

BACHELORARBEIT

**Verbesserung der Stochastic Mean Field
Näherung für korrelierte Fermionen**

Erik Kresten Schroedter

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

April 2020

Erster Gutachter:
Zweiter Gutachter:

Prof. Dr. Michael Bonitz
Priv.-Doz. Dr. Hanno Kählert

Abstract

The description of correlation effects beyond simple mean field approximations is of great importance for the simulation of many-body systems. A simple approach is the stochastic mean field approximation, which is a combination of the mean field approach with stochastic methods. In this thesis, improvements of this approach are proposed and possible generalizations for complementary application for the description of three-particle correlation effects are presented, which are usually neglected due to the enormous computational effort. In particular, the formalism of non-equilibrium Green functions is addressed, thus providing the basis for the description of many-particle effects using stochastic methods in this framework.

Zusammenfassung

Die Beschreibung von Korrelationseffekten jenseits einfacher Mean-Field-Näherungen ist von großer Bedeutung für die Simulation von Vielteilchensystemen. Einen einfachen Ansatz stellt hier die Stochastic-Mean-Field-Näherung dar, die eine Kombination des Mean-Field-Ansatzes mit stochastischen Methoden ist. In dieser Arbeit werden Verbesserungen dieses Ansatzes vorgeschlagen und mögliche Verallgemeinerungen zur komplementären Anwendung für die Beschreibung von Dreiteilchenkorrelationseffekten präsentiert, welche in der Regel aufgrund des enormen Rechenaufwandes vernachlässigt werden. Insbesondere wird dabei auf den Formalismus der Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen eingegangen und so die Grundlage zur Beschreibung von Vielteilcheneffekten mithilfe stochastischer Methoden geschaffen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Erste Quantisierung	3
2.1	Schrödinger-Bild	3
2.2	Heisenberg-Bild	4
3	Zweite Quantisierung	5
3.1	Spin-Statistik	5
3.2	Besetzungszahldarstellung	6
3.3	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	8
3.4	Dynamik des Dichtematrixoperators	10
4	Stochastic Mean Field	15
4.1	Grundlagen der SMF-Näherung	15
4.2	Anwendung der SMF-Näherung am Hubbard-Modell	18
5	Verbesserung der SMF-Näherung	24
6	Zusammenfassung und Ausblick	32
7	Appendix	33
7.1	Zusammenhang zwischen γ und Green-Funktionen	33
7.2	Zusammenhang mit der BBGKY-Hierarchie	35
	Literatur	44

1 Einleitung

Ziel der Vielteilchentheorie ist die quantenmechanische Beschreibung von Systemen wechselwirkender Teilchen. Bereits einfache Systeme wie ein Heliumatom lassen eine analytische Lösung der Schrödinger-Gleichung nicht mehr zu. Mit zunehmender Systemgröße werden jedoch numerische Lösungen des exakten Problems aufgrund der exponentiellen Skalierung des Rechenaufwandes unmöglich. Es ist darum notwendig, physikalisch sinnvolle Näherungen zur Lösung des Vielteilchenproblems zu finden. Mean-Field-Theorien, wie beispielsweise die Hartree-Fock-Näherung (TDHF), sind die einfachsten Ansätze zur Lösung dieses Problems. In ihnen wird die Wechselwirkung von Teilchen durch ein mittleres Potential approximiert. Diese Näherungen scheitern jedoch mit zunehmender Verschränkung der Teilchen aufgrund der fehlenden Berücksichtigung von Korrelationseffekten. Um diese Effekte zusätzlich approximativ zu berücksichtigen, werden häufig Ansätze wie die zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie (TDDFT) oder die Nichtgleichgewichts-Green-Funktionen (NEGF) angewendet. Diese zur Schrödinger-Gleichung äquivalenten Formulierungen der Quantenmechanik beinhalten nun Größen wie das Austausch-Korrelations-Potential v_{xc} (TDDFT) bzw. die Selbstenergie Σ (NEGF), die physikalisch sinnvoll genähert werden. Obwohl die Beschreibung von Vielteilchensystemen im Rahmen dieser Näherungen einen deutlichen Fortschritt gegenüber Ansätzen wie TDHF bietet, ist der Preis ein signifikanter Anstieg der notwendigen Rechenleistung. Eine Alternative stellt deswegen die Stochastic-Mean-Field-Näherung (SMF) dar. In ihr wird ein Ansatz wie TDHF durch Anwendung stochastischer Methoden erweitert, um so Korrelationseffekte zu berücksichtigen. Trotz der Reduktion auf die durch Anfangsfluktuationen hervorgerufenen Korrelationen zeigen Rechnungen deutliche Verbesserungen gegenüber TDHF- und sogar NEGF-Propagationen. [1]

In dieser Arbeit soll ein Schema zur Beschreibung von zusätzlichen Korrelationseffekten vorgestellt werden. Hierzu wird eine Bewegungsgleichung für Zweiteilchendichtefluktuationen hergeleitet und die in ihr auftretenden

Dreiteilchendichtefluktuationen mithilfe der SMF-Näherung beschrieben. Ein solcher Ansatz ermöglicht es, Dreiteilchenbeiträge, die üblicherweise in Ansätzen wie den NEGF vernachlässigt werden, auf einfache Weise zu berücksichtigen, ohne den damit typischerweise einhergehenden signifikanten Anstieg an notwendiger Rechenleistung hinnehmen zu müssen.

In dieser Arbeit wird zunächst eine kurze Einführung in die notwendige Theorie gegeben. Diese umfasst die erste Quantisierung mit einem Überblick über das Schrödinger- und Heisenberg-Bild sowie die zweite Quantisierung, in welcher auf die Notwendigkeit der Spin-Statistik und die daraus folgende Besetzungszahldarstellung eingegangen wird. Des Weiteren behandelt dieser Abschnitt die fermionischen und bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sowie die Dynamik des aus ihnen folgenden Dichtematrixoperators n_{ij} . Anschließend wird eine kurze Einführung in die Grundlagen der Stochastic Mean-Field-Näherung gegeben und diese am Hubbard-Modell demonstriert. Den Hauptteil dieser Arbeit bildet das Kapitel "Verbesserung der SMF-Näherung". Hier wird eine Bewegungsgleichung für Zweiteilchenfluktuationen entwickelt und die hier auftretenden Dreiteilchenfluktuationen mithilfe der SMF-Näherung beschrieben. Abschließend wird im Ausblick gezeigt, welche Möglichkeiten für Anwendungen und Erweiterungen dieses Ansatzes in der Zukunft bestehen. Im Appendix wird hierzu die Verbindung zu den Green-Funktionen und der BBGKY-Hierarchie der reduzierten Dichteoperatoren dargestellt.

2 Erste Quantisierung

Es existieren mehrere äquivalente Beschreibungen der Quantenmechanik, von denen hier die zwei, die für diese Arbeit am wichtigsten sind, vorgestellt werden sollen. Für einen genaueren Überblick über die Formulierung der ersten Quantisierung siehe Refs. [2] und [3].

2.1 Schrödinger-Bild

In der Quantenmechanik wird der Zustand eines Systems durch seinen Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ charakterisiert, welcher Element eines Hilbert-Raums \mathcal{H} ist. Im Schrödinger-Bild sind die Zustandsvektoren zeitabhängig, d.h. $\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \neq 0$, während die Operatoren \hat{A}_S in der Regel keine explizite Zeitabhängigkeit aufweisen, d.h. $\frac{d}{dt}\hat{A}_S \equiv 0$. Die Dynamik von $|\psi(t)\rangle$ wird im Schrödinger-Bild mithilfe der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung beschrieben:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}_S|\psi(t)\rangle, \quad (2.1)$$

wobei \hat{H}_S der Hamilton-Operator des Systems ist. Die Lösung dieser Gleichung kann für einen gegebenen Anfangswert $|\psi(t_0)\rangle$ mithilfe des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}(t, t_0)$ angegeben werden, welcher die folgende Bewegungsgleichung erfüllt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0) = \hat{H}_S\hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t, t) = \hat{1}. \quad (2.2)$$

Die Lösung von $\hat{U}(t, t_0)$ hat die Form:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_S(\tau)\right) \right]. \quad (2.3)$$

