf{k};\varphi_2,\varphi_4)\,.
\end{aligned} \tag{5.49}$$

Mit Hilfe der Gleichungen (5.8-5.13) erhalten wir

$$\begin{aligned}\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \sum_{\mathbf{m}'} \delta g(\mathbf{m}';\varphi_2,\varphi_4) \Bigg(& \rho(\varphi_1) X'(\mathbf{n}-\mathbf{m}';\varphi_1,\varphi_4)\,\delta(\varphi_2-\varphi_3) \\ & +\rho(\varphi_1)\; X'(\mathbf{n}-\mathbf{m}';\varphi_3,\varphi_1)\delta(\varphi_2-\varphi_4) \\ & -\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{m}} X'(\mathbf{n}-\mathbf{m}'-\mathbf{m});\varphi_3,\varphi_1)\, X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_4)\Bigg). \end{aligned} \tag{5.50}$$

Damit ergibt sich die Variation

$$\begin{aligned}\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)} &= \rho(\varphi_1)\; X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_4)\,\delta(\varphi_2-\varphi_3) \\ & \quad +\rho(\varphi_1)\; X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_3,\varphi_1)\,\delta(\varphi_2-\varphi_4) \\ & \quad -\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{m}} X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}'-\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_1)\, X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_4)\,. \end{aligned} \tag{5.51}$$

Nun berechnen wir mit Hilfe der Gleichungen (5.34), (5.51) und der Chain-Gleichung (4.58) das Integral

$$\begin{aligned}&\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\Big(g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)-g(\mathbf{0};\varphi_3,\varphi_4)\Big)\,D(4)\,\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta\sqrt{g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}} \\ &= 2\sqrt{g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4) g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\,D(4) \\ &\quad \times\Bigg(\rho(\varphi_1)\; X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_4)\,\delta(\varphi_2-\varphi_3)+\rho(\varphi_1)\; X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_3,\varphi_1)\,\delta(\varphi_2-\varphi_4) \\ &\quad -\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{m}} X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}'-\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_1)\, X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_4)\Bigg). \end{aligned} \tag{5.52}$$

Als Nächstes bestimmen wir nun die in Gl. (5.52) auftretenden drei Integrale.
Erstes Integral:

$$\begin{aligned}&\rho(\varphi_1)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4) g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\,D(4)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_4)\,\delta(\varphi_2-\varphi_3) \\ &= \rho(\varphi_1)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_4)\,\delta(\varphi_2-\varphi_3)\;\; D(4)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\,, \\ &= \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_4 \rho(\varphi_4)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_4)\, D(4)\, g(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_4)\,, \\ &= \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_4 \rho(\varphi_4)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_4)\, D(4) \\ &\qquad \times\Big(X'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_4)+N'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_4)\Big)\,. \end{aligned} \tag{5.53}$$

Zweites Integral:

$$
\begin{aligned}
&\rho(\varphi_1)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\, D(4)\; X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_3,\varphi_1)\,\delta(\varphi_2-\varphi_4)\\
&= \rho(\varphi_1)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_3,\varphi_1)\,\delta(\varphi_2-\varphi_4)\, D(4)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\,,\\
&= \rho(\varphi_1)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\,\delta(\varphi_2-\varphi_4)\, D(4)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_3,\varphi_1)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\,,\\
&= \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_3 \rho(\varphi_3)\, D(2)\; X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_3,\varphi_1)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_2)\,,\\
&= \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\, D(2)\; \sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_3 \rho(\varphi_3) X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_3,\varphi_1)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_2)\,,\\
&= \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\, D(2)\; N'(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)\,.
\end{aligned}
\tag{5.54}
$$

Drittes Integral:

$$
\begin{aligned}
&-\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{nm}}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\, D(4)\\
&\qquad\qquad \times X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}'-\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_1)\, X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_4)\,,\\
&= -\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{nm}}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\, X'(\mathbf{n}-(\mathbf{n}'+\mathbf{m});\varphi_3,\varphi_1)\\
&\qquad\qquad \times g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\;\; D(4)\, X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_4)\,,\\
&= -\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{nm}}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\, X'(\mathbf{n}-(\mathbf{n}'+\mathbf{m});\varphi_3,\varphi_1)\\
&\qquad\qquad \times\Big(1+\delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}+X'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)+N'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\Big)\, D(4)\, X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_4)\,,\\
&= -\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{m}}\int d\varphi_4 \rho(\varphi_4)\, N'(\mathbf{n}'-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_4)\, D(4)\, X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_4)\,,\\
&= -\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\sum_{\mathbf{n}}\int d\varphi_4 \rho(\varphi_4)\, N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_4)\, D(4)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_2,\varphi_4)\,.
\end{aligned}
\tag{5.55}
$$

Mit diesen Ergebnissen erhalten wir für Gl. (5.52) den Ausdruck

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\lambda}{8}\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4\, \rho(\varphi_3)\,\rho(\varphi_4)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\,\Big[D(3)+D(4)\Big]\,\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}\\
&= -\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\, g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)\, D(4)\,\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta\sqrt{g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}}\,,\\
&= -\frac{\lambda}{4}\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\Bigg(\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_4 \rho(\varphi_4)\, X'(\mathbf{n}-\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_4)\, D(4)\, X'(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_4)\\
&\qquad\qquad +D(2)\; N'(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)\Bigg)\, 2\sqrt{g(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}\,.
\end{aligned}
\tag{5.56}
$$

Die Variationsableitung Gl. (5.42) schreibt sich nun:

$$\frac{\delta E/N}{\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}} = \frac{1}{2}\rho(\varphi_1)\ \rho(\varphi_2)\Bigg\{2\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\,v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$$
$$+2\,\lambda\Big[D(1)+D(2)\Big]\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}$$
$$-\frac{\lambda}{4}\,2\,\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\Big[D(1)+D(2)\Big]\,N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$$
$$-\frac{\lambda}{2}\,2\,\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\Bigg(\sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_4\rho(\varphi_4)X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_4)\,D(4)\,X'(\mathbf{m};\varphi_4,\varphi_2)$$
$$+D(2)\,N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Bigg)\Bigg\}\,. \tag{5.57}$$

Wir erhalten somit die renormierte Schrödinger Gleichung

$$\lambda\Big[D(1)+D(2)\Big]\,\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}$$
$$+\Bigg(v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Bigg)\,\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}=0\,. \tag{5.58}$$

Das in Gl. (5.58) auftretende induzierte Potential $w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ist definiert durch den Ausdruck

$$w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = -\frac{\lambda}{2}\Big[D(1)+D(2)\Big]N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$$
$$-\frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_3\,\rho(\varphi_3)X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\,D(3)\,X'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)\,,$$
$$=-\lambda\,D(1)\,N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-\frac{\lambda}{2}C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.59}$$

Die Größe

$$C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)=\sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_3\rho(\varphi_3)\,X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\,D(3)\,X'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)\,, \tag{5.60}$$

die in Gl. (5.59) auftritt, wurde zur kürzeren Schreibweise eingeführt.
Um die Korrelationseffekte in der optimalen Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ einfacher zu analysieren, definieren wir die gemittelte Korrelationsfunktion [57]:

$$\begin{aligned} g(\mathbf{n}) &= \frac{<\Psi|\cos(\varphi_i-\varphi_j)\Psi>}{<\Psi|\Psi>}\,,\\ &= \delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}+\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1 d\varphi_2\ \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\ g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\cos(\varphi_1-\varphi_2)\,,\\ &= \delta_{\mathbf{n},\mathbf{0}}+G(\mathbf{n})\Big|_{\mathbf{n}\neq 0}\,. \end{aligned} \tag{5.61}$$

Für große räumliche Abstände ($\mathbf{n}\to\infty$) verschwindet diese Funktion im Grenzfall des

"weak-coupling limit" $\lambda \to \infty$. Im Grenzfall des "strong-coupling limit" ($\lambda \to 0$) ist diese Funktion langreichweitig und geht asymptotisch für ($\mathbf{n} \to \infty$) gegen das Quadrat des Ordnungsparameters M_x. Deshalb können wir die Funktion $G(\mathbf{n})$ schreiben als

$$G(\mathbf{n}) = M_x^2 + G_s(\mathbf{n}), \quad \mathbf{n} \neq 0\,. \tag{5.62}$$

Die Funktion $G_s(\mathbf{n})$ ist kurzreichweitig, d.h. geht asymptotisch für ($\mathbf{n} \to \infty$) gegen Null.

5.3 PPA Gleichung

Die Schrödinger Gleichung (5.58) kann mit Hilfe der Hypernetted-Chain Gleichungen (in HNC/0-Approximation) in die aus der Theorie der Quantenflüssigkeiten bekannte "paired phonon" (PPA) Gleichung überführt werden. Wir beginnen mit der Umformung

$$\begin{aligned}
&\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\,D(1)\,\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)} \\
&\quad = -\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\rho(\varphi_1)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\,, \\
&\quad = -\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\frac{1}{\rho(\varphi_1)}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\rho(\varphi_1)\left(\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\frac{1}{2\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}\right), \\
&\quad = -\frac{1}{2\,\rho(\varphi_1)}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\left(\rho(\varphi_1)\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\right) - \left(\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\right)^2\frac{-1}{4g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\,, \\
&\quad = \frac{1}{2}\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \left(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\right)^2
\end{aligned} \tag{5.63}$$

und merken an, daß Gl. (5.58) geschrieben werden kann als

$$\begin{aligned}
2\,\lambda\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\,D(1)\,\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)} = -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big(&v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&+w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)\,.
\end{aligned} \tag{5.64}$$

Anwendung der Gln. (4.58), (5.63) liefert dann

$$\begin{aligned}
\lambda\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;=\; & -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big(v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big) \\
& -2\,\lambda\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2\,,
\end{aligned} \tag{5.65}$$

bzw.

$$\lambda\,D(1)\,X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big(v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)$$

$$-2\,\lambda\left(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\right)^2 - \lambda\; D(1)\; N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.66}$$

Gleichung (5.66) wird durch Addition des Terms $-\lambda\, C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)/2$ und Anwendung von Gl.(5.59) umgeformt auf

$$\begin{aligned}
\lambda\, D(1)\; X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - \frac{\lambda}{2}C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) &= -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big(v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big) \\
&\quad -2\,\lambda\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2 - \lambda\, D(1)N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - \frac{\lambda}{2}C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2), \\
&= -\Big\{\Big(g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - 1\Big)w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\, v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&\quad +\lambda\Bigg(\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2 + \Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_2}\Big)^2\Bigg)\Big\}\,.
\end{aligned} \tag{5.67}$$

Mit der Abkürzung

$$\begin{aligned}
V_{ph}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) &= \Big(g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - 1\Big)\, w(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \;+\; g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&\quad +\lambda\Bigg(\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2 + \Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_2}\Big)^2\Bigg)
\end{aligned} \tag{5.68}$$

können wir Gl. (5.67) schreiben

$$\lambda\Big[D(1) + D(2)\Big]X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - \lambda\, C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = -2\, V_{ph}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.69}$$

Die Größe $V_{ph}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ kann mit dem Teilchen-Loch Potential identifiziert werden [58], das durch den Ausdruck

$$V_{ph}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \dot{X}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - \frac{\lambda}{4}\Big[D(1) + D(2)\Big]X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.70}$$

definiert ist. Gl. (5.70) enthält den sogenannten direkten Anteil $\dot{X}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ der verallgemeinerten Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n},\varphi_1,\varphi_2,\beta)$, die in Abschnitt (5.4) näher analysiert wird. Unter Verwendung dieser Definition erhalten wir aus Gl. (5.68) die Beziehung

$$\dot{X}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = -\frac{\lambda}{4}\Big[D(1) + D(2)\Big]X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \frac{\lambda}{2}C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.71}$$

Gl. (5.65) kann man mittels Gl. (4.62) durch die Funktionen $\ln g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und $N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ausdrücken:

$$\begin{aligned}
&\frac{\lambda}{2}g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)D(1)\ln g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - 2\,\lambda\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2 \\
&= -g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \lambda g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)D(1)N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)
\end{aligned}$$

$$+\frac{\lambda}{2}g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-2\,\lambda\Big(\frac{\partial\sqrt{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}}{\partial\varphi_1}\Big)^2-\frac{\lambda}{2}\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.72}$$

Daraus erhält man mit (4.38) und (4.58)

$$\begin{aligned}
&g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big(v_0(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\frac{\lambda}{2}\,D(1)\,\Big(\ln g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)\Big)\\
&\quad=\frac{\lambda}{2}\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,D(1)\,N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\frac{\lambda}{2}\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\
&\quad-\frac{\lambda}{2}\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,,
\end{aligned} \tag{5.73}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)&=\frac{\lambda}{2}\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,\Big(D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-D(1)\,X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\
&\qquad+C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)-\frac{\lambda}{2}\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,,\\
&=\frac{\lambda}{2}\Big(g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-1\Big)\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,\dot{X}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,,\\
&=\frac{\lambda}{2}\Big(g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-1\Big)\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\
&\qquad+g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big(\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-\dot{N}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)\,.
\end{aligned} \tag{5.74}$$

Als Endergebnis erhalten wir

$$\begin{aligned}
\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\frac{\lambda}{2}\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;&=\;g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\
&\quad\times\Big(\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\frac{\lambda}{2}\,D(1)\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big)
\end{aligned} \tag{5.75}$$

bzw.

$$\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\frac{\lambda}{4}\Big[D(1)+D(2)\Big]g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)=0\,. \tag{5.76}$$

Diese Gleichung is das Analogon zur paired-phonon (PPA) Gleichung formuliert im Ortsraum. Sie ist in der Theorie der Quantenflüssigkeiten bekannt. Die Punktgröße $\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ist die Ableitung einer verallgemeinerten räumlichen Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n},\varphi_1,\varphi_2,\beta)$ und kann durch den Ausdruck

$$\begin{aligned}
&\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)=\\
&\quad\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4\rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\frac{\delta g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta u(\mathbf{n}',\varphi_1,\varphi_2)}\Big|_\rho v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)
\end{aligned} \tag{5.77}$$

definiert werden. Die Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta)$ und ihre Ableitung wird im folgenden Abschnitt weiter behandelt.

5.4 Bestimmung der verallgemeinerten Verteilungsfunktion

Zur Berechnung der Funktion $\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ geht man von einem verallgemeinerten Pseudo-Potential aus:

$$u(\mathbf{n},\varphi_1,\varphi_2,\beta) = u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \beta\, v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.78}$$

Über die HNC Gleichungen sind damit verallgemeinerte Funktionen $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta)$, $X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta)$ und $N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta)$ festgelegt. Zur Berechnung des Ausdrucks (5.77) benutzen wir die Vertauschbarkeit der Funktionalableitung

$$\rho(\varphi_3)\rho(\varphi_4)\frac{\delta g(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_4)}{\delta u(\mathbf{n}',\varphi_1,\varphi_2)}\Big|_\rho = \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)\frac{\delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\delta u(\mathbf{n}',\varphi_3,\varphi_4)}\Big|_\rho \tag{5.79}$$

und bringen das Integral (5.77) auf die Gestalt

$$\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \frac{\delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\delta u(\mathbf{n}',\varphi_3,\varphi_4)}\Big|_\rho v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.80}$$

Nun formen wir die auftretende Funktionalableitung um:

$$\begin{aligned}\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial u(\mathbf{n}',\varphi_3,\varphi_4)} &= \frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\frac{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial u(\mathbf{n}',\varphi_3,\varphi_4)}\,,\\ &= \frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}\delta(\varphi_1-\varphi_3)\delta(\varphi_2-\varphi_4)\delta(\mathbf{n}\mathbf{n}')\,.\end{aligned} \tag{5.81}$$

Aus der Definition (5.77) bzw. (5.80) erhalten wir damit

$$\begin{aligned}\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) &= \sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \frac{\delta g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\delta u(\mathbf{n}',\varphi_3,\varphi_4)}\Big|_\rho v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\ &= \sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_3 d\varphi_4 \frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial u(\mathbf{n}';\varphi_1,\varphi_2)}\Big|_\rho v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\delta(\varphi_1-\varphi_3)\delta(\varphi_2-\varphi_4)\delta(\mathbf{n}\mathbf{n}')\,,\\ &= \frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,,\\ &= \frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta)}{\partial\beta}\Big|_{\beta=0}\Big[\frac{\partial\beta}{\partial u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta)}\Big]v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,,\\ &= \frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta)}{\partial\beta}\Big|_{\beta=0}\,.\end{aligned} \tag{5.82}$$

Die Größe $\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ läßt sich demnach durch die Ableitung der verallgemeinerten Funktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta)$ nach dem Parameter β berechnen. Indem wir die hypernetted-chain Gleichungen (in HNC/0 Näherung) nach dem Parameter β ableiten, erhalten wir die sogenannten HNC/0 Punkt-Gleichungen:

$$\dot{g}(\mathbf{0};\varphi_1,\varphi_2) \equiv 0\,, \tag{5.83}$$

$$\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big[v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \dot{N}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big]\,, \tag{5.84}$$

$$\dot{X}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - \dot{N}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,, \tag{5.85}$$

$$\begin{aligned}\dot{N}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) &= \sum_{\mathbf{m}} \frac{1}{2\pi}\int d\varphi_3 \rho(\varphi_3)\dot{X}'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\Big(X'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2) + N'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)\Big)\\ &+ \sum_{\mathbf{m}} \frac{1}{2\pi}\int d\varphi_3 \rho(\varphi_3)X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\Big(\dot{X}'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2) + \dot{N}'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)\Big)\,.\end{aligned} \tag{5.86}$$

Durch Multiplikation der Gl.(5.76) mit $\sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}$ erhalten wir also

$$\sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}\left(\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \frac{\lambda}{4}\Big[D(1)+D(2)\Big]\frac{\sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}}{\sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}}g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\right) = 0\,, \tag{5.87}$$

bzw.

$$\dot{\tilde{g}}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \frac{\lambda}{4}\Big[H_\circ(1)+H_\circ(2)\Big]\tilde{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = 0\,. \tag{5.88}$$

Der Operator $H_\circ(i)$ in Gl. (5.88) ist definiert durch

$$H_\circ(i) = -\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi_i)}}\frac{\partial}{\partial\varphi_i}\rho(\varphi_i)\frac{\partial}{\partial\varphi_i}\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi_i)}}\,. \tag{5.89}$$

Zur besseren Schreibweise führen wir die Größe

$$G(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta) = \sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}\Big\{g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2,\beta) - 1\Big\} \tag{5.90}$$

ein und haben damit

$$\dot{G}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}\dot{g}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.91}$$

Mit Hilfe der Gl. (5.91) können wir deshalb Gl. (5.88) auf die Form bringen

$$\dot{G}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) + \frac{\lambda}{4}\Big[H_\circ(1)+H_\circ(2)\Big]G(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = 0\,. \tag{5.92}$$

Diese ist in der Theorie des flüssiges Heliums als PPA Gleichung bekannt [23, 59]. Zur numerischen Lösungen dieser Gleichung wird ihre äquivalente Form (5.69) durch das in Kapital 5 beschriebene Iterationsverfahren gelöst.

