
Diplomarbeit

**Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen-
Zugang zu schwach inhomogenen
Vielteilchensystemen in starken
elektrischen Feldern**

vorgelegt von

Andrea Fromm

06. Dezember 2006



Institut für
Theoretische Physik und Astrophysik
der Universität Kiel

Referent:

Prof. Dr. Michael Bonitz

Korreferent/in:

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	7
2. Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen	11
2.1. Zweite Quantisierung	11
2.1.1. Feldoperatoren	14
2.2. Keldysh-Kontur	15
2.3. Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen	17
2.4. Herleitung der Kadanoff-Baym-Gleichungen	21
2.4.1. Die Martin-Schwinger-Hierarchie	21
2.4.2. Einführung der Selbstenergie	22
3. Eichinvariante Kadanoff-Baym-Gleichungen	29
3.1. Eichinvarianz elektromagnetischer Felder	29
3.2. Eichinvariante Darstellung der Kadanoff-Baym-Gleichungen	32
3.2.1. Einteilchenbeiträge	33
3.2.2. Stoßintegrale	36
3.3. Kinetische Gleichungen für $g^{R/A}$	40
4. Spektralfunktion	43
4.1. Ideales Elektronengas	43
4.2. Homogenes elektrisches Feld	44
4.2.1. Konstantes elektrisches Feld	45
4.3. Schwach inhomogenes Confinementpotential	47
4.4. Allgemeine Spektralfunktion	48
5. Quantenpotential	49

5.1. Confinementpotential	50
5.2. Confinementpotential und elektrisches Feld	53
5.3. Vergleich mit dem Quantenpotential von Ringhofer und Gardener	56
5.4. Auswertung des Quantenpotentials für ein Oszillatorpotential	57
6. Zustandsdichte	61
6.1. Konstantes elektrisches Feld ohne Confinementpotential	62
6.2. Klassische Zustandsdichten	62
6.2.1. Klassisches Potential	63
6.2.2. Klassisches Potential und konstantes elektrisches Feld	63
6.3. Zustandsdichte mit Quantenkorrektur	65
6.3.1. Quantenpotential ($\mathbf{E} = 0$)	65
7. Kinetische Gleichung für die Wignerfunktion	67
7.1. Herleitung der kinetische Gleichung	67
7.1.1. Einteilchenbeiträge	67
7.1.2. Selbstenergiebeiträge	69
7.1.3. Kinetische Gleichung für die Wignerfunktion	70
7.2. Generalisierter Kadanoff-Baym-Ansatz	72
7.3. Selbstenergien in der Bornschen Näherung	74
8. Mehrbandsysteme	79
8.1. Einführung der Greenfunktionen für Mehrbandsysteme	80
8.2. Die Martin-Schwinger-Hierarchie für Mehrbandsysteme	82
8.2.1. Entkopplung der Hierarchie	87
8.2.2. Darstellung der KBE in Relativ- und Schwerpunktvariablen	88
9. Zusammenfassung und Ausblick	93
A. Relationen der Airy-Funktion	97
B. Faltung in einer eichinvarianten Darstellung	99
C. Betrachtung der Stoßintegrale auf der Zeitdiagonalen	101

D. Eichinvariante Darstellung der Selbstenergie in der Bornschen Näherung	103
--	------------

1. Einleitung

Korrelierte Quantensysteme in externen Confinementpotentialen sind von zunehmender Bedeutung in vielen Gebieten der Physik. Betrachtet man zusätzlich noch ein externes elektromagnetisches Feld, kommt es zu einem komplizierten Wechselspiel von Effekten. Um diese beschreiben zu können, wird eine selbstkonsistente, vielteilchentheoretische Beschreibung benötigt. Hierzu ist die Methode der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen besonders geeignet. In der vorliegenden Arbeit erfolgt daher eine Untersuchung von Vielteilchensystemen im Nichtgleichgewicht mit dieser Methode. Es handelt sich dabei um eine statistische Beschreibung, bei der zur Untersuchung des makroskopischen Verhaltens des Systems die Gesamtheit aller möglichen Zustände, gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens, benutzt wird. Die Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen stellen eine Verallgemeinerung der herkömmlichen Dichtematrizen auf zwei Zeiten dar. In der Abhängigkeit der Funktionen von zwei Zeiten, liegt ein großer Vorteil der Theorie. Zusätzlich zu der, in der Dichtematrix – welche aus der Greenfunktion zu gleichen Zeiten bestimmt werden kann – enthaltenen statistischen Information des Systems, ist durch die zusätzliche Zeit in den Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen auch noch die dynamische (spektrale) Information des Systems enthalten.

Die Methode der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen geht von dem feldtheoretischen Ansatz der Darstellung der Operatoren in der zweiten Quantisierung aus. Hierdurch ist eine Erfüllung der Spinstatistik sichergestellt. Die zeitliche Entwicklung der Feldoperatoren führt auf die Bewegungsgleichungen der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen, die Kadanoff-Baym-Gleichungen (KBE), welche 1964 von Kadanoff und Baym, durch eine analytische Fortsetzung der imaginären Greenfunktionen auf die reelle Zeitachse, abgeleitet wurden [1]. In diesen beiden Gleichungen sind die einzeitigen kinetischen Gleichungen als Spezialfälle auf der Zeitdiagonalen enthalten und sie haben gegenüber den konventionellen kinetischen Gleichungen vom Boltzmann-Typ mehrere Vorteile:

1. Es ist nicht nur die kinetische Energie, sondern die gesamte Energie des Systems erhalten.

Dieses ist besonders bei stark korrelierten Systemen, wie z.B. dichten Plasmen, wichtig, da dort der Anteil der potentiellen Energie nicht vernachlässigt werden kann.

2. Die Vielteilchenkorrelationen werden in der KBE in der Selbstenergie zusammengefasst, für welche mit den Feynman-Diagrammen sehr effiziente Näherungen existieren.
3. In der Herleitung der KBE ist keine Beschränkung bezüglich der Zeit zu machen (mit der Boltzmann-Gleichung z.B. können nur Zeitskalen betrachtet werden, auf denen die Zeiten größer sind als die Korrelationszeit), so dass auch Prozesse, die auf ultrakurzen Zeitskalen im Bereich von Femtosekunden ablaufen, mit den Greenfunktionen untersucht werden können. Dieses ist ein sehr interessanter Aspekt, da gerade in den letzten Jahren experimentelle Methoden zur Untersuchung des Verhaltens von Vielteilchensystemen auf diesen Zeitskalen entwickelt wurden. Man betrachte hier z.B. ein Plasma oder einen Halbleiter. Regt man diese mit einem Femtosekundenlaser an, so finden ultraschnelle Relaxationsprozesse statt. Auch intrinsische Prozesse von Vielteilchensystemen laufen auf Zeitskalen im fs-Bereich ab und können mit wachsender Präzision experimentell untersucht werden.

Diese Arbeit ist wie folgt aufgebaut:

In Kapitel 2 wird eine ausführlichere Einführung in die Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen gegeben.

In Kapitel 3 erfolgt die Herleitung eines eichinvarianten Formalismus, da in der Arbeit speziell Vielteilchensysteme in einem homogenen elektrischen Feld und einem externen Confinementpotential betrachtet werden. Bei elektrischen Felder ist immer besondere Vorsicht bezüglich der Eichfreiheit geboten, da eine Abhängigkeit der erhaltenen Resultate von der Eichung zu verhindern ist. Es daher ein komplett eichinvarianter Formalismus verwendet, in dem das elektrische Feld und ein schwach inhomogenes Confinementpotential selbstkonsistent integriert sind. In Kapitel 3 wird zuerst eine eichinvariante Darstellung der Greenfunktionen angegeben [2] und die Kadanoff-Baym-Gleichung in einer eichinvarianten Darstellung hergeleitet, bevor in den folgenden Kapiteln mit der Auswertung der Gleichung für spezielle Systeme begonnen wird. Vielteilchensysteme in starken elektrischen Feldern wurden schon häufig mit der Methode der Greenfunktionen untersucht [3], [4] - [8]; hier erfolgt nach [9] eine zusätzliche Berücksichtigung eines externen Confinementpotentials, so dass z.B. auch geladene Teilchen in Fallen, Valenzelektronen in Metallen oder Teilchen in niederdimensionalen Heterostrukturen in einem Con-

finementpotential, wie Quantentröge, Quantendrähte und Quantenpunkte, untersucht werden können.

In Kapitel 4 wird mit einer Untersuchung der spektralen Eigenschaften begonnen. Hierzu wird die Spektralfunktion von Systemen in einem homogenen elektrischen Feld und einem schwach inhomogenen Confinementpotential bestimmt. Diese kann in der Nichtgleichgewichts-Theorie direkt aus der retardierten und der avancierten Greenfunktion bestimmt werden. Ein großer Vorteil der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen besteht darin, dass für die Untersuchung von Systemen in elektrischen Feldern keine Störungsentwicklung notwendig ist, so dass beliebig hohe Feldintensitäten betrachtet werden können.

Die in Kapitel 4 bestimmten Spektralfunktionen sind nur für die Beschreibung von klassischen Systemen geeignet. Da aber eine quantenmechanische Beschreibung von Vielteilchensystemen angestrebt wird, wird auf die Idee des Quantenpotentials zurückgegriffen. Die Ableitung einer quantenmechanisch verallgemeinerten Bewegungsgleichung für die Phasenraum-Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\mathbf{R}, \mathbf{p})$ geht zurück auf Wigner, der 1932 eine quantenmechanische Korrektur in Form von Ableitungen des ursprünglichen Potentials für die Fluktuationen der Verteilungsfunktion bestimmte [10]. Hieraus entstand die Idee des Quantenpotentials, bei der zur Berücksichtigung von Quanteneffekten in klassischen Gleichungen, das klassische, lokale Potential durch ein effektives, nichtlokales Potential ersetzt wird, in dem die Quanteneffekte integriert sind. Dieses effektive Potential wird als Quantenpotential bezeichnet. Feynman und Kleinert entwickelten mit Hilfe dieses Ansatzes aus der klassischen Zustandssumme eine effektive Zustandssumme, welche eine sehr gute Näherung der schon vorhandenen quantenmechanischen Zustandssumme darstellt, aber eine einfachere rechnerische Form besitzt [11]. Sowohl Bohm, als auch Ferry nutzten ein Quantenpotential, um in der klassischen hydrodynamischen Gleichung auch Quanteneffekte einbeziehen zu können [12], [13]. Diese Idee wurde also schon häufig erfolgreich auf Gleichgewichtssysteme angewendet. Auch bei der Berücksichtigung von Quanteneffekten in Paarwechselwirkungspotentialen wurde das Quantenpotential eingesetzt [14]-[16]. Hierbei konnte gezeigt werden, dass die Singularität des Coulombpotentials unter Berücksichtigung von Quanteneffekten verschwindet. 2004 wurde erstmals von Bonitz und Dufty [9] die Theorie des Quantenpotentials auch auf Nichtgleichgewichtssysteme angewendet. Um eine Spektralfunktion zu erhalten, in der auch Quanteneffekte berücksichtigt werden, wird in Kapitel 5 daher ein Quantenpotential abgeleitet, mit dem die klassische Spektralfunktion in eine quantenmechanische Spektralfunktion umgewandelt werden kann.

In Kapitel 6 erfolgt die Betrachtung der Zustandsdichte der Vielteilchensysteme. Diese kann direkt aus der Spektralfunktion bestimmt werden und ist besonders gut zum Vergleich der theoretischen Resultate mit dem Experiment geeignet. Die Zustandsdichte, die aus der Benutzung des ursprünglichen Potentials resultiert, wird mit der Zustandsdichte, welche aus der Benutzung des Quantenpotentials resultiert, verglichen.

Die Untersuchungen in den Kapiteln 4-6 bezogen sich auf die spektralen Eigenschaften der Systeme. Um auch die Untersuchung der makroskopischen Größen des Systems zu ermöglichen, wird daher in Kapitel 7 eine eichinvariante Bestimmungsgleichung für die Wignerfunktion hergeleitet. Diese ist als Spezialfall in der Differenz der KBE und ihrer Adjungierten auf der Zeitdiagonalen enthalten. Auch hier werden wieder ein Vielteilchensystem in einem homogenen elektrischen Feld und einem zusätzlichen Confinementpotential betrachtet. Außerdem werden Zweiteilchenstöße im Rahmen der Bornschen Näherung berücksichtigt.

Die Betrachtungen der Kapitel 3-7 beziehen sich auf Einbandsysteme. Da die Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen aber auch zur Beschreibung von Mehrbandsystemen, wie z.B. einem Festkörper, sehr gut geeignet sind, wird die bis dahin benutzte Theorie in Kapitel 8 abschließend noch auf die Beschreibung von Mehrbandsystemen erweitert.

2. Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen

Es wird zuerst eine kurze Einführung in die statistische Beschreibung von Vielteilchensystemen mit der Methode der zweiten Quantisierung und darauf aufbauend eine kurze Einführung in die Arbeit mit Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen gegeben. Zusätzlich erfolgt eine Untersuchung der Zeitentwicklung eines Systems im Nichtgleichgewicht, d.h. unter dem Einfluss einer externen Störung, welche auf die Einführung der Keldysh-Kontur führt. Für eine tiefergehende Betrachtung wird die Literatur [1], [17], [18] und [19] empfohlen, auf der die hier gegebene Einführung basiert.

2.1. Zweite Quantisierung

Eine zur Beschreibung von Vielteilchensystemen ununterscheidbarer Teilchen besonders gut geeignete Methode, ist die der zweite Quantisierung. Hierbei werden die Teilchen durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren dargestellt, die im Fockraum (Teilchenzahlraum) wirken. In dieser Darstellung erzeugt der Erzeugungsoperator $\hat{a}^\dagger(b)$ ein Teilchen in dem Zustand $|b\rangle$ und der Vernichtungsoperator $\hat{a}(b)$ vernichtet ein Teilchen in dem Zustand $|b\rangle$. Mit b wird dabei eine komplette Einteilchenobservable bezeichnet, wie z.B. der Ort und der Spin oder der Impuls und der Spin. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erfüllen die Kommutator- bzw. Antikommutatorregeln

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}(b), \hat{a}(b') \right]_{\mp} &= \left[\hat{a}^\dagger(b), \hat{a}^\dagger(b') \right]_{\mp} = 0, \\ \left[\hat{a}(b), \hat{a}^\dagger(b') \right]_{\mp} &= \delta(b - b'). \end{aligned} \tag{2.1}$$

Hierbei gilt das obere Vorzeichen für Bosonen und das untere Vorzeichen für Fermionen. Diese Notation wird in der gesamten Arbeit beibehalten, wenn beide Teilchensorten betrachtet werden.

Die (Anti-)Kommutatorregeln stellen sicher, dass die durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren dargestellten Vielteilchenzustände der korrekten Spinstatistik unterliegen, d.h. dass die Wellenfunktionen der Fermionen antisymmetrisch und die Wellenfunktionen der Bosonen symmetrisch sind. Dass die fundamentalen Symmetrien fermionischer und bosonischer Systeme bei dieser Methode der Beschreibung von Vielteilchensystemen direkt enthalten sind, ist einer der größten Vorteile der zweiten Quantisierung. Ein anderer Vorteil ist die Verknüpfung von Vielteilchen-Hilberträumen, die zu verschiedenen Teilchenzahlen gehören. Durch diese Eigenschaft wird auch die Beschreibung von Prozessen ermöglicht, bei denen die Teilchenzahl nicht konstant bleibt, wie z.B. bei Ionisations- oder Rekombinationsprozessen.

Um mit der Methode der zweiten Quantisierung arbeiten zu können, ist es wichtig, die hermiteschen Operatoren, welche in der Quantenmechanik die physikalischen Observablen beschreiben, durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{a}^\dagger(b)$ und $\hat{a}(b)$ auszudrücken. Dabei ist zu beachten, dass die meisten Operatoren, die auf ein N-Teilchensystem angewendet werden, nur auf s Teilchen des Systems wirken, d.h.

$$\hat{A}_N = \sum_{i=1}^s \sum_{1\dots i}^N \hat{A}_{1\dots i}. \quad (2.2)$$

Bei dem Großteil der Operatoren handelt es sich um Einteilchen- oder Zweiteilchengrößen, wie z.B. der Operator der kinetischen Energie $\hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m}$, der eine Einteilchengröße darstellt, oder der Wechselwirkungsoperator $\hat{W} = \sum_{i<j}^N \hat{W}_{ij}$, der eine Zweiteilchengröße darstellt. Ein s-Teilchen-Operator läßt sich wie folgt durch die Operatoren $\hat{a}^\dagger(b)$ und $\hat{a}(b)$ ausdrücken

$$\hat{A}_{1\dots s} = \frac{1}{s!} \int db_1 \dots db_s db'_1 \dots db'_s \langle b_1 \dots b_s | \hat{A}_{1\dots s} | b'_s \dots b'_1 \rangle^\pm \hat{a}^\dagger(b_1) \dots \hat{a}^\dagger(b_s) \hat{a}(b'_s) \dots \hat{a}(b'_1). \quad (2.3)$$

Da in diesem Ausdruck explizit mit den Mikrozuständen $|b_1 \dots b_N\rangle$ gearbeitet wird, handelt es sich um eine mikroskopische Beschreibung. Es soll allerdings eine Betrachtung von Vielteilchensystemen erfolgen, welche Teilchenzahlen in dem Bereich $N \sim 10^{23}$ besitzen, wodurch eine mikroskopische Beschreibung hier nicht geeignet ist. Es wird daher eine statistische (makroskopische) Beschreibung benutzt, bei der das makroskopische Verhalten des Systems durch die Gesamtheit aller möglichen Mikrozustände $|b_l\rangle$, gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit P_l ihres Auftretens, beschrieben wird. Die auf diese Weise definierten Zustände werden als gemischte Zustände bezeichnet. Um eine Beschreibung von Vielteilchensystemen mit Hilfe von gemischten

Zuständen zu ermöglichen, wird der sogenannte Dichteoperator eingeführt

$$\rho = \sum_l P_l |b_l\rangle\langle b_l| \quad , \quad (2.4)$$

für den $\text{Tr}\rho = 1$ gilt. Der Dichteoperator enthält die gesamte statistische Information des Vielteilchensystems. Mit ihm läßt sich der Mittelwert eines beliebigen Operators durch $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{A})$ bestimmen. Der Mittelwert für einen s-Teilchen-Operator lautet dann

$$\langle \hat{A}_{1\dots s} \rangle = \frac{1}{s!} \int db_1 \dots db_s db'_1 \dots db'_s \langle b_1 \dots b_s | \hat{A}_{1\dots s} | b'_s \dots b'_1 \rangle^\pm \langle \hat{a}^\dagger(b_1) \dots \hat{a}^\dagger(b_s) \hat{a}(b'_s) \dots \hat{a}(b'_1) \rangle. \quad (2.5)$$

Mit $\langle \dots \rangle$ ist im Folgenden immer eine Mittelung über den Dichteoperator gemeint.

Wie bereits erwähnt, handelt es sich bei den meisten Operatoren, die die physikalischen Observablen des N-Teilchen-Systems beschreiben, lediglich um s-Teilchen-Größen. Es ist daher sinnvoll, zur Berechnung des Erwartungswertes einer s-Teilchen-Größe, nicht den kompletten N-Teilchen-Dichteoperator zu benutzen. Hierzu wird der sogenannte reduzierte Dichteoperator eingeführt, welcher nur noch von s Teilchen abhängt. Er ist definiert durch

$$F_{1\dots s} = V^s \text{Tr}_{s+1\dots N} \rho_N \quad , \quad (2.6)$$

wobei V das Volumen des Systems bezeichnet. Hiermit lautet der Mittelwert einer s-Teilchen-Größe

$$\langle \hat{A}_{1\dots s} \rangle = \frac{1}{s!} \int db_1 \dots db_s db'_1 \dots db'_s \langle b_1 \dots b_s | \hat{A}_{1\dots s} | b'_s \dots b'_1 \rangle \langle b'_1 \dots b'_s | F_{1\dots s} | b_s \dots b_1 \rangle. \quad (2.7)$$

$\langle b'_1 \dots b'_s | F_{1\dots s} | b_s \dots b_1 \rangle$ wird reduzierte s-Teilchen-Dichtematrix genannt. Aus einem Vergleich der Ausdrücke (2.5) und (2.7) erhält man sofort eine Beziehung zwischen der reduzierten s-Teilchen-Dichtematrix und den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$n^s \langle b_1 \dots b_s | F_{1\dots s} | b'_s \dots b'_1 \rangle = \langle \hat{a}^\dagger(b_1) \dots \hat{a}^\dagger(b_s) \hat{a}(b'_s) \dots \hat{a}(b'_1) \rangle. \quad (2.8)$$

Hier bezeichnet n die mittlere Teilchendichte, für die $n = \frac{N}{V}$ gilt. Genau wie bei der kompletten Dichtematrix hängen die Diagonalelemente mit der Besetzung der Zustände zusammen und die Nicht-Diagonalelemente mit der Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den betrachteten Zuständen.

2.1.1. Feldoperatoren

Es soll nun nicht mehr länger mit der abstrakten Basis $|b_l\rangle$ gearbeitet werden, sondern auf die Ortsdarstellung $b_l \rightarrow \mathbf{r}_l, s_{z_l}$ übergegangen werden. Da in der vorliegenden Arbeit keine explizite Betrachtung des Spins durchgeführt wird, wird dieser im Folgenden unterdrückt. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in der Ortsdarstellung werden Feldoperatoren $\hat{\psi}^\dagger$ und $\hat{\psi}$ genannt und erfüllen entsprechend (2.1) die Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')]_{\mp} &= [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')]_{\mp} = 0, \\ [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')]_{\mp} &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Es ist möglich die s-Teilchen-Dichtematrix durch die Feldoperatoren darzustellen. Sie lautet dann

$$n^s \langle \mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_s | F_{1\dots s} | \mathbf{r}'_s \dots \mathbf{r}'_1 \rangle = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1) \dots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_s) \hat{\psi}(\mathbf{r}'_s) \dots \hat{\psi}(\mathbf{r}'_1) \rangle. \quad (2.10)$$

Einen interessanten Aspekt stellt die Dynamik der Feldoperatoren dar. Der Hamiltonoperator $\hat{H}_N = \sum_{i=1}^N (\frac{p_i^2}{2m} + V_i) + \sum_{i<j}^N W_{ij}$, welcher nichtrelativistische Systeme, in denen höchstens Zweiteilchenwechselwirkungen auftreten, beschreibt, lautet in der Schreibweise der zweiten Quantisierung (ausgedrückt durch Feldoperatoren)

$$\begin{aligned} \hat{H}_N &= \int d\mathbf{r}_1 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1) \left(-\frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_1} + V(\mathbf{r}_1) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_2) W(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Hier bezeichnet $V(\mathbf{r}_1)$ ein externes Potential und $W(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ die Zweiteilchen-Wechselwirkung. Mit diesem Hamiltonoperator kann durch die Heisenberggleichung die zeitliche Entwicklung der Feldoperatoren bestimmt werden

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{H}] . \quad (2.12)$$

Unter Anwendung der Kommutatorrelationen (2.9) erhält man aus der Heisenberggleichung die folgende Bewegungsgleichung für den Feldoperator $\hat{\psi}(1)$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - V(1) \right) \hat{\psi}(1) = \int d2 W(1-2) \hat{\psi}^\dagger(2) \hat{\psi}(2) \hat{\psi}(1), \quad (2.13)$$

mit

$$1 = \mathbf{r}_1, t_1, \quad \int d1 = \int d\mathbf{r}_1 dt_1, \quad W(1-\bar{1}) = W(\mathbf{r}_1 - \bar{\mathbf{r}}_1) \delta(t_1 - \bar{t}_1). \quad (2.14)$$

Diese Notation wird in der gesamten Arbeit benutzt.

Da sich die hermiteschen Operatoren nach der Beziehung (2.5) durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren – und somit durch Feldoperatoren – ausdrücken lassen, kann man aus der Bewegungsgleichung der Feldoperatoren die Bewegungsgleichung aller physikalischen Observablen ableiten. Die Bewegungsgleichung für den adjungierten Feldoperator kann durch eine analoge Rechnung bezüglich $\hat{\psi}^\dagger(1')$ bestimmt werden.

2.2. Keldysh-Kontur

Bevor die Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen eingeführt werden, erfolgt noch eine kurze Untersuchung der Erwartungswerte von Operatoren, welche in einem Nichtgleichgewichtssystem wirken. Im Nichtgleichgewicht entwickelt sich das System unter dem Einfluß einer externen Störung, die zu dem Zeitpunkt t_0 eingeschaltet wird. Der Hamiltonoperator eines solchen Systems lautet

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) . \quad (2.15)$$

Hierbei stellt \hat{H}_0 den zeitunabhängigen Anteil des Hamiltonoperators dar, der alle Einteilchenbeiträge und interne Wechselwirkungen des Systems enthält. $\hat{H}_1(t)$ beschreibt die externe Störung des Systems durch das räumlich nichtlokale Potential $V(1, 1') = V(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}'_1 t'_1) \delta(t_1 - t'_1)$, welches zum Zeitpunkt t_0 eingeschaltet wird, und ist daher zeitabhängig. Vor dem Anschalten der Störung, also zu Zeiten $t < t_0$, befinde sich das System im thermodynamischen Gleichgewicht. Das Interesse gilt nun der Entwicklung der physikalischen Observablen des Systems unter dem Einfluss dieser Störung.

Bei einer derartigen Problemstellung ist es sinnvoll, vom Heisenbergbild auf das Wechselwirkungsbild überzugehen. Im Wechselwirkungsbild werden sowohl die Zustände als auch die Operatoren zeitabhängig dargestellt. Hierbei entwickelt sich die Wellenfunktion unter dem Einfluss des zeitabhängigen Störungsanteils des Hamiltonoperators und die Operatoren entwickeln sich unter dem Einfluss des zeitunabhängigen Anteils des Hamiltonoperators. Ein Operator im Heisenbergbild ist mit dem Operator im Wechselwirkungsbild über die folgende Beziehung verknüpft

$$\hat{A}_H(1) = S(t_1, t_0)^{-1} \hat{A}_I(1) S(t_1, t_0) . \quad (2.16)$$

Hier bezeichnet

$$S(t, t_0) = T \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t d2 d\bar{2} V(2, \bar{2}) \hat{\psi}^\dagger(2) \hat{\psi}(\bar{2}) \right\} \quad (2.17)$$

den Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild, welcher die Eigenschaften $S(t, t') = S^{-1}(t', t) = S^\dagger(t', t)$ und $S(t, \bar{t}) S(\bar{t}, t') = S(t, t')$ besitzt. T ist der Zeitordnungsoperator, der die Operatoren entsprechend ihrer Zeiten chronologisch anordnet. Hierbei steht der Operator mit der frühesten Zeit ganz rechts und der Operator mit der spätesten Zeit ganz links. Werden Fermionen betrachtet, so entsteht bei Vertauschung der Operatoren ein durch die Antisymmetrie fermionischer Zustände hervorgerufener Vorzeichenwechsel.

Der Erwartungswert eines Operators im Wechselwirkungsbild lautet dann

$$\langle \hat{A}_H(1) \rangle = \langle S(t_1, t_0)^{-1} \hat{A}_I(1) S(t_1, t_0) \rangle. \quad (2.18)$$

Die Greenfunktionen sind als Mittelungen eines Produktes von zwei Feldoperatoren zu unterschiedlichen Zeiten mit dem Dichteoperator definiert. Der Erwartungswert eines solchen Produktes im Wechselwirkungsbild lautet

$$\langle T [\hat{\psi}_H(1) \hat{\psi}_H^\dagger(1')] \rangle = \langle T [S(t_0, t_1) \hat{\psi}_I(1) S(t_1, t'_1) \hat{\psi}_I^\dagger(1') S(t'_1, t_0)] \rangle. \quad (2.19)$$

Man erkennt, dass in diesem Ausdruck (wie auch schon im Ausdruck (2.18)) ein Problem bezüglich der Zeitordnung auftritt. Unter Benutzung der Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators kann der obige Ausdruck wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{aligned} & \langle T [S(t_0, t_1) \hat{\psi}_I(1) S(t_1, t'_1) \hat{\psi}_I^\dagger(1') S(t'_1, t_0)] \rangle \\ &= \langle S(t_0, t_1) S(t_1, \infty) S(\infty, t_1) \hat{\psi}_I(1) S(t_1, t'_1) \hat{\psi}_I^\dagger(1') S(t'_1, t_0) \rangle \\ &= \langle S(t_0, \infty) T [S(\infty, t_0) \hat{\psi}_I(1) \hat{\psi}_I^\dagger(1')] \rangle \end{aligned} \quad (2.20)$$

Da hier Nichtgleichgewichtssituationen betrachtet werden, ist in diesem Fall die Anwendung des adiabatischen Theorems, welches in der Gleichgewichtstheorie benutzt wird, nicht möglich. Um dennoch eine Zeitordnung zu erhalten, wird eine von Keldysh 1964 entwickelte Methode benutzt (s. [20] und Referenzen darin). Dieser führte eine spezielle Zeitkontur ein, die entlang der reellen Zeitachse von t_0 zu einem bestimmten Punkt $t = \max(t_1, t'_1)$ und von dort wieder zurück nach t_0 läuft. Diese Zeitkontur wird als Keldysh-Kontur bezeichnet. Der obere Ast der Keldysh-Kontur unterliegt einer chronologischen Zeitordnung, während der untere Ast – entsprechend der

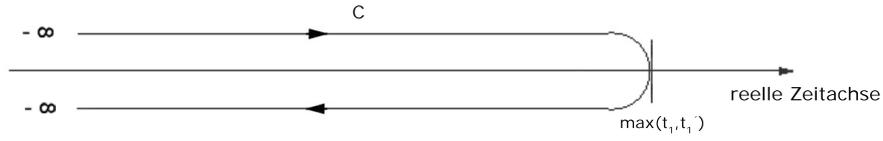


Abbildung 2.1.: Keldysh-Kontur

umgekehrten Durchlaufrichtung – einer antichronologischen Zeitordnung unterliegt. Mit Hilfe dieser Kontur kann der Ausdruck (2.20) nun wie folgt geschrieben werden

$$\left\langle S(t_0, \infty) T \left[S(\infty, t_1) \hat{\psi}_I(1) \hat{\psi}_I^\dagger(1') \right] \right\rangle \rightarrow \left\langle T_C \left[S(t_0, t_0) \hat{\psi}_I(1) \hat{\psi}_I^\dagger(1') \right] \right\rangle, \quad (2.21)$$

mit

$$S(t_0, t_0) = T_C \exp \left\{ -i \int_C d2 d\bar{2} U(2, \bar{2}) \hat{\psi}^\dagger(2) \hat{\psi}(\bar{2}) \right\}. \quad (2.22)$$

Hierbei ist T_C der Zeitordnungsoperator, welcher die Zeiten entlang der Keldysh-Kontur anordnet, und \int_C besagt, dass eine Integration entlang der Keldysh-Kontur zu betrachten ist.

2.3. Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen

Im Abschnitt 2.1 wurde gezeigt, dass eine komplette statistische Beschreibung von Vielteilchensystemen mit Hilfe von Dichtematrizen erfolgen kann. Im dem Abschnitt (2.1.1) wurde dann die Beziehung (2.10) hergeleitet, die eine Darstellung der reduzierten Dichtematrizen durch Feldoperatoren ermöglicht. In diesem Abschnitt werden nun die reellzeitigen Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen eingeführt, welche eine Verallgemeinerung der Dichtematrizen darstellen, da die beiden Feldoperatoren von nun an nicht mehr nur von gleichen, sondern von verschiedenen Zeiten abhängen können.

Die Definition der reellzeitigen, zeitgeordneten Nichtgleichgewichts-Greenfunktion für ein Teilchen erfolgt über den, im vorigen Abschnitt schon betrachteten, Erwartungswert zweier Feldoperatoren

$$G(1, 1') = \frac{1}{i\hbar} \left\langle T_C \left[S(t_0, t_0) \hat{\psi}_I(1) \hat{\psi}_I^\dagger(1') \right] \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \left\langle T_C \left[\hat{\psi}_H(1) \hat{\psi}_H^\dagger(1') \right] \right\rangle. \quad (2.23)$$

Die physikalische Bedeutung dieser Funktion ist direkt zu erkennen. Es wird die Propagation eines Teilchen durch ein System beschrieben, welches diesem zur Zeit t'_1 am Ort \mathbf{r}'_1 hinzugefügt wird und zur Zeit t_1 am Ort \mathbf{r}_1 wieder entnommen wird. Betrachtet man die Definition der

zeitgeordneten Greenfunktion, so erkennt man, dass durch unterschiedliche Anordnungen der beiden Zeiten t_1 und t'_1 auf der Keldysh-Kontur vier verschiedene Einteilchen-Greenfunktionen dargestellt werden können (im Folgenden sind Operatoren ohne Index als Operatoren im Heisenbergbild zu verstehen):

$$G(1_+, 1'_+) = g^c(1, 1'), \quad G(1_-, 1'_+) = g^>(1, 1'), \quad (2.24)$$

$$G(1_-, 1'_-) = g^a(1, 1'), \quad G(1_+, 1'_-) = g^<(1, 1'). \quad (2.25)$$

Der Index “+” gibt dabei an, dass die betrachtete Zeit auf dem oberen (chronologischen) Ast der Keldysh-Kontur liegt, der Index “-” steht für den unteren (antichronologischen) Ast der Keldysh-Kontur.

Diese vier Einteilchen-Greenfunktionen sollen nun genauer analysiert werden. Angefangen wird mit $g^c(1, 1')$, welche als kausale Greenfunktion bezeichnet wird. Ihre Definition im Heisenbergbild lautet

$$g^c(1, 1') = \frac{1}{i\hbar} \left\langle T \left[\hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(1') \right] \right\rangle. \quad (2.26)$$

Hier ist T der chronologische Zeitordnungsoperator. Analog ordnet die antikausale Greenfunktion $g^a(1, 1')$ die Operatoren entsprechend ihrer Zeiten auf dem unteren Ast an, was insgesamt gesehen einer antichronologischen Ordnung entspricht.