Hier ist \mathcal{T} der Zeitordnungsoperator mit der folgenden Wirkung:

$$\mathcal{T}\{\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\} = \left\{ \begin{array}{l} \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2) \text{ für } t_1 > t_2 \\ \hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1) \text{ für } t_1 < t_2 \end{array} \right\}. \quad (2.4)$$

Eine Zeitabhängigkeit von \hat{H}_S tritt auf, sollte ein zeitabhängiges Potential vorliegen, in diesem Fall gilt: $\frac{d}{dt}\hat{H}_S(t) \neq 0$. Der Zeitentwicklungsoperator hat nun die Eigenschaft, dass er den Zustandsvektor in der Zeit propagiert:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \quad (2.5)$$

2.2 Heisenberg-Bild

Die zu betrachtenden Größen der Quantenmechanik sind Erwartungswerte von Operatoren, welche wie folgt berechnet werden:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A}_S | \psi(t) \rangle. \quad (2.6)$$

Im Heisenberg-Bild wird nun die Zeitabhängigkeit der Zustandsvektoren auf die Operatoren übertragen, wobei man sich zunutze macht, dass man einen zeitabhängigen Zustandsvektor durch seinen Anfangswert und den Zeitentwicklungsoperator ausdrücken kann. Gleichung (2.6) bekommt damit die Form:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (2.7)$$

$$= \langle \psi(t_0) | \hat{A}_H(t) | \psi(t_0) \rangle. \quad (2.8)$$

Hier wurde der Heisenberg-Operator $\hat{A}_H(t)$ eingeführt, der definiert ist als:

$$\hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S \hat{U}(t, t_0). \quad (2.9)$$

Die Dynamik der Heisenberg-Operatoren wird mithilfe der Heisenberg-Gleichung beschrieben:

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H(t), \hat{A}_H(t)] + \left(\frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \right)_H. \quad (2.10)$$

Hier bezeichnet $\hat{H}_H(t)$ den Hamilton-Operator im Heisenberg-Bild. Diese Gleichung vereinfacht sich für nicht explizit zeitabhängige Schrödinger-Operatoren,

da hier $\frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \equiv 0$ gilt:

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H(t), \hat{A}_H(t)]. \quad (2.11)$$

3 Zweite Quantisierung

Der Formalismus der zweiten Quantisierung stellt eine zur ersten Quantisierung äquivalente Formulierung der Quantenmechanik dar, welche unter anderem zur Beschreibung von Vielteilchensystemen benutzt wird. Siehe für eine genauere Betrachtung der Herleitungen Refs. [4],[5] und [6].

3.1 Spin-Statistik

Ein System von N Teilchen wird durch einen Zustandsvektor $|\Psi_{j_1, j_2, \dots}\rangle$, wobei die Quantenzahl j_i den Zustand des i-ten Teilchens beschreibt, und den dazugehörigen Hamilton-Operator \hat{H} charakterisiert. Wendet man den Permutationsoperator \hat{P}_{ij} auf diesen Zustand an, so folgt:

$$\hat{P}_{ij} |\Psi_{j_1, j_2, \dots, j_i, \dots, j_j, \dots}\rangle = |\Psi_{j_1, j_2, \dots, j_j, \dots, j_i, \dots}\rangle. \quad (3.1)$$

Da \hat{P}_{ij} mit dem Hamilton-Operator \hat{H} , der das N-Teilchen-System beschreibt, kommutiert ¹, müssen beide gemeinsame Eigenzustände haben. Gesucht sind also Zustände, die das Eigenwertproblem von \hat{P}_{ij} lösen. Die zweifache Anwendung von \hat{P}_{ij} überführt das System in den ursprünglichen Zustand, es folgt also für die Eigenzustände:

$$(\hat{P}_{ij})^2 |\Psi_{j_1, j_2, \dots, j_i, \dots, j_j, \dots}^\pm\rangle = \lambda_\pm^2 |\Psi_{j_1, j_2, \dots, j_i, \dots, j_j, \dots}^\pm\rangle = |\Psi_{j_1, j_2, \dots, j_i, \dots, j_j, \dots}^\pm\rangle. \quad (3.2)$$

¹ $[\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0$ muss gelten, da sich die Physik eines Systems ununterscheidbarer Teilchen bei Vertauschung nicht ändern darf.

Die Eigenwerte sind also $\lambda_{\pm} = \pm 1$ ². Man kann nun aus $|\Psi_{j_1, j_2, \dots}\rangle$ einen (anti-)symmetrischen Zustand durch Anwendung eines (Anti-) Symmetrisierungsoperators $\hat{\Lambda}_{1\dots N}^{\pm}$ konstruieren, welcher definiert ist als:

$$\hat{\Lambda}_{1\dots N}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} \text{sign}(P) \hat{P}, \quad (3.3)$$

wobei über alle möglichen Permutationen, die Teil der Permutationsgruppe S_N sind, summiert wird und $\text{sign}(P) = (\pm 1)^{N_P}$ ist. N_P gibt dabei an, in wie viele Paarpermutationen \hat{P} aufgeteilt werden kann.

3.2 Besetzungszahldarstellung

Durch die Konstruktion von (anti-)symmetrischen Zuständen wird dem Umstand Genüge getan, dass es sich um ununterscheidbare Teilchen handelt, es ist also nicht mehr möglich, einem Teilchen eine Quantenzahl eindeutig zuzuweisen. Vielmehr ist nun lediglich die Anzahl an gemeinsamen Quantenzahlen ausschlaggebend. Der (anti-)symmetrische Zustand kann also wie folgt charakterisiert werden:

$$|\Psi_{j_1, j_2, \dots}^{\pm}\rangle \equiv |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (3.4)$$

Hier gibt die Quantenzahl n_i an, wie viele Teilchen den i -ten Zustand besetzen. Man spricht von der Besetzungszahl n_i des Zustandes i (auch genannt i -tes Orbital). Für antisymmetrische Wellenfunktionen, also für Fermionen, können die Besetzungszahlen nur Werte von 0 und 1 annehmen, da die antisymmetrische Wellenfunktion sonst identisch Null wäre (Pauli-Prinzip). Dies ergibt sich beispielsweise unmittelbar aus der Betrachtung eines nicht wechselwirkenden Systems, da hier die Gesamtwellenfunktion $|\Psi_{j_1, j_2, \dots}\rangle$ in ein

²Die Unterscheidung (+/-) entspricht den Fällen von Bosonen/Fermionen.

Produkt von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen faktorisiert:

$$|\Psi_{j_1, j_2, \dots}\rangle \equiv |j_1\rangle_1 |j_2\rangle_2 \dots \quad (3.5)$$

Die Anwendung des Antisymmetrisierungsoperators $\hat{\Lambda}_{1\dots N}^-$ auf diesen Zustand führt zu einer sogenannten Slater-Determinante:

$$|\Psi_{j_1, j_2, \dots}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |j_1\rangle_1 & |j_1\rangle_2 & \dots & |j_1\rangle_N \\ |j_2\rangle_1 & |j_2\rangle_2 & \dots & |j_2\rangle_N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |j_N\rangle_1 & |j_N\rangle_2 & \dots & |j_N\rangle_N \end{vmatrix}. \quad (3.6)$$

Setzt man hier nun $j_i = j_k$, so wird die Determinante Null. Für Bosonen ergibt sich eine Permanente. Jedoch gilt in diesem Fall eine andere Normierung:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \hat{\Lambda}_{1\dots N}^+ |\Psi_{j_1, j_2, \dots}\rangle. \quad (3.7)$$

Es ergibt sich, dass die Summe der Besetzungszahlen der Gesamtteilchenzahl entspricht:

$$N = \sum_{i=1}^{\infty} n_i. \quad (3.8)$$

Außerdem gilt, dass diese Zustände orthonormiert sind:

$$\sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots |n_1, n_2, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots| = \hat{1}, \quad (3.9)$$

$$\langle n'_1, n'_2, \dots | n_1, n_2, \dots \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \quad (3.10)$$

Diese Zustände sind Element eines (anti-)symmetrischen N-Teilchen-Hilbert-Raums \mathcal{H}_N^\pm . Es ist sinnvoll, den (anti-)symmetrischen Fock-Raum \mathcal{F}^\pm zu definieren:

$$\mathcal{F}^\pm \equiv \mathcal{H}_0 \cup \mathcal{H}_1^\pm \cup \mathcal{H}_2^\pm \cup \dots, \quad (3.11)$$

wobei \mathcal{H}_0 den Vakuumzustand definiert, in dem keine Teilchen sind. Jeder (anti-)symmetrische N-Teilchen-Zustand ist auch Element des dazugehörigen Fock-Raums. Diese Beschreibung von Zuständen als Teil eines Fock-Raums ist sinnvoll, da sie die Möglichkeit liefert, Erzeugung und Vernichtung von Teilchen zu beschreiben; eine Möglichkeit, die die Beschreibung der Quantenmechanik in erster Quantisierung nicht liefert.