5.5 Optimale Elementaranregungen

Zur Beschreibung der elementaren Anregungen des Systems definieren wir in Analogie zur CBF-Theorie der Quantenflüssigkeiten den verallgemeinerten Dichtefluktuationsoperator [23, 26]

$$\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\}) = \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi_{\mathbf{r}_i})}} \Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_{\mathbf{r}_i})\,. \tag{5.93}$$

Die Quantenzahlen $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ sind auf die Vektoren der ersten Brillouinzone des reziproken Gitters beschränkt, der Index α charakterisiert einen Satz von eventuell notwendigen weiteren Quantenzahlen zur vollständigen Charakterisierung aller Anregungszweige. Die Einteilchenwellenfunktionen $\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_{\mathbf{r}_i})$ sind reell und auf Eins normiert,

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi\; \Phi_\alpha^2(\mathbf{k},\varphi) = 1\,, \tag{5.94}$$

außerdem sind sie orthogonal zum Einteilchen-Grundzustand, der durch $\sqrt{\rho(\varphi)}$ charakterisiert ist,

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi \sqrt{\rho(\varphi)}\, \Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi) = 0\,. \tag{5.95}$$

Mit Hilfe der Operatoren (5.93) sind die Anregungen in Feynman-Approximation gegeben durch den Ausdruck

$$|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}> = \varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})|\Psi>\;. \tag{5.96}$$

Die zugehörige Anregungsenergie berechnet sich damit aus

$$\begin{aligned}
\omega_\alpha(\mathbf{k}) &= \frac{<\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}|H|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}> - E}{<\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}>}\,,\\
&= \frac{<\Psi|\,\varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k},\{\varphi\})\Big(H - E_\circ\Big)\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})|\Psi>}{<\Psi|\,\varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k},\{\varphi\})\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})\,|\Psi>}\,,\\
&= \frac{<\Psi|\,\Big[\varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k},\{\varphi\}),\Big[H,\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})\Big]\Big]\,|\Psi>}{2N(1-M_x^2)S_\alpha(\mathbf{k})<\Psi|\Psi>}\,,\\
&= \frac{\varepsilon_\alpha}{S_\alpha(\mathbf{k})}\,.
\end{aligned} \tag{5.97}$$

Die statische Strukturfunktion zum Anregungszweig α ist durch

$$S_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{<\Psi|\,\varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k},\{\varphi\})\varrho_\alpha(\mathbf{k},\{\varphi\})\,|\Psi>}{N(1-M_x^2)<\Psi|\Psi>} \tag{5.98}$$

definiert. Die renormierte Hartree-Energie ist durch

$$\varepsilon_\alpha = \frac{< \Psi| \Big[\varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k}, \{\varphi\}), \Big[H, \varrho_\alpha(\mathbf{k}, \{\varphi\}) \Big] \Big] |\Psi >}{2N(1 - M_x^2) < \Psi|\Psi >} \tag{5.99}$$

gegeben. Der Doppelkommutator läßt sich auf einfache Weise berechnen und ergibt

$$\begin{aligned}
< \Psi| \Big[\varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k}, \{\varphi\}), \Big[H, \varrho_\alpha(\mathbf{k}, \{\varphi\}) \Big] \Big] |\Psi > &= 2\lambda \sum_i < \Psi| \frac{\partial \varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k}, \{\varphi\})}{\partial \varphi_i} \frac{\partial \varrho_\alpha(\mathbf{k}, \{\varphi\})}{\partial \varphi_i} |\Psi > , \\
&= 2\lambda \sum_i \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_i \rho(\varphi_i) \frac{\partial \varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k}, \{\varphi\})}{\partial \varphi_i} \frac{\partial \varrho_\alpha(\mathbf{k}, \{\varphi\})}{\partial \varphi_i} < \Psi|\Psi > , \\
&= 2\lambda \sum_i \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_i \rho(\varphi_i) \varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k}, \{\varphi\}) D(i) \varrho_\alpha(\mathbf{k}, \{\varphi\}) < \Psi|\Psi > , \\
&= 2N\, \lambda \frac{1}{2\pi} \int d\varphi_1 \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_1) H_\circ(1) \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_1) < \Psi|\Psi > ,
\end{aligned} \tag{5.100}$$

wobei der Operator $H_\circ(1)$ durch (5.89) definiert ist. Wir berechnen nun das Integral

$$\begin{aligned}
&\frac{< \Psi| \varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k}; \{\varphi\}) \varrho_\alpha(\mathbf{k}, \{\varphi) |\Psi >}{< \Psi|\Psi >} \\
&= N \Big(1 + \sum_{\mathbf{n} \neq 0} e^{-i\mathbf{kn}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_1 d\varphi_2 \sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}\, g(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2)\, \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_1) \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_2) \Big) .
\end{aligned} \tag{5.101}$$

Aufgrund der Orthogonalitätsrelation (5.95) haben wir

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_1\, d\varphi_2 \sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)} \Phi_\alpha(\mathbf{k}; \varphi_1) \Phi_\alpha(\mathbf{k}; \varphi_2) = 0 . \tag{5.102}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
&\frac{< \Psi| \varrho_\alpha^\dagger(\mathbf{k}, \{\varphi\}) \varrho_\alpha(\mathbf{k}, \{\varphi\}) |\Psi >}{< \Psi|\Psi >} \\
&= N + N \sum_{\mathbf{n} \neq 0} e^{-i\mathbf{kn}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_1 d\varphi_2 \sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)} \Big(g(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2) - 1 \Big) \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_1) \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_2) , \\
&= N + N \sum_{\mathbf{n} \neq 0} e^{-i\mathbf{kn}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_1 d\varphi_2\; G(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2)\, \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_1)\, \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_2) , \\
&= N \left(1 + \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_1 d\varphi_2\; G(\mathbf{k}; \varphi_1, \varphi_2)\, \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_1)\, \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_2) \right) .
\end{aligned} \tag{5.103}$$

Unter Ausnutzung der Resultate (5.100) und (5.103) ergibt sich für die Strukturfunktion

$$S_\alpha(\mathbf{k}) \;=\; \frac{1 + \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\varphi_1 d\varphi_2\; G(\mathbf{k}; \varphi_1, \varphi_2)\, \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_1)\, \Phi_\alpha(\mathbf{k}, \varphi_2)}{(1 - M_x^2)} \tag{5.104}$$

und für die Anregungenergie folgt

$$\omega_\alpha(\mathbf{k}) \;=\; \frac{\lambda\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_1\,\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)\,H_\circ(1)\,\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)}{1+\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1\,d\varphi_2\,G(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)\,\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)\,\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_2)}\,. \tag{5.105}$$

Durch Variation nach der Funktion $\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)$ erhalten wir die Feynman-Gleichung für die optimale Anregungsenergie $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ und den Eigenzustand $\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)$. Diese Eigenwert-Gleichung lautet

$$\lambda H_\circ(1)\;\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)=\omega_\alpha(\mathbf{k})\Bigg(\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)+\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_2\,G(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)\,\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_2)\Bigg)\,. \tag{5.106}$$

In Dirac-Schreibweise der angeregten Zustände, d.h.,

$$|\alpha,\mathbf{k}>\longleftrightarrow\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi)\,, \tag{5.107}$$

liest sich Gl. (5.106),

$$\lambda\,H_\circ|\alpha,\mathbf{k}>=\omega_\alpha(\mathbf{k})\Big(1+G\Big)|\alpha,\mathbf{k}>\;. \tag{5.108}$$

Mit Hilfe der Ornstein-Zernike-Relation (5.27) können wir diese Gleichung auf die äquivalente Form bringen

$$\lambda\Big(1-\tilde{X}'\Big)H_\circ|\alpha,\mathbf{k}>=\omega_\alpha(\mathbf{k})|\alpha,\mathbf{k}>\;. \tag{5.109}$$

Explizit lautet Gl. (5.109)

$$\lambda\Bigg\{H_\circ(1)\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)-\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi_2\sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)H_\circ(2)\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_2)\Bigg\}$$
$$=\omega_\alpha(\mathbf{k})\Phi_\alpha(\mathbf{k},\varphi_1)\,. \tag{5.110}$$

Diese Gleichung ist für numerische Anwendungen am Besten geeignet. Zweckmäßig formen wir den Operator $H_\circ(i)$ wie folgt um:

$$\begin{aligned}
H_\circ(\varphi) &= -\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi)}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\rho(\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi)}}\,,\\
&= -\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi)}}\Bigg\{\frac{\partial}{\partial\varphi}\rho(\varphi)\Bigg(\frac{\partial}{\partial\varphi}(\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi)}})+\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi)}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\Bigg)\Bigg\}\,,\\
&= -\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi)}}\Bigg\{-\frac{\partial^2\sqrt{\rho(\varphi)}}{\partial\varphi^2}-\frac{\partial\sqrt{\rho(\varphi)}}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{\partial\sqrt{\rho(\varphi)}}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\sqrt{\rho(\varphi)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Bigg\}\,,\\
&= -\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi)}}\frac{\partial^2\sqrt{\rho(\varphi)}}{\partial\varphi^2}\,.
\end{aligned} \tag{5.111}$$

Die zweite Ableitung der Wurzel der Dichte erhalten wir aus der Lösung der renormierten Hartree Gleichung (5.38). Unter Benutzung der Gl. (5.38) können wir die zweite Ableitung ersetzen durch

$$\frac{1}{\sqrt{\rho(\varphi)}}\frac{\partial^2\sqrt{\rho(\varphi)}}{\partial\varphi^2} \;=\; \frac{1}{\lambda}\Big(v_d(\varphi)+v_e(\varphi)-\mu\Big) \;=\; \mathcal{F}(\varphi)/\lambda\,. \tag{5.112}$$

Die Feynman-Gleichung hat für jeden Wellenvektor $\mathbf{k}$ in der Brillouinzone die spezielle Lösung

$$\Phi_\circ(\mathbf{k},\varphi) \;=\; \sqrt{\rho(\varphi)}\,, \qquad\qquad \omega_\circ(\mathbf{k}) \;=\; 0\,, \tag{5.113}$$

die den Grundzustand charakterisiert.

5.6 Die ungeordnete Phase

Für die ungeordnete Phase reduzieren sich die erhaltenen Ergebnisse der Kapitel 4 und 5, da die renormierte Hartree Gleichung entfällt. In diesem Gebiet ist die Einteilchendichte konstant, $\rho(\varphi_i)=1$. Deswegen vereinfacht sich die Energieformel (4.37) auf

$$E/N \;=\; 2+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varphi_1\,d\varphi_2\,g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.114}$$

Das Jackson-Feenberg Potential ist reduziert auf

$$v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)=\Delta(\mathbf{n})\cos(\varphi_1-\varphi_2)+\frac{\lambda}{4}\Big[\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2}\Big]u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.115}$$

Die PPA-Bedingung (5.69) läßt sich ebenfalls vereinfachen und schreibt sich nun

$$-\lambda\Big[\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2}\Big]X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)+\lambda C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)=2\,V_{ph}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \tag{5.116}$$

mit

$$C(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int d\varphi_3\rho(\varphi_3)\,X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi_3^2}\,X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2) \tag{5.117}$$

und

$$V_{ph}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)=\dot{X}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)-\frac{\lambda}{4}\Big[\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2}\Big]\,X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\,. \tag{5.118}$$

Außerdem sind in der ungeordneten Phase alle Zweiteilchen-Funktionen nur vom Relativwinkel $\varphi=\varphi_1-\varphi_2$ $(0<\varphi<2\pi)$ abhängig, da wegen $M_x=0$ keine Richtung ausgezeichnet ist. Wir können deshalb eine Funktion $F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\;=\;F(\mathbf{n},\varphi)$ nach har-

monischen Funktionen entwickeln :

$$F(\mathbf{n};\varphi) = \sum_{l=-\infty}^{l=\infty} F_l(\mathbf{n})\,\cos(l\varphi)\,, \qquad F_l(\mathbf{n}) = \frac{1}{2\pi}\int F(\mathbf{n};\varphi)\,\cos\varphi\,. \tag{5.119}$$

Zerlegung des Feenberg Potentials (5.115) mit $v^\star(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \equiv v^\star(\mathbf{n};\varphi)$ in eine harmonische Reihe ergibt die Komponenten

$$v_l^\star(\mathbf{n}) = \Delta(\mathbf{n})\delta_{1l} - \frac{\lambda}{2}\,l^2\,u_l(\mathbf{n})\,. \tag{5.120}$$

In ähnlicher Weise ist die l-te Komponente des Dichtefluktuationsoperators gegeben durch

$$\varrho_l(\mathbf{k}) = \sum_i e^{i\mathbf{k}\,\mathbf{r}_i}\,e^{i\,l\varphi_i}\,. \tag{5.121}$$

Für die Anregungsenergie des Anregungszweiges $\alpha = l$ ergibt sich damit

$$\omega_l(\mathbf{k}) = \lambda\sum_i < \Psi|\frac{\partial\varrho_l^\dagger(\mathbf{k})}{\partial\varphi_i}\frac{\partial\varrho_l(\mathbf{k})}{\partial\varphi_i}|\Psi > \frac{1}{S_l(\mathbf{k})} = \frac{\lambda\,l^2}{S_l(\mathbf{k})}\,. \tag{5.122}$$

Die Zerlegung der Strukturfunktion $S(\mathbf{k};\varphi)$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} S(\mathbf{k};\varphi) &= 1 + \sum_{n\neq 0} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}}\Big(g(\mathbf{n};\varphi) - 1\Big)\,, \\ &= 1 + \Big(X'(\mathbf{k};\varphi) + N'(\mathbf{k};\varphi)\Big)\,, \\ &= 1 + \sum_{l=-\infty}^{\infty}\Big(X_l'(\mathbf{k}) + N_l'(\mathbf{k})\Big)\,\cos(l\varphi)\,, \\ &= 1 + \sum_{l=-\infty}^{\infty}\Big(S_l(\mathbf{k}) - 1\Big)\cos(l\varphi)\,, \end{aligned} \tag{5.123}$$

mit

$$S_l(\mathbf{k}) = 1 + X_l'(\mathbf{k}) + N_l'(\mathbf{k})\,. \tag{5.124}$$

Die Komponenten $S_l(\mathbf{k})$ sind:

$$\begin{aligned} S_l(\mathbf{k}) &= < \Psi|\varrho_l^\dagger(\mathbf{k})\varrho_l(\mathbf{k})|\Psi > \frac{1}{< \Psi|\Psi >}\,, \\ &= 1 + \sum_{n\neq 0} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}}\,\frac{1}{2\pi}\int d\varphi\,\Big(g(\mathbf{n};\varphi) - 1\Big)e^{i\,l\varphi}\,, \\ &= 1 + \frac{1}{2\pi}\int d\varphi\,\Big(S(\mathbf{k};\varphi) - 1\Big)\,\cos(l\varphi)\,. \end{aligned} \tag{5.125}$$

Für die PPA-Gleichung (5.88) erhalten wir in Komponenten-Schreibweise

$$\dot{S}_l(\mathbf{k}) + \frac{\lambda}{2}\, l^2 \Big(S_l(\mathbf{k}) - 1\Big) = 0\,. \tag{5.126}$$

Mittels der HNC/0-Gleichungen der Komponenten können wir die Funktion $\dot{S}_l(\mathbf{k})$ berechnen. Das Ergebnis liefert die Gleichungen

$$N'_l(\mathbf{k}) = \frac{X'_l(\mathbf{k})^2}{1 - X'_l(\mathbf{k})}\,, \tag{5.127}$$

$$\dot{N}'_l(\mathbf{k}) = = \frac{2\, X'_l(\mathbf{k}) - X'_l(\mathbf{k})^2}{\Big(1 - X'_l(\mathbf{k})\Big)^2}\, \dot{X}'_l(\mathbf{k})\,, \tag{5.128}$$

$$S_l(\mathbf{k}) = \frac{1}{1 - X'_l(\mathbf{k})}\,. \tag{5.129}$$

Wir haben deshalb

$$\dot{S}'_l(\mathbf{k}) = \dot{X}'_l(\mathbf{k}) S_l^2(\mathbf{k})\,. \tag{5.130}$$

Die PPA-Gleichung (5.126) können wir nun in Termen der direkten Anteile der Komponenten ausdrücken und erhalten

$$2\dot{X}'_l(\mathbf{k})\, S_l^2(\mathbf{k}) = -l^2\, \lambda\, X_l(\mathbf{k})\, S_l(\mathbf{k})\,, \tag{5.131}$$

bzw.

$$2\dot{X}'_l(\mathbf{k}) = -l^2\, \lambda\, X_l(\mathbf{k}) \Big(1 - X_l(\mathbf{k})\Big) \tag{5.132}$$

Gleichungen (5.126) und (5.132) ist zur numerischen Berechnung der optimale Größen in der ungeordneten Phase am besten geeignet.

Kapitel 6

Numerische Lösungsverfahren

Die numerischen Berechnungen der Grundzustandseigenschaften des Modells beruhen auf den Euler-Lagrange Gleichungen (5.38) und (5.69), den HNC/0 Gleichungen (4.58)-(4.60) und den HNC/0 Punkt-Gleichungen (5.83)-(5.86). Die Numerik wird für einfach quadratische Gitter der Größe $(L \times L)$ mit periodischen Randbedingungen und konstanter Gitterkonstante $a = 1$ durchgeführt. Die Variable φ_i wird im Phasenraum $-\pi \leq \varphi_i \leq \pi$ mit $n = 31$ Stützpunkten diskretisiert. Dadurch wird die Rechenzeit des Programms auf ein annehmbares Maß reduziert, da es sich um $(n \times n) \times (L \times L)$ Zweiteilchenwerte und n Einteilchenwerte handelt, die in jedem Iterationsschritt aus den zugehörigen Gleichungen berechnet werden müssen.

6.1 Lösungsverfahren für die Hartree Gleichung

Die Euler-Lagrange Gleichungen (5.38) und (5.69) bilden in Verbindung mit den HNC Gleichungen (4.58)-(4.60) (in HNC/0 Näherung) ein abgeschlossenes Gleichungssystem für die Dichte $\rho(\varphi)$ und die räumliche Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2)$. Zur Lösung muß ein geeignetes Iterationsverfahren gewählt und in einem Rechenprogramm implementiert werden.

Im ersten Schritt eines Iterationsverfahrens geben wir ein parametrisiertes Pseudo-Potential vor und bestimmen den optimalen Parameter durch Berechnung des Energieminimums. Dazu gehen wir wie folgt vor:

1) Für vorgegebenen Wert λ lösen wir die Hartree Gleichung für die Einteilchendichte $\rho(\varphi)$ in Molekularfeld-Näherung $(u(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2) \equiv 0)$,

$$-\Big(\lambda \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 4M_x \cos(\varphi)\Big)\sqrt{\rho(\varphi)} \;=\; \mu\sqrt{\rho(\varphi)}. \tag{6.1}$$

Wir teilen das Winkelintervall in n Punkte auf and stellen $\rho(\varphi)$ durch 31 diskretisierte Punkte mit der Randbedingung $\rho(-\pi) = \rho(\pi)$ dar. Aufgrund der bestehenden

Symmetrien gilt

$$\rho(n+1-j) = \rho(j)\,, \qquad 1 \le j \le n\,. \tag{6.2}$$

Mit $\rho(j)$ bezeichnen wir den Wert der Dichte am Punkt j im φ-Raum, $\varphi = \varphi(j) = -\pi + (j-1)\,(2\pi/(n-1))$. Für die Darstellung von $\rho(\varphi)$ im Intervall $[-\pi, \pi]$ brauchen wir nur die im unteren Halbraum $-\pi \le \varphi \le 0$, also $1 \le j \le n + 1/2 =: m$ gelegenen Werte.

2) Nun wählen wir das Pseudopotential

$$u(\mathbf{n}) = \alpha(1 - \delta_{\mathbf{n0}})\Delta(\mathbf{n}), \tag{6.3}$$

mit $\Delta(\mathbf{n}) = -1$ für nächste Nachbarn und $\Delta(\mathbf{n}) = 0$ sonst, wobei der Parameter α bei gegebenem Kopplungsparameter λ durch das Ritz'sche Verfahren optimiert werden soll. In diesem Fall treten eine Reihe von Zweiteilchen-Funktionen auf, die auf dem Gitter diskretisiert werden müssen. Dazu werden die Winkel φ_i und φ_j, von denen die Zweiteilchen-Funktionen abhängen mit $n \times n$ Punkten diskretisiert. Solche Funktionen $F(\varphi_1(i), \varphi_2(j)) = F(i,j)$ werden in folgender Weise diskretisiert:

$$F(i,j) = F(j,i) = F(n+1-i, n+1-j) = F(n+1-j, n+1-i)\,. \tag{6.4}$$

Es genügt, die Funktion F für $-\pi \le \varphi_1 \le 0$ und $-|\varphi_1| \le \varphi_2 \le |\varphi_1|$, also die Werte $F(i,j)$ für $1 \le i \le m$ und $i \le j \le n+1-i$ zu betrachten.

3) Bei festgehaltenem Anfangswert λ wird der Parameter α variiert und optimal so bestimmt, daß die Grundzustandsenergie (4.71) bzw. (4.37) ein Minimum annimmt.
Mit der Einteilchendichte in Molekularfeld-Näherung und dem parametrisierten Pseudo-Potential $u(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2)$ werden nun die HNC Gleichungen (4.58)-(4.60) iterativ durch Standardverfahren gelöst, indem wir für vorgegebene Werte λ und α $\Big($und mit der Näherungslösung $\rho(\varphi)$ in der geordneten Phase, wo $\rho(\varphi) \neq 1\Big)$ die zugehörigen Größen $X'(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2)$, $N'(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2)$ und $g(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2)$ berechnet werden. Im Einzelnen gehen wir folgendermaßen vor: Durch Vorgabe einer geeigneten ersten Approximation $N'^{(1)}$ berechnen wir aus der Gleichung (4.59) die direkte Korrelationsfunktion $X'^{(1)}$. Dann lösen wir die Gleichung (5.15) nach der genäherten nodalen Funktion $N^{(1)}$ mit Hilfe des Programms DL2NRG der IMSL-Programmbibiothek im $\mathbf{k}$-Raum auf. Für unser diskretisiertes System nimmt diese Gleichung die Form an:

$$\sum_{l=1}^{n} N_{\mathbf{k}}(i,l)\Big(\delta_{lj} - \rho(l)s(l)X_{\mathbf{k}}(l,j)\Big) = \sum_{l=1}^{n} X_{\mathbf{k}}(l,i)\rho(l)s(l)X_{\mathbf{k}}(l,j), \quad s(l) = \Delta\varphi_l\,. \tag{6.5}$$

Mit den berechneten Daten $N_{\mathbf{k}}(i,j) = N'(\mathbf{k}, \varphi_1(i), \varphi_2(j))$ wiederholen wir diese Prozedur bis wir Konvergenz erreichen.