Zwei sehr wichtige Größen stellen die Einteilchen-Korrelationsfunktionen

$$\begin{aligned} g^<(1, 1') &= \pm \frac{1}{i\hbar} \left\langle \hat{\psi}^\dagger(1') \hat{\psi}(1) \right\rangle, \\ g^>(1, 1') &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(1') \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.27)$$

dar. Bedingt durch die unterschiedliche Anordnung der Zeiten auf den beiden Ästen der Keldysh-Kontur sind diese beiden Greenfunktion unabhängig voneinander. Es gilt

$$G(1, 1') = \Theta(t_1 - t'_1) g^>(1, 1') + \Theta(t'_1 - t_1) g^<(1, 1') \quad (2.28)$$

Aus der Korrelationsfunktion $g^<$ erhält man für den Fall gleicher Zeiten $t_1 = t'_1$ die reduzierte Einteilchen-Dichtematrix

$$\pm i\hbar g^<(1, 1')|_{t_1=t'_1=t} = \left\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'_1, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1, t) \right\rangle = n \left\langle \mathbf{r}_1 | F_1(t) | \mathbf{r}'_1 \right\rangle. \quad (2.29)$$

In den Korrelationsfunktionen ist also die gesamte statistische Information des Systems enthalten. Betrachtet man auch noch den Fall gleicher Orte, d.h. $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'_1$, so sieht man, dass $\pm i\hbar g^<(1, 1')$ die räumliche Dichte der besetzten Zustände liefert

$$\pm i\hbar g^<(1, 1')|_{t_1=t'_1=t; \mathbf{r}_1=\mathbf{r}'_1} = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1, t) \rangle = n(\mathbf{r}_1, t). \quad (2.30)$$

Die Korrelationsfunktion $g^>$ stellt unter den gleichen Bedingungen die räumliche Dichte der unbesetzten Zustände dar. Man kann daher sagen, dass $g^<$ die räumliche Dichte der Teilchen und $g^>$ die räumliche Dichte der Löcher angibt.

Im Gegensatz zu Gleichgewichtssituationen hängen die Korrelationsfunktionen im Nichtgleichgewicht nicht mehr nur von der Differenz der Variablen $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1$ und $\tau = t_1 - t'_1$, sondern direkt von beiden Variablen ab. Daher ist es im Nichtgleichgewicht vorteilhaft, Relativ- und Schwerpunktvariable einzuführen

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}'_1}{2}, & \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1, \\ T &= \frac{t_1 + t'_1}{2}, & \tau &= t_1 - t'_1. \end{aligned} \quad (2.31)$$

In den meisten Fällen variieren die Schwerpunktvariablen \mathbf{R} und T langsam auf einer makroskopischen Skala und die Relativvariablen \mathbf{r} und τ schnell auf einer mikroskopischen Skala. Durch den Übergang auf Relativ- und Schwerpunktvariablen wird in diesen Fällen eine Skalenseparation möglich. In der neuen Darstellung kann nun eine Fouriertransformation bezüglich der Relativvariablen durchgeführt werden

$$g^{\gtrless}(\mathbf{p}, \mathbf{R}, \omega, t) = \int d\tau d\mathbf{r} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{r} - i\omega\tau} g^{\gtrless}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \tau, t). \quad (2.32)$$

Betrachtet man die Einteilchen-Korrelationsfunktion zu gleichen Zeiten (d.h. $\tau = 0$), so erhält man die Wignerfunktion

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = \pm i\hbar g^<(\mathbf{p}, \mathbf{R}, \tau, t)|_{\tau=0} = \pm i\hbar \int \frac{d\omega}{2\pi} g^<(\mathbf{p}, \mathbf{R}, \omega, t). \quad (2.33)$$

Die Wignerfunktion kann als eine räumlich aufgelöste Verteilungsfunktion für den Impuls betrachtet werden. Es ist allerdings Vorsicht geboten, da diese Größe im Nichtgleichgewicht nicht unbedingt positiv definit ist. Bei der Bestimmung von Erwartungswerten mit der so bestimmten Wignerfunktion treten allerdings keine Probleme auf, so dass mit der Einteilchen-Wignerfunktion die Erwartungswerte aller Einteilchengrößen bestimmen werden können. Als Beispiel sei

auch hier wieder der Ausdruck für die kinetische Energie angegeben

$$\langle T \rangle(t) = \int d\mathbf{R} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t) . \quad (2.34)$$

Für die Berechnung der Einteilchengrößen sind also nur die Werte auf der Zeitdiagonalen erforderlich. Da die Greenfunktionen aber von zwei Zeiten abhängen, können mit den Korrelationsfunktionen auch die Erwartungswerte von Zweiteilchengrößen bestimmt werden. Als Beispiel erhält man für die potentielle Energie (die Herleitung dieses Ausdrucks ist in [1] angegeben)

$$\langle V \rangle(t) = \pm \frac{1}{4} i\hbar \int d\mathbf{R} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\partial}{\partial t'_1} \right) - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right\} g^<(\mathbf{p}, t_1, t'_1) |_{t_1=t'_1} . \quad (2.35)$$

Hierbei wird allerdings nicht nur die Kenntnis der Korrelationsfunktion auf der Zeitdiagonalen, sondern – durch die Ableitungen – auch in der direkten Umgebung der Zeitdiagonalen vorausgesetzt. Dass aus den Einteilchen-Korrelationsfunktionen Erwartungswerte von Zweiteilchengrößen berechnet werden können, ist einer der Vorteile der Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen.

Durch die Abhängigkeit der Greenfunktionen von zwei Zeiten ergibt sich eine weitere wichtige Eigenschaft dieser Methode. Betrachtet man die Beziehung

$$g^<(\mathbf{p}, \mathbf{R}, E, t) = \int d\tau e^{\frac{i}{\hbar} E\tau} g^<(\mathbf{p}, \mathbf{R}, \tau, t) , \quad (2.36)$$

welche sich mit $E = \hbar\omega$ aus (2.32) ergibt, erkennt man, dass in den zweizeitigen Korrelationsfunktionen auch die Information über die spektralen Eigenschaften des Systems enthalten sind. Diese lassen sich durch die sogenannte Spektralfunktion darstellen

$$a(1, 1') \equiv i\hbar \{ g^>(1, 1') - g^<(1, 1') \} . \quad (2.37)$$

Durch die Bildung der Differenz entfällt die statistische Information, so dass in der Spektralfunktion nur die dynamische Information des Systems enthalten ist. Im Gegensatz zu einzeitigen Theorien, in denen die Bestimmung der Spektralfunktion ein zusätzliches Problem darstellt, kann sie aus den Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen direkt bestimmt werden.

Aus den vorangegangenen Betrachtungen wird klar, dass in den Korrelationsfunktionen die gesamte statistische und dynamische Information des Systems enthalten ist. Sie stellen somit die fundamentalen Größen der Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen dar. Es existieren neben den Einteilchenkorrelationsfunktionen und der kausalen und antikausalen Greenfunktion aber noch zwei weitere wichtige Greenfunktionen, die retardierte und die avancierte Greenfunktion, die wie folgt definiert sind

$$g^{\text{R/A}}(1, 1') = \pm \Theta(\pm(t_1 - t'_1)) [g^>(1, 1') - g^<(1, 1')] . \quad (2.38)$$

Man erkennt, dass die retardierte und die avancierte Greenfunktion nicht unabhängig von den Korrelationsfunktionen sind. Da zu ihrer Bestimmung (genau wie bei der Spektralfunktion) die Differenz der Korrelationsfunktionen betrachtet wird, ist in ihnen nur die dynamische Information des Systems enthalten. Die Spektralfunktion läßt sich wie folgt durch diese Greenfunktionen ausdrücken

$$a(1, 1') = i\hbar (g^R(1, 1') - g^A(1, 1')) . \quad (2.39)$$

Abschließend sei in diesem Abschnitt noch zu erwähnen, dass das Konzept der Einteilchen-Korrelationsfunktionen auf s-Teilchen-Korrelationsfunktionen

$$\begin{aligned} g^<(1 \dots s, 1' \dots s') &= \left(\pm \frac{1}{i\hbar} \right)^s \langle \hat{\psi}^\dagger(1') \dots \hat{\psi}^\dagger(s') \hat{\psi}(s) \dots \hat{\psi}(1) \rangle , \\ g^>(1 \dots s, 1' \dots s') &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^s \langle \hat{\psi}(1) \dots \hat{\psi}(s) \hat{\psi}^\dagger(s') \dots \hat{\psi}^\dagger(1') \rangle , \end{aligned} \quad (2.40)$$

erweitert werden kann. Mit den s-Teilchen-Korrelationsfunktionen lassen sich dann die Erwartungswerte von s-Teilchengrößen bestimmen.

2.4. Herleitung der Kadanoff-Baym-Gleichungen

In den vorangegangenen Abschnitten wurde gezeigt, dass die Greenfunktionen die komplette statistische und dynamische Information des Vielteilchensystems beinhalten. Es wurde bisher allerdings noch keine Möglichkeit zur Bestimmung dieser fundamentalen Größen angegeben. Dieser Abschnitt beschäftigt sich daher mit der Herleitung von Bewegungsgleichungen für die Greenfunktionen.

2.4.1. Die Martin-Schwinger-Hierarchie

Den Ausgangspunkt der Herleitung bilden die Bewegungsgleichungen der Feldoperatoren. Für den Vernichter ist das die Gleichung (2.13). Wie schon erwähnt, kann mit ihrer Hilfe die Dynamik jeder physikalischen Observablen, und somit die Dynamik des gesamten N-Teilchensystems, bestimmt werden.

Um eine Bewegungsgleichung für die zeitgeordnete Green-Funktion (2.23) zu erhalten, wird die Gleichung (2.13) von rechts mit $\hat{\psi}^\dagger(1')$ multipliziert, eine Mittelung über den Dichteoperator ρ durchgeführt und der Zeitordnungsoperator T_C auf die gesamte Gleichung angewendet. Außerdem wird das Potential $V(1)$ auf ein räumlich nichtlokales Potential $V(r_1 t_1, r'_1 t'_1) \delta(t_1 - t'_1)$,

wie es im Abschnitt 2.2 benutzt wird, verallgemeinert. Man erhält

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right) \langle T_C [\hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(1')] \rangle - \int_C d\bar{1} V(1, \bar{1}) \langle T_C [\hat{\psi}(\bar{1}) \hat{\psi}^\dagger(1')] \rangle \\ = \delta_C(1 - 1') \pm \int_C d2 W(1 - 2) \langle T_C [\hat{\psi}(1) \hat{\psi}(2) \hat{\psi}^\dagger(2^+) \hat{\psi}^\dagger(1')] \rangle . \end{aligned} \quad (2.41)$$

Die Notation $2^+ = \mathbf{r}_2, t_2 + 0_+$ bedeutet, dass t_2^+ infinitesimal größer ist als t_2 , um bei Ausführung der Zeitordnung die ursprüngliche Anordnung der Operatoren in der Bewegungsgleichung (2.13) wiederherstellen zu können. Außerdem gilt $\delta_C(1 - 1') = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta_C(t_1 - t'_1)$, wobei die Deltafunktion auf der Keldysh-Kontur wie folgt definiert ist

$$\delta_C(t - t') = \begin{cases} \delta(t - t') , & t_+, t'_+ \\ -\delta(t - t') , & t_-, t'_- \\ 0 , & t_+, t'_- \text{ und } t_-, t'_+ \end{cases} . \quad (2.42)$$

Die Deltafunktion entsteht, wenn man die Ableitung $\frac{\partial}{\partial t_1}$ an dem Zeitordnungsoperator vorbeizieht, da diese beiden Operatoren nicht kommutieren [1].

Unter Benutzung der Definition (2.23) erhält man aus (2.41) die folgende Bewegungsgleichung für die Greenfunktion:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right) G(1, 1') - \int_C d\bar{1} V(1, \bar{1}) G(\bar{1}, 1') = \delta_C(1 - 1') \pm i\hbar \int_C d2 W(1 - 2) G(12, 1'2^+) . \quad (2.43)$$

Die zu (2.43) adjungierte Gleichung erhält man durch eine entsprechende Ableitung bezüglich des adjungierten Feldoperators $\hat{\psi}^\dagger(1')$.

Man erkennt, dass die Einteilchen-Greenfunktion durch die Wechselwirkung $W(1 - 2)$ an die Zweiteilchen-Greenfunktion gekoppelt ist. Betrachtet man die Bewegungsgleichung für die Zweiteilchen-Greenfunktion, so koppelt diese an die Dreiteilchen-Greenfunktion. Die Gleichung (2.43) stellt somit das erste Glied einer Hierarchie dar, der sogenannten Martin-Schwinger-Hierarchie. Diese Hierarchie stellt eine Verallgemeinerung der BBGKY-Hierarchie für den reduzierten Dichtoperator dar.

2.4.2. Einführung der Selbstenergie

Um eine geschlossene Gleichung für die Einteilchen-Greenfunktion zu erhalten, muss eine Möglichkeit zum Abbruch der Hierarchie gefunden werden. Eine formale Entkopplung der Martin-

Schwinger-Hierarchie wird durch die Einführung der sogenannten Selbstenergie Σ ermöglicht

$$\pm i\hbar \int_C d2 W(1-2) G(12, 1'2^+) \equiv \int_C d\bar{1} \Sigma(1, \bar{1}) G(\bar{1}, 1'). \quad (2.44)$$

Auch Σ ist auf der Keldysh-Kontur definiert und ist bezüglich der Anordnung der Zeiten analog zu der zeitgeordneten Greenfunktion zu verstehen. Setzt man die Definition der Selbstenergie in die Bewegungsgleichung (2.43) der zeitgeordneten Greenfunktion ein, so erhält man eine geschlossene Bewegungsgleichung für die Einteilchen-Greenfunktion

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right) G(1, 1') - \int_C d\bar{1} V(1, \bar{1}) G(\bar{1}, 1') = \delta_C(1-1') + \int_C d\bar{1} \Sigma(1, \bar{1}) G(\bar{1}, 1'). \quad (2.45)$$

Die dazu adjungierte Gleichung lautet

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{1'} \right) G(1, 1') - \int_C d\bar{1} G(1, \bar{1}) V(\bar{1}, 1') = \delta_C(1-1') + \int_C d\bar{1} G(1, \bar{1}) \Sigma(\bar{1}, 1'). \quad (2.46)$$

Diese beiden Gleichungen sind nicht mehr an die Zweiteilchen-Greenfunktion gekoppelt. Sie werden als Kadanoff-Baym-Gleichungen (KBE) bezeichnet und müssen für eine Lösung der Greenfunktion zusammen erfüllt sein. Die Kadanoff-Baym-Gleichungen sind die Hauptgleichungen in der Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen. Sie beschreiben die Dynamik identischer Teilchen in dem effektiven Feld $\Sigma + V$ für Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsprozesse. Die Probleme die in einem Vielteilchensystem durch die Korrelationen der Teilchen untereinander entstehen, sind allerdings nicht verschwunden, sondern wurden in die Selbstenergie transferiert. Die Aufgabe besteht nun darin, geeignete Näherungen für die Selbstenergie zu finden. Dazu erfolgt zuerst eine genaue Untersuchung der Selbstenergie [21]:

1. Verhalten zum Anfangszeitpunkt t_0

Betrachtet man den Ausdruck (2.44) für den Anfangszeitpunkt, d.h. bei $t_1 = t'_1 = t_0$, so muss gelten

$$\lim_{t_1=t'_1=t_0} \int_C d\bar{1} \Sigma(1, \bar{1}) G(\bar{1}, 1') = \pm i\hbar \int d\mathbf{r}_2 W(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; t_0). \quad (2.47)$$

Um eine eindeutige Lösung zu erhalten ist somit die Annahme einer Anfangsbedingung für die Zweiteilchen-Greenfunktion notwendig. Allgemein dargestellt lautet diese zum Zeitpunkt t_0

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; t_0) = G(1, 1') G(2, 2') |_{t_0} \pm G(1, 2') G(2, 1') |_{t_0} + c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; t_0). \quad (2.48)$$

Die Zweiteilchen-Greenfunktion kann zum Anfangszeitpunkt t_0 als eine Summe zweier Produkte von unkorrelierten Einteilchen-Greenfunktion und der Anfangskorrelationen, welche in $c(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; t_0)$ zusammengefasst sind, betrachtet werden. Für eine eindeutige Lösung muss eine Aussage über die Anfangskorrelationen gemacht werden. Eine häufig benutzte Anfangsbedingung ist "Bogolyubov's condition of weakening of initial correlations"

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} G(12, 1'2')|_{t_0} = G(1, 1') G(2, 2')|_{t_0} \pm G(1, 2') G(2, 1')|_{t_0} . \quad (2.49)$$

Diese Bedingung besagt, dass das System im Limes $t_0 \rightarrow -\infty$ keinen Anfangskorrelationen unterliegt und führt auf die von Kadanoff und Baym ursprüngliche hergeleitete Form der KBE [22].

2. Integration auf der Keldyshkontur zum Anfangszeitpunkt t_0

Für den Fall $t_1 = t'_1 = t_0$, verschwindet das Integral auf der Keldysh-Kontur. Damit die Beziehung (2.44) erfüllt ist, muss daher ein Term in der Selbstenergie existieren, der eine Deltafunktion bezüglich der Zeit beinhaltet und die Korrelationen berücksichtigt. Damit wird die Selbstenergie zu

$$\Sigma(1, 1') = \Sigma^{\text{HF}}(1, 1') + \Sigma^{\text{C}}(1, 1') + \Sigma^{\text{in}}(1, 1') , \quad (2.50)$$

mit $\Sigma^{\text{in}}(1, 1') = \Sigma^{\text{in}}(1, r'_1 t_0) \delta(t'_1 - t_0)$. Hierbei wurde der Korrelationsanteil der Selbstenergie in Σ^{HF} und $\Sigma^{\text{C}}(1, 1')$ aufgeteilt. Dieses wird in den folgenden Abschnitten noch näher erläutert.

Unter Berücksichtigung dieser beiden Betrachtungen erhält man die folgende Bewegungsgleichung für die Einteilchen-Greenfunktion

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right) G(1, 1') - \int d\bar{1} (V(1, \bar{1}) + \Sigma^{\text{HF}}(1, \bar{1})) G(\bar{1}, 1') \\ = \delta_C(1 - 1') + \int_C d\bar{1} \{ \Sigma^{\text{C}}(1, \bar{1}) + \Sigma^{\text{in}}(1, \bar{1}) \} G(\bar{1}, 1') , \end{aligned} \quad (2.51)$$

und die adjungierte Gleichung, welche man aus der Heisenberggleichung des adjungierten Feldoperators durch eine entsprechende Rechnung erhält

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial'}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right) G(1, 1') - \int d\bar{1} G(1, \bar{1}) (V(\bar{1}, 1') + \Sigma^{\text{HF}}(\bar{1}, 1')) \\ = \delta(1 - 1') + \int_C d\bar{1} G(1, \bar{1}) \{ \Sigma^{\text{C}}(\bar{1}, 1') + \Sigma^{\text{in}}(\bar{1}, 1') \} . \end{aligned} \quad (2.52)$$

Diese Gleichungen stellen die Kadanoff-Baym-Gleichungen für eine beliebige Anfangskorrelation zum Zeitpunkt t_0 dar. Sie sind der Ausgangspunkt der folgenden Betrachtungen. Sie stellen eine Verallgemeinerung der bisher bekannten kinetischen Gleichungen dar, welche als Grenzfälle in ihnen enthalten sind. Sie sind für beliebige Zeiten gültig, vor allem auch auf ultrakurzen Zeitskalen, wodurch mit ihnen der Aufbau der Anfangskorrelationen betrachtet werden kann. Außerdem ist bei ihnen sowohl die Dichte, als auch die totale Energie erhalten. In dieser Form wurde noch keine Näherung bezüglich der Korrelationen vorgenommen.

Je nach Anordnung der Zeitargumente auf der Keldysh-Kontur erhält man die Bewegungsgleichung für eine der vier Einteilchen-Greenfunktionen. Im Folgenden werden die Gleichungen für die beiden Einteilchen-Korrelationsfunktionen g_a^{\gtrless} benötigt, welche daher hier explizit angegeben werden. Um die Korrelationsfunktionen zu erhalten müssen die Zeiten auf verschiedenen Ästen der Keldysh-Kontur angeordnet werden. In diesem Fall verschwindet die Deltafunktion in (2.51) und (2.52) und unter Benutzung von $\Sigma^{\text{in}} = 0$ erhält man die Gleichungen

$$\begin{aligned} & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right) G(1, 1') - \int d\bar{1} (V(1, \bar{1}) + \Sigma^{\text{HF}}(1, \bar{1})) G(\bar{1}, 1') \\ & = \int_{t_0}^{t_1} d\bar{1} \{ \Sigma_a^>(1, \bar{1}) - \Sigma_a^<(1, \bar{1}) \} g_a^{\gtrless}(\bar{1}, 1') - \int_{t_0}^{t_1'} d\bar{1} \Sigma_a^{\gtrless}(1, \bar{1}) \{ g_a^>(\bar{1}, 1') - g_a^<(\bar{1}, 1') \} , \end{aligned} \quad (2.53)$$

und die adjungierte Gleichung

$$\begin{aligned} & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1'} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right) G(1, 1') - \int d\bar{1} G(1, \bar{1}) (V(\bar{1}, 1') + \Sigma^{\text{HF}}(\bar{1}, 1')) \\ & = \int_{t_0}^{t_1} d\bar{1} \{ g_a^>(1, \bar{1}) - g_a^<(1, \bar{1}) \} \Sigma_a^{\gtrless}(\bar{1}, 1') - \int_{t_0}^{t_1'} d\bar{1} g_a^{\gtrless}(1, \bar{1}) \{ \Sigma_a^>(\bar{1}, 1') - \Sigma_a^<(\bar{1}, 1') \} . \end{aligned} \quad (2.54)$$

Bisher wurden noch keine möglichen Näherungen für die Selbstenergie angegeben. Zum Abschluss dieses Kapitels sollen daher noch zwei Näherungen betrachtet werden, die in dieser Arbeit benutzt werden.

Hartree-Fock-Näherung

Die Zweiteilchen-Greenfunktion beschreibt die Propagation zweier Teilchen durch ein System, die diesem an dem Raumzeitpunkt \mathbf{r}'_1, t'_1 und \mathbf{r}'_2, t'_2 hinzugefügt und an dem Raumzeitpunkt \mathbf{r}_1, t_1 und \mathbf{r}_2, t_2 wieder entnommen werden. Während dieser Propagation wechselwirken die Teilchen miteinander oder mit den restlichen Teilchen des Systems.

2. Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen

Die Zweiteilchen-Greenfunktion wird in der Hartree-Fock-Näherung wie folgt durch Ein-
teilchen-Greenfunktionen genähert

$$G(12, 1'2') = G(1, 1')G(2, 2') \pm G(1, 2')G(2, 1') . \quad (2.55)$$

Diese Näherung ist in Abbildung 2.2 graphisch dargestellt und soll noch kurz erläutert werden.
Der erste Term auf der rechten Seite von (2.55) beschreibt die voneinander unabhängige Propa-

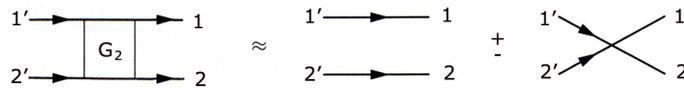


Abbildung 2.2.: Hartree-Fock-Näherung

gation der Teilchen durch das System. Dieser Teil wird als Hartree-Anteil Σ^H der Selbstenergie bezeichnet. Da mit der Methode der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen identische Teilchen betrachtet werden, kann allerdings eine Vertauschung der Teilchen stattfinden. Der so entstehende Austauschterm entspricht dem zweiten Term auf der rechten Seite von (2.55) und wird als Fock-Anteil Σ^F der Selbstenergie bezeichnet.

Um einen konkreten Ausdruck für Σ^H und Σ^F zu erhalten, wird auf der rechten Seite von (2.44) die Zweiteilchen-Greenfunktion durch (2.55) ersetzt. Man erhält

$$\begin{aligned} \Sigma^{\text{HF}}(1, \bar{1}) &= \Sigma^H(1, \bar{1}) - \Sigma^F(1, \bar{1}) \\ &= \pm i\hbar \delta(1 - \bar{1}) \int d2 W(1 - 2) G(2, 2^+) + i\hbar W(1 - \bar{1}) G(1, \bar{1}) . \end{aligned} \quad (2.56)$$

Eine Besonderheit dieser Näherung ist es, dass sie lokal in der Zeit ist. Betrachtet man den Hartree-Beitrag, so erkennt man, dass dieser Beitrag unabhängige Teilchen beschreibt, die sich in dem Potential Σ^H bewegen. Dieser Term stellt somit ein mittleres Feld da, welches durch die Teilchen des Systems erzeugt wird. Jedes Teilchen des System bewegt sich in diesem Feld. Betrachtet man ein zusätzliches äußeres Potential $V(1)$, so können dieses Potential und der Hartree-Beitrag zu einem effektiven Potential $V_I^{\text{eff}}(1) = V(1) + \Sigma^H(1)$ zusammengefasst werden. Auch der Fock-Beitrag kann als ein mittleres Feld interpretiert werden. Der Austauschterm ist allerdings nicht räumlich lokal und kann daher nicht mit in das effektive Potential integriert werden.

Da die Vielteilcheneffekte in der Hartree-Fock-Näherung nur durch ein zusätzliches mittleres Feld zum Ausdruck kommen, wird diese Näherung auch als 'mean-field'-Näherung bezeichnet.

Der Ansatz, dass die Zweiteilchen-Greenfunktion durch ein Produkt aus unkorrelierten Ein-
teilchen-Greenfunktionen ausgedrückt wird, stellt die einfachste Näherung für die Selbstenergie
dar.

Zweite Bornsche Näherung

Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung ist es nicht möglich Stoßprozesse der Teilchen zu be-
schreiben. Da aber gerade die Teilchenstöße einen wichtigen Prozess in Vielteilchensystemen
darstellen, soll hier eine Näherung entwickelt werden, die über die Hartree-Fock-Näherung hin-
aus geht und zusätzlich auch Zweiteilchenstöße berücksichtigt.

Zusätzlich zu der im obigen Abschnitt betrachteten unabhängigen Propagation der Teilchen
durch das System wird nun noch ein möglicher Streuprozess der beiden Teilchen, welche sich an
den Orten $\bar{\mathbf{r}}_1$ und $\bar{\mathbf{r}}_2$ zum Zeitpunkt \bar{t}_1 befinden, berücksichtigt. Auch hier ist ein Austauschterm
möglich. Graphisch ist die Näherung der Zweiteilchen-Greenfunktion in Abbildung 2.3 darge-
stellt. Drückt man diese Graphik durch die Greenfunktionen aus, so erhält man den folgenden

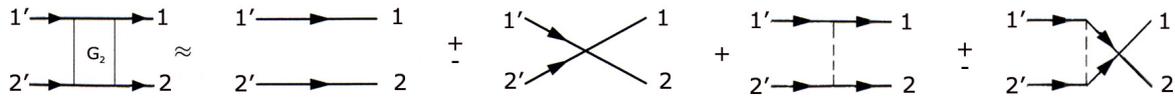


Abbildung 2.3.: Bornsche Näherung

Ausdruck für die Selbstenergie Σ

$$\Sigma(1, 1') = \Sigma^{\text{HF}}(1, \bar{1}) + \Sigma^{\text{C}}(1, \bar{1}) . \quad (2.57)$$

Die Zweiteilchenstöße sind hierbei in Σ^{C} zusammengefasst, welches wie folgt lautet

$$\begin{aligned} \Sigma^{\text{C}}(1, \bar{1}) = & \pm (i\hbar)^2 \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \\ & \times \{G(1, 1') G(2, 2') G(2', 2) \pm G(1, 2') G(2, 1') G(2', 2)\}_{t_1=t_2; t'_1=t'_2} . \end{aligned} \quad (2.58)$$

Hier beschreibt der zweite Term den Austausch. Diese Näherung wird als zweite Bornsche Nä-
herung bezeichnet, welche im Gegensatz zu der Hartree-Fock-Näherung nicht mehr zeitlich lokal
ist.

Es werden hier keine weiteren Näherungen betrachtet, da in dieser Arbeit nur die Hartree-
Fock-Näherung und die Bornsche Näherung benötigt werden. Für Näherungen, die über die
Bornsche Näherung hinaus gehen, wird auf [1] oder [18] verwiesen.

Nach diesem kurzen Überblick über die Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen, soll nun mit der Auswertung spezieller Systeme im Nichtgleichgewicht begonnen werden. Dazu erfolgt im nächsten Kapitel die Ableitung eines komplett eichinvarianten Formalismus.

3. Eichinvariante

Kadanoff-Baym-Gleichungen

Bevor mit der Herleitung einer eichinvarianten Darstellung der KBE begonnen wird, wird zuerst eine Untersuchung der Eichinvarianz elektromagnetischer Felder vorgenommen. Dabei wird das Verhalten der Feldoperatoren – und somit der Greenfunktionen – in Abhängigkeit von der gewählten Eichung betrachtet und eine modifizierte Fouriertransformation bestimmt, mit der die Greenfunktionen eichinvariant dargestellt werden können. Mit Hilfe dieser Transformation kann anschließend die eichinvariante Darstellung der KBE abgeleitet werden.

3.1. Eichinvarianz elektromagnetischer Felder

Die Erzeugung von elektrischen und magnetischen Feldern durch Ladungen und Ströme, sowie die zeitabhängige Kopplung dieser Felder, werden durch die 1864 von James Clark Maxwell aufgestellten Maxwellgleichungen beschrieben:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= 4\pi\rho(\mathbf{r}, t), & \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= 0, & \operatorname{rot} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Diese vier Gleichungen bilden die Basis der Elektrodynamik.

Aus einer Betrachtung der beiden homogenen Maxwellgleichungen wird deutlich, dass sich elektromagnetische Felder eindeutig aus einem skalaren Potential $\Phi(\mathbf{r}, t)$ und einem Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ bestimmen lassen, nach

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad , \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \nabla \Phi(\mathbf{r}, t). \quad (3.2)$$

Ersetzt man in dieser Darstellung das Vektorpotential und das skalare Potential durch

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad , \\ \phi(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \phi'(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad , \end{aligned} \quad (3.3)$$

wobei $\chi(\mathbf{r}, t)$ eine beliebige skalare Funktion ist, so erkennt man, dass – unabhängig von dem Aussehen von $\chi(\mathbf{r}, t)$ – die Felder $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ und $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ unverändert bleiben. Das Vektorpotential und das skalare Potential sind somit nicht eindeutig bestimmt. Die Transformation (3.3) wird als Eichtransformation und die skalare Funktion $\chi(\mathbf{r}, t)$ als Eichfeld bezeichnet. Die Freiheit in der Wahl einer beliebigen skalaren Funktion $\chi(\mathbf{r}, t)$ in (3.3) ist als Eichfreiheit des elektromagnetischen Feldes bekannt.

Diese Eichfreiheit kann zu Problemen bei der Entwicklung von kinetischen Gleichungen führen, mit denen Systeme in Anwesenheit elektromagnetischer Felder betrachtet werden. Geht man bei der Entwicklung der kinetischen Gleichungen über die lokale Näherung hinaus und berücksichtigt Gradientenkorrekturen erster oder höherer Ordnung, so erhält man bei der Verwendung unterschiedlicher Eichungen verschiedene Endgleichungen. Eine Abhängigkeit der Resultate von der gewählten Eichung ist natürlich nicht zufriedenstellend und daher ist es wichtig eine eichinvariante Darstellung der kinetischen Gleichungen abzuleiten.

Betrachtet man eine Wellenfunktion $\psi_a(\mathbf{r}, t)$, so ist die Beziehung der Wellenfunktion in der neuen Eichung zu der Wellenfunktion in der alten Eichung gegeben durch [23]

$$\psi'_a(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e_a}{c} \chi(\mathbf{r}, t)} \psi_a(\mathbf{r}, t) . \quad (3.4)$$

Diese Beziehung gilt analog für Feldoperatoren. Durch das Einsetzen dieser Beziehung in die Definition der Greenfunktion erhält man die Eichtransformation der Greenfunktion

$$G'_a(1, 1') = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e_a}{c} \{\chi(\mathbf{r}_1, t_1) - \chi(\mathbf{r}'_1, t'_1)\}} G_a(1, 1') = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e_a}{c} \{\chi(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t + \frac{\tau}{2}) - \chi(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, t - \frac{\tau}{2})\}} G_a(1, 1') . \quad (3.5)$$

Der Index a steht hier für die betrachtete Teilchensorte.

Hieraus läßt sich eine modifizierte Fouriertransformation ableiten, mit der die Green-"funktionen eichinvariant dargestellt werden können. Die Idee dieser Herleitung geht zurück auf Fujita [2]. Unter Benutzung der Relation

$$\chi(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t + \frac{\tau}{2}) - \chi(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, t - \frac{\tau}{2}) = (\tau \partial_t - \mathbf{r} \partial_{\mathbf{R}}) \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} d\lambda \chi(\mathbf{R} + \lambda \mathbf{r}, t + \lambda \tau) \quad , \quad (3.6)$$

und unter Anwendung einer Fouriertransformation bezüglich \mathbf{r} und τ , erhält man aus (3.5) die eichinvariante Greenfunktion in der Wignerdarstellung

$$\tilde{g}_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = \int d\mathbf{r} \int d\tau e^{i \int_{-1/2}^{1/2} d\lambda \{\tau(\omega + e_a \phi(\mathbf{R} + \lambda \mathbf{r}, t + \lambda \tau)) - \frac{1}{\hbar} \mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} + e_a \mathbf{A}(\mathbf{R} + \lambda \mathbf{r}, t + \lambda \tau))\}} g_a(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \tau, t) . \quad (3.7)$$

Der Beweis, dass der Phasenfaktor auch wirklich wegfällt, wenn $g_a(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \tau, t)$ durch die Relation (3.5) ersetzt wird, ist in [3] gegeben.

In den folgenden Untersuchungen wird sich auf die Betrachtung von homogenen elektrischen Feldern beschränkt. Die Rechnungen werden in der Vektorpotentialeichung durchgeführt. Diese sieht für homogene elektrische Felder wie folgt aus

$$\phi = 0 \quad \text{und} \quad \mathbf{A}(t) = -c \int_{-\infty}^t d\bar{t} \mathbf{E}(t) . \quad (3.8)$$

Hiermit vereinfacht sich die Transformation (3.7) zur Bestimmung der eichinvarianten Darstellung der Greenfunktion (3.7) zu

$$\tilde{g}_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = \int d\mathbf{r} \int d\tau e^{i\omega\tau - \frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \frac{1}{\tau} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)} g_a(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \tau, t) , \quad (3.9)$$

mit der zugehörigen Rücktransformation

$$g_a(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \tau, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau + \frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \frac{1}{\tau} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)} \tilde{g}_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) . \quad (3.10)$$

Der Ausdruck (3.9) stellt eine Fouriertransformation bezüglich \mathbf{r} und τ mit einem modifizierten Impuls dar. Für den Spezialfall der Betrachtung von homogenen elektrischen Feldern kann man daher die eichinvariante Greenfunktion aus der ursprünglichen Greenfunktion in der Wignerdarstellung erhalten, indem der ursprüngliche Impuls \mathbf{p} durch den modifizierten, feldabhängigen Impuls

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \quad (3.11)$$

ersetzt wird.