3.3 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Übergänge von Zuständen bedeuten in der Besetzungszahldarstellung die Änderung der Besetzungszahlen der beteiligten Orbitale. Prozesse, die Teilchen vernichten bzw. erzeugen, führen ebenfalls zu Änderungen dieser Art. Es ist darum sinnvoll, Operatoren zu definieren, die diese Anforderungen erfüllen:

$$\hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \cdot \begin{cases} (-1)^\alpha \delta_{1, n_i} & \text{für Fermionen} \\ 1 & \text{für Bosonen} \end{cases}, \quad (3.12)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \cdot \begin{cases} (-1)^\alpha \delta_{0, n_i} & \text{für Fermionen} \\ 1 & \text{für Bosonen} \end{cases}. \quad (3.13)$$

$\alpha = \sum_{k=1}^{i-1} n_k$ sorgt für die Berücksichtigung des (anti-)symmetrischen Charakters des N-Teilchen Zustandes. Die Fallunterscheidung bezüglich der letzten Faktoren führt dazu, dass die Besetzungszahl für Fermionen nur die Werte 0 und 1 annehmen kann. Eine solche Einschränkung kommt nicht für den bosonischen Fall vor. Hier dürfen lediglich keine negativen Besetzungszahlen auftreten. Diese Definition der Operatoren ist analog zu den Leiteroperatoren des harmonischen Oszillators. Ebenfalls gelten auch hier

(Anti-)Kommutatorrelationen:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_{\mp} = \delta_{ij}, \quad (3.14)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j]_{\mp} = 0, \quad (3.15)$$

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_{\mp} = 0. \quad (3.16)$$

Die Unterscheidung \mp für Bosonen/Fermionen spiegelt auch hier den (anti-)symmetrischen Charakter der Zustände wider. Mithilfe des Erzeugungsoperators \hat{a}_i^\dagger ist es möglich, einen beliebigen N-Teilchen-Zustand aus dem Vakuumzustand $|0, 0, \dots\rangle \equiv |0\rangle$ zu erzeugen:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle. \quad (3.17)$$

Es ergibt sich des Weiteren aus der Definition der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren folgender Zusammenhang:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \hat{n}_i |n_1, n_2, \dots\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} n_i |n_1, n_2, \dots\rangle = N |n_1, n_2, \dots\rangle, \quad (3.18)$$

wobei hier folgende Definition verwendet wurde: $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \hat{n}_i$. Es handelt sich bei \hat{n}_i also um den Besetzungszahloperator. Der Gesamt-Teilchenzahloperator hat damit die folgende Gestalt:

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{n}_i = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (3.19)$$

Allgemein lässt sich definieren:

$$\hat{n}_{ij} \equiv \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j. \quad (3.20)$$

Dieser Operator stellt ein Matrixelement des Dichtematrixoperators $\hat{\mathbf{n}}$ dar. Durch die Definition der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist es möglich, beliebige Operatoren im Fock-Raum zu definieren. Allgemeine Einteilchen-

und Zweiteilchenoperatoren haben folgende Form:

$$\hat{B}_1 = \sum_{ij} b_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \quad (3.21)$$

$$\hat{B}_2 = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} b_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k. \quad (3.22)$$

Hier sind b_{ij} und b_{ijkl} die Matrixelemente bezüglich einer Basis $|i\rangle$ sowie deren Produktzuständen $|kl\rangle = |k\rangle|l\rangle$ und sind definiert als:

$$b_{ij} = \langle i | \hat{B}_1 | j \rangle, \quad (3.23)$$

$$b_{ijkl} = \langle ij | \hat{B}_2 | kl \rangle. \quad (3.24)$$

Erwartungswerte von Einteilchenoperatoren lassen sich also in der zweiten Quantisierung immer mithilfe des Erwartungswertes des Dichtematrixoperatorelements $\langle \hat{n}_{ij} \rangle = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle$ ausdrücken.

Damit erhält ein allgemeiner Hamilton-Operator folgende Form:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{W} = \sum_{ij} (t_{ij} + v_{ij}) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} w_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k, \quad (3.25)$$

wobei $\hat{T} + \hat{V}$ die kinetische Energie sowie ein externes Potential und \hat{W} die Wechselwirkung zwischen den Teilchen beschreibt.

3.4 Dynamik des Dichtematrixoperators

Da die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die zentralen Größen der zweiten Quantisierung darstellen, ist es sinnvoll, ihre Dynamik zu bestimmen. Ausgangspunkt hierfür ist die Heisenberg-Gleichung für nicht explizit zeitabhängige Schrödinger-Operatoren (2.11).³ Unter Benutzung der Eigenschaft der

³Im Allgemeinen ist eine Anwendung des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}(t, t_0)$ im Rahmen der zweiten Quantisierung nicht beliebig möglich. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der Zeitentwicklungsoperator bezüglich einer konstanten Teilchenzahl auf einem N-Teilchen-

Unitarität des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}(t, t_0)$ folgt der Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung im Heisenberg-Bild:

$$\begin{aligned}\hat{H}_H(t) &= \hat{T}_H(t) + \hat{V}_H(t) + \hat{W}_H(t) \\ &= \sum_{ij} (t_{ij} + v_{ij}) \hat{a}_{i,H}^\dagger(t) \hat{a}_{j,H}(t) + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} w_{ijkl} \hat{a}_{i,H}^\dagger(t) \hat{a}_{j,H}^\dagger(t) \hat{a}_{l,H}(t) \hat{a}_{k,H}(t),\end{aligned}\tag{3.26}$$

Im Weiteren soll jedoch aufgrund der Anschaulichkeit auf den Index H und die explizite Zeitabhängigkeit verzichtet werden und diese immer implizit angenommen werden. Entsprechend der Heisenberg-Gleichung folgt somit für \hat{n}_{ij} :

$$i\hbar\partial_t\hat{n}_{ij} = [\hat{n}_{ij}, \hat{H}].\tag{3.27}$$

Diese Gleichung kann unter Verwendung folgender Kommutatorrelationen umgeformt werden:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B},\tag{3.28}$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]_{\mp} \pm [\hat{A}, \hat{C}]_{\mp}\hat{B}.\tag{3.29}$$

Hilbert-Raum \mathcal{H}_N und nicht auf den Fock-Raum \mathcal{F} definiert wird, weshalb eine Veränderung der Gesamtteilchenzahl im Rahmen dieses Formalismus nicht ohne Weiteres möglich ist. Da die Gesamtteilchenzahl jedoch in den hier vorliegenden Gleichungen erhalten bleibt, ist eine genauere Behandlung dieses Problems hier vorerst nicht notwendig. [6]

Es folgt:

$$[\hat{n}_{ij}, \hat{T} + \hat{V}] = \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \sum_{kl} h_{kl} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \right] \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{kl} h_{kl} \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \right] \\ &= \sum_{kl} h_{kl} \left\{ \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l] + [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l] \hat{a}_j \right\} \\ &= - \sum_{kl} h_{kl} \left\{ \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l, \hat{a}_j] + [\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l, \hat{a}_i^\dagger] \hat{a}_j \right\} \\ &= - \sum_{kl} h_{kl} \left\{ \hat{a}_i^\dagger (\pm [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_j]_{\mp} \hat{a}_l) + \hat{a}_k^\dagger [\hat{a}_l, \hat{a}_i^\dagger]_{\mp} \hat{a}_j \right\} \\ &= - \sum_{kl} h_{kl} \left\{ \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \delta_{il} - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \delta_{jk} \right\} \\ &= \sum_k h_{jk} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k - h_{ki} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$= [\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{h}^*]_{ij}. \quad (3.32)$$