4) Mit den vorher berechneten Funktionen ist nun die renormierte Hartree Gleichung

unter der Nebenbedingung

$$\int_{-\pi}^{\pi} \rho(\varphi) d\varphi = 1 \tag{6.6}$$

zu lösen. Da die Potentiale $v_e(\varphi)$ und $v_d(\varphi)$ selbst von der Dichte $\rho(\varphi)$ abhängen, handelt es sich bei der renormierten Hartree Gleichung um ein nichtlineares Problem, das am günstigsten durch ein Newton-Iterationsverfahren gelöst wird. Dazu ersetzen wir in der Gleichung (5.38) die Dichte $\sqrt{\rho(\varphi)}$ durch $\sqrt{\rho(\varphi)}+\delta\sqrt{\rho(\varphi)}$, beziehungsweise den Lagrange Parameter μ durch $\mu+\delta\mu$ und entwickeln die in Gl. (5.38) enthaltenen Größen bei fester Paarverteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ bis zur ersten Ordnung in der Variation $\delta\sqrt{\rho(\varphi)}$ um $\sqrt{\rho(\varphi)}$. Wir erhalten das Ergebnis

$$\begin{aligned}
&\left(\mu + \lambda\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2} - v_d(\varphi_1) - v_e(\varphi_1)\right)\delta\sqrt{\rho(\varphi_1)} \\
&-2\sqrt{\rho(\varphi_1)}\int_{-\pi}^{\pi}\sqrt{\rho(\varphi_2)}\left(\frac{\delta v_d(\varphi_1)}{\delta\rho(\varphi_2)} + \frac{\delta v_e(\varphi_1)}{\delta\rho(\varphi_2)}\right)\delta\sqrt{\rho(\varphi_2)}d\varphi_2 + \sqrt{\rho(\varphi_1)}\delta\mu \\
&= \left(-\lambda\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2} + v_d(\varphi_1) + v_e(\varphi_1) - \mu\right)\sqrt{\rho(\varphi_1)}
\end{aligned} \tag{6.7}$$

mit

$$\int_{-\pi}^{\pi}\sqrt{\rho(\varphi)}\delta\sqrt{\rho(\varphi)}d\varphi = 0\,. \tag{6.8}$$

Wir haben nun die im Integral der Gl.(6.7) stehende Funktionalableitung bei fester Verteilungsfunktion zu berechnen. Unter Benutzung von Gl.(5.39) erhalten wir:

$$\frac{\delta v_d(\varphi_1)}{\delta\rho(\varphi_2)} = \sum_{\mathbf{n}\neq 0} g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)v_\circ(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \tag{6.9}$$

und

$$\begin{aligned}
\frac{\delta v_e(\varphi_1)}{\delta\rho(\varphi_2)} &= \lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0} F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) \\
&+\lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)} \\
&-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{m}}\frac{\partial N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial X'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3} \\
&-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\frac{\delta N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\frac{\partial X'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3} \\
&-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\frac{\delta X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\,.
\end{aligned} \tag{6.10}$$

Mit der Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\frac{\delta N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)} = -\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\frac{\delta X'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)} \tag{6.11}$$

können wir Gl.(6.10) auf die Gestalt bringen:

$$\begin{aligned}\frac{\delta v_e(\varphi_1)}{\delta\rho(\varphi_2)} &= \lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0} F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\ &\quad +\lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\\ &\quad -\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{m}}\frac{\partial N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial X(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3}\\ &\quad +\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\Big(N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)-X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\,.\end{aligned} \tag{6.12}$$

Zur Bestimmung der Funktionalableitung der Größe $F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ wenden wir nun Gl.(4.69) an und erhalten

$$\begin{aligned}&\lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\\ &\quad = -\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\partial\varphi_1}\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\frac{\delta N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\\ &\quad -\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\frac{\delta N'(\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\,.\end{aligned} \tag{6.13}$$

Berücksichtigen wir noch, daß $g(\mathbf{0},\varphi_1,\varphi_2)$ verschwindet, so können wir weiter schreiben:

$$\begin{aligned}&\lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\delta F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\\ &= -\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\Big(X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\\ &\quad -\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\Big(X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\,.\end{aligned} \tag{6.14}$$

Durch Einsetzen dieser Beziehung in Gl. (6.12) folgt für die Variationsableitung

$$\begin{aligned}\frac{\delta v_e(\varphi_1)}{\delta\rho(\varphi_2)} &= \lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0} F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\ &\quad -\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial X(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3}\\ &\quad -\frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial X(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial}{\partial\varphi_3}\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\end{aligned}$$

$$-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\Big(X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\frac{\delta N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\delta\rho(\varphi_2)}\,. \quad (6.15)$$

Aus Gl. (5.32) ergibt sich dann

$$\begin{aligned}\frac{\delta v_e(\varphi_1)}{\delta\rho(\varphi_2)} &= \lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\ &-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial X(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3}\\ &-\frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{n}\,\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi_3\rho(\varphi_3)X(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_2)\frac{\partial X(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\\ &-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}\,\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi_3\rho(\varphi_3)\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\Big(X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)+N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)\Big)\\ &\qquad\times X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)\frac{\partial X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\,. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Schließlich liefert die Benutzung der HNC Gleichung (4.58) den Ausdruck

$$\begin{aligned}\frac{\delta v_e(\varphi_1)}{\delta\rho(\varphi_2)} &= \lambda\sum_{\mathbf{n}\neq 0}F(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\\ &-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial X'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3}\\ &-\frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{n}}\frac{\partial N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)}{\partial\varphi_1}\frac{\partial X(\mathbf{n};\varphi_2,\varphi_1)}{\partial\varphi_1}\\ &-\frac{\lambda}{2}\sum_{\mathbf{n}\,\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi_3\rho(\varphi_3)X'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_2)\frac{\partial X'(\mathbf{n};\varphi_3,\varphi_1)}{\partial\varphi_3}\frac{\partial X'(\mathbf{m};\varphi_2,\varphi_3)}{\partial\varphi_3}\,. \end{aligned} \quad (6.17)$$

5) Wir formulieren nun die Gleichungen (6.7) und (6.8) im Rahmen des diskretisierten Systems. Wir berücksichtigen, daß die Änderung $\delta\sqrt{\rho}$ eine symmetrische Funktion ist und nutzen die Formel für die zweite Ableitung der Änderung $\delta\sqrt{\rho}$:

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\delta\sqrt{\rho}\Big|_i = \frac{\delta\sqrt{\rho(i+1)}-2\,\delta\sqrt{\rho(i)}+\delta\sqrt{\rho(i-1)}}{(\Delta\varphi)^2}\,. \quad (6.18)$$

Mit $1\leq i\leq m=(n+1)/2$ können wir schreiben

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\delta\sqrt{\rho}\Big|_i = \sum_{j=1}^{m+1}d(i,j)\Delta\sqrt{\rho}(j), \qquad 1\leq i\leq m\,. \quad (6.19)$$

Die $(m+1)\times(m+1)$-Matrix $\boldsymbol{d}$ mit den Elementen $d(i,j)$ ist gegeben durch

$$d(1,1)=\frac{-2}{(\Delta\varphi)^2},$$

$$
\begin{aligned}
d(1,2) &= \frac{2}{(\Delta\varphi)^2}, \\
d(i,j) &= \frac{\delta_{i+1,j} - 2\,\delta_{i,j} + \delta_{i-1,j}}{(\Delta\varphi)^2}, \qquad 2 \le i \le m-1, 1 \le j \le m, \\
d(m,j) &= \frac{2\left(\delta_{m-1,j} - \delta_{m,j}\right)}{(\Delta\varphi)^2}, \qquad 1 \le j \le m, \\
d(m+1,j) &= d(i,m+1) = 0\,. \qquad (6.20)
\end{aligned}
$$

Die Differenz $\Delta\sqrt{\rho}$ ist durch eine $(m+1)$ komponentige Größe dargestellt, deren Komponenten für $1 \le j \le m$ die Änderung der Wurzel der Dichte $\delta\sqrt{\rho}$ angeben und dessen $(m+1)$-te Komponente die Änderung $\delta\mu := \Delta\sqrt{\rho}(m+1)$ ist.
Das nachfolgende Integral wird durch eine Summe ersetzt:

$$
-2\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}\delta v_T(\varphi_1,\varphi_2)\delta\sqrt{\rho(\varphi_2)}d\varphi_2 \;=\; 2\sum_{j=1}^{m+1} h(i,j)\Delta\sqrt{\rho}(j) \qquad (6.21)
$$

mit $\quad 1 \le i \le m$. Die $(m+1)\times(m+1)$-Matrix $\boldsymbol{h}$ ist definiert durch

$$
h(i,j) = -2\sqrt{\rho(i)\rho(j)}\Big(\delta v_T(i,j)\Big)s(j), \qquad (6.22)
$$

für $\quad 1 \le i \le m, 1 \le j \le m-1,$

$$
h(i,m) = -2\sqrt{\rho(i)\rho(m)}\delta v_T(i,m), \qquad (6.23)
$$

für $\quad 1 \le i \le m,$

$$
h(i,m+1) = h(m+1,j) = 0\,. \qquad (6.24)
$$

Mit

$$
\delta v_T(i,j) = \frac{\delta v_d(\varphi_i)}{\delta\rho(\varphi_j)} + \frac{\delta v_e(\varphi_i)}{\delta\rho(\varphi_j)} \qquad (6.25)
$$

schreiben wir schließlich Gleichungen (6.20) und (6.22) in der Form eines linearen Gleichungssystems für die Größe $\Delta\sqrt{\rho}$

$$
\sum_{j=1}^{m+1} l(i,j)\Delta\sqrt{\rho}(j) = r(i), \qquad 1 \le i \le m+1\,. \qquad (6.26)
$$

Die Elemente $l(i,j)$ der Matrix $\boldsymbol{l}$ sind explizit gegeben durch:

$$
l(i,j) = \lambda\, d(i,j) + h(i,j) + (\mu - \mathcal{G}(j))\delta_{ij} + \delta_{m+1,j}\sqrt{\rho(i)}\,, \qquad (6.27)
$$

für $\quad 1 \le i \le m, 1 \le j \le m+1,$

$$
l(m+1,j) = 2\sqrt{\rho(j)}s(j)\,, \quad \text{Gl. (6.6)} \qquad (6.28)
$$

für $\quad 1 \leq j \leq m-1,$

$$l(m+1,m) = \sqrt{\rho(m)}s(m), \tag{6.29}$$

$$l(m+1,m+1) = 0\,. \tag{6.30}$$

Auf der rechte Seite der Gl. (6.24) treten die Komponenten

$$r(i) = -\lambda \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\sqrt{\rho}\Big|_i + (\mathcal{G}(i)-\mu)\sqrt{\rho(i)}, \tag{6.31}$$

$$r(m+1) = 0 \tag{6.32}$$

auf $(1 \leq i \leq m)$ mit $\mathcal{G}(i) = v_e(i) + v_d(i)$. Gleichung (6.26) können wir mit Hilfe der IMSL-Programmbibliothek DL2NRG numerisch lösen.

6) Die Beziehungen (5.39), (6.9) und (6.17) liefern das zu der vorgegebenen Startgröße zugehörige Hartree Potential v_e und das Potential $v_d$und deren Funktionalableitung nach der Dichte ρ. Damit lösen wir die Gleichungen (6.7) und (6.8) nach den Änderungen $\delta\sqrt{\rho}$ und $\delta\mu$ auf. Mit der neuen Dichte $\rho + \delta\rho$ und neuem Wert $\mu + \delta\mu$ wiederholen wir die Rechnungen. Damit erhalten wir in jedem Schritt neue Werte für die eingegebenen Funktionen, bis die Beträge der Änderungen $\delta\sqrt{\rho}$ und $\delta\mu$ den Konvergenzkriterien genügen. Schrittweise werden dadurch korrigierte Zweiteilchenfunktionen bestimmt. Von Neuem wird der Parameter α variiert, bis die Energie ein Minimum angenommen hat.

6.2 Iterationsverfahren zur CBF-Optimierung

Wir wenden uns nun dem Lösungsverfahren der PPA Gleichung zu. Hier handelt es sich darum, den abgeschlossenen Satz von Gleichungen in einem geeigneten Iterationsverfahren zu lösen. Die HNC Gleichungen, die renormierte Hartree Gleichung, die HNC Punkt-Gleichungen und schließlich die PPA Gleichung müssen in einem selbstkonsistenten Verfahren gleichzeitig gelöst werden. Das Ergebnis liefert dann das optimale Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und die optimale Dichte $\rho(\varphi)$ (im Fall des geordneten Zustandes).

Folgende fünf Schritte werden dabei ausgeführt:

1) Bei festgehaltenem Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ wird die Hartree-Gleichung für die optimale Einteilchendichte, wie in Abschnitt 6.1 erläutert, iterativ gelöst. Die Iteration wird solange fortgeführt, bis Konvergenz für $\rho(\varphi)$ erreicht ist. Mit diesen Ergebnissen berechnen wir daraufhin die zugehörigen Zweiteilchen-Funktionen $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$, $X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$, etc.

2) Über die HNC Punkt-Gleichungen (5.83)-(5.86) bestimmen wir die Funktion $\dot{X}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$ und $\dot{N}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$. Aus Gleichung (5.70) erhalten wir das Teilchen-Loch Potential $V_{ph}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$.

3) Mit diesem Ergebnis für $V_{ph}(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$ wird die PPA Gleichung (5.69) in Termen der Funktion $X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ mit Hilfe eines Relaxationsverfahrens iterativ gelöst [60], womit wir eine Näherung für die Funktion $X(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ bekommen. Dabei wird die PPA Gleichung näherungsweise für jeden Relativabstand $\mathbf{n}$ durch eine Differenzen-Gleichung ersetzt, die auf $n \times n$ Punkten im Raum der zugehörigen Winkel formuliert ist. Die zweite Ableitung wird durch endliche Differenzen in der üblichen Art dargestellt, z.B. durch

$$\begin{aligned}
\lambda\Big[H_\circ(1)+H_\circ(2)\Big]\tilde{X}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) &= \frac{-\lambda}{(\Delta\varphi)^2}\Big(\tilde{X}'_{\mathbf{n}}(i+1,j)+\tilde{X}'_{\mathbf{n}}(i-1,j) \\
&\quad +\tilde{X}'_{\mathbf{n}}(i,j+1)+\tilde{X}'_{\mathbf{n}}(i,j-1)-4\tilde{X}'_{\mathbf{n}}(i,j)\Big)+\Big(\mathcal{F}(i)+\mathcal{F}(j)\Big)\tilde{X}'_{\mathbf{n}}(i,j) \\
&= \lambda C_{\mathbf{n}}(i,j)-2\tilde{V}^{ph}_{\mathbf{n}}(i,j), \qquad 1\le i,j\le n\,. \qquad (6.33)
\end{aligned}$$

Die Elemente $C_{\mathbf{n}}(i,j)$ sind dabei gegeben durch

$$\begin{aligned}
C_{\mathbf{n}}(i,j) &= C(\mathbf{n},\varphi_1(i),\varphi_2(j)) \\
&= \sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi_3\,\tilde{X}'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\,H_\circ(3)\,\tilde{X}'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)\,, \\
&= \sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi_3\,\partial_{\varphi_3}\tilde{X}'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\,\partial_{\varphi_3}\tilde{X}'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2) \\
&\quad +\frac{1}{\lambda}\sum_{\mathbf{m}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\varphi_3\,\tilde{X}'(\mathbf{n}-\mathbf{m};\varphi_1,\varphi_3)\,\mathcal{F}(\varphi_3)\,\tilde{X}'(\mathbf{m};\varphi_3,\varphi_2)\,. \qquad (6.34)
\end{aligned}$$

Durch fortlaufende Abzählung der Punkte im zweidimensionalen Winkelraum der Variablen φ_1, φ_2 in einer eindimensionalen Anordnung und Anwendung periodischer Randbedingungen kann man Gleichung (6.33) in Matrixform für einen Vektor $\tilde{\mathbf{X}}' = \{\tilde{X}'(l)\}$, $l = (i-1)(n+1)+j$, $j=1,n$ bringen. Die entstehende Matrix-Gleichung ist

$$\boldsymbol{A}\cdot\tilde{\boldsymbol{X}}' = \boldsymbol{b}\,. \qquad (6.35)$$

Diese wird am besten durch eine Relaxationsmethode gelöst. Die 'Sparse'-Matrix $\boldsymbol{A}$ in Gl. (6.35) besteht aus Elementen von $n \times n$ Blöcken, jeder Block ist durch eine $n \times n$ Matrix gegeben, somit hat die Matrix $\boldsymbol{A}$ $(n^2 \times n^2)$ Elemente. In unserem Problem mit $n = 31$ Punkten im Winkelraum an jedem Gittervektor $\mathbf{n}$ und (31×31) Werten der direkten Korrelationsfunktion $\tilde{X}'$ muß man daher bei jeder Iteration für jeden Punkt im $\mathbf{n}$-Raum eine (991×991) 'Sparse'-Matrix invertieren. Dies ist der komplizierteste Schritt der Aufgabe. Es ist nämlich schwierig, mit der so formulierten Matrix $\boldsymbol{A}$ Konvergenz zu erzielen. Geeignete Relaxationsverfahren ermöglichen eine gut konvergierende Iteration. Das schafft man durch eine Aufteilung der $\boldsymbol{A}$-Matrix in eine invertierte Matrix $\boldsymbol{E}$ und eine Restmatrix $\boldsymbol{F}$. Durch Anwendung eines geeigneten Startvektors $\tilde{\boldsymbol{X}}'^{(0)}$ kann man

die Iteration sukzessive mittels der Vorschrift

$$\boldsymbol{E} \cdot \tilde{\boldsymbol{X}}'^{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{F} \cdot \tilde{\boldsymbol{X}}'^{\boldsymbol{n-1}} + \boldsymbol{b} \tag{6.36}$$

durchführen. Gl. (6.36) liefert die n-te Approximation des Vektors $\tilde{\boldsymbol{X}}'$ aus der $(n-1)$-ten Näherung.

4) Aus der erhaltenen Näherung für die Funktion $X'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ berechnen wir die zugehörige Fouriertransformierte $X'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$ und mit Hilfe der Ornstein-Zernike Relation die Funktion $N'(\mathbf{k};\varphi_1,\varphi_2)$. Daraus gewinnen wir die Funktionen $N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ für $\mathbf{n} \neq 0$. Aus diesen genäherten Größen konstruieren wir eine verbesserte Approximation für die Hartree-Jastrow Funktion $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ mittels der Gleichung

$$u^{(1)}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = ln\Big[g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) - N'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)\Big]\,. \tag{6.37}$$

Damit ist der erste Schritt des Iterationsverfahrens beendet. Mit dem verbesserten Pseudo-Potential Gl. (6.37) als Eingangsgröße werden die Iterationsschritte solange wiederholt, bis im n-ten Schritt $u^{(n)}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ erhalten wird. Wir brechen das Iterationsverfahren ab, wenn sich das Ergebnis im nächsten Schritt um weniger als $0.05 \times u^{(n)}(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ändert. Mittels der berechneten Größen ergeben sich alle optimalen physikalischen Größen von Interesse für vorgegebenen Kopplungsparameter λ.

5) Die optimalen Größen werden als Eingangsdaten benutzt, um für einen benachbarten Wert des Kopplungsparameters λ das Verfahren in analoger Weise durchzuführen. In hier durchgeführten Rechnungen gehen wir in Schritten $\Delta\lambda = \pm 0.01$ vor. Für kleine Werte $0 \leq \lambda \leq 0.2$ zeigt sich, daß Konvergenz mit abnehmenden Werten λ immer schwieriger zu erreichen ist, da die Matrixelemente des Operators $H_\circ$ für kleine λ sehr kleine numerische Werte annehmen.