Diese Eigenschaft wurde von einigen Gruppen z.B. von Haug und Jauho [3], oder Kremp, Schlanges, Kraeft und Bonitz [18], [4] und [5], dazu genutzt, die Spektralfunktion oder die Wignerfunktion in der eichabhängigen Darstellung zu berechnen und anschließend, entsprechend (3.11), den Impuls zu ersetzen, um eine eichinvariante Darstellung zu erhalten. In der vorliegenden Arbeit wird allerdings das Vorgehen von Bonitz und Dufty [9] benutzt, bei dem mit Hilfe der Transformation (3.9) die gesamte KBE eichinvariant dargestellt wird. Durch Lösen der eichinvarianten KBE erhält man dann direkt die eichinvarianten Greenfunktionen und somit die eichinvariante Spektralfunktion oder Wignerfunktion.

3.2. Eichinvariante Darstellung der Kadanoff-Baym-Gleichungen

Nachdem mit (3.9) eine modifizierte Fouriertransformation abgeleitet wurde, mit der eine eichinvariante Darstellung der Greenfunktionen ermöglicht wird, kann mit der Ableitung der eichinvarianten Darstellung der Kadanoff-Baym-Gleichungen begonnen werden.

Es sollen Vielteilchensysteme in einem homogenen elektrischen Feld und einem zusätzlichen externen Confinementpotential betrachtet werden. Der Hamiltonoperator, der ein solches System beschreibt, lautet

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{(\mathbf{p}_i - \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t))^2}{2m_a} + V_I(\mathbf{r}_i, t) \right\} + \sum_{i < j}^N W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (3.12)$$

Wie im vorigen Abschnitt schon erwähnt, wird die Vektorpotentialeichung (3.8) benutzt. Mit diesem Hamiltonoperator erhält man für die Korrelationsfunktionen g_a^{\gtrless} die Kadanoff-Baym-Gleichung

$$\begin{aligned} & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \epsilon \left[\frac{\hbar}{i} \nabla_1 - \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(1) \right] - V_I(1) \right\} g_a^{\gtrless}(1, 1') - \int d\bar{\mathbf{r}}_1 \Sigma_a^{\text{HF}}(1, \bar{\mathbf{r}}_1 t_1) g_a^{\gtrless}(\bar{\mathbf{r}}_1 t_1, 1') \\ &= \int_{t_0}^{t_1} d\bar{1} \{ \Sigma_a^>(1, \bar{1}) - \Sigma_a^<(1, \bar{1}) \} g_a^{\gtrless}(\bar{1}, 1') - \int_{t_0}^{t'_1} d\bar{1} \Sigma_a^{\gtrless}(1, \bar{1}) \{ g_a^>(\bar{1}, 1') - g_a^<(\bar{1}, 1') \}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Hierbei wurde eine allgemeine Dispersionsrelation benutzt.

Diese Gleichung muss zusammen mit ihrer Adjungierten erfüllt werden. Um die adjungierte Gleichung zu erhalten wird die Gleichung (3.13) unter Benutzung der Relation $[g_a^{\gtrless}(1, 1')]^* = -g_a^{\gtrless}(1', 1)$ komplex konjugiert und anschließend werden 1 und 1' getauscht

$$\begin{aligned} & \left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} - \epsilon \left[-\frac{\hbar}{i} \nabla_{1'} - \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(1') \right] - V_I(1') \right\} g_a^{\gtrless}(1, 1') - \int d\bar{\mathbf{r}}_1 g_a^{\gtrless}(1, \bar{\mathbf{r}}_1 t'_1) \Sigma_a^{\text{HF}}(\bar{\mathbf{r}}_1 t'_1, 1') \\ &= \int_{t_0}^{t_1} d\bar{1} \{ g_a^>(1, \bar{1}) - g_a^<(1, \bar{1}) \} \Sigma_a^{\gtrless}(\bar{1}, 1') - \int_{t_0}^{t'_1} d\bar{1} g_a^{\gtrless}(1, \bar{1}) \{ \Sigma_a^>(\bar{1}, 1') - \Sigma_a^<(\bar{1}, 1') \}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Diese beiden Gleichungen sind nun eichinvariant darzustellen. In den folgenden Abschnitten wird dieses zuerst für die linke Seite der Gleichungen, also für die Einteilchenbeiträge realisiert, anschließend wird die rechte Seite – also die Stoßintegrale – betrachtet.

3.2.1. Einteilchenbeiträge

Unter der Annahme, dass in dem betrachteten System makroskopische und mikroskopische Prozesse auf unterschiedlichen Längenskalen ablaufen, ist ein Übergang auf Relativ- und Schwerpunktvariablen angebracht. Hierbei ist zu beachten, dass ein homogenes elektrisches Feld betrachtet wird, d.h. dass das Vektorpotential nur von der Zeit und nicht vom Ort abhängt

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \epsilon \left[\frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{R}} + \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} - \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(t_1) \right] - V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) \right\} g_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = I_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \quad (3.15)$$

Die adjungierte Gleichung, abhängig von Relativ- und Schwerpunktkoordinaten, lautet

$$\left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} - \epsilon \left[-\frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{R}} + \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} - \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(t'_1) \right] - V_I(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, t'_1) \right\} g_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = -[I_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t'_1, t_1)]^* . \quad (3.16)$$

Hierbei wurden die Beziehungen $\nabla_{r_1} = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{R}} + \nabla_{\mathbf{r}}$ und $\nabla_{r'_1} = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{R}} - \nabla_{\mathbf{r}}$ benutzt. Die Stoßintegrale, welchen den Hartree-Fock-Beitrag und den Kollisionsbeitrag der Selbstenergie beinhalten, werden hier in dem Ausdruck $I_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1)$ zusammengefasst.

Es soll nun der Übergang auf die eichinvariante Darstellung der KBE und ihrer adjungierten Gleichung erfolgen. Dazu wird auf die beiden Gleichungen der räumliche Anteil der eichinvariante Fouriertransformation (3.9) angewendet. Diese Rechnung soll hier ausführlich für die Gleichung (3.15) gezeigt werden.

1. Nach Anwendung der Transformation (3.9) lautet die Gleichung (3.15):

$$\int d\mathbf{r} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \frac{1}{\tau} \int_{t'_1}^{t_1} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)} \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \epsilon \left[\frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{R}} + \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} - \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(t_1) \right] - V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) \right\} \times \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \frac{1}{\tau} \int_{t'_1}^{t_1} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \tilde{I}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \quad (3.17)$$

Hierbei wurde $g_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1)$ durch die Rücktransformation (3.10) der eichinvarianten Fouriertransformation ersetzt.

2. Die in der Rücktransformation enthaltene Integration und die Exponentialfunktion können an den Operatoren in der Klammer vorbei gezogen werden. Man muss die Operatoren in der Klammer aber erst auf die Exponentialfunktion wirken lassen, bevor man letztere an ihnen vorbeiziehen kann:

- Wirkung von $i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1}$ auf die Exponentialfunktion

$$\begin{aligned}
 & i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} \right)} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 &= e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} \right)} \left\{ \frac{e_a}{c} \frac{1}{t_1 - t'_1} \mathbf{r} \left(\int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} - \mathbf{A}(t_1) \right) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \right\} \\
 & \quad \times \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \quad (3.18)
 \end{aligned}$$

- Wirkung von $\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}}$ auf die Exponentialfunktion

$$\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} \right)} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \quad (3.19)$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} \right)} \left\{ \mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \quad (3.20)$$

$\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}}$ angewendet auf $\tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1)$ ergibt Null, da die Green-Funktion nicht von \mathbf{r} abhängt.

- $\frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{R}}$, $\frac{e_a}{c} \mathbf{A}(t_1)$ und $V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1)$ haben keine Wirkung auf die Exponentialfunktion, so dass sie einfach an ihnen vorbei gezogen werden kann.

3. Nach Ausführung der Ableitungen heben sich die beiden feldabhängigen Phasenfaktoren der Exponentialfunktion gegenseitig weg. Der Vektor \mathbf{r} kann durch den Ausdruck $i\hbar \nabla_{\mathbf{k}}$ ersetzt werden. Die gesamte Gleichung lautet dann

$$\int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)} \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{e_a}{c} \frac{i\hbar}{t_1 - t'_1} \nabla_{\mathbf{k}} \left(\int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} - \mathbf{A}(t_1) \right) \right. \quad (3.21)$$

$$\left. - \epsilon \left[\frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(t_1) \right] - V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 = \tilde{I}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \quad (3.22)$$

Da nur noch die Exponentialfunktion von \mathbf{r} abhängt, kann die \mathbf{r} -Integration nun unter Benutzung von $\int d\mathbf{r} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)} = (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)$ eliminiert werden. Anschließend kann die \mathbf{k} -Integration mit Hilfe der entstandenen Deltafunktion ausgeführt werden. Die Integrationen über das Potential können nicht mit ausgeführt werden, da bei dem Potential nicht

zwangsläufig von einer Separation der Schwerpunkt- und Relativkoordinate ausgegangen werden kann. Die Gleichung lautet dann

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{e_a}{c} \frac{i\hbar}{t_1 - t'_1} \nabla_{\mathbf{k}} \left(\int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} - \mathbf{A}(t_1) \right) \right. \quad (3.23)$$

$$\left. - \epsilon \left[\frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(t_1) \right] \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \quad (3.24)$$

$$- \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)} V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \tilde{I}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \quad (3.25)$$

Um die Gleichung etwas übersichtlicher darzustellen, wird nach [4] die folgende Kurzschreibweise eingeführt

$$\mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t, t') \equiv \frac{e_a}{c} \int_{t'}^t dt'' \frac{\mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t'')}{t - t'} = -\frac{e_a}{c} \int_{t'}^t dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t - t'} + \frac{e_a}{c} \mathbf{A}(t) . \quad (3.26)$$

$\mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t, t')$ stellt einen feldabhängigen Impuls mit den folgenden Eigenschaften dar:

1. $\mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t, t) = 0$.
2. $\mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t, t') - \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t', t) = \frac{e_a}{c} (\mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t')) = -e_a \int_{t'}^t d\bar{t} \mathbf{E}(\bar{t})$.

Die Differenz gibt den zusätzlichen Impuls an, den ein geladenes Teilchen durch die Anwesenheit eines elektrischen Feld dazu gewinnt.

3. $-\frac{1}{m_a} \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t, t') (t - t') = -\frac{e_a}{cm_a} \int_{t'}^t dt'' (\mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t'')) = e_a \int_{t'}^t dt'' \int_{t'}^{t''} d\bar{t} \mathbf{E}(\bar{t})$.

Diese Beziehung beschreibt die durch das Feld hervorgerufene örtliche Verschiebung eines geladenen Teilchens in der Zeit $\Delta t = t - t'$.

Mit dieser Abkürzung lautet die eichinvariante Darstellung der KBE

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - i\hbar \frac{1}{t_1 - t'_1} \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) \nabla_{\mathbf{k}} - \epsilon \left[\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) \right] \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\ - \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \tilde{I}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \quad (3.27)$$

Um die zu (3.27) adjungierte Gleichung zu erhalten, kann entweder eine analoge Rechnung für die adjungierte Gleichung von (3.15) durchgeführt werden oder die Gleichung (3.27) komplex konjugiert werden. Die adjungierte Gleichung lautet

$$\left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} - i\hbar \frac{1}{t_1 - t'_1} \mathbf{K}_a^A(t'_1, t_1) \nabla_{\mathbf{k}} - \epsilon \left[-\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^A(t'_1, t_1) \right] \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) - \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t'_1) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = -[\tilde{I}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t'_1, t_1)]^* . \quad (3.28)$$

Hiermit ist also eine eichinvariante Darstellung der linken Seite der KBE gefunden. Die Betrachtung der rechten Seite erfolgt im nächsten Abschnitt.

3.2.2. Stoßintegrale

Gradientenentwicklung

Um die komplette KBE in der eichinvarianten Darstellung zu erhalten, folgt noch eine Betrachtung der Stoßintegrale. Auch hier wird – in Analogie zu dem Vorgehen bei den Einteilchenbeiträgen – mit dem Übergang auf Relativ- und Schwerpunktvariablen begonnen. Dieser Übergang ist allerdings genauer zu betrachten, da die Stoßintegrale von der folgenden Struktur sind

$$I(x_1, x'_1) = \int d\bar{x}_1 A(x_1, \bar{x}_1) B(\bar{x}_1, x'_1) \xrightarrow{\text{Kootransf.}} \int d\bar{x} A(x - \bar{x}, X + \frac{\bar{x}}{2}) B(\bar{x}, X + \frac{\bar{x} - x}{2}) = I(x, X) . \quad (3.29)$$

Hier bezeichnet $x_1 = \mathbf{r}_1, t_1$; $x = \mathbf{r}, \tau$; $X = \mathbf{R}, t$ und $\bar{x} = \bar{x}_1 - x'_1$.

Um in dem obigen Ausdruck die makroskopischen und die mikroskopischen Variablen zu entkoppeln, wird in einer ersten groben Näherung angenommen, dass \bar{x} und $\bar{x} - x$ vernachlässigbare Korrekturen der Schwerpunktvariablen darstellen. Man erhält das Stoßintegral

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \tau, t) = \int d\bar{\mathbf{r}} \int d\bar{t} A(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \tau - \bar{t}, t) B(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) . \quad (3.30)$$

Hier ist eine Faltungsstruktur bezüglich der Relativvariablen zu erkennen. Es wird daher noch eine Fouriertransformation der Relativvariablen vorgenommen. Unter Beachtung des Faltungstheorems $F(A*B(\bar{x})) = \sqrt{2\pi} F(A(\bar{x})) F(B(\bar{x}))$, wobei $F(A)$ die Fouriertransformierte der Funktion A bezeichnet, erhält man

$$I(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = A(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) B(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) . \quad (3.31)$$

Diese Näherung wird als lokale Näherung bezeichnet, da durch die Vernachlässigung der Korrekturterme eine Lokalisierung der Funktionen um die Schwerpunktvariablen vorgenommen wird. Die lokale Näherung stellt eine komplette Entkopplung der mikroskopischen und der makroskopischen Variablen dar, d.h. die Dynamik des Prozesses auf der mikroskopischen Ebene wird bei dieser Näherung als unabhängig von der Dynamik auf der makroskopischen Ebene angesehen. Für homogene Systeme ist diese Näherung bezüglich des Ortes exakt, da die Ableitungen nach \mathbf{R} verschwinden. Außer für homogene Systeme wird die lokale Näherung noch für schwach inhomogene Systeme verwendet, da in diesen Systemen die Gradienten der Schwerpunktvariablen vernachlässigbar klein sind.

Um über die lokale Näherung hinaus gehen zu können, wird eine Gradientenentwicklung der Funktionen $A(x - \bar{x}, X + \frac{\bar{x}}{2})$ und $B(\bar{x}, X - \frac{\bar{x}-x}{2})$ um die Schwerpunktvariable durchgeführt. Die auftretenden Gradienten sind durch die langsame Änderung der Schwerpunktvariablen klein. Bricht man diese Entwicklung nach der nullten Ordnung ab, erhält man die bereits betrachtete lokale Näherung. Berücksichtigt man zusätzlich die erste Ordnung und führt auch hier wieder eine Fouriertransformation bezüglich der Relativvariablen durch, erhält man für die Stoßterme den folgenden Ausdruck

$$I(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = AB + \frac{i\hbar}{2}(\nabla_{\mathbf{k}}A \nabla_{\mathbf{R}}B - \nabla_{\mathbf{R}}A \nabla_{\mathbf{k}}B + \frac{\partial A}{\partial t} \frac{\partial B}{\partial \omega} - \frac{\partial A}{\partial \omega} \frac{\partial B}{\partial t}). \quad (3.32)$$

Hier haben A und B stets das Argument $(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t)$. Diese Näherung des Stoßterms wird als Gradientenkorrektur erster Ordnung bezeichnet. Sie ist bei Systemen, deren Inhomogenität nicht mehr als schwach angesehen werden kann, zu benutzen.

In dieser Arbeit wird nur die lokale Näherung benutzt. Der Hartree-Fock-Beitrag der KBE lautet in der lokalen Näherung bezüglich der Koordinaten

$$I_a^{\text{HF}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \int d\bar{\mathbf{r}} \Sigma_a^{\text{HF}}(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, t_1) g_a^{\geq}(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \rightarrow \Sigma_a^{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1) g_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1), \quad (3.33)$$

und die Stoßintegrale lauten (gezeigt am Beispiel des ersten Integrales)

$$\begin{aligned} I_a^{\text{C1}} &= \int_{t_0}^{t_1} d\bar{t}_1 \int d\bar{\mathbf{r}} \{ \Sigma_a^>(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) - \Sigma_a^<(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) \} g_a^{\geq}(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1) \\ &\rightarrow \int_{t_0}^{t_1} d\bar{t}_1 \{ \Sigma_a^>(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) - \Sigma_a^<(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) \} g_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Eichinvariante Darstellung der Stoßintegrale

Auch die Stoßintegrale müssen eichinvariant dargestellt werden. Wie an (3.33) und (3.34) gut zu erkennen ist, stellen die Stoßintegrale in der Ortsdarstellung eine Faltung bezüglich des ersten Arguments dar. Es wird daher zuerst ganz allgemein die eichinvariante Darstellung einer Faltung betrachtet. Die so erhaltene Struktur kann dann auf die Stoßintegrale übertragen werden.

Den Ausgangspunkt der Rechnung stellt der allgemeine Ausdruck (3.30) dar. Hier soll allerdings nur die lokale Näherung bezüglich der Koordinaten betrachtet werden

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \int d\bar{t}_1 \int d\bar{\mathbf{r}} A(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, t_1, \bar{t}_1) B(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1). \quad (3.35)$$

Um die eichinvariante Darstellung dieser Faltung zu erhalten, werden jetzt die Funktionen $A(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, t_1, \bar{t}_1)$ und $B(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1)$ durch die ihre Rücktransformation (3.10) ersetzt. Um die Rechnung möglichst übersichtlich zu halten, werden die Zeitargumente und die Integration über \bar{t}_1 nicht mitgeschrieben, da sie sich nicht ändern.

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \int d\bar{\mathbf{r}} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}'_1}{(2\pi\hbar)^6} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}-\bar{\mathbf{r}}) \cdot \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} \tilde{A}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{\mathbf{r}} \cdot \left(\mathbf{k}'_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{\bar{t}_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{\bar{t}_1 - t'_1} \right)} \tilde{B}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{R}) \\ &= \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} \tilde{A} \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - \bar{t}_1}, \mathbf{R} \right) \\ &\quad \times \tilde{B} \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{\bar{t}_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{\bar{t}_1 - t'_1}, \mathbf{R} \right). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Die Zwischenschritte dieser Rechnung sind in dem Appendix B angegeben.

Die eichinvariante Darstellung der linken Seite dieses Ausdrucks erhält man ebenfalls unter Anwendung der Rücktransformation

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} \tilde{I}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1). \quad (3.37)$$

Vergleicht man diese beiden Ausdrücke, so erhält man die eichinvariante Darstellung einer Faltung

$$\begin{aligned}
 \tilde{I}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) &= \int d\bar{t}_1 \tilde{A}\left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - \bar{t}_1}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1\right) \\
 &\quad \times \tilde{B}\left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - \bar{t}_1}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1\right). \quad (3.38)
 \end{aligned}$$

Mit (3.38) kann jetzt die eichinvariante Darstellung der Stoßintegrale aufgeschrieben werden. Bei der eichinvarianten Darstellung des Hartree-Fock-Terms (3.33) ist allerdings vorsichtig sein, da bei diesem Beitrag keine Integration über \bar{t} auftritt und die Selbstenergie Σ^{HF} nur auf der Zeitdiagonalen existiert. In dem Argument der Selbstenergie ist also $t_1 = t'_1 = \bar{t}$ zu setzen, in dem Argument der Greenfunktion ist $t'_1 = \bar{t}$ zu setzen. Die Integrale in den beiden Argumenten kürzen sich dann weg und man erhält

$$\tilde{I}_a^{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \tilde{\Sigma}_a^{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1). \quad (3.39)$$

In der lokalen Näherung ist die eichinvariante Darstellung des Hartree-Fock-Beitrags somit gleich dem ursprünglichen Ausdruck.

Das erste Stoßintegral (3.34) läßt sich direkt in der Form (3.38) aufschreiben, ebenso das zweite Stoßintegral. Die beiden Ausdrücke werden daher nicht extra angegeben, sondern es wird gleich die eichinvariante Darstellung der Einteilchenbeiträge und der Stoßterme zusammengesetzt. Man erhält die eichinvariante Darstellung der KBE in der lokalen Näherung

$$\begin{aligned}
 &\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - i\hbar \frac{1}{t_1 - t'_1} \mathbf{K}_a^{\text{A}}(t_1, t'_1) \nabla_{\mathbf{k}} - \epsilon \left[\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^{\text{A}}(t_1, t'_1) - \tilde{\Sigma}_a^{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1) \right] \right\} \\
 &\quad \times \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 &\quad - \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)} V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 &= \int_{t_0}^{t_1} d\bar{t}_1 \left\{ \tilde{\Sigma}_a^{\geq}(\mathbf{k}_{\text{mod}1}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) - \tilde{\Sigma}_a^{\leq}(\mathbf{k}_{\text{mod}1}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_{\text{mod}2}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1) \\
 &\quad - \int_{t_0}^{t'_1} d\bar{t}_1 \tilde{\Sigma}_a^{\geq}(\mathbf{k}_{\text{mod}1}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) \left\{ \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_{\text{mod}2}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1) - \tilde{g}_a^{\leq}(\mathbf{k}_{\text{mod}2}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1) \right\}, \quad (3.40)
 \end{aligned}$$

und die zugehörige adjungierte Gleichung

$$\begin{aligned}
 & \left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} - i\hbar \frac{1}{t_1 - t'_1} \mathbf{K}_a^A(t'_1, t_1) \nabla_{\mathbf{k}} - \epsilon \left[-\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^A(t'_1, t_1) - \tilde{\Sigma}_a^{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t'_1) \right] \right\} \\
 & \quad \times \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & - \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t'_1) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & = \int_{t_0}^{t_1} d\bar{1} \left\{ \tilde{g}_a^>(\mathbf{k}_{\text{mod1}}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) - \tilde{g}_a^<(\mathbf{k}_{\text{mod1}}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) \right\} \tilde{\Sigma}_a^{\geq}(\mathbf{k}_{\text{mod2}}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1) \\
 & - \int_{t_0}^{t'_1} d\bar{1} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_{\text{mod1}}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}_1) \left\{ \tilde{\Sigma}_a^>(\mathbf{k}_{\text{mod2}}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1) - \tilde{\Sigma}_a^<(\mathbf{k}_{\text{mod2}}, \mathbf{R}, \bar{t}_1, t'_1) \right\}, \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

mit $\mathbf{k}_{\text{mod1}} = \mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{t_1}^{t'_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1}$ und $\mathbf{k}_{\text{mod2}} = \mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{t_1}^{\bar{t}_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1}$.

Diese beiden Gleichungen sind die eichinvarianten Kadanoff-Baym-Gleichungen in der Wigner-darstellung für ein Vielteilchensystem in einem homogenen elektrischen Feld und einem schwach inhomogenen Confinementpotential. Sie stellen den Ausgangspunkt für die folgende Herleitung von eichinvarianten Gleichungen zur Berechnung der Spektralfunktion und der Wignerfunktion dar.

3.3. Kinetische Gleichungen für $g^{\text{R/A}}$

Die Bestimmung der Spektralfunktion setzt nach der Definition (2.39) die Kenntnis der retardierten und der avancierten Greenfunktion voraus. Daher soll nun ausgehend von der eichinvarianten KBE und ihrer adjungierten Gleichung eine eichinvariante Bewegungsgleichung für $g^{\text{R/A}}$ hergeleitet werden.

Um die Herleitung übersichtlicher zu gestalten, werden die Ausdrücke (3.27) und (3.28) benutzt, in denen die Stoßterme in $\tilde{I}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t, t')$ zusammengefasst sind. Zuerst ist die Summe der KBE und ihrer Adjungierten zu bilden

$$\begin{aligned}
 & \left\{ 2i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - 2i\hbar \frac{\mathbf{K}_{a+}^A(t_1, t'_1)}{t_1 - t'_1} \nabla_{\mathbf{k}} - \epsilon \left[\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^A(t_1, t'_1) \right] - \epsilon \left[-\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^A(t'_1, t_1) \right] \right\} \\
 & \quad \times \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & - \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) - e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t'_1) \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & = 2\tilde{I}_{a-}^{\text{C}\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) + 2\tilde{I}_{a-}^{\text{F}\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1). \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

Hier wurde von der Tatsache Gebrauch gemacht, dass der Hartree-Term aus Σ^{HF} lokal in der Zeit

und im Ort ist und daher mit dem Potential V_I zu einem effektiven Potential zusammengefasst werden kann, in dem die Teilchen sich bewegen

$$V_I^{\text{eff}}(\mathbf{r}_1, t_1) = V_I(\mathbf{r}_1, t_1) + \Sigma(\mathbf{r}_1, t_1) . \quad (3.43)$$

Der Fock-Term aus Σ^{HF} wird im Folgenden als I_{F}^{\geq} bezeichnet und mit auf die rechte Seite der KBE geschrieben. Die Abkürzung I^C beschreibt den Korrelationsanteil der Selbstenergie. $I_-(t_1, t'_1)$ stellt die Kurzschreibweise für $\frac{1}{2} \{I(t_1, t'_1) - [I(t_1, t'_1)]^*\}$ dar.

In der bisherigen Herleitung wurde eine beliebige Dispersionsrelation der Teilchen betrachtet. Zur Bestimmung der Spektralfunktion wird jetzt der Spezialfall einer parabolischen Dispersionsrelation $\epsilon(k) = \frac{k^2}{2m}$ angenommen. Die Summe der beiden Dispersionsrelation in (3.42) lautet dann

$$\begin{aligned} & -\epsilon\left[\frac{\hbar}{2i}\nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^{\text{A}}(t_1, t'_1)\right] - \epsilon\left[-\frac{\hbar}{2i}\nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^{\text{A}}(t'_1, t_1)\right] \quad \rightarrow \\ & -\frac{1}{m_a} \left\{ k^2 + \left(\frac{\hbar}{2i}\nabla_{\mathbf{R}}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\mathbf{K}_a^{\text{A}^2}(t_1, t'_1) + \mathbf{K}_a^{\text{A}^2}(t'_1, t_1) \right) - 2\mathbf{k}\mathbf{K}_{a+}^{\text{A}}(t_1, t'_1) - \frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{R}}\mathbf{K}_{a-}^{\text{A}}(t_1, t'_1) \right\} . \end{aligned} \quad (3.44)$$

Dieser Ausdruck wird in der Gleichung (3.42) ersetzt. Die Bewegungsgleichung der Einteilchen-Korrelationsfunktionen für Systeme, in denen die Teilchenenergien einer parabolischen Dispersionsrelation genügen, lautet dann

$$\begin{aligned} & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - i\hbar \frac{\mathbf{K}_{a+}^{\text{A}}(t_1, t'_1)}{t_1 - t'_1} \nabla_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2m_a} \left(k^2 + \left(\frac{\hbar}{2i}\nabla_{\mathbf{R}}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\mathbf{K}_a^{\text{A}^2}(t_1, t'_1) + \mathbf{K}_a^{\text{A}^2}(t'_1, t_1) \right) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - 2\mathbf{k}\mathbf{K}_{a+}^{\text{A}}(t_1, t'_1) - \frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{R}}\mathbf{K}_{a-}^{\text{A}}(t_1, t'_1) \right) \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\ & - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1\right) - e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t'_1\right) \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\ & = \tilde{I}_{a-}^{\text{C}\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) + \tilde{I}_{a-}^{\text{F}\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \end{aligned} \quad (3.45)$$

Betrachtet man die Definition (2.38) von $g^{\text{R/A}}$, so ist nun noch die Gleichung für $g^<$ von der Gleichung für $g^>$ abzuziehen und eine Deltafunktion einzufügen. Man erhält die folgende Bewegungsgleichung für die retardierte und die avancierte Greenfunktion

$$\begin{aligned}
 & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - i\hbar \frac{1}{t_1 - t'_1} \mathbf{K}_{a+}^A(t_1, t'_1) \nabla_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2m_a} \left[\left(\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} \right)^2 + k^2 - \frac{\hbar}{i} \mathbf{K}_{a-}^A(t_1, t'_1) \nabla_{\mathbf{R}} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \frac{1}{2} \left(\mathbf{K}^{A^2}(t_1, t'_1) + \mathbf{K}^{A^2}(t'_1, t_1) \right) - 2\mathbf{k} \mathbf{K}_{a+}^A(t_1, t'_1) \right] \right\} \tilde{g}_a^{R/A}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) + e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t'_1) \right\} \\
 & \quad \times \tilde{g}_a^{R/A}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \delta(t_1 - t'_1) + \tilde{I}_{a-}^{R/A}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) . \quad (3.46)
 \end{aligned}$$

Diese partielle Differentialgleichung stellt eine exakte, eichinvariante Bewegungsgleichung für $g^{R/A}$ dar. Sie ist gültig für beliebig große Feldstärken und inhomogene Potentiale. In dem Stoßterm werden die Korrelationsbeiträge des Vielteilchensystems berücksichtigt. Ausgehend von dieser Gleichung kann die eichinvariante Darstellung von $g^{R/A}$ und somit die Spektralfunktion für Vielteilchensysteme mit einer parabolischen Dispersionsrelation in einem externen Confinementpotential und einem homogenen elektrischen Feld bestimmt werden.

4. Spektralfunktion

In dem vorangegangenen Kapitel wurde mit der Gleichung (3.46) der Ausgangspunkt zur Bestimmung der Spektralfunktion geschaffen. In diesem Kapitel sollen nun einige Spektralfunktionen für Elektronen in einem elektrischen Feld und/oder einem Confinementpotential berechnet und ausgewertet werden. Für Elektronensysteme gilt $e_a = -e_o$ und $m_a = m_e$.

Um die Spektralfunktion zu bestimmen wird die Bewegungsgleichung (3.46) an das betrachtete System angepasst und analytisch gelöst. Aus der so erhaltenen retardierten und avancierten Greenfunktion ergibt sich nach

$$a(1, 1') \equiv i\hbar \{g^R(1, 1') - g^A(1, 1')\} \quad (4.1)$$

die zugehörige Spektralfunktion. Da die Bewegungsgleichung in der eichinvarianten Darstellung benutzt wird, erhält man durch dieses Vorgehen direkt eine eichinvariante Spektralfunktion.

In den folgenden Rechnungen werden die Stoßterme vernachlässigt, d.h. es werden Einteilchenspektren ohne den Einfluss möglicher Teilchenkorrelationen betrachtet. Für Systeme in starken elektrischen Feldern ist dies eine gute Näherung, da im Falle hoher Feldstärken bei elektrisch geladenen Teilchen die Wirkung des Feldes auf die Teilchen stärker ist als die Wechselwirkung der Teilchen untereinander.

4.1. Ideales Elektronengas

Es wird mit der Untersuchung des einfachsten Falls eines idealen, homogenen Elektronengases in Abwesenheit eines elektrischen Feldes und Confinementpotentials begonnen. In diesem System gilt $\mathbf{A}(t) = V(\mathbf{R}, t) = \nabla_{\mathbf{R}} = 0$. Die Bewegungsgleichung (3.46) reduziert sich auf

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{k^2}{2m} \right\} g_a^{R/A}(\mathbf{k}, \tau) = \delta(\tau) , \quad (4.2)$$

mit der Lösung $g^{R/A}(k, \tau) = \mp \frac{i}{\hbar} \Theta(\pm\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m} \tau}$ und der Spektralfunktion

$$a(k, \tau) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m} \tau}. \quad (4.3)$$

Durch eine Fouriertransformation bezüglich τ folgt die Spektralfunktion in der Energiedarstellung

$$a(k, \omega) = 2\pi\hbar \delta\left(\hbar\omega - \frac{k^2}{2m}\right). \quad (4.4)$$

Durch die Deltafunktion ist jedem Impuls \mathbf{k} eine feste Einteilchenenergie $\hbar\omega$ zugeordnet. Man erhält also das schon bekannte Energiespektrum freier Teilchen, in dem die Teilchenzustände eine unendliche Lebensdauer besitzen. Berücksichtigt man hier noch den Hartree-Beitrag der Selbstenergie, erhält man die Spektralfunktion $a(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi\hbar \delta(\hbar\omega - \epsilon(\mathbf{k}, \omega))$, wobei $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ die kinetische Energie plus die durch das Hartree-Potential zusätzlich entstandene potentielle Energie des Teilchens bezeichnet. Die einzige Veränderung gegenüber (4.4) besteht in einem Shift des Delta-Peaks, die Lebensdauer der Teilchenzustände bleibt unbegrenzt. Eine begrenzte Lebensdauer der Zustände entsteht bei der Berücksichtigung von Stoßprozessen.