Hierbei wurde verwendet: $t_{ij} + v_{ij} \equiv h_{ij}$ und $h_{ij} = h_{ji}^*$. Für den Wechselwirkungsanteil ergibt sich analog:

$$2[\hat{n}_{ij}, \hat{W}] = \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \sum_{klmn} w_{klmn} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \right] \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{klmn} w_{klmn} \left[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \right] \\ &= \sum_{klmn} w_{klmn} \left\{ \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_n \hat{a}_m] + [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger] \hat{a}_n \hat{a}_m \right\} \\ &= \sum_{klmn} w_{klmn} \left\{ \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_n \hat{a}_m] \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger] \hat{a}_n \hat{a}_m \right\} \\ &= \sum_{klmn} w_{klmn} \left\{ -\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger (\hat{a}_n \delta_{mi} \pm \hat{a}_m \delta_{in}) \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger (\hat{a}_l^\dagger \delta_{jk} \pm \hat{a}_k^\dagger \delta_{jl}) \hat{a}_n \hat{a}_m \right\} \\ &= 2 \sum_{kln} \left\{ w_{jnkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k - w_{knil} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j \right\}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Es wurden hier Indizes vertauscht und die Symmetrie des Matrixelements ausgenutzt: $w_{klmn} = w_{lknm}$. Ziel ist es nun, diesen Kommutator in Abhängigkeit vom Dichtematrixoperator auszudrücken, um geschlossene Gleichungen zu erhalten. Hierfür benutzt man folgende Relation: $[\hat{n}_{nl}, \hat{a}_k] = -\hat{a}_l \delta_{nk}$. Damit folgt nun:

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k = \hat{n}_{ik} \hat{n}_{nl} - \hat{n}_{il} \delta_{nk} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} &= \pm \{ \hat{n}_{il} \hat{n}_{nk} - \hat{n}_{ik} \delta_{nl} \} \\ &= \frac{1}{2} \{ \hat{n}_{ik} \hat{n}_{nl} \pm \hat{n}_{il} \hat{n}_{nk} \} - \frac{1}{2} \{ \hat{n}_{il} \delta_{nk} \pm \hat{n}_{ik} \delta_{nl} \}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Die Umformung in Gleichung (3.36) wurde gewählt, um das Ergebnis (anti-)symmetrisiert darzustellen.⁴

Für den ersten Term aus Gleichung (3.34) ergibt sich somit:

$$\sum_{kln} w_{jnkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k = \sum_{kln} \frac{w_{jnkl}}{2} \{ (\hat{n}_{ik} \hat{n}_{nl} \pm \hat{n}_{il} \hat{n}_{nk}) - (\hat{n}_{il} \delta_{nk} \pm \hat{n}_{ik} \delta_{nl}) \} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_k \hat{n}_{ik} \sum_{nl} \frac{w_{jnkl}}{2} \hat{n}_{nl} \pm \sum_l \hat{n}_{il} \sum_{nk} \frac{w_{jnkl}}{2} \hat{n}_{nk} \dots \\ &\dots - \sum_k \hat{n}_{ik} \sum_{nl} \frac{w_{jnlk} \pm w_{jnkl}}{2} \delta_{nl} \\ &= \sum_k \hat{n}_{ik} \sum_{nl} \frac{w_{jnkl}^\pm}{2} \{ \hat{n}_{nl} \mp \delta_{nl} \} \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$= \sum_k \hat{n}_{ik} \hat{U}_{kj}^\pm. \quad (3.39)$$

Hier wurden zwei Definitionen eingesetzt:

$$w_{jnkl}^\pm \equiv w_{jnkl} \pm w_{jnlk}, \quad (3.40)$$

$$\hat{U}_{kj}^\pm \equiv \sum_{nl} \frac{w_{jnkl}^\pm}{2} \{ \hat{n}_{nl} \mp \delta_{nl} \}. \quad (3.41)$$

⁴Diese Darstellung ist unkonventionell und führt zu modifizierten Bewegungsgleichungen für n_{ij} . Beide Darstellungsweisen sind jedoch vollständig äquivalent.

Die Rechnung für den zweiten Term von Gleichung (3.34) ist analog und es folgt zusammenfassend:

$$\sum_{kln} \left\{ w_{jnlk} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k - w_{knli} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j \right\} = \sum_k \hat{n}_{ik} \hat{U}_{kj}^\pm - \hat{U}_{ik}^\pm \hat{n}_{kj} \quad (3.42)$$

$$= [\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{U}}^\pm]_{ij} \quad (3.43)$$

Fasst man die Gleichungen (3.32) und (3.43) zusammen, so folgt für den Dichtematrixoperator $\hat{\mathbf{n}}$:

$$i\hbar \partial_t \hat{\mathbf{n}} = [\hat{\mathbf{n}}, \{\mathbf{h}^* + \hat{\mathbf{U}}^\pm\}] = [\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{h}}^\pm]. \quad (3.44)$$

Hier kann $\hat{\mathbf{h}}^\pm \equiv \mathbf{h}^* + \hat{\mathbf{U}}^\pm$ als Operator eines effektiven Potentials (Hartree-Fock-Potential⁵) gesehen werden. Es ist also möglich, mithilfe dieses Potentials eine geschlossene Gleichung für den Dichtematrixoperator zu formulieren. Da es sich hier allerdings um einen Operator handelt, ist es notwendig, den Erwartungswert dieser Gleichung zu bestimmen, da lediglich dieser eine genaue Charakterisierung des Systems ermöglicht. Problematisch ist jedoch, dass der Dichtematrixoperator nicht linear in diesen Gleichungen auftritt. Ein möglicher Ansatz besteht deswegen darin, Fluktuationsoperatoren einzuführen:

$$\delta \hat{n}_{ij} \equiv \hat{n}_{ij} - \langle \hat{n}_{ij} \rangle \equiv \hat{n}_{ij} - n_{ij}, \quad (3.45)$$

$$\delta \hat{U}_{ij}^\pm \equiv \hat{U}_{ij}^\pm - \langle \hat{U}_{ij}^\pm \rangle \equiv \hat{U}_{ij}^\pm - U_{ij}^\pm. \quad (3.46)$$

Für beliebige Operatoren bzw. Zufallsvariablen gilt: $\langle \hat{A}\hat{B} \rangle = AB + \langle \delta \hat{A} \delta \hat{B} \rangle$, womit für Gleichung (3.44) folgt:

$$i\hbar \partial_t \mathbf{n} - [\mathbf{n}, \mathbf{h}^\pm] = \langle [\delta \hat{\mathbf{n}}, \delta \hat{\mathbf{U}}^\pm] \rangle \equiv \mathbf{I}^\pm. \quad (3.47)$$

⁵Es handelt sich hier um ein modifiziertes HF-Potential aufgrund der zuvor erwähnten unkonventionellen Umformung. Der konventionelle HF-Hamilton-Operator hat die Form: $\hat{h}_{ij}^{\text{HF}} \equiv h_{ij} + \sum_{nl} w_{injl}^\pm \hat{n}_{nl}$.

Die linke Seite dieser Gleichung entspricht somit einer gewöhnlichen zeitabhängigen Hartree-Fock-Gleichung für die Dichtematrix⁶, die nichtlinear in der Dichte ist. Berechnungen für Gleichungen dieser Art lassen sich numerisch mit wenig Rechenaufwand realisieren. Problematisch ist jedoch die Inhomogenität auf der rechten Seite der Gleichung, die Korrelationseffekte des Vielteilchenproblems beschreibt. Nun wäre es möglich, eine Bewegungsgleichung für $\delta\hat{n}_{ij}$ zu bestimmen. Diese Bewegungsgleichung würde allerdings Fluktuationen höherer Ordnung enthalten. Es ergibt sich somit eine Hierarchie von unendlich vielen Gleichungen, deren Lösung der exakten Lösung des Vielteilchenproblems entspricht. Ein möglicher Ansatz, diese Korrelationseffekte zu beschreiben, stellt die Stochastic-Mean-Field-Näherung (SMF-Näherung) dar.

4 Stochastic Mean Field

Die Grundlage dieses Kapitels stellen die Arbeiten von Ayik, Lacroix und anderen dar. Für eine genauere Betrachtung dieses Ansatzes wird auf Refs. [1], [6] und [7] verwiesen.