6.3 Lösung der Feynman-Gleichung

Zur Lösung der Feynman Eigenwert-Gleichung (5.108) bzw. (5.109) verwandeln wir die Integro-Differentialgleichung in eine Summen-Differenzen Gleichung, die in der Form einer Matrixgleichung geschrieben werden kann. Der in Gl. (5.89) auftretende Operator

$$H_\circ(\varphi) = -\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\lambda}\mathcal{F}(\varphi) \tag{6.38}$$

mit der Definition (5.112) für $\mathcal{F}(\varphi)$ kann durch Ersetzung der Differentiation durch Differenzen auf Matrixform gebracht werden. Die Diskretisierung ergibt:

$$\lambda H_\circ(i,j) \;=\; \frac{\lambda}{(\Delta\varphi)^2}\Big(-\delta_{i+1,j} + 2\,\delta_{i,j} - \delta_{i-1,j}\Big) + \mathcal{F}(j)\delta_{i,j}, \tag{6.39}$$

für $\quad 2 \leq i \leq n-1, 1 \leq j \leq n \quad$ und

$$\lambda H_\circ(1,j) = \frac{\lambda}{(\Delta\varphi)^2}\Big(-2\,\delta_{2,j} + 2\,\delta_{1,j}\Big) + \mathcal{F}(j)\delta_{1,j}\,, \qquad 1 \leq j \leq n, \tag{6.40}$$

$$\lambda H_\circ(n,j) = \frac{\lambda}{(\Delta\varphi)^2}\Big(-2\,\delta_{n-1,j} + 2\,\delta_{n,j}\Big) + \mathcal{F}(j)\delta_{n,j}\,, \qquad 1 \leq j \leq n. \tag{6.41}$$

Für das Integral schreiben wir eine entsprechende Summe

$$\begin{aligned} &-\int_{-\pi}^{\pi} \sqrt{\rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)}\tilde{X}'(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)H_\circ(2)d\varphi_2\Phi_\ell(\mathbf{k},\varphi_2) \\ &\quad \approx -\sum_{j=1}^{n}\sqrt{\rho(i)\rho(j)}\Bigg(\sum_l X_{\mathbf{k}}(i,l)H_\circ(l,j)\Bigg)s(j)\Phi_\ell(\mathbf{k},j), \\ &\qquad\qquad 1 \leq i,j \leq n\,. \end{aligned} \tag{6.42}$$

Die Feynman Gleichung in diskretisierter Form kann damit als Matrix-Eigenwertproblem behandelt werden:

$$\lambda \boldsymbol{H}_\circ\Big(\mathbf{1}-\tilde{\boldsymbol{X}}'\Big)\underline{\Phi_l}(\mathbf{k}) = \underline{\omega_l}(\mathbf{k})\,\underline{\Phi_l}(\mathbf{k})\,. \tag{6.43}$$

Gl. (6.43) liest sich in expliziter Form

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^{n}\lambda\Bigg\{H_\circ(i,j) - \sqrt{\rho(i)\rho(j)}\Big(\sum_l X_{\mathbf{k}}(i,l)H_\circ(l,j)\Big)s(j)\Bigg\}\Phi_\ell(\mathbf{k},j) \\ &\qquad\qquad = \omega_\ell(\mathbf{k})\Phi_\ell(\mathbf{k},j)\,. \end{aligned} \tag{6.44}$$

Die Energien $\omega_\ell(\mathbf{k})$ und Zustände $\Phi_\ell(\mathbf{k},j)$ lassen sich mit Standard-Verfahren für die Lösung von Matrix-Eigenwertgleichungen berechnen.
In der ungeordneten Phase fällt die Hartree Gleichung weg, die Einteilchendichte ist konstant, $\rho(\varphi_i) = 1$, und der Ordnungsparameter veschwindet ,$M_x = 0$. Ausgehend vom optimierten Ansatz (6.3) lösen wir die HNC Gleichungen (4.58)-(4.60) am Anfangswert $\lambda = 10$ des Kopplungsparameters für das vorgegebene Pseudo-Potential $u(\mathbf{n},\varphi) = u(\mathbf{n})\cos\varphi$. Die Komponenten $X_l'(\mathbf{n})$ bzw. $X_l'(\mathbf{k})$ lassen sich einfach aus der originalen Funktion $X'(\mathbf{n},\varphi)$ berechnen (Gl. (5.119) und damit die Komponenten $N_l'(\mathbf{n})$ bzw. $N_l'(\mathbf{k})$). Durch die PPA-Gleichung (5.92) bzw. (5.126) ergeben sich neue Funktionen $S_l(\mathbf{k})$ und $X_l(\mathbf{k})$ und damit neue Größen $X'(\mathbf{n},\varphi)$ und $u(\mathbf{n},\varphi)$. Die Iteration wird solange wiederholt, bis wir eine stabile optimale Lösung erreicht haben.

Kapitel 7

Ergebnisse und Diskussion

Die Eigenschaften des O(2) Modells im Grundzustand können wir im Rahmen des XY-Spinmodells aber auch des Modells für Josephson Kontakte quantitativ beschreiben. Zu den wichtigsten Eigenschaften gehören das Auftreten einer ungeordneten, einer geordneten Phase und eines kontinuierlichen Phasenübergangs, der das kritische Verhalten des Systems charakterisiert.
In diesem Kapitel wird über die numerischen Ergebnisse des untersuchten Modells für den optimalen Ordnungsparameter und die optimale Einteilchendichte in der geordneten Phase, die minimierte Grundzustandsenergie, die Korrelationsfunktionen, die Strukturfunktion und die Anregungsenergie in beiden Phasen berichtet.

7.1 Optimaler Ordnungsparameter

Das Verhalten des Ordnungsparameters kann in zwei Grenzfällen analytisch erfaßt werden. Im Grenzfall des "*Weak-coupling limit*" ($\lambda \to \infty$) werden die Korrelationseffekte beliebig klein. Die Grundzustandswellenfunktion ist deshalb unkorreliert, $\Psi(\varphi_1, ..., \varphi_N) \simeq 1$, und für die Einteilchendichte gilt $\rho(\varphi_i) = 1$. Diese Wellenfunktion beschreibt damit im XY-Modell einen Zustand, in dem alle Spins im S-Wellen Zustand der Operatoren $\hat{l}_i = l_i = 0$ sind.
Im Grenzfall des "*strong-coupling limit*" ($\lambda \to 0$) dominiert der Wechselwirkungsterm im Hamilton-Operator. Für $\lambda \simeq 0$ ist die Einteilchendichte durch die Dirac-Deltafunktion $\rho(\varphi) = 2\pi\delta(\varphi)$ gegeben, die eine perfekt-orientierte Phase beschreibt. Alle Spins sind in Richtung $\varphi = 0$, d.h. parallel zur X-Achse ausgerichtet. Damit hat der Ordnungsparameter den Wert $M_x = 1$. Aufgrund der Unschärferelation ist der Wert für den Operator $\hat{l}_i$ wegen der genauen Festlegung der Variablen völlig unbestimmt. Bei Zunahme des Kopplungsparameters λ beginnen dann die Quantenfluktuationen in φ_i und damit die Möglichkeiten für eine ungeordnete Richtungsänderung der Spins. Abb. 7.1 zeigt das numerische Ergebnis für den optimalen Ordnungsparameter M_x als Funktion des Parameters λ. Mit zunehmendem Kopplungsparameter λ fällt der Ordnungsparameter ab und verschwindet am kritischen Wert $\lambda_c \simeq 3.1$.

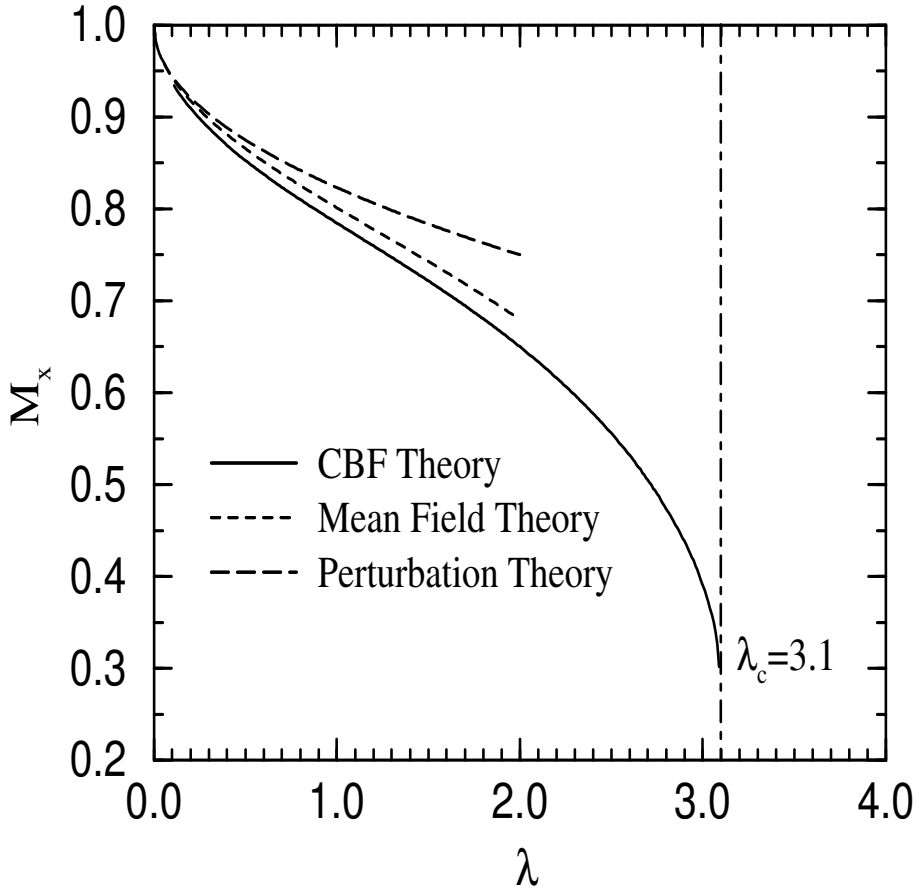


Abbildung 7.1: Numerische Ergebnisse (in HNC/0-Näherung) für den optimalen Ordnungsparameter M_x als Funktion des Kopplungsparameters λ (durchgezogene Linie). Die gepunktete und die gestrichelte Linie zeigen Resultate der Störungstheorie bzw. der Molekularfeld-Approximation. Die langreichweitige Ordnung verschwindet am kritischen Kopplungsparameter $\lambda_c \simeq 3.1$.

7.2 Optimale Einteilchendichte

Die optimale Einteilchendichte $\rho(\varphi)$ gibt die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen (Spin) in einer Richtung anzutreffen, die durch den Winkel φ gegeben ist. Mit wachsendem Kopplungsparameter λ weicht die Dichte $\rho(\varphi)$ mehr und mehr von der Form einer δ-Funktion ab, wird flacher und nähert sich einer Konstanten an. Dabei fällt mit wachsendem λ der Ordnungsparameter stetig gegen Null ab, wo der Zustand in eine ungeordnete Phase übergeht. Für $\lambda = \lambda_c \simeq 3.1$ ist die Dichte gleichmäßig, $\rho(\varphi) = 1$. Das Verhalten der optimalen Ergebnisse für die Dichte $\rho(\varphi)$ im Zwischenbereich ist in Abb. 7.2 dargestellt.

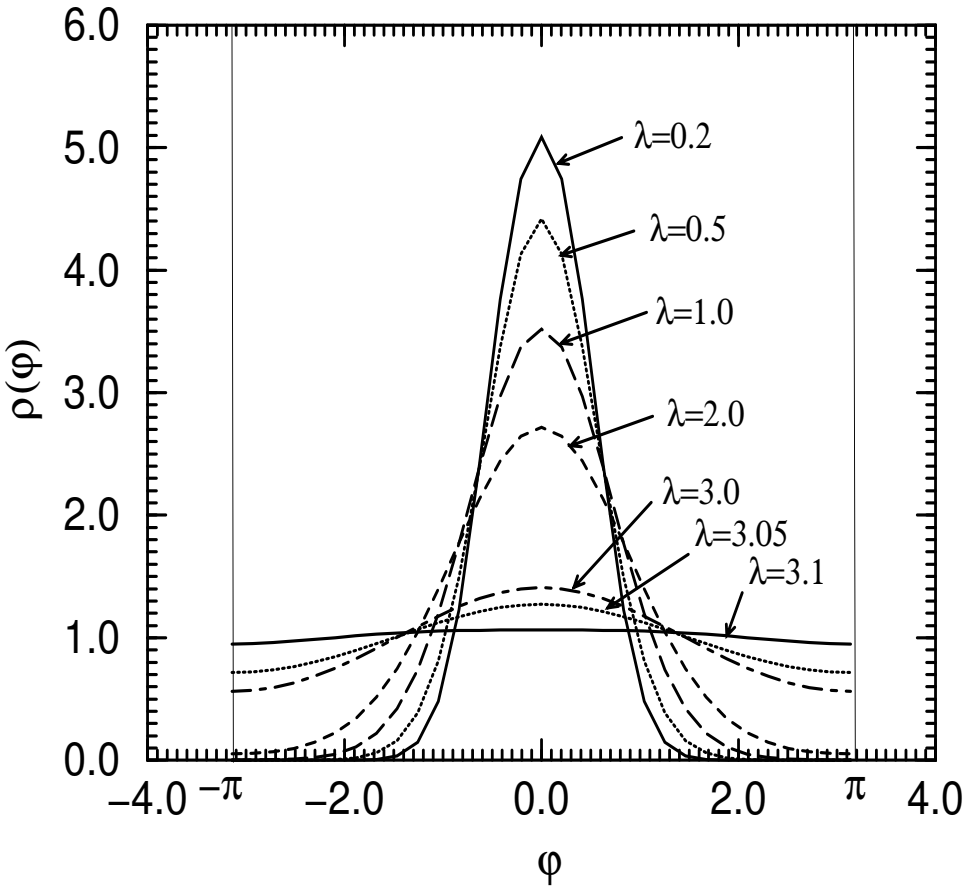


Abbildung 7.2: Numerische Ergebnisse für die optimale Einteilchendichte $\rho(\varphi)$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ.

7.3 Phasen-Phasen Wahrscheinlichkeitsdichte

Die Wahrscheinlichkeit die Phase φ_1 und die Phase φ_2 entsprechend am Gitterpunkt 1 und 2 zu finden, ist durch die Funktion $P(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ gegeben. In Abb. 7.3 ist diese Funktion für nächste Nachbarn in Abhängigkeit vom Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ für einige Werte von λ aufgetragen. Für die geordnete Phase ist $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ so gewählt, daß die Summe $\varphi_1 + \varphi_2 = 0$ ist. Für den Relativwinkel $\varphi = 0$, i.e., $\varphi_1 = -\varphi_2 = 0$, nimmt diese Funktion einen maximalen Wert an. Anschaulich bedeutet das, daß zwei parallele Rotoren stark in der (+x) Richtung orientiert sind. Rotoren in der (-x) Richtung sind unwahrscheinlich. Mit zunehmendem Kopplungsparameter nimmt die Wahrscheinlichkeit für parallele Rotoren in der (+x) Richtung ab. Für große Werte von $\lambda > \lambda_c$ ist diese Funktion $P(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ konstant. Die Rotoren sind deshalb in dieser Phase unabhängig und ihre Richtungen gleich wahrscheinlich.

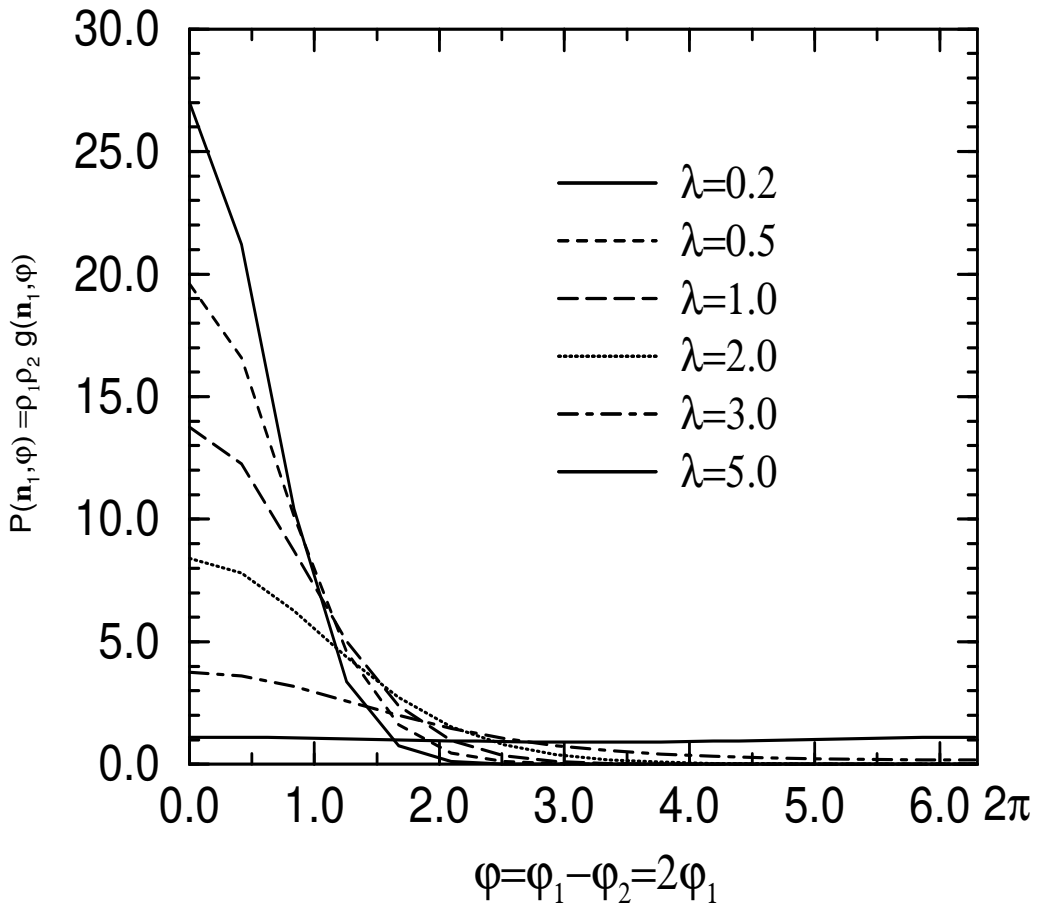


Abbildung 7.3: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2) = \rho(\varphi_1)\rho(\varphi_2)g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ als Funktion des Relativwinkels $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ und nächste Nachbarn, $|\mathbf{n}_1| = 1$.