4.2. Homogenes elektrisches Feld

Nun wird die Spektralfunktion eines freien Teilchensystems in einem homogenen elektrischen Feld beliebig hoher Feldstärke betrachtet. Für dieses System gilt $V(\mathbf{R}, t) = \nabla_{\mathbf{R}} = 0$. Die Bewegungsgleichung (3.46) lautet in dem Fall

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - i\hbar \frac{e_0}{c} \left[\frac{1}{\tau^2} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) - \frac{1}{2\tau} \mathbf{D}_{\mathbf{A}} \right] \nabla_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2m_e} \left[k^2 + \frac{1}{2} \frac{e_0}{c} \left(\mathbf{A}^2(t_1) + \mathbf{A}^2(t'_1) \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{e_0^2}{c^2} \frac{1}{\tau} \mathbf{D}_{\mathbf{A}} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) + \frac{e_0^2}{c^2} \frac{1}{\tau^2} \left(\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)^2 + \frac{e_0}{c} \mathbf{k} \mathbf{D}_{\mathbf{A}} - 2 \frac{e_0}{c} \frac{1}{\tau} \mathbf{k} \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right] \right\} = \delta(\tau). \quad (4.5)$$

Hier bezeichnet $\mathbf{D}_{\mathbf{A}} = \mathbf{A}(t_1) + \mathbf{A}(t'_1)$. Durch ein analoges Vorgehen, wie im Fall des idealen Elektronengases, erhält man aus (4.5) die Spektralfunktion

$$a(\mathbf{k}, \tau, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m_e} \tau} + e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m_e} \frac{e_0^2}{c^2} \left\{ \int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t})^2 - \frac{1}{\tau} \left(\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)^2 \right\}}. \quad (4.6)$$

Die erste Exponentialfunktion ist die Lösung des idealen Systems (freier Anteil), die zweite Exponentialfunktion beschreibt die Änderung des Einteilchenspektrums durch die Anwesenheit des elektrischen Feldes (feldabhängiger Anteil). Betrachtet man in der Spektralfunktion (4.6) den Limes $\mathbf{E} \rightarrow 0$, so geht der feldabhängige Anteil gegen Eins und es bleibt nur der freie Anteil – also die Lösung des idealen Elektronengases – übrig. Dieser Limes ist somit richtig in der Spektralfunktion enthalten.

Die Spektralfunktion eines Elektronensystems in einem konstanten elektrischen Feld wurde auch schon in [3], [18] oder [4] bestimmt. Hierbei wurde die normale KBE zur Berechnung der retardierten und avancierten Green-Funktion in der Wignerdarstellung benutzt und anschließend der Impuls entsprechend (3.11) ersetzt, um die eichinvariante Darstellung zu erhalten. Vergleicht man die dort bestimmte Spektralfunktion mit der hier berechneten Spektralfunktion, so sieht man, dass sie identisch sind.

Eine analytische Fouriertransformation dieser Spektralfunktion ist nicht möglich. Die Energiedarstellung wird hier daher nur für den Spezialfall eines konstanten elektrischen Feldes angegeben. Der Spezialfall eines harmonischen elektrischen Feldes soll hier nicht betrachtet werden, hierzu wird z.B. auf [3] oder [6] verwiesen.

4.2.1. Konstantes elektrisches Feld

Es wird ein konstantes elektrisches Feld $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0$ mit dem zugehörigen Vektorpotential $\mathbf{A}(t) = -c\mathbf{E}_0 t$ betrachtet. Wertet man die allgemeine Spektralfunktion (4.6) für diesen Fall aus, erhält man

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \tau + \frac{e_0^2 E_0^2}{24m_e} \tau^3 \right)}. \quad (4.7)$$

Die Energiedarstellung der Spektralfunktion ergibt sich wieder aus einer Fouriertransformation bezüglich τ . Um die Integration ausführen zu können, wird die Exponentialfunktion mit Hilfe der Euler-Formel auf eine Integration über einen Sinus und einen Kosinus umgeschrieben. Die Integration von $-\infty$ bis ∞ über den Sinus ergibt Null, da es sich um eine ungerade Funktion handelt. Für die Integration über den Kosinus erhält man unter Benutzung der Definition der Airy-Funktion

$$\frac{\pi}{[3a]^{\frac{1}{3}}} \text{Ai} \left(\frac{x}{[3a]^{\frac{1}{3}}} \right) = \int_0^{\infty} dt \cos(at^3 + xt), \quad (4.8)$$

die folgende Spektralfunktion in der Energiedarstellung

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = \frac{2\pi\hbar}{\left[\hbar^2 \frac{e_0^2 E_0^2}{8m_e}\right]^{\frac{1}{3}}} \text{Ai} \left(\frac{\frac{k^2}{2m_e} - \hbar\omega}{\left[\hbar^2 \frac{e_0^2 E_0^2}{8m_e}\right]^{\frac{1}{3}}} \right). \quad (4.9)$$

Diese Spektralfunktion ist in Abbildung 4.1 für unterschiedlich starke elektrische Felder gezeigt. Durch die Anwesenheit eines konstantes elektrisches Feldes sind zu einem festen Impuls ver-

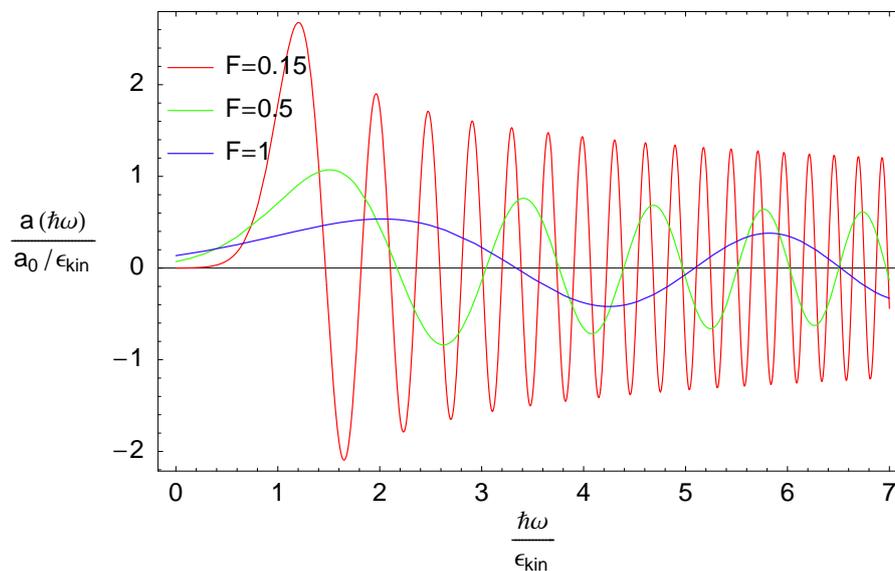


Abbildung 4.1.: Spektralfunktion (4.9) eines Elektronensystems in einem konstanten elektrischen Feld unterschiedlicher Feldstärken bei einem fixierten Impuls \mathbf{k} und zu einem festen Zeitpunkt t . $F = \hbar^2 \frac{e_0^2 E_0^2}{8m_e}$ und $a_o = 2\pi\hbar$.

schiedene Einteilchenenergien möglich. Im Gegensatz zu dem Fall des idealen Gases besitzen die Teilchen höhere Energien, die um so größer werden, je stärker das Feld ist. Gleichzeitig werden die Peaks bei einer Erhöhung des Feldes niedriger und breiter. Betrachtet man den Grenzfall $\mathbf{E} \rightarrow 0$, so schieben sich die einzelnen Maxima auf einen Peak bei der kinetischen Energie zusammen. Dieses entspricht der Spektralfunktion des idealen Elektronengases.

Ein interessanter Aspekt, der in Abbildung 4.1 deutlich wird, ist, dass die Spektralfunktion auch negative werden kann. Die Deutung der Spektralfunktion als eine Dichte, wie es aus dem Gleichgewicht bekannt ist, ist im Nichtgleichgewicht also nicht mehr anwendbar.

4.3. Schwach inhomogenes Confinementpotential

Nachdem die Spektralfunktion eines Systems in einem elektrischen Feld analysiert wurde, folgt nun die Betrachtung eines Systems in einem inhomogenen Confinementpotential. Aus der allgemeinen Bewegungsgleichung (3.46) folgt für diesen Fall die partielle Differentialgleichung

$$\begin{aligned} & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m_e} \left[\left(\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} \right)^2 + k^2 \right] \right\} g_a^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\ & - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) + e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}, t'_1) \right\} \\ & \times g_a^{\text{R/A}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \delta(t_1 - t'_1) . \end{aligned} \quad (4.10)$$

Betrachtet man ein schwach inhomogenes Confinementpotential, so ist $\nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R})$ klein und kann vernachlässigt werden. Das Potential unter dem Integral kann um \mathbf{R} entwickelt werden (s. 5.5), woraus in der lokalen Näherung $V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}) \approx V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R})$ folgt. Die Bewegungsgleichung vereinfacht sich dann zu

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{k^2}{2m_e} - \frac{1}{2} \left(V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t_1) + V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t'_1) \right) \right\} g_a^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \delta(t_1 - t'_1) . \quad (4.11)$$

Hier wurde zuerst die Exponentialfunktion ausgeklammert und anschließend die Darstellung der Deltafunktion zur Auswertung der Integrationen genutzt. Aus der Lösung dieser Differentialgleichung erhält man die Spektralfunktion

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m_e} \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t'_1}^{t_1} d\bar{t} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, \bar{t})} . \quad (4.12)$$

Auch hier läßt sich die Spektralfunktion als Produkt zweier Exponentialfunktionen darstellen, wobei die erste Exponentialfunktion wieder den freien Anteil angibt und die zweite Exponentialfunktion die durch das Confinementpotential hervorgerufene Modifikation gegenüber des Spektrums des idealen Elektronengases darstellt. Diese Struktur war auch schon bei der Spektralfunktion (4.6) bezüglich des elektrischen Feldes zu beobachten.

Betrachtet man ein schwach zeitabhängiges oder zeitunabhängiges Potential, so ist $\tau \frac{\partial V_I^{\text{eff}}}{\partial t} \ll V_I^{\text{eff}}(t)$, so dass $V_I^{\text{eff}}(t \pm \tau) \approx V_I^{\text{eff}}(t)$ angenommen werden kann. Die Zeitintegration in der Exponente läßt sich ausführen und nach einer Fouriertransformation erhält man die folgende Spektralfunktion in der Energiedarstellung

$$a(k, \omega) = 2\pi\hbar \delta\left(\hbar\omega - \frac{k^2}{2m_e} - V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t)\right) . \quad (4.13)$$

Durch die Delta-Funktion ist einem Elektron mit einem Impuls \mathbf{k} an jedem Ort eindeutig ein Energiewert zugeordnet. Die hier bestimmte Spektralfunktion ist dadurch nur für die Beschreibung von klassischen Systeme gültig, da die Heisenbergsche Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ verletzt wird.

4.4. Allgemeine Spektralfunktion

Abschließend wird die Spektralfunktion für ein Vielteilchensystem in einem homogenen elektrischen Feld und einem schwach inhomogenen Confinementpotential betrachtet. Die zu lösende Bewegungsgleichung lautet

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - i\hbar \frac{1}{\tau} \mathbf{K}_{a+}^A(t_1, t'_1) \nabla_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2m} \left[k^2 + \frac{1}{2} \left(\mathbf{K}^{A^2}(t_1, t'_1) + \mathbf{K}^{A^2}(t'_1, t_1) \right) - 2\mathbf{k} \mathbf{K}_{a+}^A(t_1, t'_1) \right] - \frac{1}{2} \left(V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t_1) + V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t'_1) \right) \right\} g_a^{\text{R/A}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \delta(t_1 - t'_1) . \quad (4.14)$$

Hier wurde wieder die Annahmen gemacht, dass das Potential nur schwach zeitabhängig ist.

Da in der partiellen Differentialgleichung keine Kopplung zwischen dem Potential und dem elektrischen Feld auftritt, ist die Spektralfunktion ein Produkt aus drei Exponentialfunktionen, in dem jeder Anteil des Systems durch eine Exponentialfunktion beschrieben wird

$$a(\mathbf{R}, \mathbf{k}, \tau, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m_e} \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{e_g^2}{c^2} \frac{1}{2m_e} \left[\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t})^2 - \frac{1}{\tau} \left(\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)^2 \right]} . \quad (4.15)$$

Mit dieser Spektralfunktion lassen sich klassische Einteilchenspektren von Elektronen in einem homogenen, zeitabhängigen elektrischen Feld beliebiger Intensität und einem schwach inhomogenen Confinementpotential beschreiben. Die Beschreibung von elektrischen Feldern beliebig hoher Intensität setzt hier keine Störungsentwicklung voraus. Um einen analytischen Ausdruck für die Spektralfunktion in der Energiedarstellung zu erhalten, muss – wie schon in Abschnitt (4.2) diskutiert – die konkrete Darstellung eines elektrischen Feldes eingesetzt werden.

Es wurde in diesem Kapitel deutlich, dass die berechneten Spektralfunktionen durch die Vertauschung des Orts- und Impulsoperators nur für klassische Systeme gültig sind. Im Rahmen der hier gemachten Näherungen werden in den Spektralfunktionen also keine Quanteneffekte berücksichtigt. Im nächsten Kapitel wird daher der Ansatz des Quantenpotentials vorgestellt, mit dem aus den klassischen Spektralfunktionen quantenmechanische Spektralfunktionen abgeleitet werden können.

5. Quantenpotential

Bei der bisherigen Betrachtung der Spektralfunktionen von Elektronensystemen in einem starken elektrischen Feld und einem schwach inhomogenen Confinementpotential war festzustellen, dass die erhaltenen Spektralfunktionen nur für die Beschreibung von klassischen Systemen gültig sind, da bei ihnen der Ortsoperator und der Impulsoperator kommutieren. In diesem Abschnitt sollen nun Spektralfunktionen hergeleitet werden, die auch für die Beschreibung von inhomogenen, quantenmechanischen Systemen geeignet sind. Um die klassische Beschreibung in eine quantenmechanische Beschreibung umzuwandeln, wird ein Quantenpotential benutzt. Bei diesem Ansatz werden weiterhin die klassischen Gleichungen benutzt, das ursprüngliche Potential wird aber durch ein effektives Potential ersetzt, das auch zusätzliche Quanteneffekte berücksichtigt. Dieses effektive Potential wird daher als Quantenpotential bezeichnet.

Die bisherige Anwendung des Quantenpotentials bezieht sich – wie in der Einleitung bereits erwähnt – weitestgehend auf Systeme im Gleichgewicht. Hier soll die Anwendung des Quantenpotentials auf Systeme im Nichtgleichgewicht verallgemeinert werden. Dazu wird das ursprüngliche Potential in der retardierten und avancierten Green-Funktion, und der zugehörigen Spektralfunktion, durch ein impulsabhängiges Quantenpotential $V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t)$ ersetzt, dessen genaue Struktur anschließend bestimmt wird. Dieses Quantenpotential wird mit einem von Gardner und Ringhofer [24] berechneten Quantenpotential verglichen. Setzt man das Quantenpotential in die Spektralfunktion ein, erhält man eine Spektralfunktion, die auch Quanteneffekte berücksichtigt. Durch die zusätzliche Impulsabhängigkeit des Potentials wird die Heisenbergsche Unschärferelation nicht mehr verletzt.

Für die von dem Quantenpotential abhängige retardierte Greenfunktion wird der folgende Ansatz gemacht

$$g^{\text{R}}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, \tau, t) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m_e} \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{e_0^2}{c^2} \frac{1}{2m_e} \left[\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t})^2 - \frac{1}{\tau} \left(\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)^2 \right]}. \quad (5.1)$$

und somit gilt für die Spektralfunktion

$$a(\mathbf{R}, \mathbf{k}, \tau, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m_e} \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{e_0^2}{c^2} \frac{1}{2m_e} \left[\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t})^2 - \frac{1}{\tau} \left(\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)^2 \right]} . \quad (5.2)$$

Hier wurde die Spektralfunktion (4.15) benutzt, die klassische Systeme beschreibt, und das ursprüngliche Potential $V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t)$ durch das Quantenpotential ersetzt. Die Greenfunktion stellt den Ausgangspunkt für die Bestimmung des Quantenpotentials und der quantenmechanischen Spektralfunktion dar. Mit dem Begriff "quantenmechanische Spektralfunktion" ist im Folgenden stets die Spektralfunktion mit dem Quantenpotential und mit "klassische Spektralfunktion" die Spektralfunktion mit dem ursprünglichen Potential gemeint.

5.1. Confinementpotential

Es wird zuerst die Spektralfunktion für ein quantenmechanisches Vielteilchensystem in einem Confinementpotential ohne äußeres elektrisches Feld betrachtet. Um eine Bestimmungsgleichung für das Quantenpotential abzuleiten, wird die retardierte Greenfunktion (5.1) ohne den feldabhängigen Anteil in eine Bewegungsgleichung (4.10) eingesetzt

$$\begin{aligned} & - \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m_e} \left[\left(\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} \right)^2 + k^2 \right] \right\} \frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{k^2}{2m_e} + V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \right) \tau} \\ & + \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \cos\left(\mathbf{r} \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_1}{\hbar}\right) V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) \frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{k_1^2}{2m_e} + V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \right) \tau} = \delta(\tau) . \end{aligned} \quad (5.3)$$

Hierbei wurden die beiden Exponentialfunktionen unter dem Integral zu einem Kosinus zusammengezogen, da das Potential als schwach zeitabhängig angenommen wird. Lässt man die Operatoren auf die Exponentialfunktionen wirken, erhält man die Bestimmungsgleichung für das Quantenpotential

$$\begin{aligned} & \left[V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) - \frac{1}{8m_e} \left(i\hbar \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \tau + [\nabla_{\mathbf{R}} V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t)]^2 \tau^2 \right) \right] a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \\ & - \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \cos\left(\mathbf{r} \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_1}{\hbar}\right) V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) a(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, \tau, t) = 0 . \end{aligned} \quad (5.4)$$

Da ein schwach inhomogenes Confinementpotential betrachtet wird, kann das Potential um die Schwerpunktkoordinate \mathbf{R} entwickelt werden

$$V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} \pm \frac{\mathbf{r}}{2}\right) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(\pm 1)^l}{2^l l!} \frac{\partial V_I(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}_I \partial \mathbf{R}_j \cdots \partial \mathbf{R}_l} \mathbf{r}_i \mathbf{r}_j \cdots \mathbf{r}_l , \quad (5.5)$$

womit man für das Integral die Entwicklung

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \cos\left(\mathbf{r} \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_1}{\hbar}\right) V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \\ = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(i\hbar)^{2l}}{2^{2l} 2l!} \frac{\partial^{2l} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t)}{\partial \mathbf{R}_i \cdots \partial \mathbf{R}_{2l}} \frac{\partial^{2l}}{\partial \mathbf{k}_i \cdots \partial \mathbf{k}_{2l}} a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \end{aligned} \quad (5.6)$$

erhält. In der Näherung nullter Ordnung, welche der lokalen Näherung entspricht, lautet der Beitrag des Integrals

$$\int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \cos\left(\mathbf{r} \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_1}{\hbar}\right) V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) a(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, \tau, t) \rightarrow V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t). \quad (5.7)$$

Das Integral wird in der Bestimmungsgleichung (5.4) durch seine Entwicklung in nullter Ordnung ersetzt. In diesem Fall ist zu berücksichtigen, dass für eine konsistente Darstellung der Bestimmungsgleichung in dieser Näherung auch alle restlichen Gradiententerme als vernachlässigbar klein angesehen werden müssen, d.h. $\nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \approx 0$. Es folgt das Quantenpotential in nullter Näherung:

$$V_Q^{\text{eff}(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t). \quad (5.8)$$

Man erhält das schon bekannte, klassische Ergebnis des vorigen Kapitels. Um eine quantenmechanische Korrektur des Potentials zu erhalten, muss das Integral also mindestens bis zur ersten Ordnung entwickelt werden.

Für die Bestimmung des Quantenpotentials in der Näherung höherer Ordnungen wird ein Iterationsverfahren benutzt. Hierbei wird wie folgt vorgegangen

$$V_Q^{\text{eff}(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) + F(V_Q^{\text{eff}(n-1)}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t)), \quad (5.9)$$

mit

$$\begin{aligned} F(V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t)) \tilde{g}^{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = \left\{ \frac{1}{8m_e} \left(i\hbar \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \tau + [\nabla_{\mathbf{R}} V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t)]^2 \tau^2 \right) \right. \\ \left. - V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) + \int d\mathbf{r} \cos\left(\mathbf{r} \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_1}{\hbar}\right) V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) \right\} a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Um das Quantenpotential in der Näherung 1.Ordnung zu erhalten, wird zuerst in (5.10) für das Integral die Entwicklung erster Ordnung eingesetzt, d.h.

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \cos\left(\mathbf{r} \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_1}{\hbar}\right) V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) a(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, \tau, t) \\ \rightarrow \left(V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) - \frac{\hbar^2}{8} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \nabla_{\mathbf{k}}^2 \right) a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Man erkennt, dass der zweite Term der Entwicklung von \hbar^2 abhängig und nichtlokal bezüglich des Ortes ist. Er stellt somit einen quantenmechanischen Anteil dar.

Nun wird noch in (5.10) für das Quantenpotential das Quantenpotential nullter Ordnung (5.8) eingesetzt und der Laplaceoperator des Impulses auf die Spektralfunktion (5.2) ohne den feldabhängigen Anteil angewendet. Aus (5.9) entsteht dann das Quantenpotential in erster Ordnung

$$V_Q^{\text{eff}(1)}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, \tau, t) = V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) + \delta V_Q(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t)\tau^2, \quad (5.12)$$

mit

$$\delta V_Q(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = \frac{1}{4m_e} \frac{i\hbar}{\tau} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) + \frac{1}{8m_e} \left\{ [\nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t)]^2 + \frac{k^2}{m_e} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \right\}. \quad (5.13)$$

Das Quantenpotential kann als Summe des klassischen Potentials V_I^{eff} und eines Korrekturterms δV_Q dargestellt werden. Auffällig ist, dass in der Korrektur durch die Ableitungen nach \mathbf{R} nur nichtlokale Terme vorkommen. Hier wird der quantenmechanische Charakter deutlich sichtbar, weil sich bei einer quantenmechanischen Betrachtungsweise die Elektronen nicht mehr wie Punktteilchen verhalten, sondern durch eine delokalisierte Wellenfunktion beschrieben werden. Man kann nicht mehr von einem bestimmten Ort reden, an dem sich das Elektron in dem Potential befindet, vielmehr spürt es durch seine Ausdehnung und die damit verbundene Dichteverteilung eine Überlagerung verschiedener Werte des Potentials. Bei der Methode des Quantenpotentials, bei der die Teilchen weiterhin durch eine klassische Spektralfunktion beschrieben werden und die Quantenkorrekturen in dem neuen Potential enthalten sind, kann man sich diesen Effekt derart vorstellen, dass ein Punktteilchen an einem bestimmten Ort \mathbf{R} nicht nur die Wirkung des Potentials an genau diesem Punkt, sondern auch aus der Umgebung dieses Punktes spürt.

Betrachtet man die Quantenkorrekturen (5.13) des Potentials, so sieht man, dass es sich bei dem ersten Term um einen imaginären Term handelt. Imaginäre Terme werden gewöhnlich durch Stöße der Teilchen hervorgerufen und verursachen eine Dämpfung der Spektralfunktion. Dieser Term schwächt wegen seines Vorzeichens die Spektralfunktion allerdings nicht ab, sondern lässt sie anwachsen. Es handelt sich hierbei also um ein nicht begründeten Beitrag, der auf einen Mangel des Ansatzes (5.1) schließen lässt. Betrachtet man diesen Term allerdings im Verhältnis

zum letzten Term in (5.13), so erkennt man, dass er, bedingt durch \hbar , sehr viel kleiner ist und vernachlässigt werden kann.

Weiterhin ist zu beachten, dass dieses Ergebnis durch die Anwendung des Iterationsverfahrens nur gültig ist, wenn der Korrekturterm (5.13) klein gegenüber dem ursprünglichen Potential ist. Ist dies nicht der Fall, bleibt die Möglichkeit einer numerischen Lösung der Gleichung (5.4).

Nachdem das Quantenpotential bekannt ist, kann die resultierende Spektralfunktion unter Benutzung des Ansatzes (5.2) bestimmt werden

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \left\{ \left(\frac{k^2}{2m_e} + V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \right) \tau + V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \tau^3 \right\}}. \quad (5.14)$$

Sie hat die gleiche Struktur wie die Spektralfunktion (4.7), die nicht wechselwirkende Elektronen in einem konstanten elektrischen Feld beschreibt. Die Fouriertransformation zum Übergang auf die Energiedarstellung wird daher analog zu (4.7) durchgeführt und ergibt

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = \frac{2\pi\hbar}{[3\hbar^2 \delta V_Q]^{\frac{1}{3}}} \text{Ai} \left(\frac{\frac{k^2}{2m_e} + V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) - \hbar\omega}{[3\hbar^2 \delta V_Q]^{\frac{1}{3}}} \right). \quad (5.15)$$

Die Spektralfunktion wird jetzt nicht mehr durch eine Deltafunktion, sondern durch eine Airy-Funktion beschrieben. Das Quantenpotential verschmiert den scharfen Delta-Peak und sorgt für die Entstehung zusätzlicher Nebenpeaks, wodurch für ein Teilchen an einem festen Ort mit einem festen Impulse verschiedene Energiewerte möglich sind und das Heisenbergsche Unschärfeprinzip nicht mehr verletzt wird.

5.2. Confinementpotential und elektrisches Feld

Das betrachtete System befindet sich nun zusätzlich zu dem schwach inhomogenen Confinementpotential auch noch in einem homogenen elektrischen Feld. Es wird entsprechend des vorigen Abschnitts vorgegangen mit dem einzigen Unterschied, dass jetzt die komplette Greenfunktion (5.1) zu betrachten ist und diese in die feldabhängige Bewegungsgleichung (4.5) eingesetzt wird.

Die resultierende Bestimmungsgleichung für das Quantenpotential lautet

$$\begin{aligned} & \left\{ V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) - \frac{1}{8m_e} \left(i\hbar \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) + \tau^2 [\nabla_{\mathbf{R}} V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t)]^2 \right) \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{4m_e} \frac{e_0}{c} \tau \left(\mathbf{A}(t_1) - \mathbf{A}(t'_1) \right) \nabla_{\mathbf{R}} V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \right\} a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \\ & \quad - \int d\mathbf{r} \cos\left(\mathbf{r} \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_1}{\hbar}\right) V_I^{\text{eff}}\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = 0. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Setzt man die Entwicklung des Integrals in nullter Näherung ein und vernachlässigt alle Gradiententerme, erhält man das Quantenpotential in nullter Näherung

$$V_Q^{\text{eff}(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t). \quad (5.17)$$

Auch hier entspricht die nullte Näherung wieder dem klassischen Ergebnis.

Unter Benutzung des schon beschriebenen Iterationsverfahrens erhält man aus dem ersten Iterationsschritt das Quantenpotential

$$V_Q^{\text{eff}(1)}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, \tau, t; \mathbf{A}) = V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) + \delta V_Q(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t; \mathbf{A}) \tau^2, \quad (5.18)$$

mit

$$\begin{aligned} \delta V_Q(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t; \mathbf{E}) &= \frac{1}{4m_e} \frac{i\hbar}{\tau} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) + \frac{1}{8m_e} \left\{ [\nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t)]^2 + \frac{k^2}{m_e} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \right\} \\ & \quad + \frac{e_0}{4m_e \tau} \nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \int_{t'_1}^{t_1} d\bar{t} \mathbf{E}(\bar{t}). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Die einzige Änderung gegenüber dem Quantenpotential (5.13) für ein feldfreies System besteht in dem zusätzlichen feldabhängigen Term. Auch dieser Term ist nicht lokal und somit quantenmechanischen Ursprungs.

Hiermit erhält man nach (5.2) die quantenmechanische Spektralfunktion

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t; \mathbf{A}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \left\{ \left(\frac{k^2}{2m_e} + V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \right) \tau + \delta V_Q(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) \tau^3 \right\}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{e_0^2}{c^2} \frac{1}{2m_e} \left[\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t})^2 - \frac{1}{\tau} \left(\int_{t-\frac{\tau}{2}}^{t+\frac{\tau}{2}} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)^2 \right]}. \quad (5.20)$$

Die Spektralfunktion in dieser allgemeinen Darstellung läßt sich durch die Abhängigkeit von dem Vektorpotential (s. Abschnitt 4.2) im allgemeinen Fall nicht mehr analytisch fouriertransformieren. Es wird daher nur die Energiedarstellung für den Spezialfall eines konstanten elektrischen Feldes betrachtet. Die Integration über das Vektorpotential und die anschließende Fouriertransformation verlaufen analog zu (4.7). Es folgt die Spektralfunktion für Teilchen in einem

konstanten elektrischen Feld und einem schwach inhomogenen Confinementpotential unter Berücksichtigung von Quanteneffekten

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = \frac{2\pi\hbar}{\alpha} \text{Ai} \left(\frac{\frac{k^2}{2m_e} + V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) - \hbar\omega}{\alpha} \right), \quad (5.21)$$

mit

$$\alpha = \left[3\hbar^2 \left(\delta V_Q(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t) + \frac{e_0^2 E_0^2}{24m_e} \right) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (5.22)$$

Diese Spektralfunktion ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Für die Graphik wurde die Spektralfunktion in der folgenden Form benutzt

$$\frac{a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t)}{a_0/\epsilon} = \frac{1}{y} \text{Ai} \left(\frac{1-x}{y} \right), \quad (5.23)$$

in der $\epsilon = \frac{k^2}{2m_e} + V_I(\mathbf{R})$, $x = \hbar\omega/\epsilon$ und $y = \alpha/\epsilon$ ist.

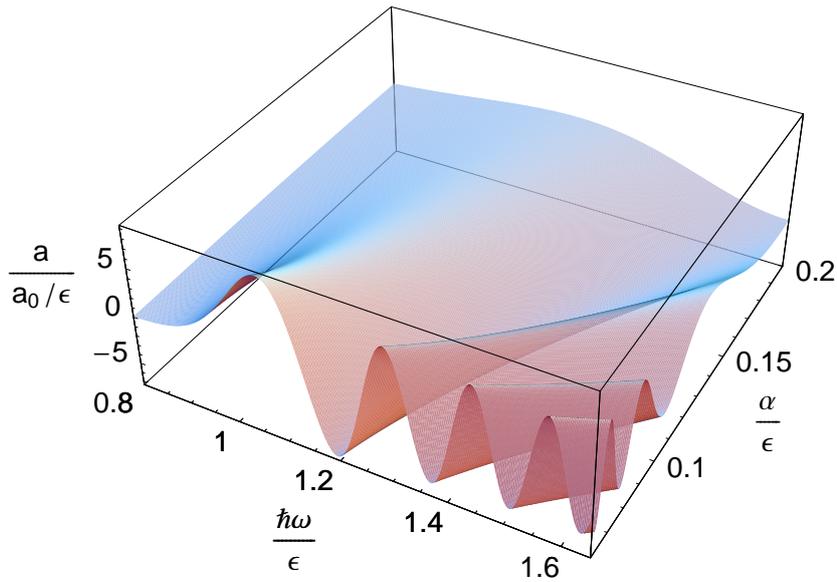


Abbildung 5.1.: Spektralfunktion $a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t; \alpha)$ eines Elektronensystems in einem konstanten elektrischen Feld und einem schwach inhomogenen Confinementpotential inklusive Quantenkorrektur zu einem festen Zeitpunkt t mit $a_o = 2\pi\hbar$.

Je größer α ist, desto weiter nach rechts verschiebt sich der Hauptpeak der Spektralfunktion. Dieser Trend zu größeren Energien ist leicht zu verstehen. Zum einen kommt es zu einer Beschleunigung der Elektronen durch das elektrische Feld, zum anderen (z.B. bei $\mathbf{E} = 0$) wächst

die Gesamtenergie der Elektronen durch das Quantenpotential. Das Quantenpotential führt zu einer Kompression der Wellenfunktion, was in einer Erhöhung der kinetischen Energie resultiert. Zusätzlich zu dem Hauptpeak entstehen Seitenpeaks, die sich mit wachsendem α ebenfalls zu größeren Energien hin verschieben. Es ist außerdem zu erkennen, dass sich mit wachsendem α die Höhe der Peaks verringert, sie sich dafür aber verbreitern (Vgl. Abbildung 4.1). Bei großen α kann dies zu der Existenz negativer Energien ($\hbar\omega < 0$) führen.

Im Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ fallen alle Peaks mit dem Hauptpeak zusammen und die Spektralfunktion wird zu einer Deltafunktion. An der Formel (5.21) wird dieser Effekt unter Benutzung der Beziehung $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \text{Ai}(\frac{x}{\varepsilon}) = \delta(x)$ deutlich.

5.3. Vergleich mit dem Quantenpotential von Ringhofer und Gardener

Es soll ein Vergleich des erhaltenen Quantenpotentials (5.18) mit einem für Gleichgewichtssituationen bestimmten Quantenpotential durchgeführt werden. Es wird dazu das Quantenpotential von Ringhofer und Gardener (s. [24], S.163, (43)) benutzt. Dieses lautet

$$V_Q(\beta, \mathbf{R}) = \frac{1}{3} V_I(\mathbf{R}) + \frac{\hbar^2 \beta}{30m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I(\mathbf{R}) + O(\hbar^4). \quad (5.24)$$

Zur Herleitung dieses Quantenpotentials wurden in der klassischen Dichtematrix $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ das ursprüngliche Potential durch ein effektives (Quanten-)Potential ersetzt. Mit der daraus erhaltenen Dichtematrix wurden die quantenmechanischen Bloch-Gleichungen gelöst. Das entstandene Quantenpotential wurde nur auf der Diagonalen (d.h bei $\mathbf{r} = \mathbf{r}' = \mathbf{R}$) betrachtet und anschließend um die Schwerpunktkoordinate \mathbf{R} entwickelt. Das Quantenpotential beschreibt ein System im thermodynamischen Gleichgewicht und ist daher unabhängig von dem Impuls und der Zeit. Um das hier erhaltene Quantenpotential (5.18) mit (5.24) vergleichen zu können, ist daher eine Mittelung bezüglich des Impulses mit einer Gleichgewichtsverteilung durchzuführen. Diese Mittelung wirkt sich nur auf den zweiten reellen Term in (5.19) aus und soll hier kurz abgeschätzt werden. Bei der Mittelung über eine Maxwellverteilung geht $\frac{k^2}{2m_e}$ in $\frac{3}{2}k_B T = \frac{3}{2} \frac{1}{\beta}$ mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$ über. Es ist aber auch noch ein τ^2 enthalten, für das $\tau \sim \hbar\beta$ gilt. Der zweite reelle Term in (5.18) lautet also nach der Mittelung $\sim \frac{1}{m_e} \frac{\hbar^2}{k_B T} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t)$. Führt man nun den Vergleich durch, so erkennt man, dass das Quantenpotential (5.24) genau wie das hier bestimmte Quantenpotential (5.19) eine Summe des ursprünglichen Potentials und einer nicht lokalen Quantenkorrektur

darstellt. Das ursprüngliche Potential, sowie der Korrekturterm $\sim \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I(\mathbf{R})$ sind auch in dem hier bestimmten Quantenpotential (5.18) vorhanden und stimmen bis auf die Vorfaktoren (die bei dieser kurzen Abschätzung nicht mitbetrachtet wurden) überein. Das hier bestimmte Quantenpotential enthält allerdings noch zwei weitere Terme, da es Systeme im Nichtgleichgewicht beschreibt und somit viel allgemeiner als (5.24) ist.