4.1 Grundlagen der SMF-Näherung

Das wesentliche Ziel der SMF-Näherung ist die Reduktion von Korrelationen auf die Korrelationen, die durch Anfangsfluktuationen hervorgerufen werden. Diese werden mithilfe von normalverteilten Dichtefluktuationen beschrieben. Zusätzlich ersetzt man den quantenmechanischen Erwartungswert durch einen

⁶Hier wird $\langle\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j\rangle = n_{ij}$ als Dichtematrix bezeichnet; üblicherweise wird jedoch $\langle\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i\rangle = \rho_{ij}$ als Dichtematrix definiert. Die Adjungierung der Gleichung führt also zu der konventionellen Form (Von-Neumann-Gleichung).

statistischen. Formal entspricht dies folgendem Übergang:

$$\delta \hat{n}_{ij} \longrightarrow \Delta n_{ij}^{(\alpha)}, \quad (4.1)$$

$$\hat{n}_{ij} \longrightarrow n_{ij}^{(\alpha)}. \quad (4.2)$$

Statt wie in Gleichung (3.44) eine Operator-Gleichung zu haben, erhält man eine Bewegungsgleichung für $n_{ij}^{(\alpha)}$, aus der sich die Gesamtlösung durch statistische Erwartungswertbildung ergibt:

$$i\hbar \partial_t \mathbf{n}^{(\alpha)} = [\mathbf{n}^{(\alpha)}, \mathbf{U}^{\pm,(\alpha)}], \quad (4.3)$$

$$\mathbf{n} = \overline{\mathbf{n}^{(\alpha)}} = \int p_\alpha \mathbf{n}^{(\alpha)} d\alpha. \quad (4.4)$$

Es handelt sich somit um Hartree-Fock-Propagationen, welche durch ihre zufallsverteilten Anfangswerte $\mathbf{n}^{(\alpha)}(t_0) = \mathbf{n}_0^{(\alpha)} = \mathbf{n}_0 + \Delta \mathbf{n}_0^{(\alpha)}$ charakterisiert werden. p_α ist hier die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten der Realisierung $\mathbf{n}^{(\alpha)}$. Analog zu Gleichung (3.47) ergibt sich somit:

$$i\hbar \partial_t \mathbf{n} - [\mathbf{n}, \mathbf{U}^\pm] = \overline{[\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)}, \Delta \mathbf{U}^{\pm(\alpha)}]} \equiv \mathbf{I}_{\text{SMF}}^\pm \quad (4.5)$$

Betrachtet man die Gleichungen (4.3) und (4.4) so fällt auf, dass man zunächst beliebig viele unabhängige Hartree-Fock-Propagationen durchführen kann, die anschließend gemittelt werden. Da jedoch nur eine endliche Anzahl an Propagationen durchgeführt werden kann, nimmt Gleichung (4.4) folgende Gestalt an:

$$\mathbf{n} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \mathbf{n}^{(i)}, \quad (4.6)$$

welche im Grenzübergang $M \longrightarrow \infty$ in den Ausdruck von Gleichung (4.4) übergeht. In dieser semiklassischen Näherung sind die zufälligen Anfangswerte für $t = t_0$ so verteilt, dass ihr Mittelwert \mathbf{n}_0 ergibt. Als Varianz kann beispielsweise die Varianz des freien Elektronengases [1] angenommen werden,

sodass sich für die Matrixelemente von $\mathbf{n}^{(\alpha)}$ folgende Bedingungen ergeben:

$$\overline{n_{ij}^{(\alpha)}}(t_0) = \delta_{ij}n_i(t_0), \quad (4.7)$$

$$\overline{\Delta n_{ij}^{(\alpha)}(t_0)\Delta n_{kl}^{(\alpha)}(t_0)} = \frac{1}{2}\delta_{jk}\delta_{il}n_j(t_0)[1 - n_i(t_0)]. \quad (4.8)$$

Höhere Momente der Wahrscheinlichkeitsverteilung werden hier zunächst vernachlässigt.⁷ Observablen werden in der SMF-Näherung nach dem selben Prinzip berechnet:

$$\langle \hat{B}_1(t) \rangle = \sum_{ij} b_{ij} \overline{n_{ij}^{(\alpha)}}(t), \quad (4.9)$$

$$\langle \hat{B}_2(t) \rangle = \sum_{ijkl} b_{ijkl} \left(\overline{(n_{ij}^{(\alpha)}(t))(n_{kl}^{(\alpha)}(t))} + \overline{\Delta n_{ij}^{(\alpha)}(t)\Delta n_{kl}^{(\alpha)}(t)} \right) \quad (4.10)$$

Durch den Übergang von Operatoren zu Zufallsvariablen kommt es zu einer Näherung der höheren Hierarchiestufen. Da in der SMF-Näherung der Aufbau von Korrelationen durch Kollisionen und der Verfall der Anfangskorrelationen vernachlässigt werden, sollte diese Näherung lediglich für Systeme anwendbar sein, in denen Kollisionen keinen signifikanten Effekt haben, bzw. nur für Zeiten $t \leq \tau_{cor}$.⁸ Zu beachten ist bei dieser Näherung, dass keine Beschränkung der normalverteilten Dichtefluktuationen vorliegt, d.h. für den Fall von Fermionen, für die $n_{ij} \in [0, 1]$ gelten muss, werden beliebige Dichten zugelassen ($n_{ij} \in \mathbb{R}$). Potentiell kann also unphysikalisches Verhalten auftreten, da $n_{ij} < 0$ bzw. $n_{ij} > 1$ möglich sind.⁹ Eine Beschränkung der Anfangsfluktuationen, die zu große Abweichungen verhindern soll, wäre also der erste Ansatz, die SMF-Näherung zu verbessern. Jedoch zeigen Rechnungen, dass solche Einschränkungen zu schlechteren Ergebnissen führen. Aufgrund der

⁷Berücksichtigung höherer Momente kann potentiell zu mehr Variabilität führen.

⁸ τ_{cor} bezeichnet hier die Korrelationszeit, also die Zeit, nach der Anfangskorrelationen durch Kollisionen vollständig aufgehoben werden [8].

⁹Auch für Bosonen kann so also unphysikalisches Verhalten auftreten, wobei hier nur der Fall $n_{ij} < 0$ relevant ist.

Simplizität der Propagationen, welche optimal für parallele Berechnungen geeignet sind, ist eine nähere Untersuchung dieses Ansatzes sinnvoll, da dieser eine Verbesserung zu einfachen Hartree-Fock-Propagationen verspricht aufgrund der Berücksichtigung von Korrelationseffekten.

4.2 Anwendung der SMF-Näherung am Hubbard-Modell

Das System, an dem die Anwendbarkeit der SMF-Näherung demonstriert werden soll, ist ein fermionischer Hubbard-Cluster. In diesem Fall soll speziell eine eindimensionale Kette betrachtet werden. Im Hubbard-Modell wird das Verhalten von Elektronen in einem starren Gitter beschrieben. Elektronen können dabei nur miteinander wechselwirken, wenn sie am selben Gitterplatz sind. An jedem kann allerdings nur ein Paar von Elektronen sein.¹⁰ In einfacher Näherung ist außerdem nur ein Springen zwischen benachbarten Plätzen möglich. Das Hubbard-Modell stellt somit eines der einfachsten Modelle dar, in dem das Verhalten von Elektronen in Festkörpern näherungsweise beschrieben werden kann.

Der Hubbard-Hamilton-Operator [9] hat die Form:

$$\hat{H} = -J \sum_{i,j=1}^{N_s} \sum_{\sigma} \delta_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j,\sigma} + U \sum_{i=1}^{N_s} \hat{a}_{i,\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{i,\uparrow} \hat{a}_{i,\downarrow}^{\dagger} \hat{a}_{i,\downarrow}. \quad (4.11)$$

Hier werden folgende Größen und Definitionen verwendet: $\delta_{\langle i,j \rangle} \equiv \delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1}$, was zu einer Summation benachbarter Gitterplätze führt, N_s bezeichnet die Anzahl an Gitterplätzen, σ beschreibt den Spin der Elektronen ($\sigma = \downarrow (\uparrow)$), U ist die Wechselwirkungsstärke zwischen den Elektronen und J charakterisiert den kinetischen Anteil des Hamilton-Operators.