7.4 Grundzustandsenergie

Die numerischen Ergebnisse der CBF Theorie (in HNC/0-Näherung) für die minimierte Energie des Grundzustandes pro Gitterpunkt sind in Abb. (7.4) dargestellt. Die Energiekurve zeigt im gesamten λ-Bereich ein glattes Verhalten. Der Phasenübergang zweiter Ordnung tritt bei $\lambda \simeq 3.1$ auf. Für Werte $\lambda > \lambda_c$ ist $\rho(\varphi) = 1$ und $M_x = 0$. In diesem Bereich weicht die Korrelationsenergie stark vom Molekularfeld-Ergebniss ab. Hier herrschen starke Phasenfluktuationen, die Phasen φ_i sind unbestimmt und können mit gleicher Wahrscheinlichkeit jeden Wert im Interval $[-\pi, \pi]$ annehmen. Ist λ genügend groß, wird die Korrelationsenergie vernachlässigbar und kann durch die Störungstheorie in zweiter Ordnung gut approximiert werden. Das Ergebnis ist:

$$E_c/N = -\frac{1}{2\lambda}\,. \tag{7.1}$$

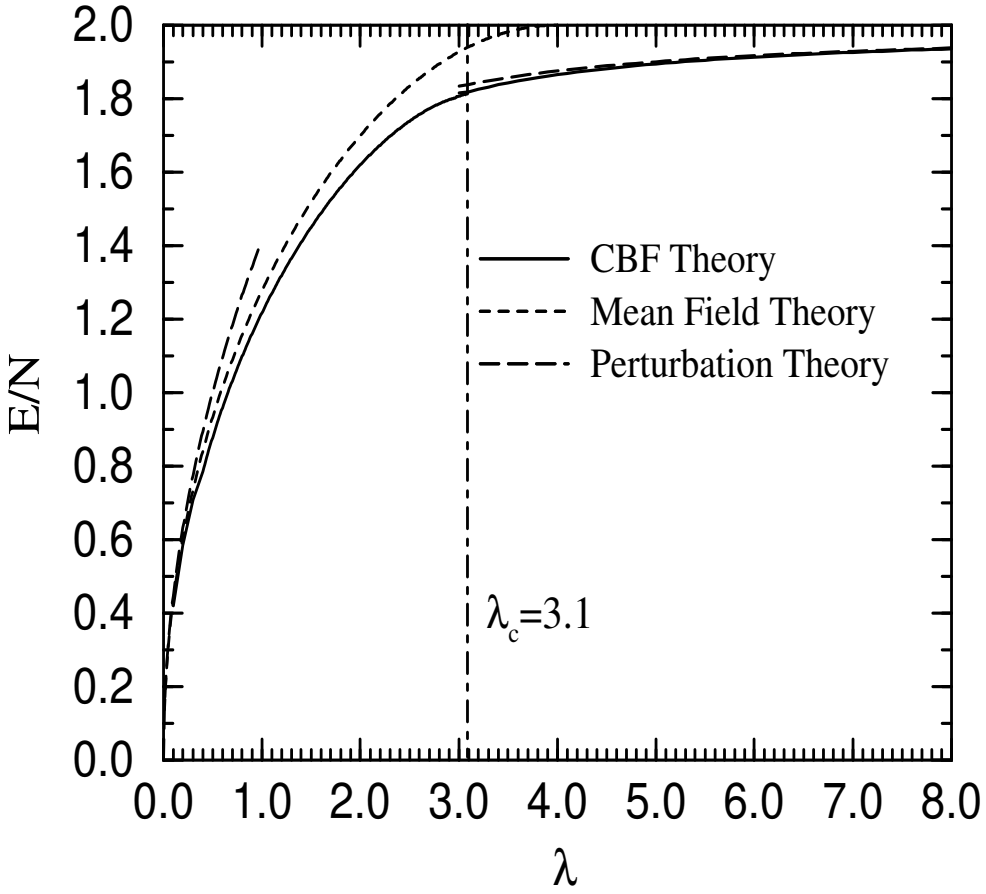
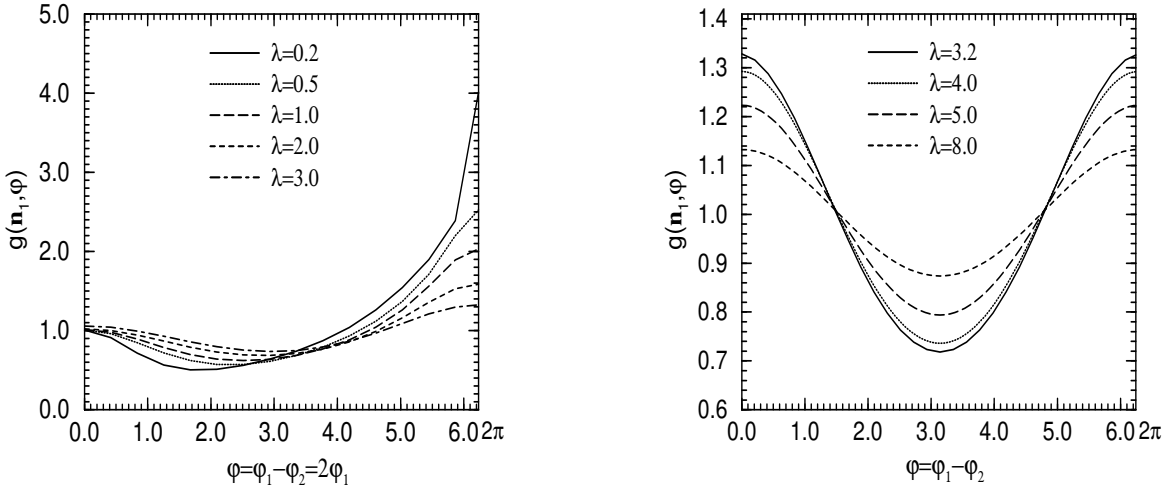


Abbildung 7.4: Minimale Grundzustandsenergie pro Gitterpunkt als Funktion des Kopplungsparameters λ. Gezeigt sind numerische Ergebnisse der CBF Theorie.

In dieser Phase lassen sich die Rotoren approximativ als freie Bosonen in S-Wellen-Zuständen ($\hat{l}_i = 0$) verstehen. Im Rahmen des Modells für granulare Materie interpretiert man diesen Fall dadurch, daß sich keine Cooper-Paare (keine Ladung) auf den Inseln befinden. Im Bereich $\lambda < \lambda_c$ nimmt die Korrelationsenergie mit fallendem Wert des Kopplungsparameters λ ab. Es existiert eine langreichweitige Ordnung, an die die Richtungen φ_i stark gebunden sind. Diesen geordneten Zustand kann man auch als ein Kondensat von Bosonen (Quasiteilchen) mit Spin 1 interpretieren. Eine andere Interpretation ist, den Zustand als Cluster von Spinrotoren mit unbestimmten Einzel-Drehimpulsen zu beschreiben. Im Bild der Josephson Kontakte bedeutet das, daß die Zahl der Cooper Paare auf der Insel unbestimmt und die Anordnung supraleitend ist. Mit zunehmendem Kopplungsparameter nimmt die Abstoßung durch die kinetische Bewegung der Rotoren zu, die die Clusterung (bzw. langreichweitige Ordnung) am kritischen Wert λ_c zerbricht und nun über die anziehende Wechselwirkung dominiert.

7.5 Räumliche Verteilungsfunktion

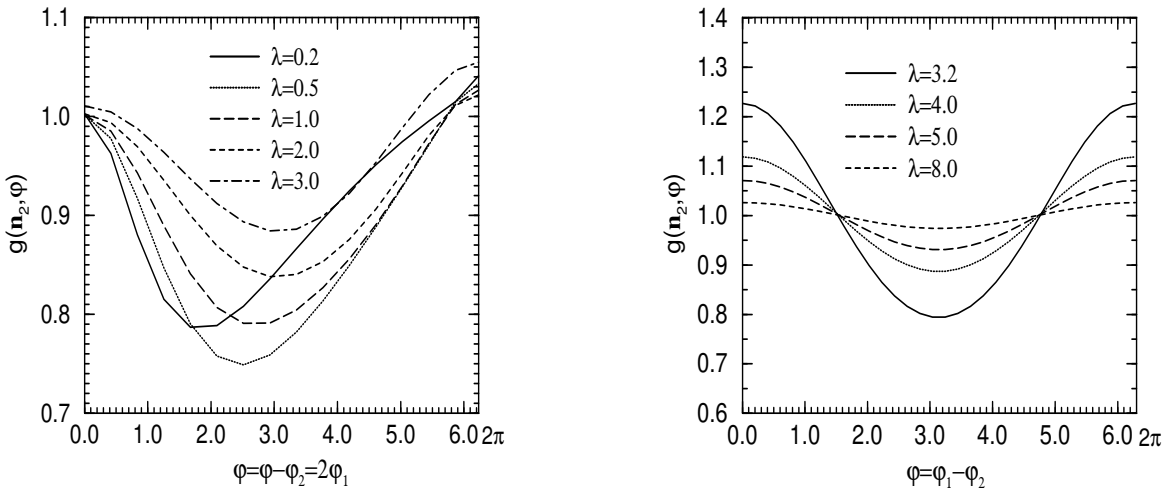
Die Korrelationseffekte im betrachteten System kann man durch die winkelabhängige räumliche Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ beschreiben.



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.5: Die winkelabhängige räumliche Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ als Funktion vom Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ für nächste Nachbarn, $|\mathbf{n}_1| = 1$.

In Abb.(7.5) ist die Funktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ für nächste Nachbarn, $|\mathbf{n}_1| = 1$, in Abhängigkeit vom Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ für einige Werte von λ aufgetragen. Für die geordnete Phase ist $\varphi = 2\varphi_1$. Allgemein sieht man, daß die Funktion $g(\mathbf{n}_1;\varphi_1,\varphi_2)$ bei $\varphi = 2\pi$ die größten Werte zeigt. Das bedeutet anschaulich im Fall (a), daß zwei parallele Spins mit anti-paralleler Ausrichtung zur x-Richtung maximal korreliert sind und sich deshalb gegenseitig am meisten beeinflussen. Die Stärke der Korrelationen nimmt mit zunehmendem Kopplungsparameter λ ab. In Abb.(7.6) ist diese Funktion für die übernächsten Nachbarn ($\mathbf{n}_2 = (1,1)$) für einige Werte des Kopplungsparameters λ dargestellt. Die Korrelationen sind am stärksten an den Werten $\varphi = 0$ und 2π und nehmen mit absteigender Kopplungsstärke λ ab. Im Vergleich zum Maximum der Funktion $g(\mathbf{n}_1,\varphi)$ ist das entsprechende Maximum der Funktion $g(\mathbf{n}_2,\varphi)$ kleiner. Das Verhalten der Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ unter der Transformation $\varphi_1 \to \pi - \varphi_1$ (unter der der Hamilton-Operator invariant ist) kann man an den Figuren (7.5) und (7.6) ablesen. Die ungeordnete Phase erhält diese Reflexionssymmetrie, da die Funktion nur vom Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ abhängig ist. Sie ist deshalb eine gerade Funktion bzgl. $\varphi = \pi$. In der geordneten Phase ist diese Symmetrie-Eigenschaft des Hamilton-Operators jedoch gebrochen. Die Verteilungsfunktion ist nun nicht nur abhängig vom Relativwinkel, sondern auch von der Summe $(\varphi_1 + \varphi_2)$ und die Symmetrie bzw. Spiegelung an $\varphi = \pi$



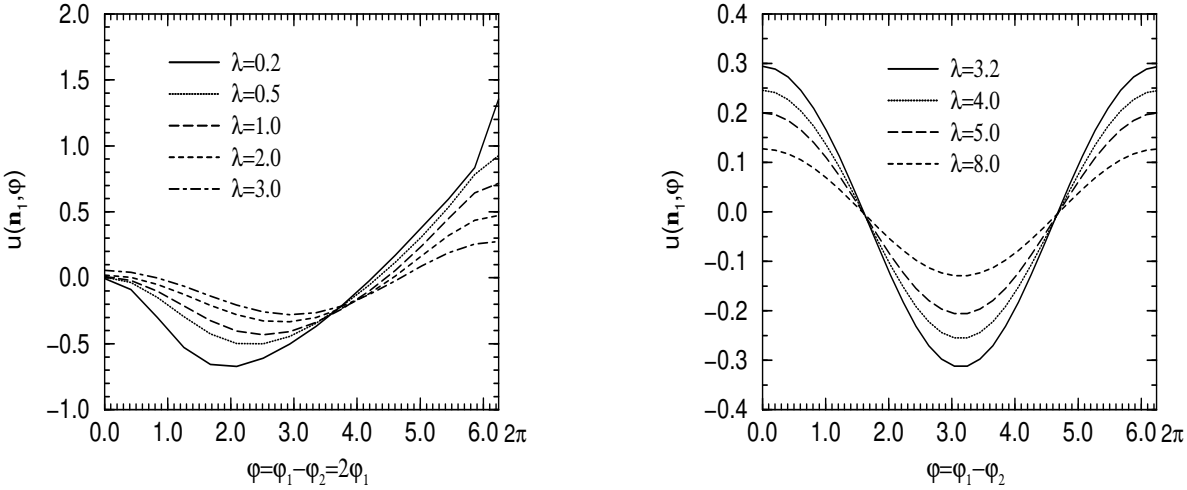
(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.6: Die winkelabhängige räumliche Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ als Funktion vom Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ für übernächste Nachbarn, $|\mathbf{n}_2| = \sqrt{2}$.

geht verloren.

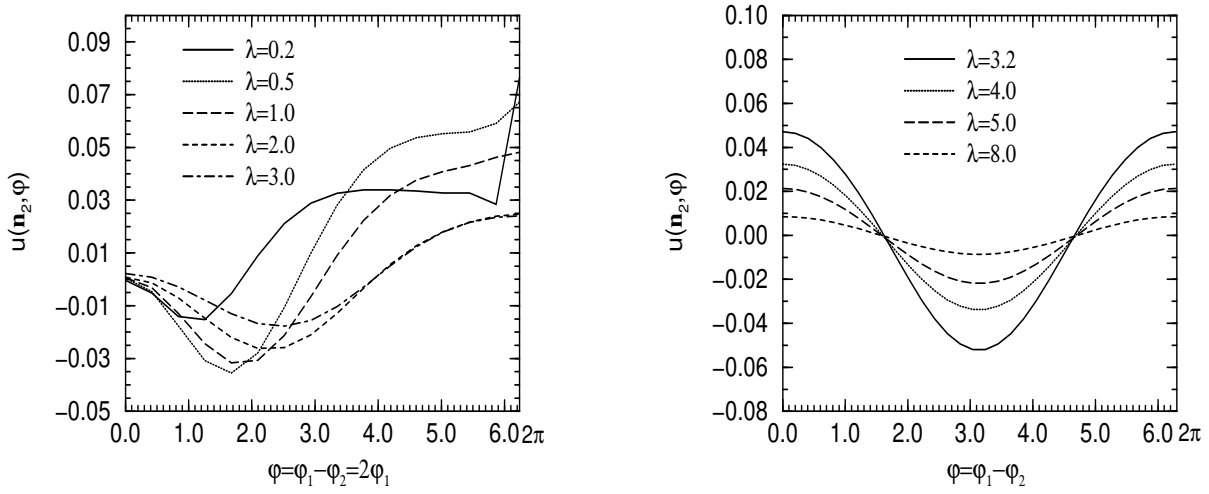
7.6 Pseudopotential

Weitere Informationen über die Korrelationseffekte lassen sich auch aus dem Verlauf des Pseudopotentials $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ gewinnen. Anhand der Abbn. (7.7) und (7.8) zeigt



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.7: Das Pseudopotential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ als Funktion vom Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters für nächste Nachbarn, $|\mathbf{n}_1| = 1$.



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.8: Das Pseudopotential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ als Funktion vom Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ für übernächste Nachbarn $|\mathbf{n}_2| = \sqrt{2}$.

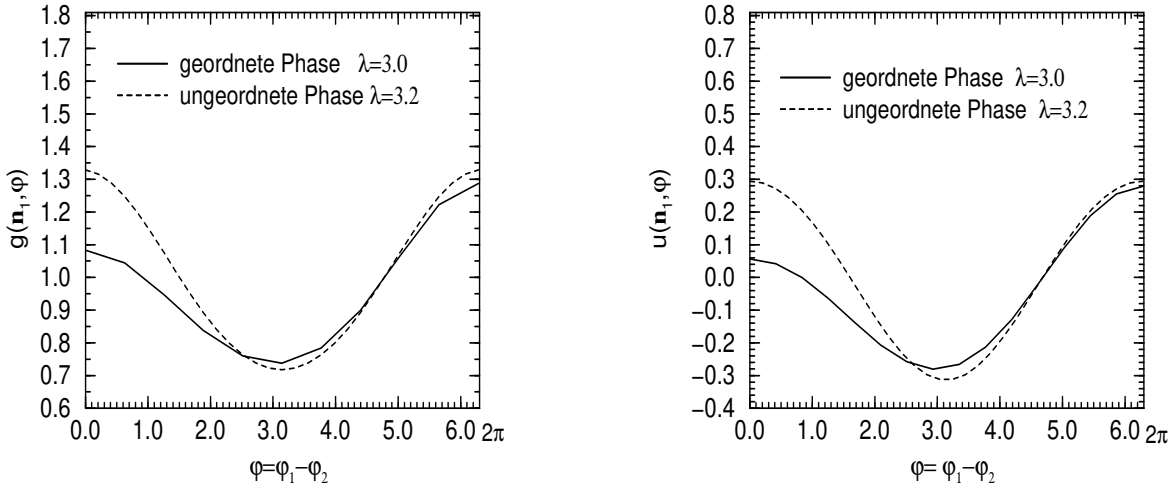
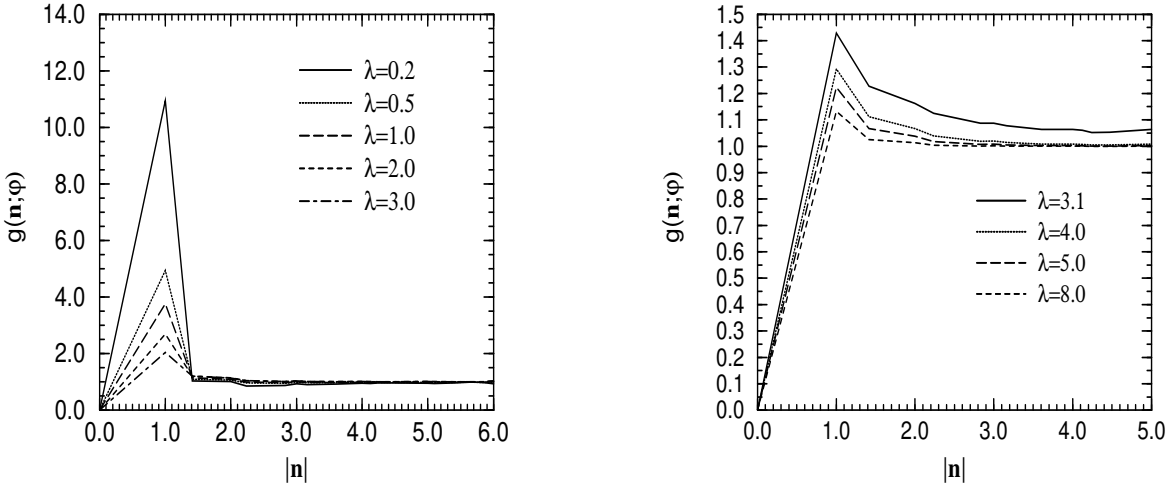


Abbildung 7.9: Die winkelabhängige räumliche Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n}_1;\varphi_1,\varphi_2)$ und das Pseudopotential $u(\mathbf{n}_1;\varphi_1,\varphi_2)$ beim Kopplungsparameter $\lambda = 3.0$ in der geordneten Phase und $\lambda = 3.1$ in der ungeordneten Phase als Funktion des Relativwinkels φ.

diese Funktion ein ganz ähnliches Verhalten wie die entsprechende Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$. Die Korrelationen für nächste Nachbarn sind am stärksten und in der geordneten Phase genügend groß zur Ausrichtung der Spins. Sie verschwinden für große Kopplungsparameter λ. Das Verhalten der Funktion $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ unter der Transformation $\varphi_1 \to \pi - \varphi_1$ ist ähnlich dem der Funktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$. Die ungeordnete Phase ist invariant unter chiraler Symmetrie sowie der O(2) Symmetrie. Diese Symmetrie-

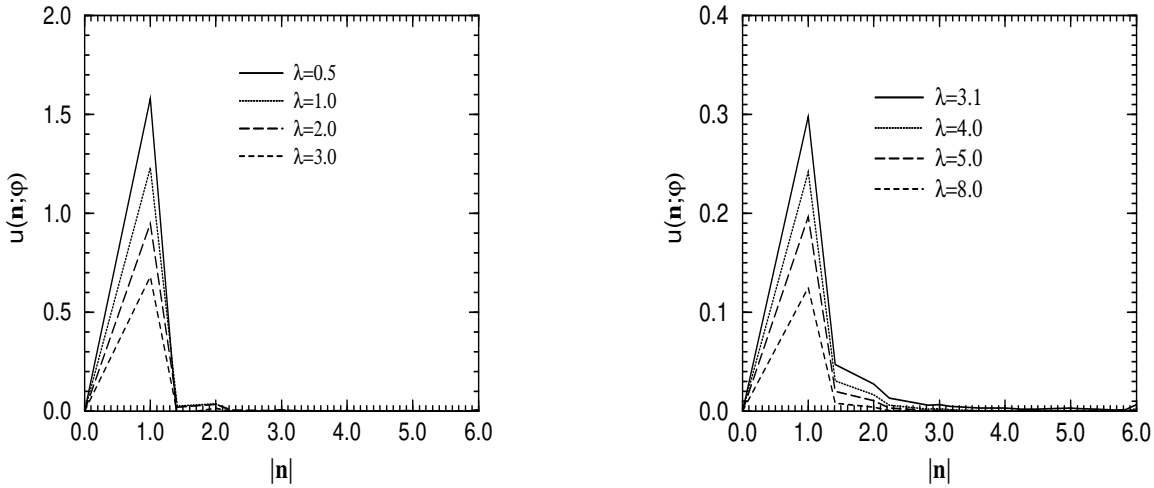
Eigenschaften sind in der geordneten Phase gebrochen. Zum Vergleich sind die Funktio-



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.10: Die winkelabhängige räumliche Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ als Funktion des Gitterabstands $|\mathbf{n}|$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ beim Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = 2\pi$ $(\varphi_1 = -\varphi_2 = \pi)$.

nen $g(\mathbf{n}_1;\varphi_1,\varphi_2)$ und $u(\mathbf{n}_1;\varphi_1,\varphi_2)$ in Abb. (7.9) gegen den Relativwinkel φ aufgetragen (für $\lambda = 3.0$ in der geordneten Phase und $\lambda = 3.2$ in der ungeordneten Phase). Am kritischen Kopplungsparameter $\lambda_c \simeq 3.1$ gehen diese Funktionen ineinander über.
Abbn. (7.5)-(7.8) zeigen, daß die Funktionen $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ maximale



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.11: Das Pseudopotential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ als Funktion des Gitterabstands $|\mathbf{n}|$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ beim Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = 2\pi$ $(\varphi_1 = -\varphi_2 = \pi)$.