Es ist noch zu erwähnen, dass durch die verschiedenen Ansätze der Ableitungen der beiden Quantenpotentiale ein großer Unterschied zwischen ihnen besteht: Das Quantenpotential von Ringhofer und Gardener wurde durch eine Ersetzung des Potentials in der Dichtematrix entwickelt. Dadurch kann das klassische Potential im Hamiltonoperator direkt durch das Quantenpotential ersetzt werden, d.h. $\hat{H}_{klas} \rightarrow \hat{H}_Q$. Der Gradient des Quantenpotentials kann als eine quantenmechanische Kraft gedeutet werden, welche auf die Teilchen des Systems wirkt und z.B. direkt in Molekulardynamiksimulationen benutzt werden kann. Für die Bestimmung des Quantenpotentials (5.18) hingegen, wurde das Potential in der Spektralfunktion ersetzt. Durch dieses Vorgehen kann das Quantenpotential nicht direkt in den Hamiltonoperator eingesetzt werden, sondern führt zu einer Renormierung der Einteilchenenergie $\epsilon \rightarrow \epsilon_Q$. Dieser Vergleich ist daher nur als ein erster Vergleich zu sehen, bei dem nicht zwangsläufig eine Übereinstimmung vorliegen muss. Die gute Übereinstimmung ist daher um so interessanter.

5.4. Auswertung des Quantenpotentials für ein Oszillatorpotential

Das Quantenpotential wird für den Fall eines Vielteilchensystem in einem externen Oszillatorpotential $V(\mathbf{R}, t) = \frac{m}{2}\Omega^2\mathbf{R}^2$ und einem konstanten elektrischen Feld genauer analysiert. Der Hartree-Beitrag wird hier nicht mitbetrachtet. Ein besonderes Interesse besteht dabei an den Grenzen, in denen die in der Rechnung gemachten Näherungen ihre Gültigkeit behalten. Es wird hier ein harmonisches Oszillatorpotential betrachtet, was keine qualitative Einschränkung bedeutet, da im allgemeinen ein Potential mit einem Minimum, in der direkten Umgebung des Minimums, durch ein Oszillatorpotential approximiert werden kann.

Das Quantenpotential (5.18) lautet ausgewertet für ein harmonisches Oszillatorpotential

$$V_Q^{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) = \frac{m}{2}\Omega^2 R^2 + \frac{1}{4}\Omega^2 \left(\frac{3k^2}{2m} + \frac{m}{2}\Omega^2 R^2 + e_0 \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{R} \right) \tau^2. \quad (5.25)$$

Mit diesem Quantenpotential erhält man die Spektralfunktion

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = \frac{2\pi\hbar}{\left[3\hbar^2 \left(\frac{1}{4}\Omega^2 \{3\epsilon_{\text{kin}} + V_I(\mathbf{R}, t) + e_0\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{R}\} + \frac{e_0^2 E_0^2}{24m_e}\right)\right]^{\frac{1}{3}}} \times \text{Ai} \left(\frac{\epsilon_{\text{kin}} + V_I(\mathbf{R}, t) - \hbar\omega}{\left[3\hbar^2 \left(\frac{1}{4}\Omega^2 \{3\epsilon_{\text{kin}} + V_I(\mathbf{R}, t) + e_0\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{R}\} + \frac{e_0^2 E_0^2}{24m_e}\right)\right]^{\frac{1}{3}}} \right), \quad (5.26)$$

welche das Einteilchenspektrum von freien Elektronen in einem parabolischen Potential und einem konstanten elektrischen Feld unter Berücksichtigung von Quanteneffekten beschreibt.

Durch die Anwendung eines Iterationsverfahrens muss gewährleistet sein, dass der Korrekturterm des Quantenpotentials sehr viel kleiner ist als das ursprüngliche Potential, d.h.

$$V(\mathbf{R}, t) \gg \delta V_Q(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t; \mathbf{A})\tau^2. \quad (5.27)$$

Aus dieser Ungleichung werden jetzt für den Fall eines konstanten elektrischen Feldes und eines Oszillatorpotentials Bedingungen ermittelt, die für eine korrekte Benutzung des Quantenpotentials erfüllt sein müssen. Hierzu wird jeder reelle Korrekturterm aus (5.19) einzeln gegen das ursprüngliche Potential abgeschätzt. Da hier speziell der Fall eines schwach inhomogenen Potentials betrachtet wird, ist man vor allem an einer oberen Grenze der Frequenz des Potentials, mit der das Quantenpotential seine Gültigkeit behält, interessiert.

- 1.Term: Es wird gefordert

$$\frac{\tau^2}{8m_e} \left[\nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, T) \right]^2 = \frac{\tau^2}{8} m_e \Omega^4 R^2 \ll \frac{m_e}{2} \Omega^2 R^2. \quad (5.28)$$

Dieser Ausdruck läßt sich zusammenkürzen zu

$$\frac{1}{4}\tau^2\Omega^2 \ll 1. \quad (5.29)$$

Um τ abzuschätzen, wird die Energie-Zeit-Unschärferelation $\hbar \leq \tau \epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, \mathbf{R})$ benutzt. Setzt man diese in die obige Ungleichung ein, leitet sich die folgende Bedingung für die Oszillatorfrequenz Ω ab

$$\hbar\Omega \ll 2\epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}). \quad (5.30)$$

Diese Relation kann für bestimmte Punkte verletzt werden (z.B. $\mathbf{k} = 0, \mathbf{R} = 0$). Es ist hier aber nicht die kinetische Energie an einem bestimmten Punkt, sondern die mittlere kinetische Energie der Teilchen des Systems zu betrachten, d.h. $\langle k^2/2m_e \rangle = \frac{3}{2}k_B T$. Bezüglich

der potentiellen Energie ist zu beachten, dass das Quantenpotential eingeführt wurde, um zusätzliche Quanteneffekte zu berücksichtigen. In diesem Fall kann man allerdings nicht mehr von einem Teilchen an einem bestimmten Ort sprechen, sondern von einem Teilchen mit einer quantenmechanischen Ausdehnung. Dieser Effekt wurde schon in der Delokalisierung der Korrekturterme deutlich. Für \mathbf{R} wird hier daher die charakteristische Oszillatorlänge $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}}$ eingesetzt. Die Bedingung lautet dann

$$\hbar\Omega \ll 2\overline{\epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, x_0)}. \quad (5.31)$$

in der $\overline{\epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, x_0)} = \frac{3}{2}k_B T + \frac{m_e}{2}\Omega^2 x_0^2$ bedeutet.

- 2.Term: Es wird gefordert

$$\frac{\tau^2}{8m_e} \frac{k^2}{m_e} \nabla_{\mathbf{R}}^2 V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, T) = \frac{3}{4}\tau^2 \epsilon_{\text{kin}}(k) \Omega^2 \ll \frac{m}{2}\Omega^2 R^2. \quad (5.32)$$

Auch hier wird wieder die Energie-Zeit-Unschärferelation benutzt. Dieser Ausdruck läßt sich dann umformen zu

$$\frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{m_e R^2} \epsilon_{\text{kin}}(k) \ll \epsilon_{\text{ges}}^2(\mathbf{k}, \mathbf{R}). \quad (5.33)$$

Benutzt man – aus den gleichen Gründen wie in Term 1 – für \mathbf{R} wieder x_0 , erhält man

$$\frac{3}{2} \epsilon_{\text{kin}}(\mathbf{k}) \hbar\Omega \ll \epsilon_{\text{ges}}^2(\mathbf{k}, x_0). \quad (5.34)$$

Die Gesamtenergie besteht aus einem kinetischen und einem potentiellen Anteil. Für die kinetische Energie gilt daher $\epsilon_{\text{kin}}(\mathbf{k}) < \epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, \mathbf{R})$. Die kinetische Energie kann somit herausgekürzt werden, woraus die folgende Bedingung entsteht

$$\hbar\Omega \ll \frac{2}{3}\overline{\epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, x_0)}. \quad (5.35)$$

- 3.Term:

Dieser Term ist nur in dem Quantenpotential enthalten, wenn sich das System, zusätzlich zu dem Confinementpotential, in einem homogenen elektrischen Feld befindet. Es wird hier der Fall eines konstanten elektrischen Feldes betrachtet. Die Gesamtenergie lautet dann Fall $\epsilon_{\text{ges}} = \epsilon_{\text{kin}} + \epsilon_{\text{pot}} + \epsilon_{\text{E}}$, wobei $\epsilon_{\text{E}} = e_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{R}$ und es gilt $(\mathbf{A}(t_1) - \mathbf{A}(t'_1)) = -c \mathbf{E}_0 \tau$. Daraus folgt

$$\frac{e_0}{4m_e} \tau^2 \mathbf{E}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, T) = \frac{e_0}{4} \tau^2 \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{R} \Omega^2 \ll \frac{m_e}{2} \Omega^2 R^2. \quad (5.36)$$

Das Skalarprodukt kann als $E_0 R \cos \vartheta$ geschrieben werden, wobei ϑ den eingeschlossenen Winkel bezeichnet. Der Kosinus variiert zwischen 1 und -1. Bei der Abschätzung ist jeweils der Wert einzusetzen, mit dem die linke Seite größtmöglich ist. Welcher der beiden Werte zu wählen ist, hängt von dem Vorzeichen der Ladung ab. Ansonsten wird dieser Term wie der vorangegangene ausgewertet. Es folgt

$$\left| \frac{1}{2} e_a E_0 x_0 \right| \ll \overline{\epsilon_{\text{ges}}^2(\mathbf{k}, \mathbf{R})}. \quad (5.37)$$

Auch hier ist bezüglich der Feldenergie wieder die Ausdehnung eines quantenmechanischen Teilchens zu beachten. Es ist somit das gleiche Argument für die Feldenergie zu benutzen, welches in den vorigen Termen für das Potential benutzt wurde. Daraus folgt die Bedingung

$$\hbar\Omega \ll 2 \overline{\epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, \mathbf{x}_0)}, \quad (5.38)$$

mit $\overline{\epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, x_0)} = \frac{3}{2} k_B T + \frac{m_e}{2} \Omega^2 x_0^2 + |e_0 E x_0|$

Aus diesen drei Bedingungen wird ersichtlich, dass für die Gültigkeit des Quantenpotentials die klassische Gesamtenergie $\overline{\epsilon_{\text{ges}}(\mathbf{k}, x_0)}$ des Teilchens sehr viel größer sein muss, als der Abstand der Energieniveaus $\hbar\Omega$ des quantenmechanischen Oszillators. Dieses ist im Allgemeinen für ein schwach inhomogenes Potential erfüllt.

6. Zustandsdichte

In den beiden vorangegangenen Kapiteln wurde deutlich, dass die Spektralfunktion im Nichtgleichgewicht negative Werte annehmen kann. Im Gegensatz zu der Spektralfunktion, die zur Beschreibung im Gleichgewicht benutzt wird, kann sie also nicht unmittelbar als eine Dichte oder Wahrscheinlichkeitsverteilung gedeutet werden. Es wird daher zum Vergleich mit Experimenten eine neue physikalische Größe benötigt. Hierzu wird aus der Spektralfunktion die Zustandsdichte

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\operatorname{Tr} g^R(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega) \right] = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{R}} a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{R} a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega) \quad (6.1)$$

abgeleitet. Die Zustandsdichte gibt die Anzahl der Einteilchenzustände pro Energieintervall an.

In den vorigen Kapiteln erfolgte eine Beschränkung auf Elektronensysteme, deren Teilchenenergien einer parabolischen Dispersionsrelation $\epsilon = \frac{k^2}{2m}$ unterliegen. Dieses soll auch in diesem Kapitel beibehalten werden. Im dreidimensionalen Fall kann die Integration über den Impuls dann wie folgt durch eine Integration über die Energie ersetzt werden

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{k} a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega) &= \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^4} \int d\mathbf{R} \int dk k^2 a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega) \\ &= \frac{\rho_0}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{R} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} a(\epsilon, \mathbf{R}, \omega) , \end{aligned} \quad (6.2)$$

mit $\rho_0 = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} m \sqrt{2m}$.

Den Ausgangspunkt dieses Kapitels stellen die in den Kapiteln 4 und 5 berechneten Spektralfunktionen in der Energiedarstellung dar. Aus diesen Spektralfunktionen wird durch eine Integration über den Phasenraum die Zustandsdichte des jeweiligen Systems bestimmt. Da die Spektralfunktionen ohne die Berücksichtigung der Stoßintegrale bestimmt wurden, werden auch in den Zustanddichten keine Korrelationen der Teilchen untereinander berücksichtigt. Als Confinementpotential wird in diesem Kapitel stets ein harmonisches Oszillatorpotential verwendet.

6.1. Konstantes elektrisches Feld ohne Confinementpotential

Die Spektralfunktion im Falle eines konstanten elektrischen Felds lautet

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = \frac{2\pi\hbar}{\alpha} \text{Ai} \left(\frac{\epsilon_{\text{kin}} - \hbar\omega}{\alpha} \right), \quad (6.3)$$

wobei $\alpha = [\hbar^2 \frac{\epsilon_0^2 E_0^2}{8m}]^{\frac{1}{3}}$ und ϵ_{kin} die kinetische Energie $\frac{k^2}{2m_e}$ der Elektronen bezeichnet.

Man erhält aus dieser Spektralfunktion unter Benutzung der Substitution $z = \frac{\epsilon}{\alpha}$ die folgende Zustandsdichte

$$\rho(\omega) = \rho_0 V \alpha^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dz z^{\frac{1}{2}} \text{Ai}(z + x). \quad (6.4)$$

Hier ist $x = -\frac{\hbar\omega}{\alpha}$ und V bezeichnet das Volumen des Systems, welches durch die Integration über \mathbf{R} entstanden ist. Dieses Integral kann analytisch Verwendung der Rechenregeln für die Airy-Funktion in mehreren Schritten gelöst werden. Der Lösungsweg ist im Appendix A angegeben.

Man erhält die Zustandsdichte

$$\frac{\rho(\omega, \mathbf{R})}{\rho_0 V} = \frac{\pi}{2^{\frac{1}{3}}} \alpha^{\frac{1}{2}} \left\{ \text{Ai}^2 \left(-\frac{\hbar\omega}{2^{\frac{2}{3}} \alpha} \right) - \frac{\hbar\omega}{2^{\frac{2}{3}} \alpha} \text{Ai}^2 \left(-\frac{\hbar\omega}{2^{\frac{2}{3}} \alpha} \right) \right\}. \quad (6.5)$$

Dieses Ergebnis unterscheidet sich von dem Ergebnis von Haug und Jauho [3] lediglich um eine Konstante. Die Zustandsdichte ist hier ohne Berücksichtigung möglicher Teilchenkorrelationen abgeleitet worden. In [8] wird die Zustandsdichte für ein System in einem konstanten elektrischen Feld unter Einbeziehung möglicher Teilchenstöße bestimmt.

Für die Zustandsdichte eines Systems in einem harmonischen Feld wird auf [3] und [7] verwiesen.

6.2. Klassische Zustandsdichten

Es sollen nun die klassischen Zustandsdichten eines Elektronensystems in einem harmonischen Oszillatorpotential bestimmt werden, d.h. die Zustandsdichten werden aus den klassischen Spektralfunktionen ohne Berücksichtigung der Quantenkorrekturen des Potentials abgeleitet. Es erfolgt zuerst die Betrachtung eines Systems, das sich nur in einem Oszillatorpotential befindet, anschließend wird auch noch ein konstantes elektrisches Feld berücksichtigt.

6.2.1. Klassisches Potential

Es wird mit dem einfachsten Fall eines Systems, welches sich nur in einem klassischen, harmonischen Oszillatorpotential befindet, angefangen. In diesem Fall ist die Spektralfunktion proportional zu eine Deltafunktion und lautet

$$a(k, \omega) = 2\pi\hbar \delta(\hbar\omega - \epsilon_{\text{kin}} - V_{\text{Osz}}) . \quad (6.6)$$

Um die folgenden Ausdrücke übersichtlicher zu gestalten, werden die Kurzschreibweisen $V_{\text{Osz}} = \frac{m}{2}\Omega^2 R^2$ und $\theta = \frac{\hbar\omega}{\hbar\Omega}$ benutzt.

Aus der obigen Spektralfunktion erhält man durch die Integration über \mathbf{R} und \mathbf{k} die Zustandsdichte

$$\rho(\theta) = \frac{1}{2} \frac{1}{\hbar\Omega} \theta^2 \Theta(\theta) . \quad (6.7)$$

Man erkennt, dass die Zustandsdichte quadratisch von θ abhängt. Als Test der hier benutzten Theorie soll diese Zustandsdichte nun noch mit der bekannten Zustandsdichte aus der Statistischen Physik verglichen werden. In der Statistischen Physik läßt sich die Zustandsdichte aus der Ableitung aller Mikrozustände, deren Energie kleiner als $\hbar\omega$ ist, bestimmen [25] und lautet

$$\rho(\theta) = \frac{1}{2} \frac{1}{\hbar\Omega} \theta^2 \Theta(\theta) . \quad (6.8)$$

Die mit der Methode der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen bestimmte Zustandsdichte ist also identisch mit der klassischen Zustandsdichte aus der statistischen Physik.

6.2.2. Klassisches Potential und konstantes elektrisches Feld

Zusätzlich zu dem harmonischen Oszillatorpotential wirkt auch wieder ein konstantes elektrisches Feld auf das System. Die Spektralfunktion eines solchen Systems lautet

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, T) = \frac{2\pi\hbar}{\hbar\Omega [\frac{1}{8}\vartheta]^{\frac{1}{3}}} \text{Ai}\left(\frac{\epsilon_{\text{kin}} + V_{\text{Osz}} - \hbar\omega}{\hbar\Omega [\frac{1}{8}\vartheta]^{\frac{1}{3}}}\right) . \quad (6.9)$$

mit $\vartheta = \frac{e_0^2 E_0^2}{m\Omega^2} \frac{1}{\hbar\Omega}$.

Aus dieser Spektralfunktion folgt die Zustandsdichte

$$\rho(\theta) = \frac{1}{16} \left(\frac{1}{8}\vartheta\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{\hbar\Omega} \int_0^\infty dz z^2 \text{Ai}\left(z - \frac{\theta}{[\frac{1}{8}\vartheta]^{\frac{1}{3}}}\right) . \quad (6.10)$$

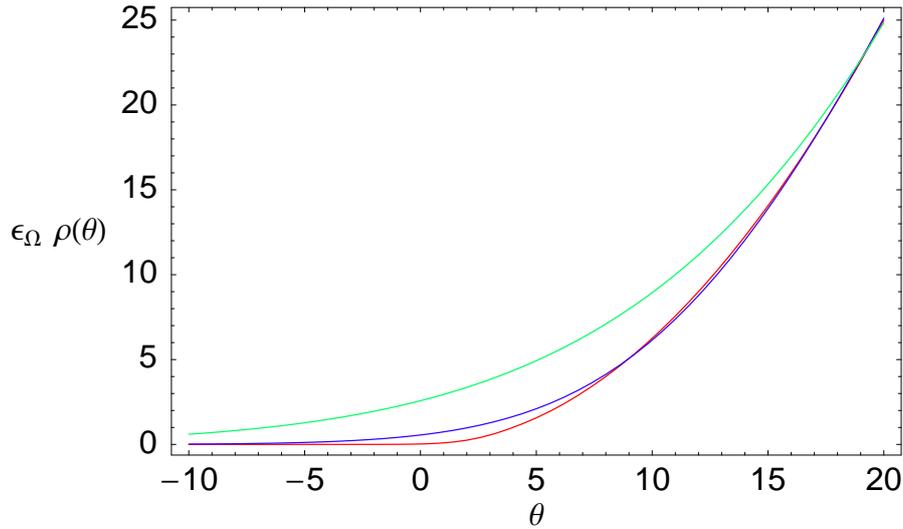


Abbildung 6.1.: Klassische Zustandsdichte für verschiedene Feldstärken. Rote Kurve: $\vartheta=10$; blaue Kurve: $\vartheta=1000$; grüne Kurve: $\vartheta=10000$. $\epsilon_\Omega = \hbar\Omega$

Die Integration kann numerisch ausgeführt werden. In der Abbildung 6.1 ist die Zustandsdichte für verschiedene Feldstärken gezeigt. Man sieht, dass durch die Anwesenheit eines konstanten elektrischen Feldes Zustände mit negativen Energien existieren. Je größer die Intensität des Feldes ist, desto stärker verschiebt sich die Kurve hin zu negativen Energien, was wie folgt erklärt werden kann: Der Hamiltonoperator eines Teilchens in einem Oszillatorpotential und einem konstanten elektrischen Feld lautet $\hat{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2}\Omega^2 q^2 + e_0 E q$. Dieser lässt sich umformen zu

$$\hat{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2}\Omega^2 \left(q^2 + \frac{e_0 E}{m_e \Omega^2} \right)^2 - \frac{e_0^2 E^2}{2m_e \Omega^2}. \quad (6.11)$$

Die rechte Seite stellt nun wieder den Hamiltonoperator eines Teilchens in einem Oszillatorpotential dar, in dem die Koordinaten des Minimums des Ortes und der Energie allerdings durch das Feld modifiziert wurden

$$(q_0, \epsilon_0) = (0, 0) \rightarrow \left(-\frac{e_0^2 E^2}{2m_e \Omega^2}, -\frac{e_0^2 E^2}{2m_e \Omega^2} \right). \quad (6.12)$$

Die Verschiebung des Oszillatorpotentials zu negativen Energien erklärt die Verschiebung der Zustandsdichte zu negativen Energien

6.3. Zustandsdichte mit Quantenkorrektur

Jetzt soll auch noch die Zustandsdichte für Elektronensysteme unter Berücksichtigung von Quanteneffekten bestimmt werden. Es werden hierfür die in dem Kapitel 5 bestimmten Spektralfunktionen benutzt, die nicht mehr von dem klassischen Potential, sondern von einem Quantenpotential abhängen. Auch hier wird zuerst ein System, das sich nur in einem harmonischen Oszillatorpotential befindet, betrachtet, bevor anschließend auch das konstante elektrische Feld mitbetrachtet wird.

6.3.1. Quantenpotential ($\mathbf{E} = 0$)

Zuerst wird die Zustandsdichte eines Elektronensystems in einem Oszillatorpotential mit Quantenkorrektur, aber ohne elektrisches Feld, betrachtet. Die Spektralfunktion dieses Systems lautet:

$$a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \omega, t) = \frac{2\pi\hbar}{\left[\frac{3}{4}\hbar^2\Omega^2(3\epsilon_{\text{kin}} + V_{\text{Osz}})\right]^{\frac{1}{3}}} \text{Ai}\left(\frac{\epsilon_{\text{kin}} + V_{\text{Osz}} - \hbar\omega}{\left[\frac{3}{4}\hbar^2\Omega^2(3\epsilon_{\text{kin}} + V_{\text{Osz}})\right]^{\frac{1}{3}}}\right). \quad (6.13)$$

Im Folgenden werden die Abkürzungen $a = \frac{\epsilon_{\text{kin}}}{\hbar\Omega}$, $b = \frac{V_{\text{Osz}}}{\hbar\Omega}$ und $\Theta = \frac{\hbar\omega}{\hbar\Omega}$ benutzt. Aus dieser Spektralfunktion folgt die Zustandsdichte

$$\rho(\Theta) = \frac{4}{\pi} \frac{1}{\hbar\Omega} \int_0^\infty da \int_0^\infty db \frac{(ab)^{\frac{1}{2}}}{\left[\frac{9}{4}a + \frac{3}{4}b\right]^{1/3}} \text{Ai}\left(\frac{a + b - \Theta}{\left[\frac{9}{4}a + \frac{3}{4}b\right]^{1/3}}\right). \quad (6.14)$$

Auch diese Zustandsdichte kann wieder numerisch ausgewertet werden. Sie ist in Abbildung 6.2 (rote Kurve) dargestellt. Zusätzlich ist in dieser Abbildung zum Vergleich noch die klassische Zustandsdichte (6.7) (blaue Kurve) eines Systems in einem Oszillatorpotential gezeigt. Die Abbildung zeigt, dass durch die Quantenkorrektur – wie auch im Fall des konstanten elektrischen Feldes im vorigen Abschnitt – eine Verschiebung der Zustandsdichte zu negativen Energien erfolgt. Betrachtet man die Spektralfunktion (5.21), sieht man, dass die Quantenkorrektur den gleichen Einfluss auf die Veränderung der Spektralfunktion hat, wie das konstante elektrische Feld, wodurch auch in diesem Fall Zustände bei negativen Energien entstehen.

Um die Zustandsdichte für ein System in einem homogenen elektrischen Feld und einem Oszillatorpotential inklusive Quantenkorrektur zu erhalten, ist ein analoges Vorgehen anzuwenden, wie bei den beiden vorigen Fällen. Der Fall soll hier daher nicht näher betrachtet werden.

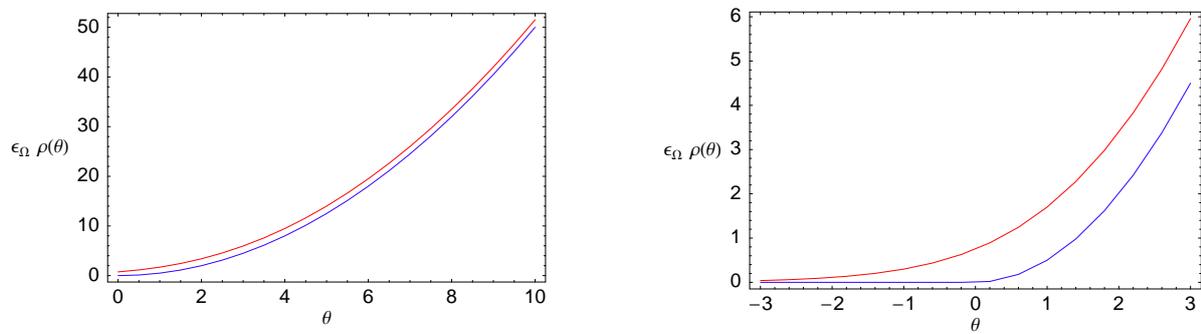


Abbildung 6.2.: Vergleich der Zustandsdichte mit Quantenkorrektur (rote Kurve) und ohne Quantenkorrektur (blaue Kurve). In der rechten Graphik ist ein vergrößerter Ausschnitt aus der linken Graphik zu sehen. $\epsilon_\Omega = \hbar\Omega$

7. Kinetische Gleichung für die Wignerfunktion

In den vorigen Kapiteln wurde schon mehrfach erwähnt, dass in den Korrelationsfunktionen die gesamte statistische und dynamische Information des Systems enthalten ist. Es ist allerdings möglich, dass man nicht an der kompletten Information des Systems, sondern nur an einem Teil davon interessiert ist. In dem Abschnitt (3.3) wurde bereits eine Gleichung zur Bestimmung der retardierten und avancierten Green-Funktionen hergeleitet, mit denen anschließend die spektralen Eigenschaften des Systems untersucht werden konnten. In diesem Abschnitt gilt das Interesse nun den statistischen Eigenschaften des Systems und es wird daher eine eichinvariante Gleichung zur Bestimmung der Wignerfunktion hergeleitet, mit der die Betrachtung der makroskopischen Größen des Systems möglich ist. Da die Wignerfunktion eine einzeitige Größe ist, ist es mitunter sinnvoll eine Rechnung mit den komplizierteren zweizeitigen Funktionen zu vermeiden und eine geschlossene Gleichung nur auf der Zeitdiagonalen abzuleiten.

7.1. Herleitung der kinetische Gleichung

Um eine eichinvariante, kinetische Gleichung zur Bestimmung der Wignerfunktion zu erhalten, muss zuerst die Differenz der eichinvarianten KBE für $g^<$ und der zugehörigen adjungierten Gleichung in der Wignerdarstellung gebildet werden. Die entstandene Gleichung ist dann auf der Zeitdiagonale, d.h. zu gleichen Zeiten $t_1 = t'_1 = t$, zu betrachten. Es wird wieder zuerst eine Untersuchung der linken Seite der Gleichung, also der Einteilchenbeiträge, durchgeführt. anschließend werden die Korrelationsbeiträge der rechten Seite betrachtet.

7.1.1. Einteilchenbeiträge

Es wird auch hier – wie schon bei der Betrachtung der dynamischen Eigenschaften – die kinetische Gleichung für eine parabolische Dispersionsrelation $\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m}$ ausgewertet. Bei der Bildung

7. Kinetische Gleichung für die Wignerfunktion

der Differenz der KBE (3.27) und ihrer Adjungierten (3.28) entsteht die folgende Differenz der beiden Dispersionsrelationen

$$\begin{aligned}
 & -\epsilon \left[\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) \right] + \epsilon \left[-\frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{k} - \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}}(t'_1, t_1) \right] \quad \rightarrow \quad (7.1) \\
 & = -\frac{1}{2m_a} \left\{ \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}^2}(t_1, t'_1) - \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}^2}(t'_1, t_1) + 2\frac{\hbar}{i} \mathbf{k} \nabla_{\mathbf{R}} - 4\mathbf{k} \mathbf{K}_{a-}^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) - \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{K}_{a+}^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) \right\} . \quad (7.2)
 \end{aligned}$$

Mit diesem Ausdruck erhält man durch die Subtraktion von (3.27) und (3.28) die Gleichung

$$\begin{aligned}
 & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - 2i\hbar \frac{\mathbf{K}_{a-}^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) \nabla_{\mathbf{k}}}{t_1 - t'_1} - \frac{\hbar}{i} \frac{\mathbf{k}}{m_a} \nabla_{\mathbf{R}} \right. \\
 & \quad \left. - \frac{1}{2m_a} \left(\mathbf{K}_a^{\mathbf{A}^2}(t_1, t'_1) - \mathbf{K}_a^{\mathbf{A}^2}(t'_1, t_1) - 4\mathbf{k} \mathbf{K}_{a-}^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) - \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{K}_{a+}^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) \right) \right\} \tilde{g}_a^<(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & - \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t_1) - e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)} V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t'_1) \right) \tilde{g}_a^<(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & = \text{Re} \left[\tilde{I}_{a+}^<(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \right] , \quad (7.3)
 \end{aligned}$$

die jetzt auf der Zeitdiagonalen betrachtet wird. Es wird die Kurzschreibweise $I_+(t_1, t'_1) = I(t_1, t'_1) + [I(t_1, t'_1)]^*$ benutzt.

Bevor der Limes gleicher Zeiten der Gleichung (7.3) gebildet wird, erfolgt zuerst eine Untersuchung des zweiten Terms der Gleichung zu gleichen Zeiten, da hier die Grenzwertbildung wegen der Differenz im Nenner sorgfältig ausgeführt werden muss. Es gilt

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}_{a-}^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1) & = \frac{1}{2} \frac{e_a}{c} \left\{ \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1 - t'_1} - \mathbf{A}(t_1) - \int_{t_1}^{t'_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t'_1 - t_1} + \mathbf{A}(t'_1) \right\} \\
 & = -\frac{1}{2} \frac{e_a}{c} \{ \mathbf{A}(t_1) - \mathbf{A}(t'_1) \} .
 \end{aligned}$$

Unter Anwendung der Regel von l'Hospital erhält man mit Hilfe der Beziehung $\mathbf{E}(t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(t)$

$$\lim_{t_1 \rightarrow t'_1} \frac{\mathbf{K}_{a-}^{\mathbf{A}}(t_1, t'_1)}{t_1 - t'_1} = \frac{1}{2} e_a \mathbf{E}(t) . \quad (7.4)$$

Hiermit kann jetzt die Gleichung (7.3) auf der Zeitdiagonalen betrachtet werden. Unter Benutzung von (7.4), der Eigenschaft $\mathbf{K}^{\mathbf{A}}(t, t) = 0$, sowie der Relation $-i\hbar g_a^<(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \tau, t) |_{t_1=t'_1=t} = f_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t)$ erhält man die folgende eichinvariante, kinetische Gleichung für die Wignerfunktion

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{k}}{m_a} \nabla_{\mathbf{R}} - e_a \mathbf{E}(t) \nabla_{\mathbf{k}} \right\} \tilde{f}_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) \\
 & + \frac{2}{\hbar} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \sin \frac{\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)}{\hbar} V_I(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t) \tilde{f}_a(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t) \\
 & = -\text{Re} \left[\tilde{I}_{a+}^{\leq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \right]. \tag{7.5}
 \end{aligned}$$

Auf der Zeitdiagonalen können die beiden Exponentialfunktionen unter dem Integral über das Potential zu einem Sinus zusammengezogen werden.

7.1.2. Selbstenergiebeiträge

Die Stoßintegrale in der eichinvarianten Darstellung wurden in Abschnitt (3.2.2) hergeleitet. Da die KBE auf der Zeitdiagonalen ausgewertet werden soll, ist der Ausdruck (3.38) für $t_1 = t'_1 = t$ zu betrachten. In diesem Fall gilt

$$\lim_{t_1 \rightarrow t} \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - \bar{t}_1} = \lim_{t'_1 \rightarrow t} \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{\bar{t}_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{\bar{t}_1 - t'_1} = \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^t dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t - \bar{t}_1}. \tag{7.6}$$

Unter Benutzung der Kurzschreibweise (3.26) sieht dann die eichinvariante Darstellung der Faltung (3.38) zu gleichen Zeiten wie folgt aus

$$\tilde{I}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) = \int d\bar{t}_1 \tilde{A}(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}_1), t, \bar{t}_1) \tilde{B}(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}_1), \bar{t}_1, t). \tag{7.7}$$

Für den Fall gleicher Zeiten erhalten die beiden an der Faltung beteiligten Operatoren somit gleiche Impulsargumente, welche durch den feldabhängigen Impuls gegenüber dem nicht eichinvarianten Fall verschoben sind.