Die zu diesem Hamilton-Operator dazugehörige Matrix erhält in der Mean-

¹⁰siehe Pauli-Prinzip

Field-Näherung folgende Gestalt:

$$h(\mathbf{n})_{ij,\sigma} = -J\delta_{\langle i,j \rangle} + U\delta_{ij}n_{ii,\bar{\sigma}}, \quad (4.12)$$

wobei $\bar{\sigma} = \uparrow (\downarrow)$ bezeichnet. Für den Fall der SMF-Näherung ergibt sich:

$$h(\mathbf{n}^{(\alpha)})_{ij,\sigma} = -J\delta_{\langle i,j \rangle} + U\delta_{ij}n_{ii,\bar{\sigma}}^{(\alpha)}. \quad (4.13)$$

Die SMF-Näherung wird hier an einer eindimensionalen Hubbard-Kette mit acht Gitterplätzen demonstriert, von denen die linken vier vollständig gefüllt sein sollen. Gezeigt wird hier die Dichte am ersten Gitterplatz im Vergleich zu exakten und Hartree-Fock-Rechnungen.¹¹

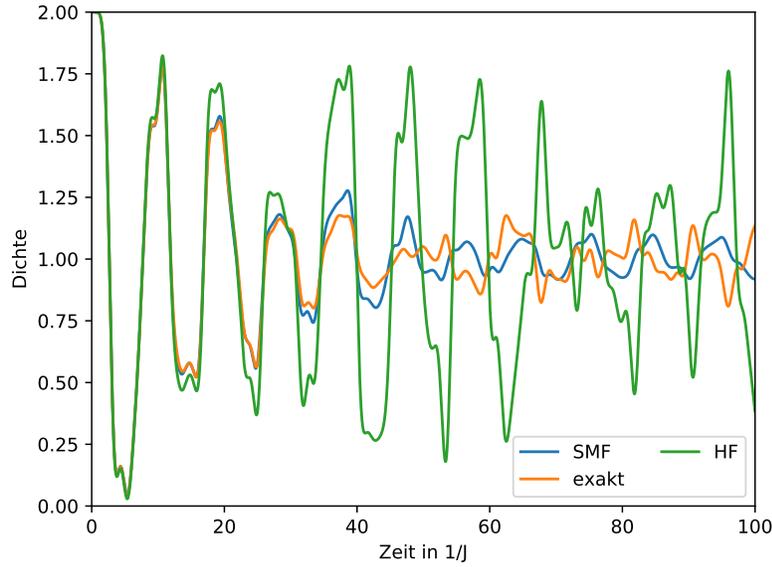


Abbildung 1: Zeitentwicklung der Dichte des ersten Gitterplatzes für $N_s = N = 8$ und $U/J = 0.1$ für exakte, HF- und SMF-Rechnungen.

¹¹Exakte Rechnungen werden dabei mit der Configuration Interaction (CI) durchgeführt, welche jedoch aufgrund des exponentiellen Rechenaufwandes für zu große Systeme nicht anwendbar ist. Außerdem wird hier in Einheiten von J gerechnet und $\hbar = 1$ gesetzt.

Man sieht in Abbildung 1 deutlich, dass die SMF-Rechnung eine Verbesserung gegenüber der HF-Rechnung darstellt. Bis zu einer Zeit von $t \sim 30J^{-1}$ reproduziert die SMF-Näherung das exakte Ergebnis und gibt die Trends im weiteren Verlauf korrekt wieder. Die fehlende Berücksichtigung von Korrelationseffekten durch Kollisionen und des Verfalls der Fluktuationen des Anfangszustandes wird mit zunehmender Zeit deutlich, da hier für die exakte Rechnung eine Vergrößerung der Amplitude der Dichteoszillationen zu beobachten ist, während das SMF-Modell diese zu stark dämpft. Dieses Verhalten wird auffälliger für größere Wechselwirkungsstärken.

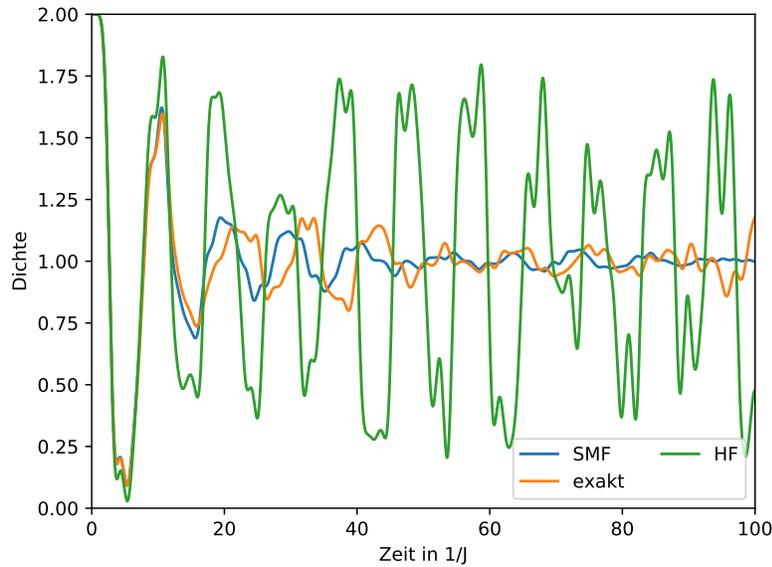


Abbildung 2: Zeitentwicklung der Dichte des ersten Gitterplatzes für $N_s = N = 8$ und $U/J = 0.25$ für exakte, HF- und SMF-Rechnungen.

In Abbildung 2 wird die angesprochene Problematik deutlicher. Bereits für Zeiten $t \sim 15J^{-1}$ beginnen exakte und SMF-Rechnungen Abweichungen zu zeigen. Zudem wird in diesen Rechnungen offensichtlich, dass die Dichteoszillationen zu stark gedämpft werden und es zu keiner Vergrößerung der

Amplitude kommt wie bei den exakten Rechnungen.

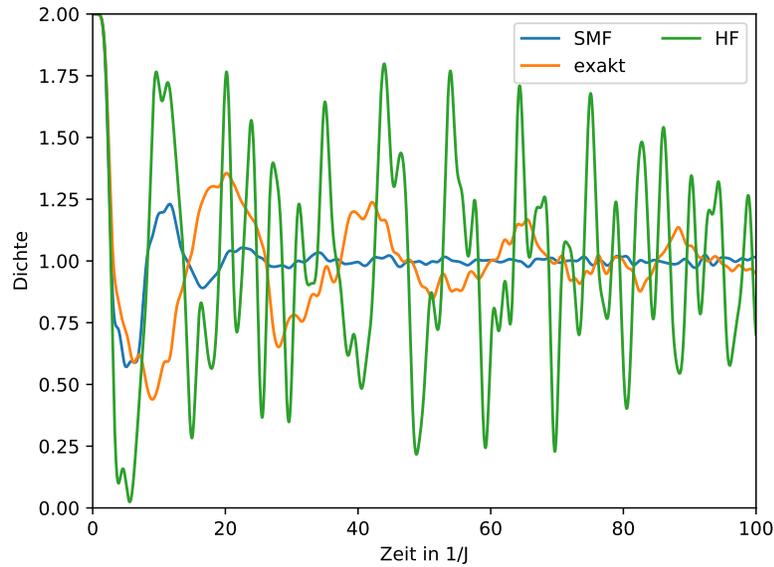


Abbildung 3: Zeitentwicklung der Dichte des ersten Gitterplatzes für $N_s = N = 8$ und $U/J = 1$ für exakte, HF- und SMF-Rechnungen.

Abbildung 3 zeigt nun eindeutig den erwarteten Gültigkeitsbereich der SMF-Näherung. Für zu große Wechselwirkungen und die daraus folgenden Korrelationen jenseits der Anfangsfluktuationen kommt es zu signifikanten Abweichungen vom tatsächlichen Verhalten der Propagation.