Werte beim Relativwinkel $\varphi = 0$ und 2π annehmen. In Abbn.(7.10) und (7.11) sind diese Funktionen gegen den Gitterabstand $|\mathbf{n}|$ für $\varphi_1 = -\varphi_2 = \pi$ ($\varphi = 2\pi$) aufgetragen, d.h. Spin 1 und Spin 2 sind parallel und zeigen in negativer x-Richtung. Diese Abbildungen zeigen, daß die Funktionen $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ und $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ am stärksten für nächste Nachbarn und für übernächste Nachbarn von Eins bzw. Null abweichen. Die Funktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ für $\varphi_1 = -\varphi_2 = \pi$ zeigt, daß die Korrelationen zwei Spins mit paralleler Ausrichtung in der (-x) Richtung viel größer in der geordneten Phase sind als in der ungeordneten. Die Funktion $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ ist für kleine Werte des Kopplungsparameters groß und nimmt mit wachsendem λ ab. Am kritischen Kopplungsparameter geht diese Funktion stetig von einer Phase zur anderen.

7.7 Korrelationfunktion $G(\mathbf{n})$

Um die Abhängigkeit der Korrelationseffekte vom Abstand noch besser zu erkennen, ist die Zweiteilchen-Korrelationsfunktion $G(\mathbf{n})$, Gl.(5.61), gegen den relativen Gitterabstand $|\mathbf{n}|$ in Abbn. (7.12) und (7.13) für verschiedene Werte des Kopplungsparameters aufgetragen.

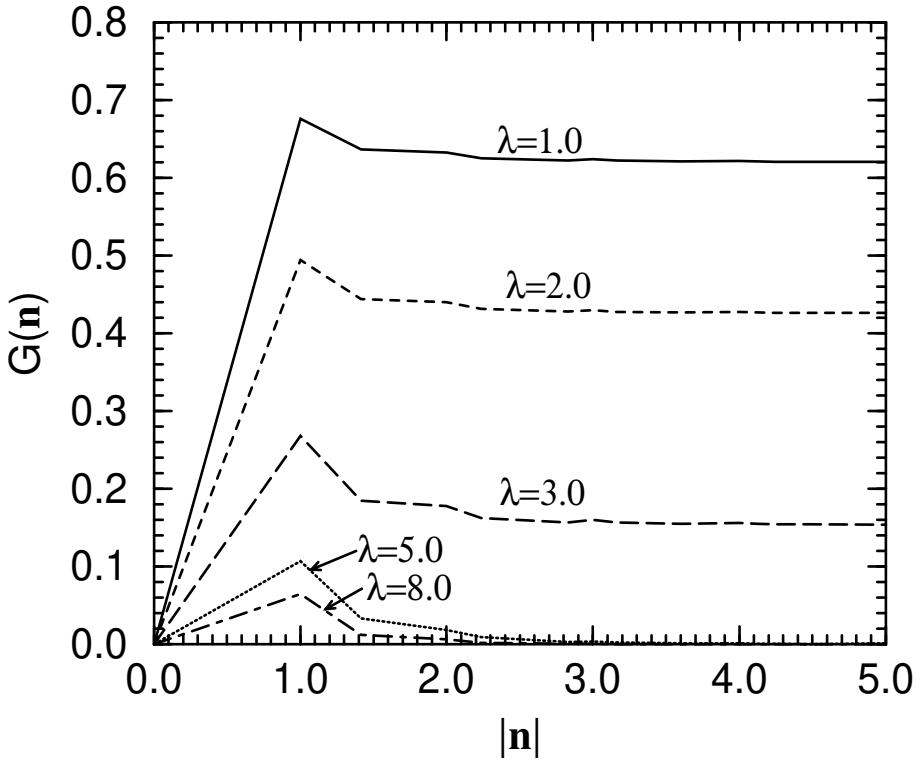
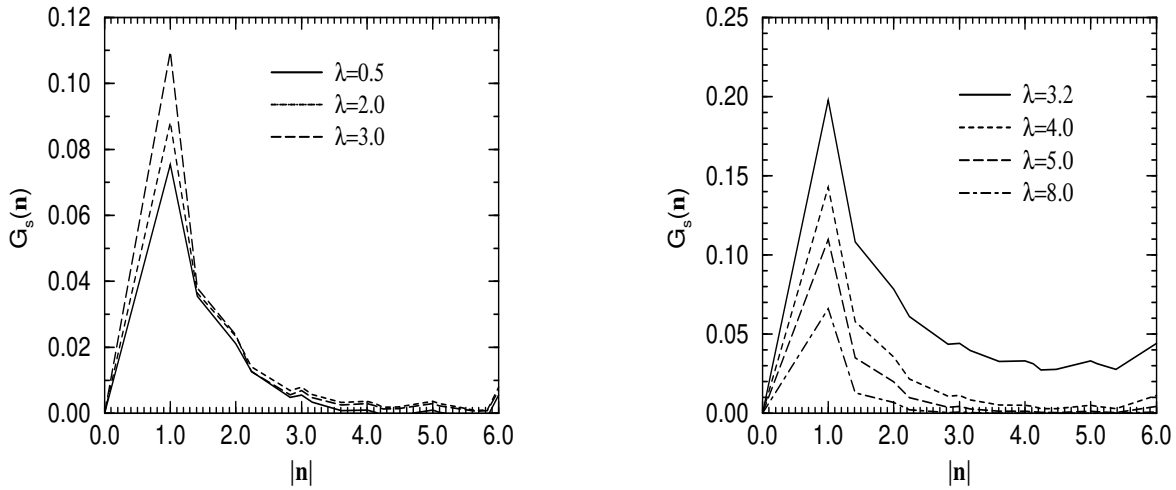
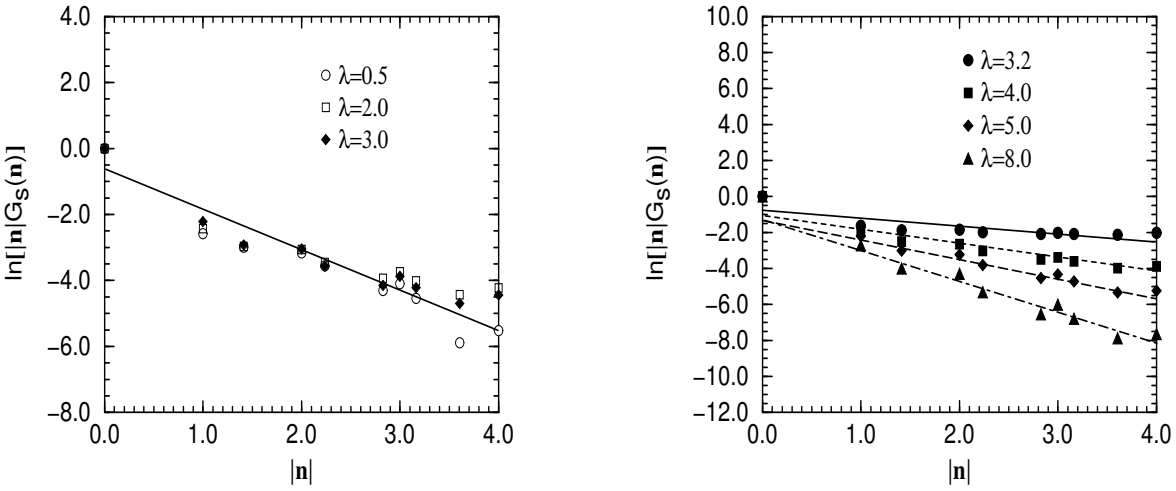


Abbildung 7.12: Die gemittelte Korrelationsfunktion $G(\mathbf{n})$ als Funktion des Relativabstandes $|\mathbf{n}|$ für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ.



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.13: Der kurzreichweitige Anteil $G_s(\mathbf{n})$ der Korrelationsfunktion $G(\mathbf{n})$ als Funktion des Relativabstandes $|\mathbf{n}|$, für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ.



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.14: Die inverse Korrelationslänge κ der Korrelationsfunktion $G_s(\mathbf{n})$, die durch die Steigung der Funktion $\ln|\mathbf{n}|\,G_s(\mathbf{n})$ gegeben ist, für verschiedene Werte des Kopplungsparameters λ in Abhängigkeit vom relativen Abstand $|\mathbf{n}|$.

Diese Funktion verschwindet bei $\mathbf{n} = 0$, hat einen maximalen Wert bei $|\mathbf{n}_1| = 1$ und geht danach asymptotisch auf den Wert 0 in der ungeordneten Phase bzw. auf M_x^2 in der geordneten Phase. Beispielsweise fällt diese Funktion für $\lambda = 1$ bzw. $\lambda = 3$ auf 0.628 bzw. 0.227, was im Vergleich mit den M_x^2 Daten übereinstimmt. Daraus kann man zwei Dinge schließen: Erstens, das asymptotische Verhalten $M_x^2 > 0$ zeigt eine langreichweitige geordnete Phase an, zweitens, sind die Korrelationen für nächste Nachbarn am stärksten und sind unterschiedlich groß. Abb. (7.13) zeigt, daß die räumliche Korrelationsfunktion

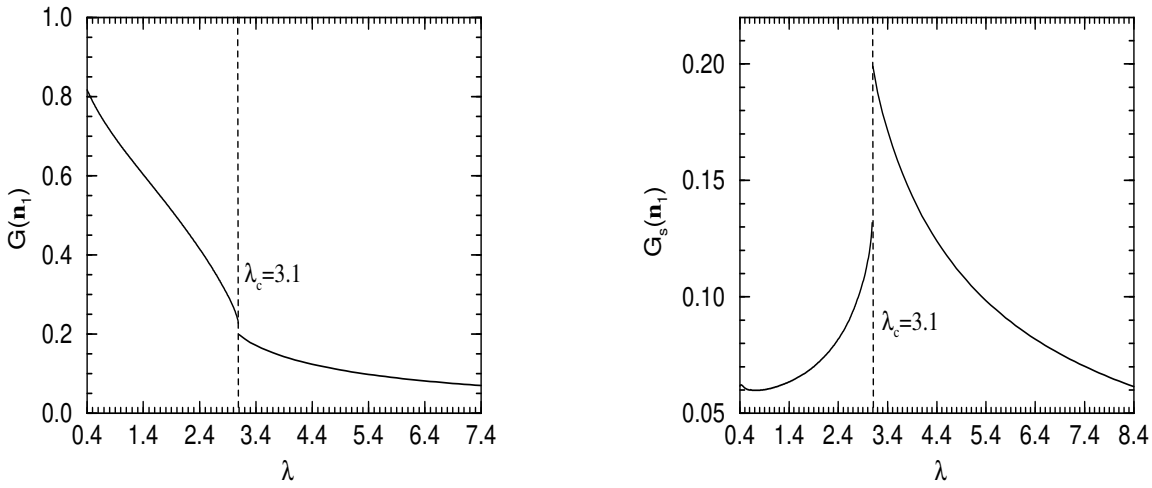


Abbildung 7.15: Die Korrelationsfunktion $G(\mathbf{n}_1)$ und ihr kurzreichweitiger Anteil $G_s(\mathbf{n}_1)$ für nächste Nachbarn, $\mathbf{n}_1 = (0,1)$, als Funktion des Kopplungsparameters λ.

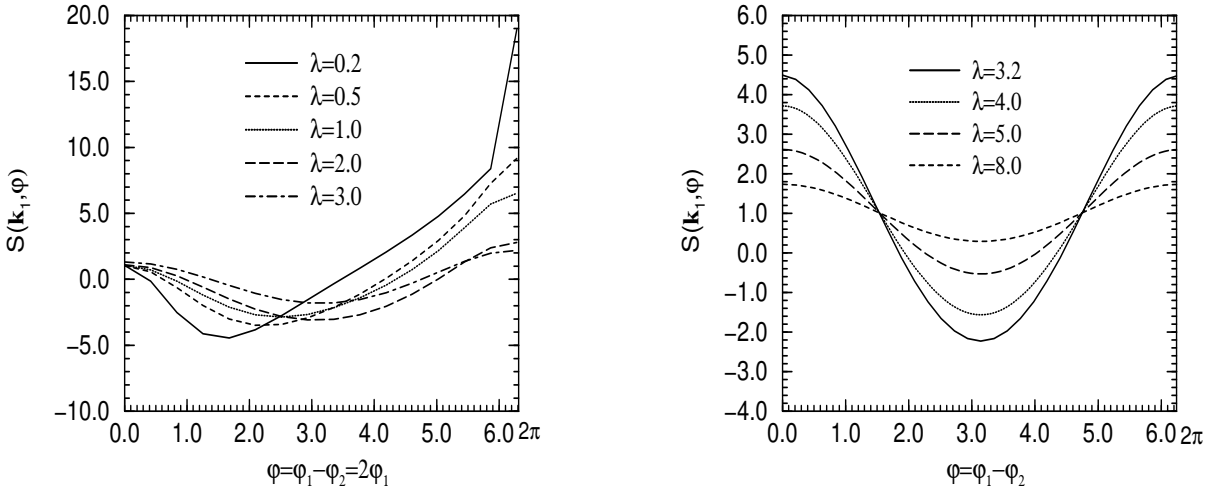
$G(\mathbf{n})$ zerlegt werden kann, $G(\mathbf{n}) = M_x^2 + G_s(\mathbf{n})$, für $\mathbf{n} \neq 0$. Die Funktion $G_s(\mathbf{n})$ ist stets kurzreichweitig und besitzt ungefähr Yukawa-artiges Verhalten

$$G_s(\mathbf{n}) \simeq \frac{G_0}{|\mathbf{n}|} e^{-\kappa|\mathbf{n}|} . \tag{7.2}$$

Der Parameter κ^{-1} charakterisiert die Korrelationslänge der Funktion $G_s(\mathbf{n})$, welche wegen Gl. (7.2) durch den Logarithmus $\ln|\mathbf{n}|G_s(\mathbf{n}) = [\ln G_0 - \kappa|\mathbf{n}|]$ bestimmt werden kann, Abb. (7.14).
In Abb. (7.15) sind die Korrelationsfunktionen $G(\mathbf{n})$ und $G_s(\mathbf{n})$ für den Gitterabstand $|\mathbf{n}_1| = 1$ gegen den Kopplungsparameter λ aufgetragen.

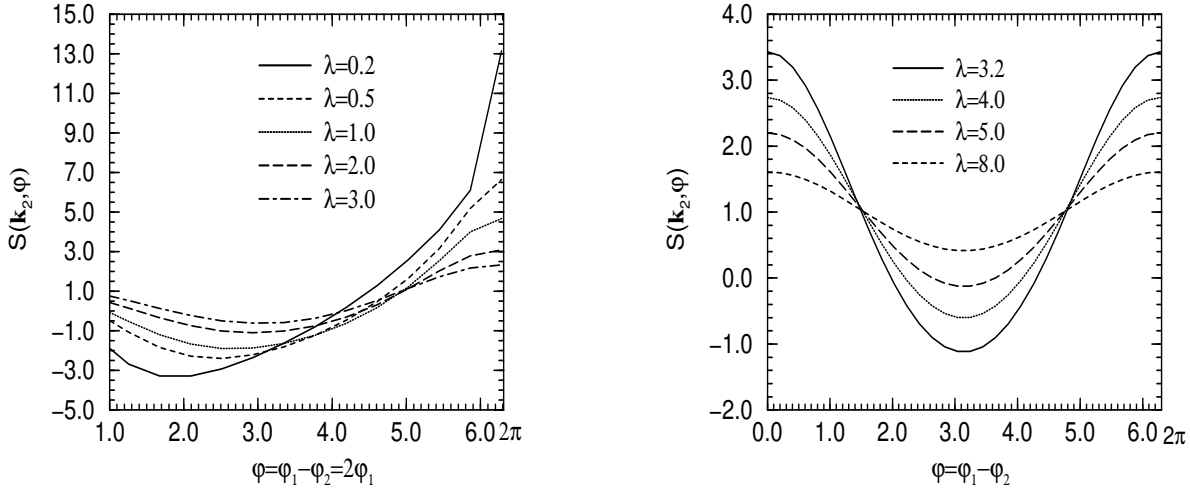
7.8 Die Strukturfunktion $S(\mathbf{k}; \varphi_1, \varphi_2)$

In Gleichung (5.17) haben wir die winkelabhängige Zweiteilchen-Strukturfunktion als die Fouriertransformierte der Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n}; \varphi_1, \varphi_2)$ eingeführt. In Abbn. (7.16) und (7.17) ist diese Funktion gegen den Relativwinkel aufgetragen, bei verschwindendem Wellenvektor $\mathbf{k}_1 = 0$ und bei $|\mathbf{k}_2| = 1$. Die im System vorhandenen Korrelationen können natürlich auch durch diese Strukturfunktion charakterisiert werden. Abbn. (7.16) und (7.17) zeigen, daß die winkelabhängige Zweiteilchen-Strukturfunktion das Verhalten der winkelabhängigen Zweiteilchen-Verteilungsfunktion widerspiegelt. Anhand dieser Abbildungen findet man, daß die Strukturfunktion $S(\mathbf{k}; \varphi_1, \varphi_2)$ bei den Wellenvektoren $\mathbf{k}_1 = (0,0)$ und $\mathbf{k}_2 = (0,1)$ mit wachsendem Kopplungsparameter abnimmt. Für große Werte von λ ist diese Funktion fast gleich Eins.



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.16: Die winkelabhängige Zweiteilchen-Strukturfunktion für den Wellenvektor $\mathbf{k}_1 = (0,0)$, aufgetragen gegen den Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = 2\varphi_1$, mit $(\varphi_1 + \varphi_2 = 0)$in beiden Phasen des Grundzustands.



(a) geordnete Phase (b) ungeordnete Phase

Abbildung 7.17: Die winkelabhängige Zweiteilchen-Strukturfunktion für den Wellenvektor $\mathbf{k}_2 = (0,1)$, aufgetragen gegen den Relativwinkel $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = 2\varphi_1$, mit $(\varphi_1 + \varphi_2 = 0)$ in beiden Phasen des Grundzustands.

7.9 Anregungsenergie

Die in dieser Arbeit analysierten Anregungen wurden für die ungeordnete Phase in Feynman Näherung berechnet. Abbildung 7.18 zeigt die Anregungsenergie des tiefliegendsten Zweiges ($\alpha = 1$) bei verschwindendem Wellenvektor $\mathbf{k} = 0$ als Funktion des Kopplungsparameters λ.

Für die geordnete Phase wurde die Feynman Gleichung nur qualitativ untersucht. Grund-

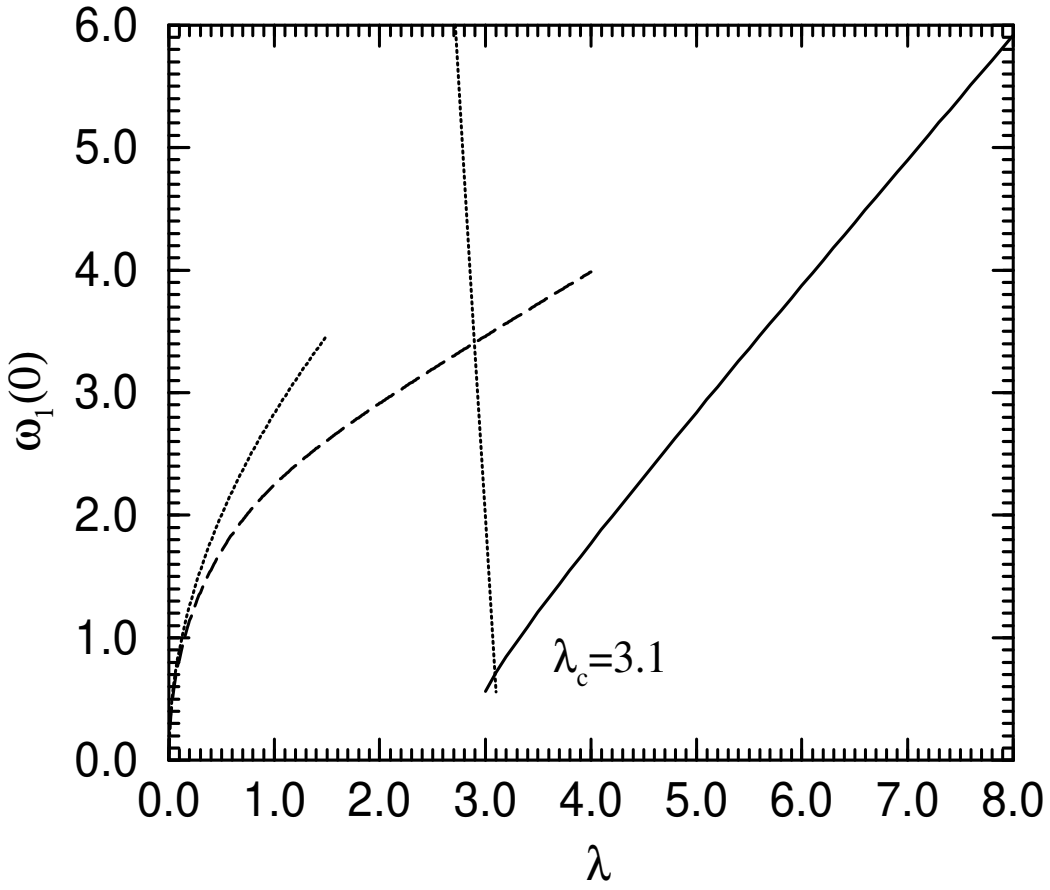


Abbildung 7.18: Die Energielücke des ersten Anregungszweiges $\omega_1(\mathbf{k})$ bei verschwindendem Wellenvektor $\mathbf{k}_1 = (0,0)$ in Feynman-Approximation. Die gepunkteten und gestrichelten Linien zeigen Resultate der Störungstheorie erster Ordnung bzw. der Molekularfeld-Approximation.

zustände und Anregungen des O(2) Modells sind durch Phasenfluktuationen charakterisiert, die das Verhalten des Modells über den gesamten Bereich des Kopplungsparameters bestimmen. Dieser bestimmt die Stärke dieser Fluktuationen und der Korrelationen des Systems. Nach der Unschärferelation zwischen den Operatoren $\hat{l}_i$ and $\hat{\varphi}_i$ ist das System nicht fähig, eine definierte Phasen-Konfiguration auszuwählen, statt dessen nimmt es einen Durchschnittswert φ_i mit einer Abweichung $\Delta\varphi_i$ an. Diese Abweichung $\Delta\varphi_i$ ist klein in der geordneten Phase für $0 < \lambda \ll \lambda_c$, wächst dann für größer werdende Werte λ und wird völlig unbestimmt in der ungeordneten Phase. Diese Unbestimmtheit verhindert deshalb die langreichweitige Ordnung des Systems in der ungeordneten Phase.