Hartree-Fock-Beiträge

Die eichinvariante Darstellung des Hartree-Fock-Beitrags (3.39) auf der Zeitdiagonalen lautet

$$\tilde{\Sigma}^{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t). \tag{7.8}$$

Die Differenz der Hartree-Fock-Beiträge in (3.27) und (3.28) ergibt dann

$$\tilde{\Sigma}^{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) - \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) \tilde{\Sigma}^{\text{HF}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) = 0. \tag{7.9}$$

Die beiden Hartree-Fock-Beiträge heben sich bei Benutzung der lokalen Näherung für die Stoßintegrale in der Gleichung für die Wignerfunktion gegenseitig.

Stoßintegrale

Auf der Zeitdiagonalen erhält man für die eichinvariante Darstellung der Stoßintegrale in der KBE (3.40)

$$\begin{aligned}
 & \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \tilde{\Sigma}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) - \tilde{\Sigma}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) \right\} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t) \\
 & - \int_{t_0}^t d\bar{t} \tilde{\Sigma}_a^{\geq}(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) \left\{ \tilde{g}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t) - \tilde{g}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right\} \\
 & = \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \tilde{\Sigma}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) \tilde{g}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right. \\
 & \quad \left. - \tilde{\Sigma}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) \tilde{g}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right\}. \quad (7.10)
 \end{aligned}$$

Für die Stoßintegrale der adjungierten KBE (3.41) auf der Zeitdiagonalen erhält man den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 & - \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \tilde{\Sigma}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \tilde{g}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \right. \\
 & \quad \left. - \tilde{\Sigma}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \tilde{g}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \right\}. \quad (7.11)
 \end{aligned}$$

Diese beiden Ausdrücke unterscheiden sich lediglich im Vorzeichen und in den Zeitargumenten. Im Appendix C wird gezeigt, dass die Zeitargumente dieser Ausdrücke auf der Zeitdiagonalen vertauscht werden dürfen. Die Differenz der beiden Stoßintegrale ergibt dann

$$\begin{aligned}
 & 2 \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \tilde{\Sigma}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) \tilde{g}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right. \\
 & \quad \left. - \tilde{\Sigma}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) \tilde{g}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right\}. \quad (7.12)
 \end{aligned}$$

Die Stoßintegrale sind hier in der lokalen Näherung angegeben.

7.1.3. Kinetische Gleichung für die Wignerfunktion

Setzt man die Einteilchenbeiträge und die Stoßintegrale auf der Zeitdiagonalen wieder zusammen, so erhält man die folgende eichinvariante Gleichung für Systeme in einem homogenen

elektrischen Feld beliebiger hoher Feldstärke und einem zusätzlichen Confinementpotential

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{k}}{m_a} \nabla_{\mathbf{R}} - e_a \mathbf{E}(t) \nabla_{\mathbf{k}} \right\} \tilde{f}_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) \\
 & + \frac{2}{\hbar} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \sin \frac{\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)}{\hbar} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t) \tilde{f}_a(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t) \\
 & = -2 \text{Re} \left[\int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \tilde{\Sigma}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}; t, \bar{t}) \tilde{g}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}; \bar{t}, t) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \tilde{\Sigma}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}; t, \bar{t}) \tilde{g}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}; \bar{t}, t) \right\} \right]. \quad (7.13)
 \end{aligned}$$

Der Hartree-Beitrag wurde wieder mit dem ursprünglichen Potential zu einem effektiven Potential zusammengefaßt.

Damit die Gleichung weiter ausgewertet werden kann, erfolgt auch hier eine Beschränkung auf schwach inhomogene Potentiale. Unter Benutzung von (5.5) läßt sich dann das Integral über das Potential in (7.13) wie folgt entwickeln

$$\begin{aligned}
 & \frac{2}{\hbar} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \sin \frac{\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)}{\hbar} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t) f_a(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t) \\
 & = - \left\{ \nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \nabla_{\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2}{24} \frac{\partial^3 V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t)}{\partial \mathbf{R}_1 \partial \mathbf{R}_2 \partial \mathbf{R}_3} + \dots \right\} f_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t). \quad (7.14)
 \end{aligned}$$

Um die kinetische Gleichung der Wignerfunktion für Teilchensysteme in einem inhomogenen Confinementpotential zu erhalten, müssen somit mindestens Gradientenkorrekturen erster Ordnung berücksichtigt werden.

Das Integral wird wie folgt in der Gradientenkorrektur 1.Ordnung genähert:

$$\frac{2}{\hbar} \int d\mathbf{r} \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \sin \frac{\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)}{\hbar} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t) \tilde{f}_a(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t) \rightarrow -\nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{f}_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t), \quad (7.15)$$

womit man auf der Zeitdiagonalen die folgende Gleichung für die Wignerfunktion erhält

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{k}}{m_a} \nabla_{\mathbf{R}} - \left(\nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) - e_a \mathbf{E}(t) \right) \nabla_{\mathbf{k}} \right\} \tilde{f}_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) \\
 & = -2 \text{Re} \left[\int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \tilde{\Sigma}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}; t, \bar{t}) \tilde{g}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}; \bar{t}, t) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \tilde{\Sigma}_a^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}; t, \bar{t}) \tilde{g}_a^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}; \bar{t}, t) \right\} \right]. \quad (7.16)
 \end{aligned}$$

Es fällt auf, dass die Stoßintegrale in der lokalen Näherung auftauchen, das Potential, sowie der Hartree-Beitrag aber in der ersten Ordnung Gradientenkorrektur dargestellt sind. Für eine

konsistente Gleichung müssten auch die Gradientenkorrekturen erster Ordnung der Stoßintegrale mitbetrachtet werden. Im Falle starker elektrischer Felder ist der Einfluss der Stöße in dem System aber klein (s. [4] oder Kapitel 4) und es reicht aus, die Stoßintegrale in der wesentlich einfacheren Darstellung der lokalen Näherung zu benutzen.

Die Gleichung (7.16) stellt noch keine geschlossene Gleichung für die Wignerfunktion dar, da die Stoßintegrale durch die Korrelationsfunktionen und die Selbstenergien noch von zweizeitigen Funktionen abhängen. Es muss daher eine passende Näherung der Selbstenergien gefunden werden, in der die Selbstenergien als Funktionale der Korrelationsfunktionen dargestellt werden und die Korrelationsfunktionen wiederum müssen als Funktionale der einzeitigen Wignerfunktion dargestellt werden. Dieses Problem wird als Rekonstruktionsproblem bezeichnet und im folgenden Abschnitt behandelt.

7.2. Generalisierter Kadanoff-Baym-Ansatz

Zur Lösung des Rekonstruktionsproblems, d.h. um die zweizeitigen Korrelationsfunktionen durch die einzeitige Wignerfunktion auszudrücken, wurde der folgende Ansatz – in Anlehnung an die Gleichgewichtstheorie – entwickelt

$$\pm i\hbar g_a^{\gtrless}(t_1, t'_1) = f_a^{\gtrless}(t) i\hbar \{g_a^{\text{R}}(t_1, t'_1) - g_a^{\text{A}}(t_1, t'_1)\} = a_a(t_1, t'_1) f_a^{\gtrless}(t). \quad (7.17)$$

Dieser Ansatz wird Kadanoff-Baym-Ansatz (KBA) genannt. Hier bezeichnet $f_a^<(t) = f_a(t)$ und $f_a^>(t) = 1 - f_a(t)$ und für $a_a(t_1, t'_1)$ ist die Spektralfunktion des Nichtgleichgewichtssystems einzusetzen. Dafür kann näherungsweise die freie Spektralfunktion benutzt werden.

Ein Problem des KBA ist es, dass durch ihn keine Korrelations- und Retardationseffekte beschrieben werden. Besonders bei der Berücksichtigung eines elektrischen Feldes sind aber Retardationseffekte zu erwarten. Um diese berücksichtigen zu können, entwickelten Lipavsky, Spicka und Velicky im Jahre 1986 den Generalisierten Kadanoff-Baym-Ansatz (GKBA) [26]. Dieser lautet in der lokalen Näherung

$$g_a^{\gtrless}(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \pm g_a^{\text{R}}(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) f_a^{\gtrless}(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t'_1) \mp f_a^{\gtrless}(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t_1) g_a^{\text{A}}(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t_1, t'_1). \quad (7.18)$$

Die Inhomogenität wird in der lokalen Näherung nur durch eine zusätzliche Abhängigkeit der Funktionen von der Schwerpunktkoordinate \mathbf{R} berücksichtigt. Der nächste Schritt wäre auch hier (analog zu den Stoßtermen), diesen Ansatz nicht in der lokalen Näherung, sondern in der 1. Ordnung Gradientenkorrektur zu benutzen.

Da eine eichinvariante Darstellung der kinetischen Gleichung der Wignerfunktion gesucht ist, muss der GKBA erst eichinvariant dargestellt werden, bevor er in der Gleichung (7.16) angewendet werden kann. Hierzu wird von der Ortsdarstellung des GKBA in der lokalen Näherung ausgegangen

$$g_a^{\gtrless}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \pm \int d\bar{\mathbf{r}} \left\{ g_a^{\text{R}}(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) f_a^{\gtrless}(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, t'_1) - f_a^{\gtrless}(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, t_1) g_a^{\text{A}}(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \right\}. \quad (7.19)$$

Um die eichinvariante Darstellung zu erhalten, werden – dem schon bekannten Vorgehen entsprechend – die einzelnen Funktionen wieder durch ihre Rücktransformation (3.10) ersetzt

$$\begin{aligned} & \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \left(\mathbf{k} + \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'}^t dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t-t''} \right)} \tilde{g}_a^{\gtrless}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\ &= \pm \int d\bar{\mathbf{r}} \int \frac{d\mathbf{k}' d\mathbf{k}''}{(2\pi\hbar)^6} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{r}-\bar{\mathbf{r}}) \left(\mathbf{k}' + \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1-t''} \right)} \tilde{g}_a^{\text{R}}(\mathbf{k}', \mathbf{R}, t_1, t'_1) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{\mathbf{r}} \left(\mathbf{k}'' + \frac{e\mathbf{a}}{c} \mathbf{A}(t_1) \right)} \tilde{f}_a^{\gtrless}(\mathbf{k}'', \mathbf{R}, t'_1) \right. \\ & \quad \left. - e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{r}-\bar{\mathbf{r}}) \left(\mathbf{k}' + \frac{e\mathbf{a}}{c} \mathbf{A}(t_1) \right)} \tilde{f}_a^{\gtrless}(\mathbf{k}', \mathbf{R}, t_1) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{\mathbf{r}} \left(\mathbf{k}'' + \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt'' \frac{\mathbf{A}(t'')}{t_1-t''} \right)} \tilde{g}_a^{\text{A}}(\mathbf{k}'', \mathbf{R}, t_1, t'_1) \right\}. \quad (7.20) \end{aligned}$$

Nutzt man bezüglich der $\bar{\mathbf{r}}$ -Integration die Darstellung der Deltafunktion aus, führt anschließend die Integration über \mathbf{k}' aus und vergleicht dann die beiden Seiten der Gleichung, erhält man die eichinvariante Darstellung des GKBA [5]

$$\tilde{g}_a^{\gtrless}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \pm \left\{ \tilde{g}_a^{\text{R}}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{f}_a^{\gtrless}(\mathbf{k} - \mathbf{K}_a^{\text{A}}(t'_1, t_1), \mathbf{R}; t'_1) - \tilde{f}_a^{\gtrless}(\mathbf{k} - \mathbf{K}_a^{\text{A}}(t_1, t'_1), \mathbf{R}; t_1) \tilde{g}_a^{\text{A}}(\mathbf{k}', \mathbf{R}, t_1, t'_1) \right\}. \quad (7.21)$$

Die Argumente der Wignerfunktionen sind um den feldabhängigen Impuls $\mathbf{K}_a^{\text{A}}(t_1, t'_1)$ bzw. $\mathbf{K}_a^{\text{A}}(t'_1, t_1)$ geschiftet, wobei die unterschiedliche Zeitabhängigkeit der beiden Wignerfunktionen zu beachten ist. Bei einer festgelegten Zeitordnung bleibt in diesem Ansatz nur ein Term erhalten, da entweder nur g_a^{R} oder g_a^{A} existiert.

In dem Stoßintegral von (7.16) sind zwei Produkte der Selbstenergie und der Greenfunktion zu berechnen, die von folgender Struktur sind

$$\tilde{\Sigma}_a^{\gtrless}(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^{\text{A}}(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) \tilde{g}_a^{\gtrless}(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^{\text{A}}(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t). \quad (7.22)$$

Ersetzt man die Impulsargumente in dem eichinvarianten GKBA (7.21) entsprechend, erhält man, da durch die Integration in (7.16) immer $t \geq \bar{t}$ gilt,

$$\begin{aligned}\tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t) &= \mp \tilde{f}_a^{\geq}(\mathbf{k} + Q_a(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}) \tilde{g}_a^A(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}, t), \\ \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) &= \pm \tilde{g}_a^R(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}), \mathbf{R}, t, \bar{t}) \tilde{f}_a^{\geq}(\mathbf{k} + Q_a(t, \bar{t}), \mathbf{R}, \bar{t}).\end{aligned}\quad (7.23)$$

Hierbei bezeichnet $Q_a(t, \bar{t}) = -e_a \int_{\bar{t}}^t dt' \mathbf{E}(t')$ den zusätzlichen Impuls eines Teilchen durch die Anwesenheit eines äußeren elektrischen Feldes.

Für $g_a^{R/A}$ wird näherungsweise die freie Lösung (5.20) inklusive Quantenpotential benutzt. Da die Stoßintegrale in der lokalen Näherung angegeben werden, fallen alle Gradiententerme weg, so dass die gesamte Quantenkorrektur $\delta V_Q(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1)$ (s. 5.19) herausfällt. Die freie Lösung von $g^{R/A}$ lautet dann

$$\tilde{g}_a^{R/A}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t_1, t'_1) = \mp \frac{i}{\hbar} \Theta(\pm(t_1 - t'_1)) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{k^2}{2m_a} \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} P_a(t_1, t'_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} S_a(t_1, t'_1)}. \quad (7.24)$$

Hierbei bezeichnet

$$P_a(t_1, t'_1) = \int_{t'_1}^{t_1} d\bar{t} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, \bar{t}) \quad \text{und} \quad S_a(t_1, t'_1) = \frac{e_a^2}{c^2} \frac{1}{2m_a} \left[\int_{t'_1}^{t_1} d\bar{t} A^2(\bar{t}) - \frac{1}{t_1 - t'_1} \left(\int_{t'_1}^{t_1} d\bar{t} \mathbf{A}(\bar{t}) \right)^2 \right],$$

und es gilt: $P_a(t_1, t'_1) = -P_a(t'_1, t_1)$ und $S_a(t_1, t'_1) = -S_a(t'_1, t_1)$. Bei der Berechnung der retardierten und avancierten Greenfunktion wurde ebenfalls die Annahme eines schwach inhomogenen Potentials gemacht.

7.3. Selbstenergien in der Bornschen Näherung

Nachdem nun klar ist, wie die zweizeitigen Korrelationsfunktionen mit Hilfe des GKBA näherungsweise durch die einzeitige Wignerfunktion ausgedrückt werden können, muss zur Auswertung der Gleichung (7.16) noch eine Näherung für die Selbstenergien gemacht werden, in der diese durch die Korrelationsfunktionen dargestellt werden. Hierzu wird die zweite Bornsche Näherung benutzt, wobei der Austauschterm zur Vereinfachung vernachlässigt wird. Die Selbstenergie lautet in der Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}\Sigma_a^{\geq}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1, t_1, t'_1) &= \pm (i\hbar)^2 \sum_b \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_2 V_{ab}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) V_{ab}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \\ &\quad \times g_a^{\geq}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1, t_1, t'_1) g_b^{\geq}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2, t_2, t'_2) g_b^{\leq}(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_2, t'_2, t_2) \Big|_{t_1=t_2; t'_1=t'_2}.\end{aligned}\quad (7.25)$$

Um eine konsistente Darstellung der Gleichung für die Wignerfunktion zu erhalten, muss ein Übergang auf die eichinvariante Darstellung erfolgen. Die Rechnung ist im Appendix D gezeigt. Die eichinvariante Darstellung der Selbstenergien in der zweiten Bornschen Näherung lautet [5]

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}_a^{\geq}(\mathbf{k}_a, t_1, t'_1) &= \sum_b \frac{\hbar^2}{(2\pi\hbar)^6} \int d\bar{\mathbf{k}}_a d\mathbf{k}_b d\bar{\mathbf{k}}_b |V_{ab}(\mathbf{k}_a - \bar{\mathbf{k}}_a)|^2 \delta(\mathbf{k}_a + \mathbf{k}_b - \bar{\mathbf{k}}_a - \bar{\mathbf{k}}_b) \\ &\quad \times \tilde{g}_a^{\geq}(\bar{\mathbf{k}}_a, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\geq}(\bar{\mathbf{k}}_b, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\leq}(\mathbf{k}_b, t'_1, t_1) . \end{aligned} \quad (7.26)$$

Dieser Ausdruck beschreibt einen Stoß zwischen einem Teilchen der Sorte a mit dem Impuls \mathbf{k}_a und einem Teilchen der Sorte b und dem Impuls \mathbf{k}_b . Nach dem Stoß besitzen die Teilchen die Impulse $\bar{\mathbf{k}}_a$ und $\bar{\mathbf{k}}_b$. Die Deltafunktion stellt hierbei die Erhaltung des Gesamtimpulses während des Stoßes sicher.

Die Korrelationsfunktionen in der Selbstenergie können nach (7.21) durch die freie retardierte, bzw. avancierte Greenfunktion und die Wignerfunktion approximiert werden. Da die Stoßintegrale aus Produkten der Struktur (7.22) bestehen, sind bei Benutzung der Bornschen Näherung Produkte aus vier Greenfunktionen zu berechnen. Bevor der GKBA in dem Stoßintegral angewandt wird, wird zuerst noch das Produkt einer retardierten und einer avancierten Greenfunktion (7.24) berechnet, da dieser Ausdruck in der folgenden Betrachtungen mehrfach benötigt wird. Es gilt

$$\begin{aligned} &\tilde{g}_a^A(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \tilde{g}_a^R(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \\ &= \frac{1}{\hbar^2} e^{-\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}))^2}{2m_a} (\bar{t} - t) + P_a(\bar{t}, t) + S_a(\bar{t}, t) \right\}} e^{-\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{(\bar{\mathbf{k}} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}))^2}{2m_a} (t - \bar{t}) + P_a(t, \bar{t}) + S_a(t, \bar{t}) \right\}} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} e^{\frac{i}{\hbar} \left\{ (\epsilon_a - \bar{\epsilon}_a)(t - \bar{t}) - (\mathbf{k} - \bar{\mathbf{k}}) R_a(t, \bar{t}) \right\}} , \end{aligned} \quad (7.27)$$

wobei $R_a = \frac{e_a}{m_a} \int_{\bar{t}}^t dt' \int_{\bar{t}}^t d\tilde{t} \mathbf{E}(\tilde{t})$ die durch das elektrische Feld in dem Zeitintervall $[t, \bar{t}]$ erzeugte Ortsänderung des Teilchens mit der Ladung e_a und der Masse m_a darstellt. Man erkennt, dass sich der von dem Potential abhängige Anteil aufhebt.

Mit Hilfe dieser Relation werden nun die beiden in dem Stoßterm vorkommenden Produkte aus einer Korrelationsfunktion und der Selbstenergie bestimmt. Zur besseren Übersichtlichkeit wird nur das Produkt der vier Greenfunktionen betrachtet, die Argumente der Wignerfunktionen

und die \mathbf{R} -Abhängigkeit werden unterdrückt. Der erste Term lautet

$$\begin{aligned}
 & \tilde{\Sigma}_a^<(\mathbf{k}_a + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \tilde{g}_a^>(\mathbf{k}_a + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \quad \rightarrow \\
 & \tilde{g}_a^<(\bar{\mathbf{k}}_a + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \tilde{g}_b^<(\bar{\mathbf{k}}_b + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \tilde{g}_b^>(\mathbf{k}_b + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \tilde{g}_a^>(\mathbf{k}_a + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \\
 & = \tilde{g}_a^R(\bar{\mathbf{k}}_a + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \tilde{g}_b^R(\bar{\mathbf{k}}_b + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \tilde{g}_b^A(\mathbf{k}_b + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \tilde{g}_a^A(\mathbf{k}_a + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \\
 & \quad \times \tilde{f}_a^< \tilde{f}_b^< \tilde{f}_b^> \tilde{f}_a^> \\
 & = \frac{1}{\hbar^4} e^{\frac{i}{\hbar}(t-\bar{t})(\epsilon_{ab}-\bar{\epsilon}_{ab})} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{k}_a-\bar{\mathbf{k}}_a)R_a(t,\bar{t})} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{k}_b-\bar{\mathbf{k}}_b)R_b(t,\bar{t})} \tilde{f}_a \tilde{f}_b (1-\tilde{f}_a) (1-\tilde{f}_b) . \quad (7.28)
 \end{aligned}$$

Für den zweiten Term erhält man durch eine entsprechende Rechnung

$$\begin{aligned}
 & \tilde{\Sigma}_a^>(\mathbf{k}_a + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) \tilde{g}_a^<(\mathbf{k}_a + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \quad \rightarrow \\
 & = \frac{1}{\hbar^4} e^{\frac{i}{\hbar}(t-\bar{t})(\epsilon_{ab}-\bar{\epsilon}_{ab})} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{k}_a-\bar{\mathbf{k}}_a)R_a(t,\bar{t})} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{k}_b-\bar{\mathbf{k}}_b)R_b(t,\bar{t})} \tilde{f}_a \tilde{f}_b (1-\tilde{f}_a) (1-\tilde{f}_b) . \quad (7.29)
 \end{aligned}$$

In den beiden Ausdrücken besitzen die Wignerfunktionen stets das Argument $f_a(\mathbf{k}_a + Q_a(t, \bar{t}); \bar{t})$ und $\bar{f}_a = f_a(\bar{\mathbf{k}}_a + Q_a(t, \bar{t}); \bar{t})$.

Um den Stoßterm (7.12) in Abhängigkeit der Wignerfunktion zu erhalten, ist jetzt wieder der gesamte Ausdruck (7.26) der Selbstenergie in der Bornschen Näherung zu benutzen und die Differenz $\tilde{\Sigma}_a^< \tilde{g}_a^> - \tilde{\Sigma}_a^> \tilde{g}_a^<$ zu bilden. Beachtet man, dass durch die Deltafunktion $\mathbf{k}_b - \bar{\mathbf{k}}_b = -(\mathbf{k}_a - \bar{\mathbf{k}}_a)$ gilt, erhält man

$$\begin{aligned}
 \tilde{I}_{ab} = & \frac{2}{(2\pi\hbar)^6} \frac{1}{\hbar^2} \int d\bar{\mathbf{k}}_a d\mathbf{k}_b d\bar{\mathbf{k}}_b |V_{ab}(\mathbf{k}_a - \bar{\mathbf{k}}_a)|^2 \delta(\mathbf{k}_a + \mathbf{k}_b - \bar{\mathbf{k}}_a - \bar{\mathbf{k}}_b) \\
 & \times \int_{t_0}^t d\bar{t} \operatorname{Re} \left[e^{-\frac{i}{\hbar}(t-\bar{t})(\bar{\epsilon}_{ab}-\epsilon_{ab})} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{k}_a-\bar{\mathbf{k}}_a)R_{ab}(t,\bar{t})} \right] \\
 & \times \left\{ \tilde{f}_a \tilde{f}_b (1-\tilde{f}_a) (1-\tilde{f}_b) - f_a f_b (1-f_a) (1-f_b) \right\} . \quad (7.30)
 \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnet $\epsilon_{ab} = \epsilon_a + \epsilon_b$ und $R_{ab}(t, \bar{t}) = \left(\frac{e_a}{m_a} - \frac{e_b}{m_b} \right) \int_{\bar{t}}^t dt' \int_{\bar{t}'}^t d\tilde{t} \mathbf{E}(\tilde{t})$, wobei $R_{ab}(t, \bar{t})$ die durch das elektrische Feld erzeugte Änderung des Abstandes der Teilchen a und b zueinander darstellt. Betrachtet man nur Teilchen der gleichen Sorte, so ist $R_{ab} = 0$.

Man sieht, dass bei einer Benutzung der Stoßintegrale in der lokalen Näherung, keine Abhängigkeit der Stoßprozesse von dem Confinementpotential oder der Quantenkorrektur besteht. Die Stoßprozesse werden allerdings von dem anliegenden elektrischen Feld modifiziert. Dieses steckt zum einen in dem Shift $\mathbf{Q}_{a/b}(t, \bar{t}) = -e_{a/b} \int_{\bar{t}}^t dt' \mathbf{E}(t')$ des Arguments der Wignerfunktionen, welcher durch die eichinvariante Darstellung hervorgerufen wird und den ‘‘intracollisional

field effect" (ICFE) beschreibt. Es besteht zusätzlich noch eine exponentielle Abhängigkeit des Stoßterms von dem angelegten elektrischen Feld. Die Exponentialfunktion beschreibt im Wesentlichen die Verbreiterung der Spektrallinien durch die Teilchenstöße (collisional broadening). Dieser Effekt wird hier durch die von dem Feld hervorgerufene Änderung des Teilchenabstandes $R_{a/b}(t, \bar{t})$ modifiziert. Da diese Abhängigkeit nicht linear ist, ist sie mit der Entstehung höherer Harmonischer bei periodischen Feldern verbunden.

Das Stoßintegral (7.30) ist gleich dem in [5] und [18] bestimmten Stoßintegral, welches für ein System in einem homogenen elektrischen Feld ohne Confinementpotential erhalten wurde. In [5] und [18] wird eine detaillierte Untersuchung des Stoßintegrals für den Fall eines harmonischen elektrischen Feldes oder eines starken Laserpulses vorgenommen.

Man erhält dann die folgende eichinvariante, kinetische Gleichung für die Wignerfunktion eines Systems in einem homogenen elektrischen Feld und einem schwach inhomogenen Confinementpotential unter Berücksichtigung von Zweiteilchenstößen im Rahmen der zweiten Bornschen Näherung

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{k}}{m_a} \nabla_{\mathbf{R}} - \left(\nabla_{\mathbf{R}} V_I^{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) - e_a \mathbf{E}(t) \right) \nabla_{\mathbf{k}} \right\} \tilde{f}_a(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t) = \sum_b \tilde{I}_{ab}. \quad (7.31)$$

Es handelt sich hier um eine grundlegende Gleichung. Das elektrische Feld beliebiger Stärke und Zeitabhängigkeit wird selbstkonsistent (nichtlinear) in den Stoßtermen berücksichtigt. Es ist Lösung der Maxwell-Gleichungen, d.h. in $\mathbf{E}(t)$ ist sowohl das externe, als auch das induzierte elektrische Feld enthalten. Die Gleichung wurde im Vergleich zu [5] und [4] auf die Anwesenheit eines schwach inhomogenen Potentials erweitert, welches zusätzlich noch den Hartree-Beitrag enthält. Es wurde hier mit der Annahme einer schwachen Inhomogenität die einfachste Näherung benutzt, eine Berücksichtigung der höheren Korrekturen durch die Entwicklung (7.14) ist aber evident. Die Gleichung (7.31) ist somit ein wichtiger Ausgangspunkt für eine weiterführende analytische Untersuchung oder numerische Lösung.

8. Mehrbandsysteme

In den vorangehenden Kapiteln wurden die Kadanoff-Baym-Gleichungen für Einband-Systeme abgeleitet und ausgewertet. Die Methode der Nichtgleichgewichts-Greenfunktion ist aber auch für die Untersuchung von Vielteilchensystemen in einem Festkörper gut geeignet. In diesem Kapitel soll die KBE daher auf die Anwendung in der Festkörperphysik erweitert werden.

In einem makroskopischen Festkörper werden die Zustände der Elektronen und Löcher durch die Bandstruktur beschrieben. Die Betrachtung eines Festkörpers erfolgt meist im reziproken Raum, dem \mathbf{k} -Raum, in dem zu einem festen \mathbf{k} mehrere Energien existieren können. \mathbf{k} steht in diesem Kapitel nicht mehr für den modifizierten Impuls, sondern für den Wellenvektor (auch Kristallimpuls genannt), der über $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ mit dem Impuls zusammenhängt. Da der Wellenvektor \mathbf{k} in einem makroskopischen Festkörper quasikontinuierlich ist, werden die Energieeigenwerte als Energiebänder bezeichnet in denen die möglichen Energien innerhalb eines bestimmten Energiebereichs kontinuierlich verteilt sind. Die verschiedenen Energiebänder können sich überlappen oder es existiert ein Bereich zwischen ihnen, in dem keine Energiezustände liegen, eine sogenannte Bandlücke. Werden die Teilchen angeregt – z.B. durch einen Laserpuls – können sie in ein höheres Energieband wechseln. Unter Abgabe eines Photons können sie aus einem höheren Energieband wieder in ein tieferes Band zurückfallen. Die Energiebänder werden durch das periodische Potential, in dem sich die Elektronen des Festkörpers befinden, hervorgerufen. Eine ausführliche Einführung in die Festkörperphysik ist in [27], [28] und [29] gegeben.

Bei einer Beschreibung von Festkörpern mit Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen wird nun also nicht mehr ein Teilchen betrachtet, das dem System an dem Punkt \mathbf{k}'_1, t'_1 hinzugefügt und am Punkt \mathbf{k}_1, t_1 wieder entnommen wird, sondern es wird ein Teilchen betrachtet, das sich in einem bestimmten Band befindet und während der Propagation durch das System in andere Bänder wechseln kann. Die zur Beschreibung derartiger Systeme geeigneten Greenfunktionen müssen daher von einer zusätzlichen Quantenzahl abhängen, dem Bandindex.

Die Beschreibung von Halbleitern mit der Methode der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen

wurde schon von mehreren Gruppen betrachtet, z.B. Haug und Jauho [3], Jauho et al. [6]-[8], sowie Schäfer und Wegener [31]. Das Vorgehen in diesem Kapitel ist an [31] angelehnt.

8.1. Einführung der Greenfunktionen für Mehrbandsysteme

Ausgangspunkt ist die folgende Definition der Feldoperatoren

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \hat{a}_i^\dagger(t) \quad \text{und} \quad \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \hat{a}_i(t), \quad (8.1)$$

in der die $\varphi_i(\mathbf{r})$ eine vollständige orthonormale Basis darstellen (die Spinvariable wurde hier unterdrückt) und $\hat{a}_i^\dagger(t)$ bzw. $\hat{a}_i(t)$ Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren sind.

Um zur Beschreibung von Festkörpern geeignete Greenfunktionen zu erhalten, werden die Feldoperatoren entsprechend (8.1) nach den Blochfunktionen entwickelt. Die Blochfunktionen sind die Lösung der Schrödingergleichung eines Elektrons in dem, von den Gitteratomen eines Festkörpers erzeugten, periodischen Potential

$$\varphi_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (8.2)$$

Hierbei stellt $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ die ebene Welle eines freien Elektrons und $u_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ eine gitterperiodische Funktion dar. Der neue Index λ bezeichnet das jeweilige Band und V ist das Kristallvolumen.

Zur Vereinfachung wird hier für die Blochfunktionen der führende Term einer bei der Anwendung der $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Methode gemachten Entwicklung benutzt. Bei dieser Methode wird angenommen, dass man das Bandstruktur-Problem an einem bestimmten Punkt \mathbf{k}_0 mit hoher Symmetrie gelöst hat, d.h. alle Energieeigenwerte $\epsilon_\lambda(\mathbf{k}_0)$ und alle Funktionen $u_\lambda(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})$ sind bekannt. Um die Blochfunktionen in der Umgebung dieses Punktes zu bestimmen, wird die Funktion $u_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ nach den bekannten gitterperiodischen Funktionen $u_\lambda(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})$, welche eine vollständige Basis bilden, entwickelt. Eine ausführliche Behandlung der $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -Methode ist in [30] oder [31] gegeben. Hier wird der Punkt $\mathbf{k}_0 = 0$ benutzt, welcher als Γ -Punkt der Brillouinzone bezeichnet wird. Bricht man die Entwicklung nach der ersten Ordnung ab, erhält man die Blochfunktionen in der Form

$$\varphi_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_\lambda(0, \mathbf{r}). \quad (8.3)$$

Die Blochfunktionen erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\int_V d\mathbf{r} \varphi_{\lambda_1}^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}) \varphi_{\lambda_2}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}) = \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} , \quad (8.4)$$

und somit die Normierungsbedingung

$$\int_V d\mathbf{r} |\varphi_{\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{r})|^2 = 1 . \quad (8.5)$$

Entwickelt man die Feldoperatoren entsprechend (8.1) nach den Blochfunktionen, so erhält man

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \varphi_{\lambda}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}(t) \quad \text{und} \quad \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \varphi_{\lambda}^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^{\dagger}(t) , \quad (8.6)$$

wobei $\hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^{\dagger}(t)$ und $\hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}(t)$ Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren sind, die ein Teilchen mit dem Impuls \mathbf{k} zu der Zeit t in dem Band λ erzeugen bzw. vernichten. Sie erfüllen die Antikommutatorregeln (es werden nur Fermionen betrachtet)

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}, \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2} \right]_{+} &= \left[\hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}^{\dagger}, \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^{\dagger} \right]_{+} = 0 , \\ \left[\hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}, \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^{\dagger} \right]_{+} &= \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} . \end{aligned} \quad (8.7)$$

Die Entwicklung (8.6) der Feldoperatoren nach den Blochfunktionen wird nun in die Definition der Greenfunktion eingesetzt

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1, t_1, t'_1) &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle T_C \left[\hat{\psi}(1) \hat{\psi}^{\dagger}(1') \right] \right\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1} \sum_{\lambda_1, \lambda'_1} \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) G_{\lambda_1 \lambda'_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, t_1, t'_1) \varphi_{\lambda'_1}^*(\mathbf{k}'_1, \mathbf{r}'_1) \end{aligned} \quad (8.8)$$

Die Rechnung für die Zweiteilchen-Greenfunktion verläuft analog. Hiermit erhält man für die Einteilchen- und die Zweiteilchen-Greenfunktion die Definition

$$\begin{aligned} G_{\lambda_1 \lambda'_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, t_1, t'_1) &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle T_C \left[a_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}(t_1) \hat{a}_{\lambda'_1, \mathbf{k}'_1}^{\dagger}(t'_1) \right] \right\rangle , \\ G_{\lambda_1 \lambda_2, \lambda'_1 \lambda'_2}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, t_1, t_2; \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, t'_1, t'_2) &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \left\langle T_C \left[\hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}(t_1) \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}(t_2) \hat{a}_{\lambda'_1, \mathbf{k}'_1}^{\dagger}(t'_1) \hat{a}_{\lambda'_2, \mathbf{k}'_2}^{\dagger}(t'_2) \right] \right\rangle . \end{aligned} \quad (8.9)$$

Diese Greenfunktionen werden im Folgenden als Mehrband-Greenfunktionen bezeichnet. Sie sind durch λ abhängig von dem entsprechenden Energieband und wirken im \mathbf{k} -Raum. In der Einteilchen-Greenfunktion sind, je nach Ordnung der Zeiten auf der Keldysh-Kontur, – genau wie in den Einband-Greenfunktionen – die Korrelationsfunktionen und die kausale und antikausale Greenfunktion enthalten.