Nun soll eine Betrachtung der Energien vorgenommen werden. Diese werden

wie folgt berechnet:

$$E_{\text{kin}} = -J \sum_{i,j=1}^{N_s} \delta_{\langle i,j \rangle} (\langle \hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j,\uparrow} \rangle + \langle \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j,\downarrow} \rangle), \quad (4.14)$$

$$E_{\text{HF}} = U \sum_{i=1}^{N_s} \langle \hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i,\uparrow} \rangle \langle \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i,\downarrow} \rangle, \quad (4.15)$$

$$E_{\text{cor}} = \frac{U}{2} \sum_{i=1}^{N_s} \langle \hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i,\downarrow} \hat{a}_{i,\uparrow} \rangle - E_{\text{HF}}. \quad (4.16)$$

Und für die SMF-Näherung:

$$E_{\text{kin}}^{\text{SMF}} = -J \sum_{i,j=1}^{N_s} \delta_{\langle i,j \rangle} (\overline{n_{ij,\uparrow}} + \overline{n_{ij,\downarrow}}), \quad (4.17)$$

$$E_{\text{HF}}^{\text{SMF}} = U \sum_{i=1}^{N_s} (\overline{n_{ii,\uparrow}}) (\overline{n_{ii,\downarrow}}), \quad (4.18)$$

$$E_{\text{cor}}^{\text{SMF}} = U \sum_{i=1}^{N_s} \overline{\Delta n_{ii,\uparrow} \Delta n_{ii,\downarrow}}. \quad (4.19)$$

Hier bezeichnet E_{kin} die kinetische Energie, E_{HF} die Hartree-Fock-Energie und E_{cor} die Korrelationsenergie der Elektronen.

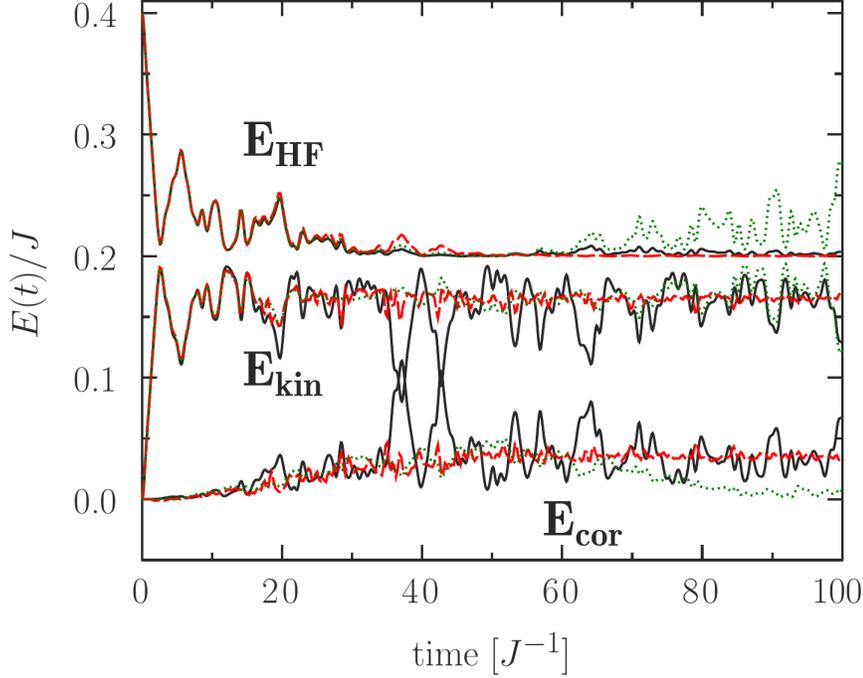


Abbildung 4: Zeitentwicklung der kinetischen, HF- und Korrelationsenergie für $N_s = N = 8$ und $U/J = 0.1$. Hierbei handelt es sich um Rechnungen für CI (schwarz), SMF (rot) und NEGF (grün) in zweiter Bornscher Näherung (SOA). (Abbildung aus Ref. [1])

Wie man auch hier in Abbildung 4 sieht, überschätzt die SMF-Näherung die Dämpfung der Oszillationen, gibt jedoch die Trends korrekt wieder. Auffällig ist die HF-Energie, die lediglich minimale Abweichungen vom exakten Ergebnis aufweist. Des Weiteren ist es möglich, mithilfe dieser Rechnung die Korrelationszeit τ_{cor} abzuschätzen. Sie markiert das Ende einer Phase, in der sich die Korrelationsenergie aufbaut und die HF-Energie verringert bis zu einem Punkt, an dem diese saturiert ist [10]. Diese Kriterien werden erfüllt für $t \sim 30J^{-1}$. Betrachtet man Abbildung 1, so fällt auf, dass Abweichungen zwischen exakter und SMF-Rechnung sichtbar werden und somit der angesprochene Gültigkeitsbereich der SMF-Näherung gezeigt werden kann.

Unphysikalische Dichten, welche die SMF-Näherung prinzipiell zulässt, treten für ausreichend große Zahlen von Anfangszuständen nicht auf. Ebenfalls bleiben die Gesamtteilchenzahl und -energie erhalten. Es tritt keine signifikante Verbesserung für mehr als 10^4 Anfangszustände auf. Wählt man allerdings zu wenig, so treten unphysikalische Ergebnisse auf.¹²

5 Verbesserung der SMF-Näherung

Da der SMF-Ansatz trotz seiner Einfachheit bereits gute Resultate geliefert hat, stellt sich die Frage, inwieweit es möglich ist, diesen Ansatz zu verbessern. Der Ansatz, der hier präsentiert werden soll, ist die Anwendung des SMF-Schemas für die nächsthöhere Hierarchiestufe. Anstatt also Zweiteilchenfluktuationen mithilfe der SMF-Näherung zu beschreiben, soll zunächst eine Lösung für die Inhomogenität \mathbf{I}^\pm gefunden werden. Dazu ist es notwendig, die Struktur von \mathbf{I}^\pm näher zu betrachten:

$$I_{ij}^\pm = \left(\langle [\delta\hat{\mathbf{n}}, \delta\hat{\mathbf{U}}^\pm] \rangle \right)_{ij} = \left\langle \sum_k \delta\hat{n}_{ik} \delta\hat{U}_{kj}^\pm - \delta\hat{U}_{ik}^\pm \delta\hat{n}_{kj} \right\rangle. \quad (5.1)$$

Außerdem soll der Operator $\delta\hat{U}_{kj}^\pm$ betrachtet werden:

$$\delta\hat{U}_{kj}^\pm = \sum_{nl} \frac{1}{2} w_{jnk}^\pm \delta\hat{n}_{nl} \equiv U_{kj}(\delta\hat{\mathbf{n}}). \quad (5.2)$$

Analog soll definiert werden:

$$U_{kj}^\pm = \sum_{nl} \frac{1}{2} w_{jnk}^\pm (n_{nl} \mp \delta_{nl}) \equiv U_{kj}(\mathbf{n}), \quad (5.3)$$

$$\hat{U}_{kj}^\pm = \sum_{nl} \frac{1}{2} w_{jnk}^\pm (\hat{n}_{nl} \mp \delta_{nl}) \equiv U_{kj}(\hat{\mathbf{n}}). \quad (5.4)$$

¹²Für die untersuchten Systeme zeigte sich, dass unphysikalische Ergebnisse auftreten, sollte man weniger als 100 Anfangszustände betrachten.