7.9.1 Ungeordnete Phase

Die Grundzustände dieser Phase sind in Molekularfeld-Näherung ein Vakuum, wo alle Teilchen in $l_i = 0$ Zuständen sind. Die Molekularfeld-Approximation zeigt weiterhin, daß die Erzeugung eines Anregungszweiges α ($\alpha = \pm 1, \pm 2, \pm 3, ...$) eine Energielücke von $\omega_\alpha(\mathbf{k}) = \alpha^2 \lambda$ überwinden muß. Im Rahmen der CBF Theorie reduziert sich diese Lücke wegen der Korrelationseffekte auf $\alpha^2 \lambda / S_\alpha(\mathbf{k})$. In diesem Fall $\lambda > \lambda_c$ können wir den Zustand des korrelierten Systems in Termen der Eigenzustände des $\hat{l}_i^2$-Operators ($\hat{l}_i^2 = -\partial^2/\partial\varphi^2$) darstellen. Die normierten Basisfunktionen sind

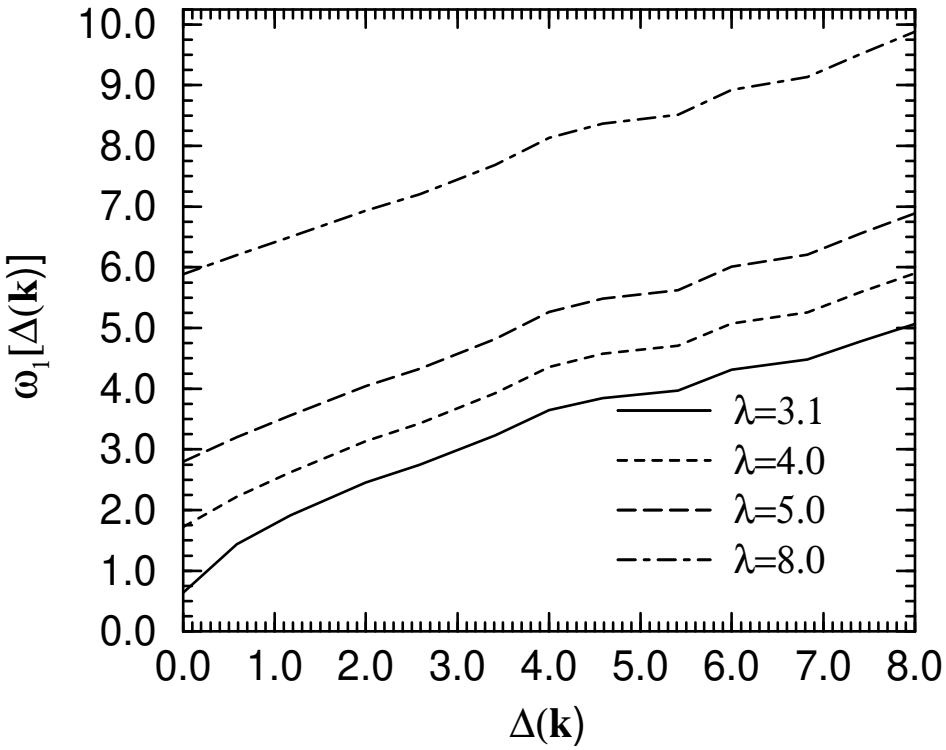


Abbildung 7.19: Energie $\omega_1(\mathbf{k})$ des ersten Aregungszweiges als Funktion des Skalars $\Delta(\mathbf{k})$ für verschiedene Werte der Kopplung $\lambda > \lambda_c$ in der ungeordneten Phase.

$$\psi(\varphi(\mathbf{r}_i)) =< l_i|\varphi(\mathbf{r}_i) >= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{\pm i l_i \varphi(\mathbf{r}_i)}. \tag{7.3}$$

In Dirac-Schreibweise bezeichnen wir diese Funktionen $\psi(\varphi_i)$ durch den Ket $|l_i>$. Wir können uns vorstellen, daß der erste niedrigstliegende Anregungszweig ($\alpha = l = 1$), dem Zustand eines Spin $l = 1$ Quasiteilchens (Quasilochs) entspricht, das sich mit dem Impuls $\hbar\mathbf{k}$ und der Energie $\omega_1(\mathbf{k})$ durch das Gitter bewegt. Theoretisch können diese Anregungen durch den Operator $e^{\pm i\varphi_i}$ erzeugt werden. Aus dem Kommutator von $\hat{l}_i$

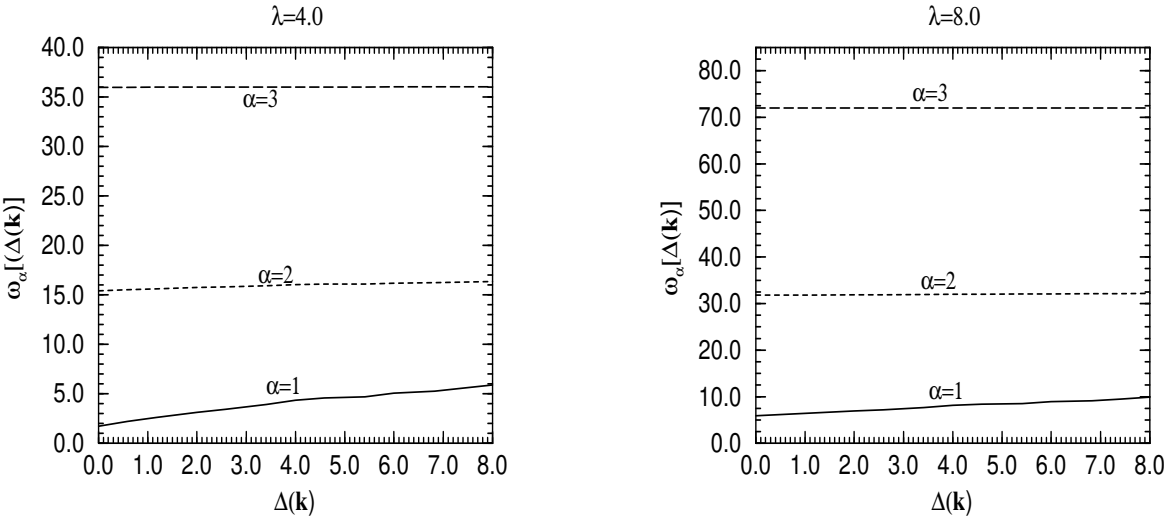


Abbildung 7.20: Die Anregungsenergie der drei niedrigstliegenden Energiezweige in Abhängigkeit von $\Delta(\mathbf{k})$ für Kopplungsparameter $\lambda = 4.0$ und $\lambda = 8.0$.

und $\hat{\varphi}_i$ ergibt sich $[\hat{l}_i, e^{\pm i\varphi_i}] = \pm\, e^{\pm i\varphi_i}$ und damit:

$$\hat{l}_i\, e^{\pm i\varphi_i} |l_i >= (l_i \pm 1)|l_i \pm 1 > . \tag{7.4}$$

Dementsprechend wirken die Operatoren $e^{\pm i\hat{\varphi}_i}$ als ob sie ein Quasiteilchen aus dem Grundzustand, der Bosonen mit l_i-Eigenwerten virtuell enthält, am Gitterpunkt i erzeugen bzw. vernichten. Dieses Teilchen kann sich im System mit einem Impuls $\hbar\mathbf{k}$ und Energie $\omega_1(\mathbf{k})$ bewegen und von einem beliebigen Gitterpunkt zu einem anderen gelangen. Diese Quasiteilchen können angeregt werden, wenn man dem System mindestens die Energie $\omega_1(0) > 0$ zufügt. Nur am kritischen Punkt verschwindet die Energielücke, so daß hier diese Teilchen im geordneten Zustand kondensieren. Ihre Energie $\omega_1(\mathbf{k})$ hängt vom Wellenvektor $\mathbf{k}$ ab. Durch Einführung der richtungsunabhängigen Größe

$$\Delta(\mathbf{k}) \;=\; 4 + \sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{0}} \Delta_{\mathbf{n}}\, e^{i\mathbf{k}\,\mathbf{n}} = 4 - 2(\cos(k_x) + \cos(k_y)), \tag{7.5}$$

können wir vorteilhafterweise $\omega_1(\mathbf{k})$ als Funktion des Skalars $\Delta(\mathbf{k})$ für die ungeordnete Phase auftragen.

In Abb.(7.19) ist die Anregungsenergie des niedrigsten Zweiges $\omega_1(\mathbf{k})$ als Funktion der skalaren Größe $\Delta(\mathbf{k})$ für verschiedene Werte von $\lambda > \lambda_c$ aufgetragen. Die Abhängigkeit der Anregungsenergie $\omega_1(\mathbf{k})$ von $\Delta(\mathbf{k})$ is fast linear.

In Abb. (7.20) haben wir die Anregungsenergie der drei niedrigstliegenden Zweige in Abhängigkeit von der skalaren Größe $\Delta(\mathbf{k})$ für $\lambda = 4.0$ und $\lambda = 8.0$ in der ungeordneten Phase aufgetragen. Die Anregungsenergien dieser drei Zweige steigen mit wachsendem Wert $\Delta(\mathbf{k})$ im wesentlich an und werden praktisch für große Werte von λ unabhängig von der Größe $\Delta(\mathbf{k})$.

7.9.2 Geordnete Phase

Für $\lambda > \lambda_c$ können Anregungen nur hervorgerufen werden, wenn sie genügend Energie besitzen, um die Lücke zu überwinden. Wenn $\lambda \to \lambda_c$ geht, verschwindet diese Energielücke und damit entstehen gap-lose Quasiteilchen und Quasilöcher im kondensierten Zustand $\lambda < \lambda_c$. Der geordnete Grundzustand kann deshalb als eine Überlagerung von diesen kondensierten Quasiteilchen mit anderen virtuellen Anregungen gesehen werden. Dadurch entsteht eine makroskopische Phasenkohärenz. Diese langreichweitige Ordnung des Systems für $0 \leq \lambda < \lambda_c$ wird durch Quantenfluktuationen zerstört, die durch langwellige Spinwellen hervorgerufen werden. Spinwellen verschiedener Zweige zeigen sich als Anregungen der geordneten Phase und sind durch den Phasen-Fluktuationsoperator (bzw. Spinorientierungsoperator) $\varrho_\alpha(\mathbf{k}, \{\varphi_i\})$ erzeugt. Ausgehend von $\lambda = 0$ nimmt die Energie des ersten Zweiges dieser Moden zu, ab dem Maximum fällt sie wieder auf Null ab. Dies bedeutet unter anderem, daß mit zunehmendem Wert von λ es wieder energetisch günstiger ist, den Zweig $\alpha = 1$ der Spinwellen zu erzeugen. Das ist verständlich, wenn wir uns die Einteilchendichte in der geordneten Phase ansehen. Nahe λ_c ist die parallele Spinorientierung fast völlig zerstört, so daß eine Spinwelle wieder fast gap-los entstehen kann. Abb. (7.18) zeigt die Energielücke $\omega_1(0)$ in der geordneten Phase in

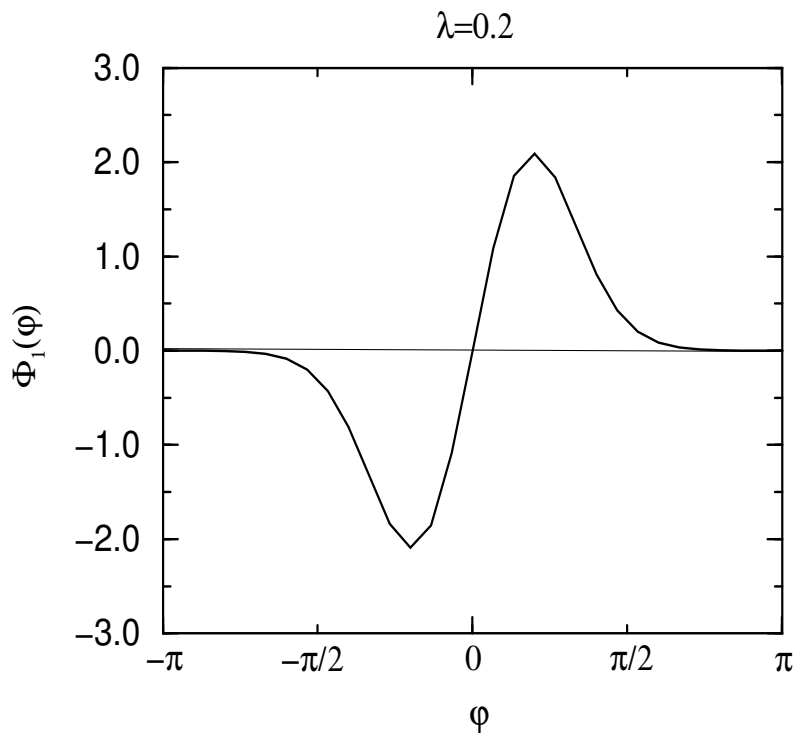


Abbildung 7.21: Der erste angeregte Zustand am Kopplungsparameter $\lambda = 0.2$ als Funktion von φ.

den Grenzfällen $\lambda \to 0$ und $\lambda \to \lambda_c^-$, die überwunden werden muß, um diese Mode zu

erzeugen. In Abb.(7.21) haben wir die Wellenfunktion des ersten angeregten Zweiges bei fester Kopplung $\lambda = 0.2$ gegen den Winkel φ aufgetragen. Für $\alpha = 1$ bzw. $\alpha = 3$ sind die Funktionen ungerade, für $\alpha = 2$ ist die Funktion gerade.

7.10 Strukturfunktion des Anregungszweiges

Korrelationseffekte der angeregten Zustände lassen sich durch die statische Strukturfunktion $S_\alpha(\mathbf{k})$ der Anregungszweige bemerkbar machen. Abbildung (7.22) zeigt die

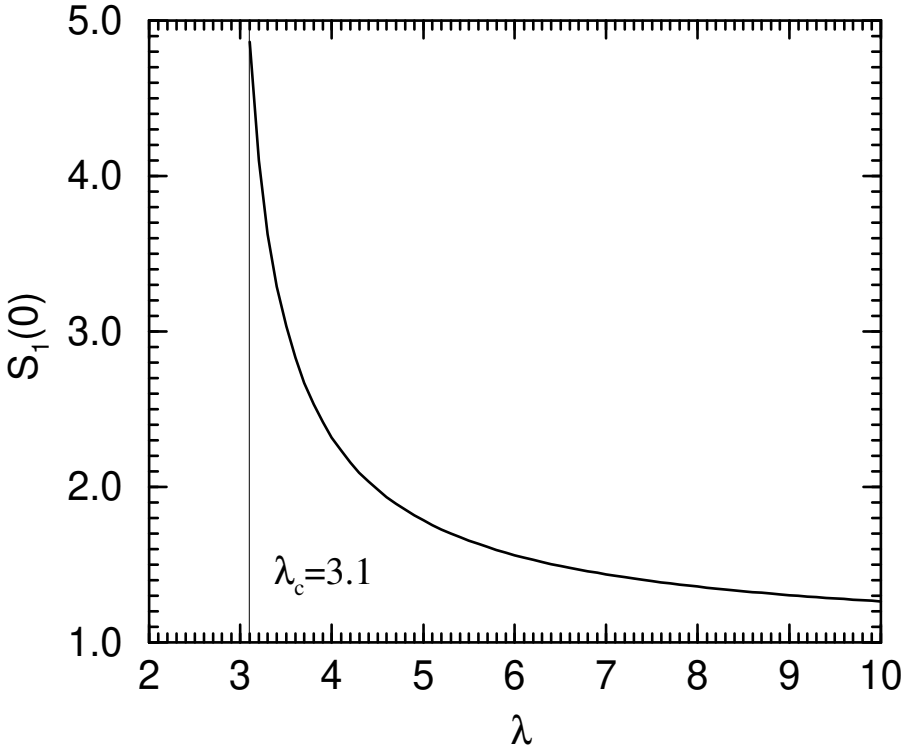


Abbildung 7.22: Die Strukturfunktion des ersten Anregungszweiges in der ungeordneten Phase bei verschwindendem Wellenvektor $\mathbf{k}_1 = (0,0)$ in Feynman-Approximation als Funktion des Kopplungsparameters λ.

Strukturfunktion des tiefliegendsten Zweiges ($\alpha = 1$) bei verschwindendem Wellenvektor $\mathbf{k}_1 = 0$ als Funktion des Kopplungsparameters λ für die ungeordnete Phase. Die Strukturfunktion (siehe Abb. 7.23) hängt nicht-linear von der skalaren Größe $\Delta(\mathbf{k})$ ab. Für große Kopplungsparameter nähert sich diese Funktion Eins an, da für große Werte von λ die Teilchen im System nahezu unkorreliert sind und in diesem Grenzfall die Verteilungsfunktion gegen Eins geht. In Abb. (7.24) haben wir die Strukturfunktion der drei niedrigstliegenden Zweige in Abhängigkeit von der Größe $\Delta(\mathbf{k})$ für $\lambda = 5.0$ in der ungeordneten Phase aufgetragen. Die Strukturfunktion des ersten Anregungszweiges

($\alpha = 1$) zeigt eine Abnahme mit abnehmendem Wert der Größe $\Delta(\mathbf{k})$. Für die andere zwei Zweige ist sie praktisch konstant.

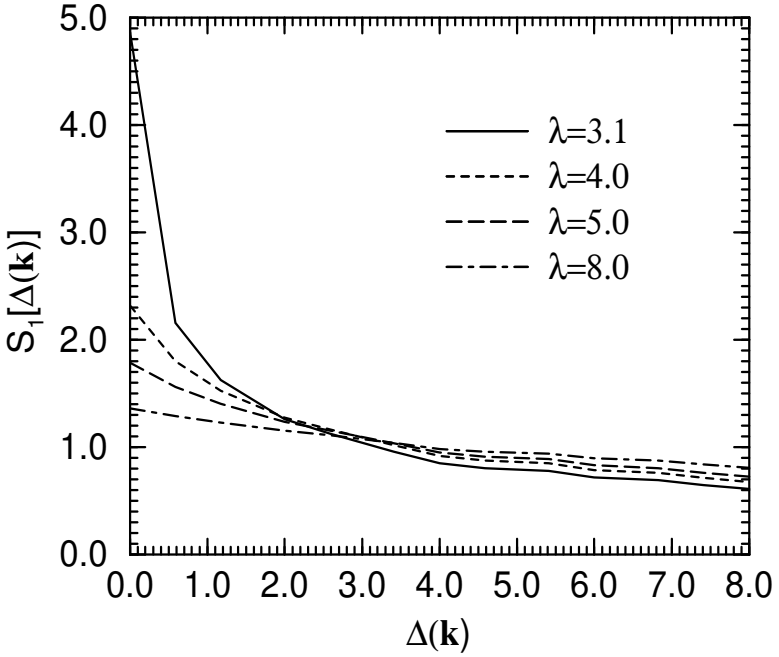


Abbildung 7.23: Die Strukturfunktion des ersten Energiezweiges $S_1(\mathbf{k})$ als Funktion von $\Delta(\mathbf{k})$ für verschiedene Werte der Kopplung λ in der ungeordneten Phase.