8.2. Die Martin-Schwinger-Hierarchie für Mehrbandsysteme

Um die Mehrband-Greenfunktionen bestimmen zu können, wird ihre Bewegungsgleichung benötigt. Dazu wird – analog zu dem Vorgehen in Kapitel 2 – die Heisenberggleichung $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{H}]_-$ für den Feldoperator $\hat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)$ und den adjungierten Feldoperator $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'_1, t'_1)$ betrachtet und entsprechend (8.6) nach den Blochfunktionen entwickelt. Der hier benutzte Hamiltonoperator in der Ortsdarstellung lautet

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \int d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} \hat{\psi}(\mathbf{r}') + \int d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \\ & + \int d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(t) \hat{\psi}(\mathbf{r}') + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'') W(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \hat{\psi}(\mathbf{r}'') \hat{\psi}(\mathbf{r}') . \end{aligned} \quad (8.10)$$

Der erste Term dieses Hamiltonoperators bezeichnet den kinetischen Anteil und wird im Folgenden mit \hat{H}_{kin} bezeichnet. Der zweite Term berücksichtigt das externe Confinementpotential und wird mit \hat{H}_V bezeichnet. Durch den dritten Term \hat{H}_E wird die Wechselwirkung der Teilchen mit dem elektrischen Feld beschrieben. Hierbei wird in Dipol-Näherung angenommen, dass $\mathbf{d} = -e_a \mathbf{r}$ ist. Die räumliche Abhängigkeit des elektrischen Feldes wird hier vernachlässigt, da das Feld meistens auf einer viel größeren Längenskala variiert als die relevanten Größen, wie z.B. die Einheitszelle. Der letzte Term des Hamiltonoperators beschreibt die Wechselwirkung der Elektronen untereinander und wird im Folgenden mit \hat{H}_{WW} bezeichnet.

Zur Lösung der Heisenberggleichung wird zuerst der Kommutator des kinetischen Anteils des Hamiltonoperators mit dem Feldoperator gebildet. Man erhält

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{r}_1), \hat{H}_{\text{kin}}]_- &= - \int d\mathbf{r}' \left\{ \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} \hat{\psi}(\mathbf{r}') - \hat{\psi}(\mathbf{r}') \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \right\} \\ &= - \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_3}} \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2 \\ \lambda_3}} \frac{\hbar^2}{2m\lambda_3} \int d\mathbf{r}' \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \varphi_{\lambda_2}^*(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}') \Delta_{\mathbf{r}'} \varphi_{\lambda_3}(\mathbf{k}_3, \mathbf{r}') \\ &\quad \times \left\{ \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3} - \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3} \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} \right\} \\ &= - \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_3}} \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2 \\ \lambda_3}} \frac{\hbar^2}{2m\lambda_3} \int d\mathbf{r}' \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \varphi_{\lambda_2}^*(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}') \Delta_{\mathbf{r}'} \varphi_{\lambda_3}(\mathbf{k}_3, \mathbf{r}') \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3} \\ &= \sum_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m\lambda_1} \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}) \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} . \end{aligned} \quad (8.11)$$

Beim Übergang von der zweiten auf die dritte Zeile wurden die Antikommutatorregeln (8.7) der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren benutzt. Beim Übergang auf die vierte Zeile wurde der Laplaceoperator bezüglich \mathbf{r}' auf die Blochfunktion $\varphi_{\lambda_3}(\mathbf{k}_3, \mathbf{r}')$ angewendet und die Näherung $\nabla_{\mathbf{r}'} u_{\lambda_3}(0, \mathbf{r}') \approx 0$ benutzt. Anschließend wurde noch die Orthogonalitätsrelation (8.4) der

Blochfunktionen ausgenutzt. Zur besseren Übersichtlichkeit wurden die Zeitargumente nicht mitgeschrieben und werden erst am Ende der Herleitung wieder eingefügt.

Durch eine analoge Rechnung erhält man für den Potentialbeitrag von \hat{H}_V des Hamiltonoperators

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{r}_1), \hat{H}_V]_- &= \int d\mathbf{r}' \left\{ \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') - \hat{\psi}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \right\} \\ &= \sum_{\lambda_1, \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3} V_{\lambda_1 \lambda_3}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}, \end{aligned} \quad (8.12)$$

wobei $V_{\lambda_1 \lambda_3}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)$ das Matrixelement

$$V_{\lambda_1 \lambda_3}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) = \int d\mathbf{r}' \varphi_{\lambda_1}^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \varphi_{\lambda_3}(\mathbf{k}_3, \mathbf{r}') \quad (8.13)$$

bezeichnet.

Für den Kommutator des Feldanteils des Hamiltonoperators mit dem Feldoperator folgt aus einer zu den vorigen Betrachtungen analogen Rechnung

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{r}_1), H_E]_- &= -e_a \mathbf{E}(t_1) \int d\mathbf{r}' \left\{ \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \mathbf{r}' \hat{\psi}(\mathbf{r}') - \hat{\psi}(\mathbf{r}') \mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \right\} \\ &= -e_a \mathbf{E}(t_1) \sum_{\lambda_1, \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3} \int d\mathbf{r}' \varphi_{\lambda_1}^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}') \mathbf{r}' \varphi_{\lambda_3}(\mathbf{k}_3, \mathbf{r}') \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Das hier vorkommende Integral soll genauer untersucht werden. Dafür werden die Blochfunktionen nach (8.3) ausgeschrieben. Das Integral lautet dann

$$\frac{1}{V} \int_V d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{r}'} u_{\lambda_1}^*(0, \mathbf{r}') \mathbf{r}' u_{\lambda_3}(0, \mathbf{r}'). \quad (8.15)$$

Die Integration über das gesamte Kristallvolumen kann unter Benutzung der Beziehung $\int_V \rightarrow \sum_N \int_\Omega$ in eine Integration über eine Einheitszelle und eine Summation über alle N Einheitszellen des Kristalls vereinfacht werden. Ω bezeichnet hier das Volumen der Einheitszelle, für das gilt $V = N \Omega$. Zusätzlich wird \mathbf{r}' noch durch $\mathbf{r}' + \mathbf{R}_n$ ersetzt, wobei \mathbf{R}_n einen Gittervektor bezeichnet. Da $u_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ eine gitterperiodische Funktion ist, gilt für sie $u_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = u_\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ und das Integral wird zu

$$\frac{1}{N \Omega} \sum_{n=1}^N e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{R}_n} \int_\Omega d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{r}'} u_{\lambda_1}^*(0, \mathbf{r}') (\mathbf{r}' + \mathbf{R}_n) u_{\lambda_3}(0, \mathbf{r}'). \quad (8.16)$$

Dieser Ausdruck kann als Summe zweier Integrale geschrieben werden. Für die weiteren Betrachtungen wird die Annahme gemacht, dass durch die Dipolwechselwirkung nur Interband-Übergänge hervorgerufen werden, d.h. $\lambda_1 \neq \lambda_3$. Mit dieser Annahme und unter Benutzung der

Orthogonalitätsrelation (8.4) (hier ist V durch Ω zu ersetzen) gilt für das erste Integral

$$\frac{1}{N\Omega} \sum_{n=1}^N e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{R}_n} \mathbf{R}_n \int_{\Omega} d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{r}'} u_{\lambda_1}^*(0, \mathbf{r}') u_{\lambda_3}(0, \mathbf{r}') = 0. \quad (8.17)$$

Bei der Auswertung des zweiten Integrals ist zu berücksichtigen, dass das Integral über das Volumen der Einheitszelle für alle Einheitszellen den gleichen Wert ergibt und daher aus der Summation über die Einheitszellen herausgezogen werden kann. Unter Benutzung der Relation $\sum_{n=1}^N e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{R}_n} = N \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3}$ erhält man

$$\delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)\mathbf{r}'} u_{\lambda_1}^*(0, \mathbf{r}') \mathbf{r}' u_{\lambda_3}(0, \mathbf{r}'). \quad (8.18)$$

Das Integral soll nun wieder in die Berechnung (8.14) des Kommutators eingesetzt werden. Der Kommutator lautet dann

$$\left[\hat{\psi}(\mathbf{r}_1), H_E \right]_- = \mathbf{E}(t_1) \sum_{\lambda_1, \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_1} \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \mathbf{d}_{\lambda_1 \lambda_3} \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_1}, \quad (8.19)$$

mit dem Dipolmatrixelement

$$\mathbf{d}_{\lambda_1 \lambda_3} = -\frac{e_a}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' u_{\lambda_1}^*(0, \mathbf{r}') \mathbf{r}' u_{\lambda_3}(0, \mathbf{r}'). \quad (8.20)$$

Das Dipolmatrixelement ist mit den gemachten Näherungen unabhängig von dem Kristallimpuls \mathbf{k} .

Jetzt fehlt nur noch die Berechnung des Kommutators des Wechselwirkungsanteils \hat{H}_{WW} des Hamiltonoperators mit dem Feldoperator. Der Kommutator lautet

$$\begin{aligned} \left[\hat{\psi}(\mathbf{r}_1), H_{WW} \right]_- &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \left\{ \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'') W(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \hat{\psi}(\mathbf{r}'') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \right. \\ &\quad \left. - \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'') W(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \hat{\psi}(\mathbf{r}'') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \right\} \\ &= \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \\ \lambda_4, \lambda_5}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_4, \mathbf{k}_5}} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \varphi_{\lambda_2}^*(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}') \varphi_{\lambda_3}^*(\mathbf{k}_3, \mathbf{r}'') W(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \varphi_{\lambda_4}(\mathbf{k}_4, \mathbf{r}'') \varphi_{\lambda_5}(\mathbf{k}_5, \mathbf{r}') \\ &\quad \times \frac{1}{2} \left\{ \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}^\dagger \hat{a}_{\lambda_4, \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\lambda_5, \mathbf{k}_5} - \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}^\dagger \hat{a}_{\lambda_4, \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\lambda_5, \mathbf{k}_5} \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} \right\} \\ &= \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2 \\ \lambda_3, \lambda_4}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}} \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) W_{12,34} \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\lambda_4, \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}, \end{aligned} \quad (8.21)$$

wobei das Matrixelement der Wechselwirkung definiert ist durch

$$\begin{aligned} W_{12,34} &= W_{\lambda_1 \lambda_2, \lambda_3 \lambda_4}(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4) \\ &= \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \varphi_{\lambda_2}^*(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}') \varphi_{\lambda_1}^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}'') W(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') \varphi_{\lambda_3}(\mathbf{k}_3, \mathbf{r}'') \varphi_{\lambda_4}(\mathbf{k}_4, \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (8.22)$$

Für das Matricelement gilt $W_{12,34} = W_{34,12}$.

Somit ist die Berechnung der rechten Seite der Heisenberggleichung, also die Berechnung des Kommutators des Feldoperators $\hat{\psi}(1)$ und des Hamiltonoperator (8.10), abgeschlossen. Es fehlt aber noch die Betrachtung der linken Seite. Für diese erhält man

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \sum_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}. \quad (8.23)$$

Die beiden Seiten der Heisenberggleichung können nun wieder zusammengesetzt werden, so dass sich die folgende Gleichung ergibt

$$\begin{aligned} & \sum_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_{\lambda_1}} \right) \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1} - \sum_{\lambda_1, \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3} V_{\lambda_1 \lambda_3}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3} \\ & - \mathbf{E}(t_1) \sum_{\lambda_1, \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_1} \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \mathbf{d}_{\lambda_1 \lambda_3} \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_1} = \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \varphi_{\lambda_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) W_{12,34} \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^\dagger \hat{a}_{\lambda_4, \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}. \end{aligned} \quad (8.24)$$

An dieser Gleichung kann ein Koeffizientenvergleich durchgeführt werden. Anschließend wird die gesamte Gleichung von rechts mit $\hat{a}_{\lambda'_1, \mathbf{k}'_1}^\dagger(t'_1)$ multipliziert, wobei die Zeiten von nun an wieder mitgeschrieben werden

$$\begin{aligned} & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_{\lambda_1}} \right) \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}(t_1) \hat{a}_{\lambda'_1, \mathbf{k}'_1}^\dagger(t'_1) - \sum_{\mathbf{k}_3, \lambda_3} V_{\lambda_1 \lambda_3}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3, t_1) \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}(t_1) \hat{a}_{\lambda'_1, \mathbf{k}'_1}^\dagger(t'_1) \\ & - \mathbf{E}(t_1) \sum_{\lambda_3} \mathbf{d}_{\lambda_1 \lambda_3} \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_1}(t_1) \hat{a}_{\lambda'_1, \mathbf{k}'_1}^\dagger(t'_1) \\ & = \int dt_2 \sum_{\lambda_2, \lambda_3} \sum_{\lambda_4} \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \delta(t_1 - t_2) W_{12,34} \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}^\dagger(t_2) \hat{a}_{\lambda_4, \mathbf{k}_4}(t_2) \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}(t_2) \hat{a}_{\lambda'_1, \mathbf{k}'_1}^\dagger(t'_1). \end{aligned} \quad (8.25)$$

Das Ziel ist eine Bewegungsgleichung für die Einteilchen-Greenfunktion (8.9) zu erhalten. Es wird daher eine Mittelung über den Dichteoperator durchgeführt und der Zeitordnungsoperator T_C auf die Gleichung angewendet. Unter Benutzung der Definition (8.9) der Einteilchen- und Zweiteilchen-Greenfunktion für Mehrbandsysteme erhält man dann die gewünschte Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}
& \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_{\lambda_1}} \right) G_{\lambda_1 \lambda'_1}(\mathbf{k}_1 t_1, \mathbf{k}'_1 t'_1) - \sum_{\bar{\mathbf{k}}, \bar{\lambda}} V_{\lambda_1 \bar{\lambda}}(\mathbf{k}_1 - \bar{\mathbf{k}}, t_1) G_{\bar{\lambda} \lambda'_1}(\bar{\mathbf{k}} t_1, \mathbf{k}'_1 t'_1) \\
& \quad - \mathbf{E}(t_1) \sum_{\bar{\lambda}} \mathbf{d}_{\lambda_1 \bar{\lambda}} G_{\bar{\lambda} \lambda'_1}(\mathbf{k}_1 t_1, \mathbf{k}'_1 t'_1) = \delta_C(1 - 1') \\
& - i\hbar \int_C dt_2 \sum_{\substack{\lambda_2, \lambda_3 \\ \lambda_4}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_4}} \delta(t_1 - t_2) W_{12,34} G_{\lambda_3 \lambda_4, \lambda'_1 \lambda_2}(\mathbf{k}_3 t_1, \mathbf{k}_4 t_2; \mathbf{k}'_1 t'_1, \mathbf{k}_2 t_2^+) . \quad (8.26)
\end{aligned}$$

Um die adjungierte Bewegungsgleichung zu erhalten, ist eine analoge Rechnung für den adjungierten Feldoperator $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'_1, t'_1)$ durchzuführen. Man erhält aus der Heisenberggleichung nach Vollzug des Koeffizientenvergleichs

$$\begin{aligned}
& \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'_1{}^2}{2m_{\lambda'_1}} \right) \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}(t_1) \hat{a}_{\lambda'_1, \mathbf{k}'_1}^\dagger(t'_1) - \sum_{\lambda_3, \mathbf{k}_3} V_{\lambda_3, \lambda'_1}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}'_1) \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}(t_1) \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}^\dagger(t'_1) \\
& \quad - \mathbf{E}(t'_1) \sum_{\lambda_3} \mathbf{d}_{\lambda_3 \lambda'_1} \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}(t_1) \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}'_1}^\dagger(t'_1) \\
& = \sum_{\substack{\lambda_2, \lambda_3 \\ \lambda_4}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_4}} W_{34, 1'2} \hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}(t_1) \hat{a}_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}^\dagger(t'_1) \hat{a}_{\lambda_4, \mathbf{k}_4}^\dagger(t_2) \hat{a}_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}(t_2) . \quad (8.27)
\end{aligned}$$

Diese Gleichung wurde von links mit $\hat{a}_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}^\dagger(t_1)$ multipliziert. Die Gleichung kann mit dem von dem Feldoperator $\hat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)$ schon bekannten Verfahren in eine Bewegungsgleichung der Einteilchen-Mehrband-Greenfunktion umgewandelt werden

$$\begin{aligned}
& \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'_1{}^2}{2m_{\lambda'_1}} \right) G_{\lambda_1 \lambda'_1}(\mathbf{k}_1 t_1, \mathbf{k}'_1 t'_1) - \sum_{\bar{\mathbf{k}}, l} G_{\lambda_1 \bar{\lambda}}(\mathbf{k}_1 t_1, \bar{\mathbf{k}} t'_1) V_{\bar{\lambda} \lambda'_1}(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{k}'_1) \\
& \quad - \mathbf{E}(t'_1) \sum_{\bar{\lambda}} G_{\lambda_1 \bar{\lambda}}(\mathbf{k}_1 t_1, \mathbf{k}'_1 t'_1) \mathbf{d}_{\bar{\lambda} \lambda'_1} = \delta_C(1 - 1') \\
& - i\hbar \int_C dt_2 \sum_{\substack{\lambda_2, \lambda_3 \\ \lambda_4}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_4}} \delta(t'_1 - t_2) W_{34, 1'2} G_{\lambda_1 \lambda_2, \lambda_3 \lambda_4}(\mathbf{k}_1 t_1, \mathbf{k}_2 t_2^-; \mathbf{k}_3 t'_1, \mathbf{k}_4 t_2) . \quad (8.28)
\end{aligned}$$

Diese Gleichung stellt die zu (8.26) adjungierte Gleichung dar.

Die Gleichungen (8.26) und (8.28) sind die gesuchten Bewegungsgleichungen der Einteilchen-Greenfunktion für Mehrbandsysteme. Sie sind durch die Wechselwirkung an die Zweiteilchen-Greenfunktion gekoppelt. Diese beiden Gleichungen stellen somit die Martin-Schwinger-Hierarchie (2.43) für Mehrbandsysteme dar.

8.2.1. Entkopplung der Hierarchie

Um eine geschlossene Gleichung zu erhalten, muss für die Gleichungen (8.26) und (8.28) eine Abbruchbedingungen bestimmt werden. Dazu wird hier analog zu der Herleitung der KBE in Kapitel 2 die Selbstenergie benutzt. Diese lautet für Mehrbandsysteme

$$\begin{aligned}
 & -i\hbar \int_C dt_2 \sum_{abc} \sum_{\substack{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_4}} \delta(t_1 - t_2) W_{na,bc}(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4) G_{bc,ma}(\mathbf{k}_3 t_1 \mathbf{k}_4 t_2; \mathbf{k}'_1 t'_1 \mathbf{k}_2 t_2^+) \\
 & \quad \equiv \sum_{l, \bar{\mathbf{k}}} \int_C d\bar{t} \Sigma_{nl}(\mathbf{k}_1, \bar{\mathbf{k}}, t_1, \bar{t}) G_{lm}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}'_1, \bar{t}, t'_1), \\
 & -i\hbar \int_C dt_2 \sum_{abc} \sum_{\substack{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_4}} \delta(t'_1 - t_2) W_{bc,ma}(\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3; \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_4) G_{na,bc}(\mathbf{k}_1 t_1, \mathbf{k}_2 t_2, \mathbf{k}_3 t_2^+, \mathbf{k}_4 t'_1) \\
 & \quad \equiv \sum_{l, \bar{\mathbf{k}}} \int_C d\bar{t} G_{nl}(\mathbf{k}_1, \bar{\mathbf{k}}, t_1, \bar{t}) \Sigma_{lm}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}'_1, \bar{t}, t'_1). \tag{8.29}
 \end{aligned}$$

Wird in den Gleichungen (8.26) und (8.28) der Wechselwirkungsanteil durch die Selbstenergie ersetzt, so erhält man Kadanoff-Baym-Gleichungen für Mehrbandsysteme

$$\begin{aligned}
 & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_n} \right) G_{nm}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, t_1, t'_1) - \sum_{\bar{\mathbf{k}}, l} V_{nl}(\mathbf{k}_1 - \bar{\mathbf{k}}, t_1) G_{lm}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}'_1, t_1, t'_1) \\
 & - \mathbf{E}(t_1) \sum_l \mathbf{d}_{nl} G_{lm}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, t_1, t'_1) = \delta_C(1 - 1') + \sum_{l, \bar{\mathbf{k}}} \int_C d\bar{t} \Sigma_{nl}(\mathbf{k}_1, \bar{\mathbf{k}}, t_1, \bar{t}) G_{lm}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}'_1, \bar{t}, t'_1) \\
 & \text{und die adjungierte Gleichung} \\
 & \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'_1{}^2}{2m_m} \right) G_{nm}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, t_1, t'_1) - \sum_{\bar{\mathbf{k}}, l} G_{nl}(\mathbf{k}_1, \bar{\mathbf{k}}, t_1, t'_1) V_{lm}(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{k}'_1, t'_1) \\
 & - \mathbf{E}(t'_1) \sum_l G_{nl}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, t_1, t'_1) \mathbf{d}_{lm} = \delta_C(1 - 1') + \sum_{l, \bar{\mathbf{k}}} \int_C d\bar{t} G_{nl}(\mathbf{k}_1, \bar{\mathbf{k}}, t_1, \bar{t}) \Sigma_{lm}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}'_1, \bar{t}, t'_1). \tag{8.30}
 \end{aligned}$$

Um eine übersichtlichere Darstellung zu erhalten, wurde der Bandindex nicht mehr mit λ_1, λ'_1 , sondern mit n, m bezeichnet.

Je nach Zeitordnung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf der Keldysh-Kontur lassen sich aus dieser Gleichung analog zu den Einbandsystemen die Bewegungsgleichungen der vier Einteilchen-Greenfunktionen ableiten.

8.2.2. Darstellung der KBE in Relativ- und Schwerpunktvariablen

Die Gleichungen (8.30) sollen nun in Relativ- und Schwerpunktvariablen dargestellt werden. Da die Greenfunktionen in Abhängigkeit des Kristallimpulses \mathbf{k} dargestellt sind, sind hier nicht Relativ- und Schwerpunktkoordinaten, sondern Impulse zu betrachten. In Übereinstimmung mit [31] wird der folgende Zusammenhang des Relativimpulses \mathbf{k} und des Schwerpunktimpulses \mathbf{Q} mit den Teilchenimpulsen \mathbf{k}_1 und $-\mathbf{k}'_1$ benutzt:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1, & \mathbf{k} &= \alpha_{nm}\mathbf{k}_1 + \beta_{nm}\mathbf{k}'_1, \\ \mathbf{k}_1 &= \mathbf{k} + \alpha_{nm}\mathbf{Q}, & \mathbf{k}'_1 &= \mathbf{k} - \beta_{nm}\mathbf{Q}, \end{aligned} \quad (8.31)$$

mit $\alpha_{nm} = \frac{m_n}{m_n+m_m}$ und $\beta_{nm} = \frac{m_m}{m_n+m_m}$.

Da die Relativ- und Schwerpunktimpulse in einem Festkörper von den Bandindizes abhängen, kann der Übergang auf diese Koordinaten nicht analog zu Abschnitt 3.2.2 durchgeführt werden. Der Übergang auf Relativ- und Schwerpunktimpulse wird hier daher für die erste Gleichung von (8.30) gezeigt. Die Rechnung für die adjungierte Gleichung verläuft analog.

Da unendlich ausgedehnte Systeme betrachtet werden, kann die Summe über den Kristallimpuls wie folgt in eine Integration umgewandelt werden

$$\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \Delta\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} F(\mathbf{k}) \quad (8.32)$$

Die KBE für Mehrbandsysteme wird nun zuerst in Abhängigkeit von Relativ- und Schwerpunktimпульs ausgedrückt und anschließend wird eine Fouriertransformation bezüglich des Schwerpunktimpuls \mathbf{Q} durchgeführt, um die Gleichung in Abhängigkeit von der Schwerpunktkoordinate \mathbf{R} darzustellen. Hierzu wird die Beziehung

$$G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{Q} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}} G_{nm}(\mathbf{k} + \alpha_{nm}\mathbf{Q}, \mathbf{k} - \beta_{nm}\mathbf{Q}, t_1, t'_1) \quad (8.33)$$

und die zugehörige Rücktransformation

$$G_{nm}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, t_1, t'_1) = G_{nm}(\mathbf{k} + \alpha_{nm}\mathbf{Q}, \mathbf{k} - \beta_{nm}\mathbf{Q}, t_1, t'_1) = \frac{1}{V\hbar^3} \int d\mathbf{R} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \quad (8.34)$$

benutzt.

Die verschiedenen Teile der Gleichung werden einzeln betrachtet. Die Zeitargumente werden in den folgenden Rechnungen unterdrückt.

1. Einteilchenbeiträge

$$\frac{V}{8\pi^3} \int d\mathbf{Q} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \alpha_{nm}\mathbf{Q})^2}{2m_n} \right) G_{nm}(\mathbf{k} + \alpha_{nm}\mathbf{Q}, \mathbf{k} - \beta_{nm}\mathbf{Q}) \quad (8.35)$$

$$= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2}{2m_n} (\mathbf{k}^2 + 2i\alpha_{nm}\mathbf{k}\nabla_{\mathbf{R}} - \alpha_{nm}^2 \Delta_{\mathbf{R}}) \right) G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}) . \quad (8.36)$$

Hier wurde \mathbf{Q} durch $i\nabla_{\mathbf{R}}$ ersetzt und anschließend die Beziehung (8.33) benutzt.

2. Potentialterm

In diesem Term wird zusätzlich zu der Fouriertransformation die Greenfunktion durch die Rücktransformation (8.34) ausgedrückt und der Term nach (8.31) in Abhängigkeit der Variablen \mathbf{Q} , $\bar{\mathbf{k}}$ und \mathbf{k} dargestellt. Um die folgenden Rechnungen zu vereinfachen, wird die Annahme eines bezüglich der Bandindizes diagonalen Potentials $V_{nl}(\mathbf{k}_1 - \bar{\mathbf{k}}) \rightarrow V_n(\mathbf{k}_1 - \bar{\mathbf{k}}) \delta_{nl}$ gemacht, d.h. dass durch das Potential keine Übergänge der Teilchen zwischen den verschiedenen Energiebändern hervorgerufen werden. Der Potentialterm lautet dann

$$\begin{aligned} \frac{V^2}{(2\pi)^6} \frac{1}{V\hbar^3} \int d\mathbf{R}' \int d\mathbf{Q} \int d\bar{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}} e^{i(\bar{\mathbf{k}} + \beta_{nm}\mathbf{Q} - \mathbf{k})\mathbf{R}'} V_n(\alpha_{nm}\mathbf{Q} + \mathbf{k} - \bar{\mathbf{k}}) \\ \times G_{nm}(\beta_{nm}\bar{\mathbf{k}} - \alpha_{nm}\beta_{nm}\mathbf{Q} + \alpha_{nm}\mathbf{k}, \mathbf{R}') . \end{aligned} \quad (8.37)$$

Nun folgt noch die Transformation $\mathbf{q} = \alpha_{nm}\mathbf{Q} + \mathbf{k} - \bar{\mathbf{k}}$, um im Folgenden eine Separation der makroskopischen und der mikroskopischen Skala zu ermöglichen

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{R}' \int d\mathbf{Q} \int d\mathbf{q} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{Q} - \mathbf{q})\mathbf{R}'} V_n(\mathbf{q}) G_{nm}(\mathbf{k} - \beta_{nm}\mathbf{q}, \mathbf{R}') . \quad (8.38)$$

Mit Hilfe der Darstellung der Deltafunktion kann zuerst die Integration über \mathbf{Q} und anschließend die Integration über \mathbf{R}' ausgeführt werden. Man erhält den Potentialbeitrag

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} V_n(\mathbf{q}) G_{nm}(\mathbf{k} - \beta_{nm}\mathbf{q}, \mathbf{R}) . \quad (8.39)$$

3. Feldbeitrag

Dieser Beitrag kann genau wie die Einteilchenbeiträge behandelt werden. Nach Ausführung der Fouriertransformation erhält man

$$\mathbf{E}(t_1) \sum_l \mathbf{d}_{nl} G_{lm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \quad (8.40)$$

4. Stoßterm

Für die Selbstenergie Σ werden die gleichen Transformationen (8.33) und (8.34) benutzt,

wie für die Greenfunktion. Auch hier werden – zusätzlich zu der Fouriertransformation bezüglich $\mathbf{Q} - g_{lm}(\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{k}'_1)$ und $\Sigma_{nl}(\mathbf{k}_1, \bar{\mathbf{k}})$ durch die Rücktransformation (8.34) in Relativ- und Schwerpunktgrößen dargestellt. Der Stoßterm lautet dann

$$\frac{V^2}{(2\pi)^6} \frac{1}{V^2 \hbar^6} \sum_l \int d\mathbf{Q} d\bar{\mathbf{k}} \int d\mathbf{R}' d\mathbf{R}'' e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}' - \bar{\mathbf{k}})\mathbf{R}'} e^{i(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{k}'_1)\mathbf{R}''} \Sigma_{nl}(\beta_{nl}\mathbf{k}_1 + \alpha_{lm}\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{R}') G_{lm}(\beta_{lm}\bar{\mathbf{k}} + \alpha_{lm}\mathbf{k}'_1, \mathbf{R}''). \quad (8.41)$$

mit $\mathbf{R}' = \alpha_{nl}\mathbf{r}_1 + \beta_{nl}\bar{\mathbf{r}}$ und $\mathbf{R}'' = \alpha_{lm}\bar{\mathbf{r}} + \beta_{lm}\mathbf{r}'_1$.

Diesen Term wird nach (8.31) vollständig durch die Impulse \mathbf{Q} , \mathbf{k} und $\bar{\mathbf{k}}$ ausgedrückt

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \sum_l \int d\mathbf{Q} d\bar{\mathbf{k}} \int d\mathbf{R}' d\mathbf{R}'' e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}} e^{i(\alpha_{nm}\mathbf{Q} + \mathbf{k} - \bar{\mathbf{k}})\mathbf{R}'} e^{i(\beta_{nm}\mathbf{Q} - \mathbf{k} + \bar{\mathbf{k}})\mathbf{R}''} \Sigma_{nl}(\beta_{nl}\alpha_{nm}\mathbf{Q} + \beta_{nl}\mathbf{k} + \alpha_{lm}\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{R}') G_{lm}(-\alpha_{lm}\beta_{nm}\mathbf{Q} + \alpha_{lm}\mathbf{k} + \beta_{lm}\bar{\mathbf{k}}, \mathbf{R}''). \quad (8.42)$$

Auch hier werden die folgenden Koordinatentransformationen durchgeführt, um eine spätere Separation der mikroskopischen und der makroskopischen Skala zu ermöglichen. Die alten Impulskoordinaten \mathbf{Q} , $\bar{\mathbf{k}}$ und \mathbf{k} werden durch die neuen Impulskoordinaten \mathbf{q} , \mathbf{q}' und \mathbf{k} und die alten Ortskoordinaten \mathbf{R} , \mathbf{R}' und \mathbf{R}'' werden durch die neuen Ortskoordinaten \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 und \mathbf{R} ersetzt, für die

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= \frac{\beta_{lm}}{N}\mathbf{q} - \frac{\alpha_{nl}}{N}\mathbf{q}' + \frac{\alpha_{nl}\alpha_{lm} - \beta_{nl}\beta_{lm}}{N}\mathbf{k}, & \mathbf{R}' &= \mathbf{R} + \beta_{nm}\mathbf{r}_2 + (\beta_{nl} - \beta_{nm})\mathbf{r}'_2, \\ \bar{\mathbf{k}} &= \frac{\alpha_{lm}\beta_{nm}}{N}\mathbf{q} + \frac{\alpha_{nm}\beta_{nl}}{N}\mathbf{q}' - \frac{\alpha_{lm}\beta_{nl}}{N}\mathbf{k}, & \mathbf{R}'' &= \mathbf{R} + \alpha_{nm}\mathbf{r}'_2 + (\alpha_{lm} - \alpha_{nm})\mathbf{r}_2, \\ \mathbf{k} &= \mathbf{k}, & \mathbf{R} &= \mathbf{R}, \end{aligned} \quad (8.43)$$

mit $N = \alpha_{nm}\beta + \beta_{nn'}\alpha$ gilt.