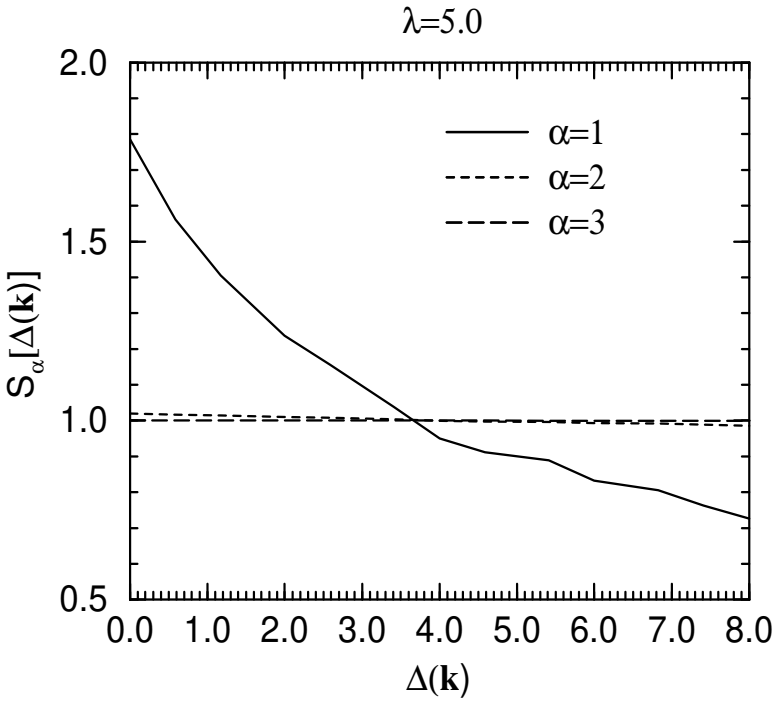


Abbildung 7.24: Die Strukturfunktion der drei niedrigstliegenden Energiezweige $S_\alpha(\mathbf{k})$ in Abhängigkeit von $\Delta(\mathbf{k})$ für den Kopplungsparameter $\lambda = 5.0$ (ungeordnete Phase).

Kapitel 8

Schlußfolgerungen und Ausblick

8.1 Schlußfolgerungen

Wir haben das O(2) Gittermodell, geeignet z. B. zur Beschreibung von XY Spin-Modellen und supraleitenden Josephson Kontakten, im Rahmen der Theorie der korrelierten Basisfunktionen (CBF Theorie) in zwei räumlichen Dimensionen untersucht. Das Optimierungsverfahren - Variation des Energiefunktionals in Verbindung mit den hypernetted-chain Gleichungen (in HNC/0 Näherung)- hat zwei Euler-Lagrange Gleichungen ergeben, eine für die optimale Einteilchendichte $\rho(\varphi)$ die andere für das Pseudo-Potential $u(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$ bzw. die Zweiteilchen-Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$. Die optimalen physikalischen Größen des Systems wurden durch Lösung dieser Gleichungen numerisch berechnet. Im Rahmen der CBF Theorie ergaben sich numerische Ergebnisse u. a. für den optimalen Ordnungsparameter M_x, die optimale Einteilchendichte $\rho(\varphi)$, die Verteilungsfunktion $g(\mathbf{n};\varphi_1,\varphi_2)$, die abhängig vom Abstand der Gitterpunkte und von den Winkeln ist, die minimierte Grundzustandsenergie, die Korrelationsfunktionen, die Strukturfunktionen und die niedrigliegenden Anregungsenergien. Sie wurden soweit möglich mit Resultaten der Störungstheorie bzw. der Hartree-Näherung verglichen. Die Ergebnisse zeigen, daß der Grundzustand zwei Phasen besitzt. Die Grundzustände für Kopplungsparameter im Bereich $0 \leq \lambda < \lambda_c$ beschreiben eine geordnete Phase, während für $\lambda > \lambda_c$ eine ungeordnete Phase vorliegt. Eine qualitative Analyse des Modells im Rahmen der Molekularfeld-Näherung ergibt einen kritischen Punkt $\lambda_c = 4$, wo ein Phasenübergang zweiter Ordnung auftritt. Die CBF Theorie führt zu dem kritischen Wert $\lambda_c \simeq 3.1$. Für $\lambda \to 0$ und $\lambda \to \infty$ stimmen die Resultate der CBF Theorie mit den bekannten Ergebnissen der Störungstheorie überein. Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, wie man das Phasendiagramm im Rahmen der Spinsysteme (Spinrotoren) aber auch der Josephson Kontakte interpretieren kann. In der geordneten Phase sind die klassischen Spins korreliert und ordnen sich für Kopplungsparameter $0 \leq \lambda \leq \lambda_c$ auf den Gitterpunkten ferromagnetisch. Deshalb ist der Ordnungsparameter M_x von Null verschieden und es liegt eine Symmetriebrechung der O(2) bzw. chiralen Symmetrie vor. Quantenfluktuationen der Spinorientierung nehmen mit wachsendem Kopplungsparameter zu, am

kritischen Kopplungsparameter $\lambda_c \simeq 3.1$ sind sie genügend stark, um die ferromagnetische Ordnung zu zerstören und die ungeordnete Phase zu verursachen. Das System befindet sich dann für $\lambda > \lambda_c$ in einer paramagnetischen Phase, die die volle Symmetrie des Hamilton-Operators besitzt.
In anderer Interpretation, nämlich eines Gitters von Josephson Kontakten, beschreibt die geordnete Phase $0 \leq \lambda \leq \lambda_c$ eine global-supraleitende Phase, für die die granularen Inseln schwach korreliert sind, aber eine langreichweitige Ordnung aufweisen. Für $\lambda > \lambda_c$ sind die Inseln bezüglich ihrer Phase ungeordnet. Deswegen entsteht kein Suprastrom und die Gesamtheit der Kontakte ist in der normalen Phase. Die physikalischen Eigenschaften des Modells sind ausführlich im Kapitel 7 beschrieben und diskutiert. Der Ordnungsparameter M_x ändert sich stetig von seinem Maximum bei $\lambda = 0$, wo die renormierte Einteilchendichte $\rho(\varphi)$ eine Delta-Funktion ist. Er fällt mit zunehmendem Kopplungsparameter λ ab und verschwindet beim kritischen Wert $\lambda \simeq 3.1$, wo die Einteilchendichte $\rho(\varphi)$ ihren konstanten Wert $\rho(\varphi) = 1$ erreicht. Die minimale Energie nimmt monoton zu. Am Wert λ_c ist sie glatt, weicht danach stark von der Hartree-Näherung ab und stimmt asymptotisch mit dem Resultat der Störungstheorie zweiter Ordnung überein. Die räumliche Korrelationfunktion ist maximal für nächste Nachbarn ($|\mathbf{n}_1| = 1$), kurzreichweitig in der ungeordneten Phase bzw. langreichweitig in der geordneten Phase und hat einen Yukawa-artigen Anteil, der ungefähr exponentiell mit dem Relativabstand $|\mathbf{n}|$ abfällt. Die winkelabhängigen Funktionen weisen deutlich auf die Brechung der chiralen Symmetrie in der geordneten Phase hin. In der ungeordneten Phase ist die Symmetrie erhalten. Die Resultate für die Energie des niedrigliegendsten Anregungszweiges und der zugehörigen Strukturfunktion bei verschwindendem Wellenvektor $\mathbf{k} = 0$ zeigen, daß diese Größen sehr viel besser berechnet worden sind als in der Molekularfeld-Näherung. Allgemein können wir feststellen, daß die CBF Theorie, obwohl sie nur Zweiteilchen-Pseudopotentiale berücksichtigt und im Rahmen der hypernetted-chain Näherung (HNC/0) durchgeführt ist, eine akzeptable quantitative Beschreibung des Verhaltens des Modells liefert.

8.2 Ausblick

Eine Erweiterung dieser Arbeit wäre, die Theorie auf das O(2) Modell auf einem dreidimensionalen räumlichen Gitter anzuwenden. Ebenso wäre es möglich, das Problem für beliebige Wechselwirkungen $\Delta(\mathbf{n})$, z. B. zur Analyse der Frustration der Spins zu behandeln.
In der vorliegenden Arbeit haben wir das System quantenmechanisch bei verschwindender Temperatur behandelt. Die Anregungen zeigen sich hier als Abweichung vom physikalischen Vakuum bzw. als Erzeugung und Vernichtung von quantisierten Einteilchen-Anregungen. Eine zukünftige Aufgabe ist, das Verhalten des Gittersystems bei endlichen Temperaturen zu betrachten, um das Zusammenspiel von Quanten- und thermischen-

Effekten und der von ihnen verursachten Phasenübergänge in verschiedenen räumlichen Dimensionen zu analysieren. Zu dieser Formulierung müßte die CBF Theorie auf eine korrelierte Dichtematrixtheorie verallgemeinert werden, die solche Erweiterungen erlaubt und systematische Studien bei beliebigen Temperaturen ermöglicht.
Eine relativ einfache Erweiterung der gegenwärtigen Studie bestünde darin, das chirale O(4) Gittermodell zu untersuchen. Man wäre dann in der Lage, einen Phasenübergang von Pionen zwischen einer Confinement-Phase und einer normalen Phase modellhaft zu studieren.

Literaturverzeichnis

[1] R. F. Bishop, N. E. Ligterink, and N. R. Walet, in *Condensed Matter Theories*, Vol. **14**, edited by D. J. Ernst, I. E. Perakis, A. S. Umar (Nova Science Publishers, Huntington, New York, 2000).

[2] C. J. Hamer, John B. Kogut, and L. Susskind, Phys. Rev. D **19**, 3091 (1979).

[3] Denis Dalidovich and Philip Phillips, Phys. Rev. B **59**, 11925 (1999).

[4] Min-Chul Cha, M. P. A. Fisher, S. M. Girvin, M. Wallin, and A. P. Young, Phys. Rev. B **44**, 6883 (1991).

[5] E. Šimánek, *Inhomogeneous Superconductors* (Oxford University Press, Oxford, 1994).

[6] S. Katsumoto, J. Low Temp. Phys. **98**, 287 (1995).

[7] U. Eckern and A. Schmid, Phys. Rev. B **39**, 6441 (1989).

[8] E. Roddick and D. Stroud, Phys. Rev. B **48**, 16600 (1993).

[9] C. Rojas and J. V. José, Phys. Rev. B **54**, 12361 (1996).

[10] T. K. Kopeć and J. V. José, Phys. Rev. B **63**, 64504 (2001).

[11] S. A. Chin, in *Theory of Spin Lattices and Lattice Gauge Models*, Lecture Notes in Physics, Vol. **494**, edited by J. W. Clark and M. L. Ristig (Springer-Verlag, Berlin, 1997).

[12] S. Doniach, Phys. Rev. B **24**, 5063 (1981).

[13] B. J. Kim and M. Y. Choi, Phys. Rev. B **52**, 3624 (1995).

[14] L. J. Geerligs, M. Peters, L. E. M. de Groot, A. Verbruggen, and J. E. Mooij, Phys. Rev. Lett. **63**, 326 (1989).

[15] H. S. J. van der Zant, W. J. Elion, L. J. Geerligs, and J. E. Mooij, Phys. Rev. B **54**, 10081 (1996).

[16] L. Amico and V. Penna, Phys. Rev. B **62**, 1224 (2000).

[17] J. W. Clark, in *Progress in Particle and Nuclear Physics*, Vol.2, edited by D. Wilkinson (Pergamon, Oxford, 1979).

[18] J. W. Clark and E. Feenberg, Phys. Rev. **113**, 388 (1959).

[19] H. W. Jackson and E. Feenberg, Rev. Mod. Phys. **34**, 686 (1962).

[20] E. Krotscheck, in *Lecture Notes in Physics*, Vol. **510**, edited by J. Navarro and A. Polls (Springer, Berlin, 1998).

[21] R. F. Bishop, A. S. Kendall, L. Y. Wong, and Y. Xian, Phys. Rev. D **48**, 887 (1993).

[22] R. F. Bishop, D. J. J. Farnell, S. E. Krueger, J. B. Parkinson, J. Richter, and C. Zeng, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 7601 (2000); `cond-mat/0011008`.

[23] E. Feenberg, *Theory of Quantum Fluids* (Academic Press, New York, 1969).

[24] C. E. Campbell, in *Progress in Liquid Physics*, edited by C. A. Croxton (Wiley, New York, 1978).

[25] A. Dabringhaus, doctoral thesis, Universität zu Köln (1990), (unveröffentlicht).

[26] A. Dabringhaus, and M. L. Ristig, in *Condensed Matter Theories*, Vol.**2**, edited by S. Fantoni and S. Rosati (Plenum, New York, 1991).

[27] M. L. Ristig and J. W. Kim, Phys. Rev. B **53**, 6665 (1996).

[28] M. Wallin, E. S. Sørensen, S. M. Girvin, A. P. Young, Phys. Rev. B **49**, 12115 (1994).

[29] B. Abeles, Phys. Rev. B **15**, 2828 (1977).

[30] E. Granato and M. A. Contentino, Phys. Rev. B **48**, 15977 (1993).

[31] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C**5**, L124 (1972).

[32] V. L. Berezinskii, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **61**, 1144 (1971) [Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1972)].

[33] A. Cuccoli, A. Fubini, V. Tognetti, and R. Vaia, Phys. Rev. B **61**, 11289 (2000).

[34] E. S̃imánek, Solid State Commun. **31**, 419 (1979).

[35] M. V. Simkin, Phys. Rev. B **44**, 7074 (1991).

[36] D. M. Wood and D. Stroud, Phys. Rev. B **25**, 1600 (1982).

[37] D. Ariosa and H. Beck, Phys. Rev. B **45**, 819 (1992).

[38] K. B. Efetov, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **78**, 2017 (1980) [Sov. Phys. JETP **51**, 1015 (1980)].

[39] E. Šimánek, Phys. Rev. B **32**, 500 (1985).

[40] R. S. Fishman, Phys. Rev. B **42**, 1985 (1990).

[41] W. Wang, doctoral thesis, Universität zu Köln (Shaker Verlag, Aachen, 1997).

[42] G. Grignani, A. Mattoni, P. Sodano, and A. Trombettoni, Phys. Rev. B **61**, 11676 (2000).

[43] B. J. Kim, J. Kim, S. Y. Park, and M. Y. Choi, Phys. Rev. B **56**, 395 (1997).

[44] L. Jacobs, J. V. José, M. A. Novotny, and A. M. Goldman, Phys. Rev. B **38**, 4562 (1988).

[45] J. Mikalopas, M. Jarrel, F. J. Pinski, Woonki Chung, and M. A. Novotny, Phys. Rev. B **50**, 1321 (1994).

[46] T. K. Kopeć and J. V. José, Phys. Rev. B **60**, 7473 (1999).

[47] R. Fazio and G. Schön, Phys. Rev. B **43**, 5307 (1991).

[48] J. E. Mooij, B. J. van Wees, L. J. Geerligs, M. Peters, R. Fazio, and G. Schön, Phys. Rev. Lett. **65**, 645 (1990).

[49] See, e.g., S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shahar, Rev. Mod. Phys. **69**, 315 (1997), and references therein.

[50] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University, New York, 1995).

[51] K. A. Gernoth and J. W. Clark, J. Low Temp. Phys. **96**, 153 (1994).

[52] C. W. Woo, in *The Physics of Liquid and Solid Helium,* edited by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (Wiley, New York, 1976).

[53] T. Morita and K. Hiroike, Prog. Theor. Phys. **25**, 537 (1961).

[54] M. Saarela, P. Pietiläinen and A. Kallio, Phys. Rev. B **27**, 231 (1983).

[55] A. Dabringhaus, M. L. Ristig and J. W. Clark, Phys. Rev. D **43**, 1978 (1991).

[56] L. S. Ornstein and F. Zernike, Proc. Acad. Sci. Amsterdam **17**, 793 (1914).

[57] W. Wang and M. L. Ristig, Phys. Lett. A **241**, 122 (1998).

[58] E. Krotscheck, G.-X. Qian, and W. Kohn, Phys. Rev. B **31**, 4245 (1985).

[59] L. Szybisz and M. L. Ristig, Phys. Rev. B **40**, 4391 (1989).

[60] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (University Press, Cambridge, 1986), Ch. 19.

Erklärung

Ich versichere, daß ich die von mir vorgelegte Dissertation selbständig angefertigt, die benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben und die Stellen der Arbeit - einschließlich Tabellen, Karten und Abbildungen -, die anderen Werken im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, in jedem Einzelfall als Entlehnung kenntlich gemacht habe; daß diese Dissertation noch keiner anderen Fakultät oder Universität zur Prüfung vorgelegen hat; daß sie - abgesehen von unten angegebenen Teilpublikationen - noch nicht veröffentlicht worden ist sowie, daß ich eine solche Veröffentlichung vor Abschluß des Promotionsverfahrens nicht vornehmen werde. Die Bestimmungen dieser Promotionsordnung sind mir bekannt. Die von mir vorgelegte Dissertation ist von Prof. Dr. M. L. Ristig betreut worden.

Khaled Abu Qasem

Teilveröffentlichungen:

M. L. Ristig, K. Abu Qasem, D. J. J. Farnell und K. E. Kürten, *Quantum Phase Transitions*, Proceedings International Workshop, Varna, 2001.

Danksagung

Bei Herrn Professor Dr. Manfred L. Ristig möchte ich mich besonders herzlich bedanken für die Vergabe des Themas dieser Arbeit und seine stets freundliche Betreuung und Bereitschaft, mir bei Fragen und anderem zu helfen. Bei Frau Ristig bedanke ich mich auch für ihre Freundlichkeit und ihre Ermutigungen.
Dem Deutschen Akademischen Austauschdienst (DAAD) danke ich für die finanzielle Unterstützung und die geistige Förderung.
Zudem möchte ich den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Professor Dr. M. L. Ristig, Dr. Thomas Lindenau, Dr. Klaus Gernoth und Dr. Damian Farnell für gute Zusammenarbeit danken.
Mein herzlicher Dank gilt meiner Familie und allen, die mich während meiner Arbeit an der Dissertation unterstützt haben.
Ebenfalls danke ich Herrn A. Sindermann, Frau Hochscheidt, Frau Dr. Krebs, Frau Hermann und Frau Richmond die mir stets freundlich geholfen haben.

Lebenslauf

Familienname:	Abu Qasem
Vorname:	Khaled
Geburtsdatum:	28.05.1965
Geburtsort :	Broqin-Salfeet (Westbank)
Geschlecht:	Männlich
Familienstand:	ledig
Staatsangehörigkeit:	Jordanien/Palästina
Schulausbildung:	
1971 - 1980	Grund- und Vorbereitungschule,Broqin
1981-183	höhere Schule, Broqin und Salfeet
6/1983	Abitur, Note: sehr gut
Studium der Physik:	
1983-1987	An-Najah National-Universität, Nablus, Westbank Bakkalaureus der Wissenschaften (Bsc.) in Physik, Note: sehr gut
1989	Lehrer in der Zeta Schule/Westbank
1989/90-1994	Jordanische Universität, Amman, Jordanien Mastergrad der Wissenschaften in theoretischer Physik, Note: Exzellent
Titel der Magisterarbeit:	"The Effective Interaction and Some Sound Phenomena in Dilute Neutral Fermi Systems", Betreuer Prof. Dr. Humam Ghassib
1995/1996	Lehrer für Physik an der Salfeet höheren Schule Westbank
10/1996	DAAD-Stipendiat zum Promotionsstudium in Deutschland
10/1996-3/1997	Teilnahme an Deutschkursen am Goethe-Institut, Bremen
4/1997	Beginn des Promotionsstudiums an der Universität zu Köln
SS 1997-10/1998	Erfüllung der Bedingungen zur Anerkennung des Mastergrades, Hauptdiplom-Prüfung, Note: sehr gut.
WS 1998/99-SS 2002	Beginn der Dissertation am Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, Betreuer Prof. Dr. Manfred L. Ristig
Thema der Dissertation	Mikrostruktur des quantisierten O(2) Gittermodells.
SS 2002	Abgabe der Dissertationsschrift und Promotionsprüfung.