Die Funktionaldeterminanten kürzen sich gegenseitig weg und man erhält den folgenden Beitrag

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \sum_l \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}' \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_2 e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}')\mathbf{r}_2} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{q})\mathbf{r}'_2} \Sigma_{nl}(\mathbf{q}, \mathbf{R} + \beta_{nm}\mathbf{r}_2 + (\beta_{nl} - \beta_{nm})\mathbf{r}'_2) G_{lm}(\mathbf{q}', \mathbf{R} + \alpha_{nm}\mathbf{r}'_2 + (\alpha_{lm} - \alpha_{nm})\mathbf{r}_2). \quad (8.44)$$

Setzt man die einzelnen Beiträge 1-4 jetzt wieder zusammen, so erhält man die KBE für Mehr-

bandsysteme in der Wignerdarstellung

$$\begin{aligned}
 & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2}{2m_n} (\mathbf{k}^2 + 2i\alpha_{nm} \mathbf{k} \nabla_{\mathbf{R}} - \alpha_{nm}^2 \Delta_{\mathbf{R}}) \right) G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & - \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} V_n(\mathbf{q}, t_1) G_{nm}(\mathbf{k} - \beta_{nm} \mathbf{q}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) - \mathbf{E}(t) \sum_l \mathbf{d}_{nl} G_{lm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & = \delta_C(1 - 1') + \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \sum_l \int_C d\bar{t} \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}' \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_2 e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}')\mathbf{r}_2} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\mathbf{r}'_2} \\
 & \quad \Sigma_{nl}(\mathbf{q}, \mathbf{R} + \beta_{nm}\mathbf{r}_2 + (\beta_{nl} - \beta_{nm})\mathbf{r}'_2, t_1, \bar{t}) G_{lm}(\mathbf{q}', \mathbf{R} + \alpha_{nm}\mathbf{r}'_2 + (\alpha_{lm} - \alpha_{nm})\mathbf{r}_2, \bar{t}, t'_1) .
 \end{aligned} \tag{8.45}$$

Diese Gleichung soll nun in der lokalen Näherung betrachten werden, wodurch die in dem Stoßterm auftretende, nichtlokale Kopplung zwischen der Selbstenergie und der Greenfunktion bezüglich der Ortsvariable entfällt. In den meisten Problemstellungen variieren die Wellenvektoren auf einer viel kleineren, mikroskopischen Skala, als die makroskopische Variable \mathbf{R} . Bei Betrachtung des Stoßterms erkennt man, dass die Koordinaten \mathbf{r}_2 und \mathbf{r}'_2 die Fouriertransformierten der Wellenvektoren \mathbf{q} und \mathbf{q}' darstellen und daher auch auf einer mikroskopischen Skala variieren. Es kann daher eine Gradientenentwicklung der Selbstenergie und der Greenfunktion des Stoßterms um die Schwerpunktkoordinate \mathbf{R} durchgeführt werden, welche in der Näherung nullter Ordnung

$$\begin{aligned}
 & \Sigma_{nl}(\mathbf{q}, \mathbf{R} + \beta_{nm}\mathbf{r}_2 + (\beta_{nl} - \beta_{nm})\mathbf{r}'_2, t_1, \bar{t}) G_{lm}(\mathbf{q}', \mathbf{R} + \alpha_{nm}\mathbf{r}'_2 + (\alpha_{lm} - \alpha_{nm})\mathbf{r}_2, \bar{t}, t'_1) \\
 & \approx \Sigma_{nl}(\mathbf{q}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}) G_{lm}(\mathbf{q}', \mathbf{R}, \bar{t}, t'_1)
 \end{aligned} \tag{8.46}$$

ergibt. Diese Näherung entspricht der lokalen Näherung. Werden die Selbstenergie und die Greenfunktion entsprechend des obigen Ausdrucks in (8.45) ersetzt, fällt die Integration über \mathbf{r}_2 und \mathbf{r}'_2 durch die Darstellung der Deltafunktion weg, mit der anschließend die Integrationen über \mathbf{q} und \mathbf{q}' ausgeführt werden können. Man erhält die KBE für Mehrbandsysteme

$$\begin{aligned}
 & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \frac{\hbar^2}{2m_n} (\mathbf{k}^2 + 2i\alpha_{nm} \mathbf{k} \nabla_{\mathbf{R}} - \alpha_{nm}^2 \Delta_{\mathbf{R}}) \right) G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & - \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} V_n(\mathbf{q}, t_1) G_{nm}(\mathbf{k} - \beta_{nm} \mathbf{q}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) - \mathbf{E}(t_1) \sum_l \mathbf{d}_{nl} G_{lm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
 & = \delta_C(1 - 1') + \sum_l \int_C d\bar{t} \Sigma_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}) G_{lm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \bar{t}, t'_1) .
 \end{aligned} \tag{8.47}$$

Durch eine entsprechende Rechnung bezüglich der zweiten Gleichung in (8.30) erhält man die zugehörige adjungierte Gleichung

$$\begin{aligned}
& \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'_1} - \frac{\hbar^2}{2m_m} (\mathbf{k}^2 - 2i\beta_{nm}\mathbf{k}\nabla_{\mathbf{R}} - \beta_{nm}^2 \Delta_{\mathbf{R}}) \right) G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
& - \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} V_m(\mathbf{q}, t'_1) G_{nm}(\mathbf{k} + \alpha_{nm}\mathbf{q}', \mathbf{R}, t_1, t'_1) - \mathbf{E}(t'_1) \sum_l G_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \mathbf{d}_{lm} \\
& = \delta_C(1 - 1') + \sum_l \int_C d\bar{t} G_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, \bar{t}) \Sigma_{lm}(\mathbf{k}, \mathbf{R}, \bar{t}, t'_1) . \tag{8.48}
\end{aligned}$$

Diese beiden Gleichungen stellen die Bewegungsgleichungen der Einteilchen-Mehrband-Greenfunktion eines Vielteilchensystems in einem elektrischen Feld und einem Confinementpotential dar. Für die Wechselwirkung der Teilchen mit dem elektrischen Feld wurde die Dipolnäherung benutzt und die Stoßterme sind in der lokalen Näherung angegeben. Diese Gleichungen sind die Verallgemeinerung der Gleichungen (3.40) und (3.41) auf Mehrbandsysteme. Damit ist die Grundlage für die Anwendung des Quantenpotentials auf Mehrbandsysteme gelegt, wodurch sich das Anwendungsgebiet erheblich erweitert. Ein weiterer Schritt sollte in dem Übergang auf eine eichinvariante Darstellung bestehen, wie es in Kapitel 3 demonstriert wurde.

9. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine komplett eichinvariante Methode zur Untersuchung von Vielteilchensystemen in einem homogenen elektrischen Feld und einem zusätzlichen schwach inhomogenen Confinementpotential angegeben, in der das Feld und das Potential selbstkonsistent enthalten sind. Dazu wurden die Kadanoff-Baym-Gleichungen in einer eichinvarianten Darstellung hergeleitet, aus denen dann eichinvariante Gleichungen für die retardierte und avancierte Greenfunktion zur Untersuchung der spektralen Eigenschaften des Systems, sowie eine eichinvariante kinetische Gleichung für die Wignerfunktion zur Untersuchung der statistischen Eigenschaften des Systems folgten. In der anschließenden Untersuchung der Spektralfunktion wurde gezeigt, dass die unter der Annahme eines schwach inhomogenen Potentials bestimmten Spektralfunktionen nur für die Beschreibung von klassischen Systemen gültig sind. Um auch Spektralfunktionen erhalten zu können, in denen Quanteneffekte berücksichtigt werden, wurde der Ansatz eines Quantenpotentials auf die betrachteten Nichtgleichgewichtssysteme angewendet. Die Idee war hierbei, die Form der klassischen Spektralfunktion beizubehalten, das ursprüngliche, lokale Potential allerdings durch ein nichtlokales Quantenpotential zu ersetzen, d.h. die Quanteneffekte in das Potential zu integrieren. Dazu wurde eine Bestimmungsgleichung für das Quantenpotential entwickelt, welche mit Hilfe eines Iterationsverfahrens gelöst wurde. Das auf diese Weise erhaltene Quantenpotential stellt eine Verallgemeinerung der bisher bekannten Quantenpotentiale dar, da es für Systeme im Nichtgleichgewicht gültig ist, die sich in einem homogenen elektrischen Feld und einem schwach inhomogenen Confinementpotential befinden. Durch eine Mittelung des Quantenpotentials über eine Gleichgewichtsverteilung konnte ein Vergleich mit einem für Gleichgewichtssysteme gültigen Quantenpotential durchgeführt werden, der eine qualitative Übereinstimmung ergab.

Mit dem Quantenpotential konnte eine quantenmechanische Spektralfunktion bestimmt werden, die durch die Impulsabhängigkeit des Quantenpotentials die Heisenbergsche Unschärfere-lation nicht mehr verletzt. Es wurde gezeigt, dass sich der Delta-Peak der klassischen Spektral-

funktion auch ohne die Berücksichtigung von Stößen durch die Anwesenheit eines elektrischen Feldes eines Quantenpotentials verbreitert, und zusätzliche Nebenpeaks entstehen. Im Anschluss folgte noch eine konkrete Auswertung des Quantenpotentials und der quantenmechanischen Spektralfunktion für den Fall eines Oszillatorpotentials und eines konstanten elektrischen Feldes. Mit diesem Quantenpotential wurde die Zustandsdichte dieses Systems bestimmt und mit der Zustandsdichte ohne die Berücksichtigung des Quantenpotentials verglichen. Hierbei wurde deutlich, dass durch das Quantenpotential negative Teilchenenergien möglich werden.

Nach der Betrachtung der spektralen Eigenschaften des Systems folgte die Herleitung einer eichinvariante kinetische Gleichung für die Wignerfunktion. Hierzu wurde der GKBA, sowie die Stoßintegrale in der Bornschen Näherung in einer eichinvarianten Darstellung angegeben. Die Stoßterme wurden in der lokalen Näherung betrachtet, wobei eine nichtlineare Abhängigkeit der Stoßprozesse vom elektrischen Feld erkennbar war, die auf den “intracollisional field effect” und die Entstehung höherer Harmonischer führte. Es wurde zudem gezeigt, dass in der lokalen Näherung keine Modifikation der Stoßprozesse durch das Confinement- oder Quantenpotential entstehen.

Abschließend folgte noch eine Verallgemeinerung der Greenfunktionen und der KBE auf die Beschreibung von Mehrbandsystemen. Hierzu wurden die Feldoperatoren nach den Blochfunktionen entwickelt, womit Greenfunktionen abgeleitet werden konnten, die eine zusätzliche Abhängigkeit vom Bandindex besitzen. Durch die Heisenberggleichung der Feldoperatoren, welche dann auch nach den Blochfunktionen entwickelt wurde, konnte die KBE für Mehrbandsysteme abgeleitet werden. Auch hier wurden ein elektrisches Feld – im Rahmen der Dipolnäherung – und ein externes Confinementpotential berücksichtigt.

Es wurden aber auch einige interessante Aspekte entdeckt, die im Rahmen dieser Diplomarbeit leider nicht mehr betrachtet werden konnten und daher im Folgenden näher untersucht werden sollten:

- Bei der Entwicklung des Quantenpotentials ist in den Korrekturtermen (5.13) und (5.19) ein physikalisch nicht begründeter Term aufgetreten. Obwohl dieser Term vernachlässigbar klein ist und eine gute Übereinstimmung mit einem Quantenpotential im Gleichgewicht gegeben ist, scheint der gewählte Ansatz (5.1) nicht optimal zu sein. Es soll daher untersucht werden, ob ein besserer Ansatz zur Bestimmung des Quantenpotentials gefunden werden kann, in dem dieser Term nicht auftaucht. Hierbei wäre eine Idee, statt von

der Spektralfunktion in Abhängigkeit von τ , von der Spektralfunktion in der Energiedarstellung auszugehen. Ein anderer Ansatz wäre es, nicht die Spektralfunktion, sondern die Wignerfunktion als Ausgangspunkt zu wählen. Dieser Ansatz würde allerdings auf ein einzeitiges Quantenpotential führen.

- Bei der Untersuchung des Stoßintegrals in Kapitel 7 wurde in dem eichinvarianten GKBA für $g_a^{R/A}$ näherungsweise die freie Lösung (5.20)

$$\tilde{g}_a^{R/A}(\mathbf{R}, \mathbf{k}, t_1, t'_1) = \mp \frac{i}{\hbar} \Theta(\pm(t_1 - t'_1)) e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{k^2}{2m_a} + \delta V_Q(\mathbf{k}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tau^3 \right) \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} P_a(t_1, t'_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} S_a(t_1, t'_1)}$$

inklusive Quantenpotential benutzt. Da die Stoßintegrale aber in der lokalen Näherung angegeben wurden, fielen alle Gradiententerme weg, so dass die gesamte Quantenkorrektur δV_Q verschwand. Es soll daher eine Untersuchung der Stoßterme in der ersten Ordnung Gradientenkorrektur durchgeführt werden. In dieser Näherung fällt die Quantenkorrektur des Potentials nicht mehr weg und die Inhomogenität des Potentials wird berücksichtigt. In dem Fall ist daher eine Abhängigkeit der Stoßprozesse von dem Potential und den Quantenkorrekturen zu erwarten.

- Im Kapitel 7 wurde abschließend die Bestimmungsgleichung (7.31) der Wignerfunktion angegeben, die Wignerfunktion selbst aber nicht bestimmt. Im Falle starker elektrischer Felder sind die Stoßprozesse vernachlässigbar klein und die Gleichung (7.31) kann mit dem Silin-Ansatz gelöst werden. Für den Fall von Systemen, die sich nur in einem elektrischen Feld befinden wurde dies in [4] durchgeführt. Hier soll die Wignerfunktion unter zusätzlicher Berücksichtigung eines schwach inhomogenen Confinementpotentials bestimmt werden.
- Die Arbeit endet mit der Angabe der KBE für Mehrbandsysteme. Ein Ziel weiterführender Arbeit sollte daher eine eichinvariante Darstellung dieser Gleichung und eine anschließende Untersuchung verschiedener Mehrbandsysteme sein.

Abschließend kann gesagt werden, dass in dieser Arbeit ein eichinvarianter Formalismus vorgestellt wurde, der für eine effiziente Beschreibung von schwach inhomogenen Vielteilchensystemen im Nichtgleichgewicht in einem starken elektrischen Feld geeignet ist. Durch die Berücksichtigung eines Quantenpotentials wurde dabei eine konsistente Verwendung der lokalen Näherung ermöglicht. Dieses stellt einen guten Ausgangspunkt für folgende Untersuchungen dar.

A. Relationen der Airy-Funktion

Es soll hier der Lösungsweg des Integrals (6.4) dargestellt werden. Dazu werden Beziehungen für die Airy-Funktion aus dem Paper von Aspnes [32] benutzt:

Es wird ein Integral der folgenden Struktur betrachtet:

$$\rho(\omega, \mathbf{R}) = b \alpha^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} dt t^{\frac{1}{2}} \text{Ai}(t+x) . \quad (\text{A.1})$$

Dieses Integral kann analytisch in mehreren Schritten gelöst werden.

1. Das Integral wird nun mit Hilfe der Beziehung

$$\int_0^{\infty} dt t^n \text{Ai}(t+x) = \left[\frac{d^2}{dx^2} - x \right] \int_0^{\infty} dt t^{n-1} \text{Ai}(t+x) \quad (\text{A.2})$$

in der Ordnung reduziert. Dieser Vorgang wird so oft wiederholt, bis das Integral lösbar ist, d.h. bis $0 \geq n > -1$. Auf das obige Integral wird diese Beziehung also einmal angewendet

$$\int_0^{\infty} dt t^{\frac{1}{2}} \text{Ai}(t+x) = \left[\frac{d^2}{dx^2} - x \right] \int_0^{\infty} dt t^{-\frac{1}{2}} \text{Ai}(t+x) . \quad (\text{A.3})$$

2. Das so entstandene Integral läßt sich lösen:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - x \right] \int_0^{\infty} dt t^{-\frac{1}{2}} \text{Ai}(t+x) = \left[\frac{d^2}{dx^2} - x \right] \kappa \pi \text{Ai}^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) , \quad (\text{A.4})$$

mit $\kappa = 2^{\frac{2}{3}}$

3. Nun muss noch der Differentialoperator auf das Quadrat der Airy-Funktion angewendet werden:

$$\frac{d^2}{dx^2} \text{Ai}^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) = \frac{2}{\kappa^2} \text{Ai}'^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) + \frac{2}{\kappa^2} \text{Ai}\left(\frac{x}{\kappa}\right) \text{Ai}''\left(\frac{x}{\kappa}\right) = \frac{2}{\kappa^2} \text{Ai}'^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) + \frac{2}{\kappa^2} \frac{x}{\kappa} \text{Ai}^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) . \quad (\text{A.5})$$

Hier wurde beim Übergang von der ersten zur zweiten Zeile die Bestimmungsgleichung der Airy-Funktion $\frac{d^2}{dx^2} \text{Ai}(x) = x \text{Ai}(x)$ benutzt.

4. Nun wird diese Beziehung nun auf die Darstellung der Zustandsdichte in 3. angewendet:

$$\begin{aligned} \kappa\pi \left[\frac{d^2}{dx^2} - x \right] \text{Ai}^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) &= \frac{1}{2}\kappa^2\pi \left\{ \frac{4}{\kappa^3} \text{Ai}'^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) + \left(\frac{4}{\kappa^3} - 2\right) \frac{x}{\kappa} \text{Ai}^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) \right\} \\ &= \frac{1}{2}\kappa^2\pi \left\{ \text{Ai}'^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) - \frac{x}{\kappa} \text{Ai}^2\left(\frac{x}{\kappa}\right) \right\}. \quad (\text{A.6}) \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck entspricht der Zustandsdichte (6.5).

B. Faltung in einer eichinvarianten Darstellung

Hier sollen die Zwischenschritte der Rechnung (3.36) gezeigt werden. Die Ausgangsgleichung lautet

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \int d\bar{\mathbf{r}} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}'_1}{(2\pi\hbar)^6} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}-\bar{\mathbf{r}}) \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'} \right)} \tilde{A}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{\mathbf{r}} \left(\mathbf{k}'_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{\bar{t}_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{\bar{t}_1 - t'} \right)} \tilde{B}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{R}). \quad (\text{B.1})$$

Hier werden nun die Exponentialfunktionen zusammengefasst, die zu den verschiedenen Ortskoordinaten gehören

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \int d\bar{\mathbf{r}} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}'_1}{(2\pi\hbar)^6} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{\mathbf{r}} \left(\mathbf{k}'_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{\bar{t}_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{\bar{t}_1 - t'} - \mathbf{k}_1 - \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'} \right)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'} \right)} \tilde{A}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}) \tilde{B}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{R}). \quad (\text{B.2})$$

Die Integration über $\bar{\mathbf{r}}$ kann mit Hilfe der Darstellung der Deltafunktion ausgewertet werden

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \int d\bar{\mathbf{r}} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}'_1}{(2\pi\hbar)^3} \delta\left(\mathbf{k}'_1 + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{\bar{t}_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{\bar{t}_1 - t'} - \mathbf{k}_1 - \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'}\right) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'} \right)} \tilde{A}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}) \tilde{B}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{R}). \quad (\text{B.3})$$

Hiermit kann jetzt die \mathbf{k}'_1 -Integration ausgeführt werden

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \int d\bar{\mathbf{r}} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}'_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'} \right)} \tilde{A}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}) \tilde{B}\left(\mathbf{k}_1 + \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'} - \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{\bar{t}_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{\bar{t}_1 - t'}, \mathbf{R}\right). \quad (\text{B.4})$$

Um einen Vergleich mit der linken Seite zu ermöglichen, wird nun noch die folgende Substitution durchgeführt

$$\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - \bar{t}_1}. \quad (\text{B.5})$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = & \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} \tilde{A} \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - \bar{t}_1}, \mathbf{R} \right) \\ & \times \tilde{B} \left(\mathbf{k} + \frac{e_a}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} - \frac{e_a}{c} \int_{\bar{t}_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - \bar{t}_1}, \mathbf{R} \right). \quad (\text{B.6}) \end{aligned}$$

C. Betrachtung der Stoßintegrale auf der Zeitdiagonalen

Es soll gezeigt werden, dass die Stoßintegrale der eichinvarianten KBE (3.40) bis auf ein Vorzeichen gleich den Stoßintegralen der zugehörigen adjungierten Gleichung (3.41) zu gleichen Zeiten sind, d.h. dass in den Stoßintegralen (7.11) die Zeitargumente einfach vertauscht werden dürfen.

Hierzu wird von den Stoßintegralen in der Ortsdarstellung in Abhängigkeit von den Normalkoordinaten ausgegangen. Der Stoßterm der KBE zu gleichen Zeiten vereinfacht sich zu

$$\begin{aligned}
& \int d\bar{\mathbf{r}}_1 \left\{ \int_{t_0}^{t_1} d\bar{t}_1 \left(\Sigma^>(1, \bar{1}) - \Sigma^<(1, \bar{1}) \right) g^{\geq}(\bar{1}, 1') - \int_{t_0}^{t_1'} d\bar{t}_1 \Sigma^{\geq}(1, \bar{1}) \left(g^>(\bar{1}, 1') - g^<(\bar{1}, 1') \right) \right\} \\
& \xrightarrow{t_1=t_1'=t} \int d\bar{\mathbf{r}}_1 \int_{t_0}^t d\bar{t}_1 \left\{ \left(\Sigma^>(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) - \Sigma^<(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) \right) g^{\geq}(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) \right. \\
& \quad \left. - \Sigma^{\geq}(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) \left(g^>(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) - g^<(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) \right) \right\} \\
& = \int d\bar{\mathbf{r}}_1 \int_{t_0}^t d\bar{t}_1 \left\{ \Sigma^>(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) g^<(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) - \Sigma^<(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) g^>(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) \right\}.
\end{aligned} \tag{C.1}$$

In der lokalen Näherung erhält man:

$$\int d\bar{\mathbf{r}} \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \Sigma^>(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, -\bar{t}, t) g^<(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) - \Sigma^<(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, -\bar{t}, t) g^>(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right\}. \tag{C.2}$$

Der Stoßterm der adjungierten KBE zu gleichen Zeiten vereinfacht sich durch eine analoge Rechnung zu

$$- \int d\bar{\mathbf{r}}_1 \int_{t_0}^t d\bar{t}_1 \left\{ g^<(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) \Sigma^>(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) - g^>(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) \Sigma^<(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) \right\}. \tag{C.3}$$

In der lokalen Näherung läßt sich dieser Term schreiben als

$$- \int d\bar{\mathbf{r}} \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ g^<(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, -\bar{t}, t) \Sigma^>(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) - g^>(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, -\bar{t}, t) \Sigma^<(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right\}. \tag{C.4}$$

Unter Benutzung der Rechenregel $(f * g)(t) = (g * f)(t)$ für eine Faltung erhält man

$$- \int d\bar{\mathbf{r}} \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \Sigma^>(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, -\bar{t}, t) g^<(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) - \Sigma^<(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, -\bar{t}, t) g^>(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right\}. \quad (\text{C.5})$$

Vergleicht man diesen Ausdruck mit (C.2), so sieht man, dass die beiden Stoßintegrale bis auf ein entgegengesetztes Vorzeichen gleich sind. In der kinetischen Gleichung für die Wignerverteilung sind die Selbstenergie also wie folgt zu berücksichtigen:

$$2 \int d\bar{\mathbf{r}} \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \Sigma^>(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, -\bar{t}, t) g^<(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) - \Sigma^<(\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, -\bar{t}, t) g^>(\bar{\mathbf{r}}, \mathbf{R}, \bar{t}, t) \right\} \quad (\text{C.6})$$

$$= 2 \int d\bar{\mathbf{r}}_1 \int_{t_0}^t d\bar{t}_1 \left\{ \Sigma^>(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) g^<(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) - \Sigma^<(\mathbf{r}_1, \bar{\mathbf{r}}_1, t, \bar{t}_1) g^>(\bar{\mathbf{r}}_1, \mathbf{r}'_1, \bar{t}_1, t) \right\}. \quad (\text{C.7})$$

Stellt man diesen Ausdruck jetzt durch (3.38) und (7.7) noch eichinvariant dar, erhält man

$$\int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \Sigma^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) g^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) - \Sigma^<(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); t, \bar{t}) g^>(\mathbf{k} + \mathbf{K}_a^A(t, \bar{t}); \bar{t}, t) \right\}. \quad (\text{C.8})$$

D. Eichinvariante Darstellung der Selbstenergie in der Bornschen Näherung

Den Ausgangspunkt stellt die Gleichung (7.25) dar. Die Selbstenergien werden in der lokalen Näherung betrachtet, d.h. es existiert nur eine parametrische Abhängigkeit von der Schwerpunktkoordinate \mathbf{R} . Dann kann die Gleichung (7.25) mit Hilfe der Rücktransformation (3.10) wie folgt dargestellt werden

$$\begin{aligned}
\Sigma_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) &= \hbar^2 \sum_b \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_2 \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi\hbar)^3} \\
&\times e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\mathbf{p}_1} V_{ab}(\mathbf{p}_1) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2)\mathbf{p}_2} V_{ab}(\mathbf{p}_2) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \\
&\times e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) \left(\mathbf{k}_2 + \frac{e\mathbf{b}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} g_b^{\geq}(\mathbf{k}_2, \mathbf{R}, t_1, t'_1) e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) \left(\mathbf{k}_3 + \frac{e\mathbf{b}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} g_b^{\leq}(\mathbf{k}_3, \mathbf{R}, t'_1, t_1). \tag{D.1}
\end{aligned}$$

Fasst man die Exponentialfunktionen nun derart zusammen, dass in einer Exponentialfunktion nur die Terme zu \mathbf{r}_2 und in einer Exponentialfunktion nur die Terme zu \mathbf{r}'_2 stehen, erhält man

$$\begin{aligned}
\Sigma_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) &= \hbar^2 \sum_b \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_2 \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi\hbar)^3} \\
&\times e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}_1 \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} + \mathbf{p}_1 \right)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}'_1 \left(\mathbf{p}_2 - \mathbf{k}_1 - \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} \\
&\times e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}_2 (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{p}_1)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}'_2 (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{p}_2)} V_{ab}(\mathbf{p}_1) V_{ab}(\mathbf{p}_2) \\
&\times \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\geq}(\mathbf{k}_2, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\leq}(\mathbf{k}_3, \mathbf{R}, t'_1, t_1). \tag{D.2}
\end{aligned}$$

Benutzt man hier bezüglich der Integration über \mathbf{r}_2 und \mathbf{r}'_2 die Darstellung der Deltafunktion, erhält man

$$\begin{aligned} \Sigma_a^{\geq}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = & \hbar^2 \sum_b \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{p}_2) \\ & \times e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}_1 \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} + \mathbf{p}_1 \right)} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}'_1 \left(\mathbf{p}_2 - \mathbf{k}_1 - \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} \\ & \times V_{ab}(\mathbf{p}_1) V_{ab}(\mathbf{p}_2) \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\geq}(\mathbf{k}_2, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\leq}(\mathbf{k}_3, \mathbf{R}, t'_1, t_1). \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Durch die Deltafunktionen kann nun die Integration über \mathbf{p}_1 und \mathbf{p}_2 ausgeführt werden

$$\begin{aligned} \Sigma_a^{\geq}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = & \hbar^2 \sum_b \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \left(\mathbf{k}_1 + \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 \right)} \\ & |V_{ab}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2)|^2 \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\geq}(\mathbf{k}_2, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\leq}(\mathbf{k}_3, \mathbf{R}, t'_1, t_1). \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Durch die Transformation (3.9) kann die Selbstenergie (linken Seite) wie folgt dargestellt werden

$$\Sigma_a^{\geq}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = \int d(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) e^{-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \left(\mathbf{k}'_1 + \frac{e\mathbf{a}}{c} \int_{t'_1}^{t_1} dt' \frac{\mathbf{A}(t')}{t_1 - t'_1} \right)} \Sigma_a^{\geq}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1). \quad (\text{D.5})$$

Ersetzt man in diesem Ausdruck $\Sigma_a^{\geq}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1)$ durch (D.4) und $k'_1 \rightarrow k_a$, $k_1 \rightarrow k'_a$, $k_2 \rightarrow k'_b$ und $k_3 \rightarrow k_b$ erhält man

$$\begin{aligned} \Sigma_a^{\geq}(\mathbf{k}_a, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = & \hbar^2 \sum_b \int \frac{d\mathbf{k}'_a}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}'_b}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\mathbf{k}_b}{(2\pi\hbar)^3} \int d(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \left(\mathbf{k}'_a + \mathbf{k}'_b - \mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a \right)} \\ & |V_{ab}(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}'_b)|^2 \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}'_a, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\geq}(\mathbf{k}'_b, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\leq}(\mathbf{k}_b, \mathbf{R}, t'_1, t_1). \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Nutzt man auch hier wieder die Darstellung der Deltafunktion, folgt

$$\begin{aligned} \Sigma_a^{\geq}(\mathbf{k}_1, \mathbf{R}, t_1, t'_1) = & \frac{\hbar^2}{(2\pi\hbar)^6} \sum_b \int d\mathbf{k}'_a d\mathbf{k}'_b d\mathbf{k}_b \delta(\mathbf{k}_a + \mathbf{k}_b - \mathbf{k}'_a - \mathbf{k}'_b) \\ & |V_{ab}(\mathbf{k}_a - \mathbf{k}'_a)|^2 \tilde{g}_a^{\geq}(\mathbf{k}'_a, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\geq}(\mathbf{k}'_b, \mathbf{R}, t_1, t'_1) \tilde{g}_b^{\leq}(\mathbf{k}_b, \mathbf{R}, t'_1, t_1). \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Man erkennt, dass es sich hierbei um die gesuchte Gleichung (7.26) handelt.

Literaturverzeichnis

- [1] L.P. Kadanoff, G. Baym *Quantum Statistical Mechanics*, Benjamin, New York, (1962).
- [2] S. Fujita, *Introduction to Nonequilibrium Quantum Statistical Mechanics*, W.B. Saunders Company, Philadelphia, London, (1966).
- [3] H. Haug, A.P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Semiconductors*, Springer-Verlag, Heidelberg, NewYork, (1996).
- [4] M. Bonitz, Th. Bornath, D. Kremp, M. Schlanges and W.D. Kraeft, *Contrib. Plasma Phys.* **39**, 329 (1999).
- [5] D. Kremp, Th. Bornath, M. Bonitz and M. Schlanges, *Phys. Rev. E* **60**, 4725 (1999).
- [6] A.P. Jauho, K. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4576 (1996).
- [7] A.P. Jauho, K. Johnsen, *Phys. Rev. B* **48**, 7944 (1993).
- [8] R. Bertonecini, A.P. Jauho, *Phys. Rev. B* **44**, 3655 (1990).
- [9] M. Bonitz, J.W. Dufty, *Cond. Matt. Phys.* **7**, 483 (2004).
- [10] E. Wigner, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932).
- [11] R.P. Feynman, H. Kleinert, *Phys. Rev.* **40**, 5080 (1986).
- [12] D. Bohm, *Phys. Rev.* **85**, 166 und 180 (1986).
- [13] D.K. Ferry, J.R. Zhou, *Phys. Rev. B* **48**, 7944 (1993).
- [14] A.V. Filinov, M. Bonitz, W. Ebeling, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 5957 (2003).
- [15] A.V. Filinov, V.O. Golubnychiy, M. Bonitz, W. Ebeling, J.W. Dufty, *Phys. Rev. E* **70**, 046411 (2004).

- [16] W. Ebeling, A. Filinov, M. Bonitz, V. Filinov, T. Pohl, J. Phys. A: Math. Gen. **39**, 4309 (2006).
- [17] M. Bonitz, *Quantum Kinetic Theory*, Teubner, Stuttgart/Leipzig, (1998).
- [18] D. Kremp, M. Schlanges and W.D. Kraeft, *Quantum Statistics of Nonideal Plasmas*, Springer-Verlag, Heidelberg, New York, (1996).
- [19] M. Bonitz, D. Semkat (Eds.) *Introduction to Computational Methods in Many-Body-Problems*, Rinton-Press, Princeton, (2006).
- [20] M. Bonitz, D. Semkat (Eds.) *Progress in Nonequilibrium Green's Functions II*, World Scientific, New Jersey, (2003).
- [21] D. Kremp, D. Semkat, M. Bonitz, Th. Bornath, J. Phys. **41**, 661 (1985).
- [22] D. Kremp, M. Schlanges, J. Phys.: Conf.Ser. **11** (2005).
- [23] L.D. Landau, E.M. Lifschitz, *Course of Theoretical Physics: Quantum Mechanics*, Pergamon, Oxford, (1962).
- [24] C.L. Gardener, C. Ringhofer, Phys. Rev. E **53**, 157 (1996).
- [25] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker *Theoretische Physik Band 9: Thermodynamik und statistische Mechanik*, Thun, Frankfurt am Main (1993).
- [26] P. Lipavsky, V. Spicka, B. Velicky Phys. Rev. B **34**, 6933 (1986).
- [27] Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, Oldenbourg, München, Wien, (1999).
- [28] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Festkörperphysik*, Oldenbourg, München, (2005).
- [29] H. Ibach, H. Lüth, *Festkörperphysik: Einführung in die Grundlagen*, Springer, Berlin, (2002).
- [30] H. Haug, S.W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific, Singapore, (2004).
- [31] W. Schäfer, M. Wegener, *Semiconductor Optics and Transport Phenomena*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, (2002).
- [32] D.A. Aspnes, Phys. Rev. **147**, 554 (1966).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich während meines Studiums und vor allem während der Diplomarbeit auf verschiedenste Art und Weise unterstützt haben und somit wesentlich zum Zustandekommen dieser Arbeit beigetragen haben.

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Michael Bonitz bedanken. Er hat mir die Möglichkeit gegeben, diese Arbeit in seiner Gruppe anzufertigen und mich als mein Betreuer bei der Erstellung dieser Arbeit begleitet und unterstützt. Durch seine hilfreichen Anregungen hat er viel zum Fortschreiten dieser Arbeit beigetragen und in zahlreichen Diskussionen mein physikalisches Verständnis wesentlich erweitert.

Weiterhin möchte ich mich bei meinen Büropartner Herrn Karsten Balzer für die angenehme Arbeitsatmosphäre und nette, sowie geistreiche Gesellschaft bedanken. Unsere grundlegenden Diskussionen haben mir beim Verständnis der Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen sehr geholfen.

Auch meiner Arbeitsgruppe bin ich zu Dank verpflichtet. Durch das angenehme Arbeitsklima und die stete Hilfe bei Problemen wurde mir das Arbeiten sehr erleichtert. Auch an netten, motivierenden Worten in Phasen der Frustration, mangelte es nie. Außerdem waren die Kaffeepausen immer eine gute Gelegenheit um zwischendurch etwas entspannen zu können.

Ein besonderer Dank ist an Herrn Prof. Dr. Eckhardt Pehlke gerichtet. Durch seine Bereitschaft, diese Arbeit in nur einer Woche zu begutachten, ermöglicht er es mir, mich um ein Stipendium zur Förderung der Doktorarbeit zu bewerben.

Ein abschließender, großer Dank gilt natürlich meiner Familie und meinen Freunden. Hier

möchte ich vor allem meinen Eltern danken, ohne deren Beistand und finanzielle Unterstützung ich nicht hätte studieren können. Weiterhin möchte ich meinem Freund Daniel Kaiser danken, der mir während des Studiums stets treu zur Seite stand und eine große Stütze war. Er hat während des gesamten Studiums sehr viel Geduld bewiesen. Nicht unerwähnt bleiben sollte meine beste Freundin Katharina Knappe, die mir bei der Fehlerkorrektur dieser Arbeit behilflich war und für die nötige Entspannung neben dem Studium sorgte.

Eidesstattliche Erklärung

Die vorliegende Arbeit ist von mir selbständig und nur unter Zuhilfenahme der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt worden.

Kiel, den 06. Dezember 2006

(Ort)

(Datum)

(Unterschrift)