Es ergibt sich damit folgende Eigenschaft:

$$U_{kj}(\hat{\mathbf{n}}) = U_{kj}(\mathbf{n} + \delta\hat{\mathbf{n}}) = U_{kj}(\mathbf{n}) + U_{kj}(\delta\hat{\mathbf{n}}). \quad (5.5)$$

Aus Gleichung (5.1) folgt somit sofort, für welche Größe eine Bewegungsgleichung gesucht ist:

$$\begin{aligned} I_{ij}^{\pm} &= \sum_k \langle \delta\hat{n}_{ik} U_{kj}(\delta\hat{\mathbf{n}}) \rangle - \langle U_{ik}(\delta\hat{\mathbf{n}}) \delta\hat{n}_{kj} \rangle = \frac{1}{2} \sum_k \sum_{nl} w_{jnk}^{\pm} \langle \delta\hat{n}_{ik} \delta\hat{n}_{nl} \rangle \dots \\ &\dots - w_{knl}^{\pm} \langle \delta\hat{n}_{nl} \delta\hat{n}_{kj} \rangle. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Gesucht ist also eine Bewegungsgleichung für $\delta\hat{n}_{nl}\delta\hat{n}_{kj}$. Man definiere hierzu zunächst einen Operator und den dazugehörigen Erwartungswert:

$$\hat{\gamma}_{ijkl} \equiv \delta\hat{n}_{ij}\delta\hat{n}_{kl}, \quad (5.7)$$

$$\gamma_{ijkl} \equiv \langle \delta\hat{n}_{ij}\delta\hat{n}_{kl} \rangle. \quad (5.8)$$

Gleichung (5.6) erhält damit folgende Form:

$$I_{ij}^{\pm} = \frac{1}{2} \sum_{knl} w_{jnk}^{\pm} \gamma_{iknl} - w_{knl}^{\pm} \gamma_{nlkj}. \quad (5.9)$$

Um eine Bewegungsgleichung für $\hat{\gamma}_{ijkl}$ bzw. γ_{ijkl} zu finden, ist es sinnvoll, diese zunächst für $\delta\hat{n}_{ij}$ zu konstruieren. Diese ergibt sich über Subtraktion der Bewegungsgleichung von $\hat{\mathbf{n}}$ und \mathbf{n} :

$$i\hbar\partial_t(\hat{\mathbf{n}} - \mathbf{n}) = [\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{h}^*] - [\mathbf{n}, \mathbf{h}^*] + [\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{U}}^{\pm}] - [\mathbf{n}, \mathbf{U}^{\pm}] - \langle [\delta\hat{\mathbf{n}}, \delta\hat{\mathbf{U}}^{\pm}] \rangle, \quad (5.10)$$

womit folgt:

$$i\hbar\partial_t\delta\hat{n}_{ij} = [\delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{h}^*]_{ij} + [\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{U}(\hat{\mathbf{n}})]_{ij} - [\mathbf{n}, \mathbf{U}(\mathbf{n})]_{ij} - I_{ij}^{\pm}. \quad (5.11)$$

Hiermit lässt sich eine Bewegungsgleichung für $\hat{\gamma}_{ijkl}$ bestimmen:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\hat{\gamma}_{ijkl} &= i\hbar\partial_t(\delta\hat{n}_{ij}\delta\hat{n}_{kl}) = i\hbar(\partial_t\delta\hat{n}_{ij})\delta\hat{n}_{kl} + i\hbar\delta\hat{n}_{ij}(\partial_t\delta\hat{n}_{kl}) \\ &= ([\delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{h}^*]_{ij} + [\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{U}(\hat{\mathbf{n}})]_{ij} - [\mathbf{n}, \mathbf{U}(\mathbf{n})]_{ij} - I_{ij}^{\pm})\delta\hat{n}_{kl} + \dots \end{aligned} \quad (5.12)$$

Die Terme, welche nicht explizit aufgeführt wurden, ergeben sich durch einfache Vertauschung von $(ij) \leftrightarrow (kl)$ und Multiplikation von links mit $\delta\hat{n}_{ij}$ statt rechts. Nun sollen die Terme jeweils separat betrachtet werden:

$$[\delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{h}^*]_{ij}\delta\hat{n}_{kl} = \sum_m (\delta\hat{n}_{im}h_{mj}^* - h_{im}^*\delta\hat{n}_{mj})\delta\hat{n}_{kl} \quad (5.13)$$

$$= \sum_m h_{mj}^*\hat{\gamma}_{imkl} - h_{im}^*\hat{\gamma}_{mjkl}. \quad (5.14)$$

Mit dem dazugehörigen Erwartungswert ergibt sich:

$$\langle [\delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{h}^*]_{ij}\delta\hat{n}_{kl} \rangle = \sum_m h_{mj}^*\gamma_{imkl} - h_{im}^*\gamma_{mjkl}. \quad (5.15)$$

Da im nächsten Term $\hat{\mathbf{n}}$ auftritt, ist es sinnvoll, diesen Operator durch \mathbf{n} und $\delta\hat{\mathbf{n}}$ auszudrücken:

$$[\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{U}(\hat{\mathbf{n}})]_{ij}\delta\hat{n}_{kl} = [\mathbf{n} + \delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{U}(\mathbf{n} + \delta\hat{\mathbf{n}})]_{ij}\delta\hat{n}_{kl} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} &= ([\mathbf{n}, \mathbf{U}(\mathbf{n})]_{ij} + [\mathbf{n}, \mathbf{U}(\delta\hat{\mathbf{n}})]_{ij} + [\delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{U}(\mathbf{n})]_{ij} \dots \\ &\dots + [\delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{U}(\delta\hat{\mathbf{n}})]_{ij})\delta\hat{n}_{kl}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Der erste Term von Gleichung (5.17) fällt weg, da er dem dritten Term der Gleichung (5.12) entspricht. Es folgt somit aus Gleichung (5.17):

$$\begin{aligned}
& ([\mathbf{n}, \mathbf{U}(\delta\hat{\mathbf{n}})]_{ij} + [\delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{U}(\mathbf{n})]_{ij} + [\delta\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{U}(\delta\hat{\mathbf{n}})]_{ij}) \delta\hat{n}_{kl} \\
&= \sum_m \{n_{im} U(\delta\hat{\mathbf{n}})_{mj} - U(\delta\hat{\mathbf{n}})_{im} n_{mj} \dots \\
&\quad \dots + \delta\hat{n}_{im} U(\mathbf{n})_{mj} - U(\mathbf{n})_{im} \delta\hat{n}_{mj} \dots \\
&\quad \dots + \delta\hat{n}_{im} U(\delta\hat{\mathbf{n}})_{mj} - U(\delta\hat{\mathbf{n}})_{im} \delta\hat{n}_{mj}\} \delta\hat{n}_{kl} \tag{5.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_m \sum_{no} \{ (n_{im} w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj}) \delta\hat{n}_{no} \dots \\
&\quad \dots + (w_{jnmo}^\pm \delta\hat{n}_{im} - w_{mnio}^\pm \delta\hat{n}_{mj}) (n_{no} \mp \delta_{no}) \dots \\
&\quad \dots + w_{jnmo}^\pm \delta\hat{n}_{im} \delta\hat{n}_{no} - w_{mnio}^\pm \delta\hat{n}_{no} \delta\hat{n}_{mj} \} \delta\hat{n}_{kl} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{mno} (n_{im} w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj}) \hat{\gamma}_{nokl} \dots \\
&\quad \dots + (w_{jnmo}^\pm \hat{\gamma}_{imkl} - w_{mnio}^\pm \hat{\gamma}_{mjkl}) (n_{no} \mp \delta_{no}) \dots \\
&\quad \dots + w_{jnmo}^\pm \delta\hat{n}_{im} \delta\hat{n}_{no} \delta\hat{n}_{kl} - w_{mnio}^\pm \delta\hat{n}_{no} \delta\hat{n}_{mj} \delta\hat{n}_{kl}, \tag{5.19}
\end{aligned}$$

womit für den Erwartungswert von (5.19) folgt:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{mno} (n_{im} w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj}) \gamma_{nokl} \dots \\
& \dots + (w_{jnmo}^\pm \gamma_{imkl} - w_{mnio}^\pm \gamma_{mjkl}) (n_{no} \mp \delta_{no}) \dots \\
& \dots + w_{jnmo}^\pm \langle \delta\hat{n}_{im} \delta\hat{n}_{no} \delta\hat{n}_{kl} \rangle - w_{mnio}^\pm \langle \delta\hat{n}_{no} \delta\hat{n}_{mj} \delta\hat{n}_{kl} \rangle. \tag{5.20}
\end{aligned}$$

Terme, die lediglich linear in $\delta\hat{n}_{ij}$ sind, fallen bei der Erwartungswertbildung weg, da $\langle \delta\hat{n}_{ij} \rangle = 0$ gilt. Somit entfällt $\langle I_{ij}^\pm \delta\hat{n}_{kl} \rangle$. Für die Bewegungsgleichung

von γ_{ijkl} folgt damit:

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t\gamma_{ijkl} = & \frac{1}{2} \sum_{mno} 2(h_{mj}^* \gamma_{imkl} - h_{im}^* \gamma_{mjkl}) \dots \\
& \dots + (n_{im} w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj}) \gamma_{nokl} \dots \\
& \dots + (w_{jnmo}^\pm \gamma_{imkl} - w_{mnio}^\pm \gamma_{mjkl}) (n_{no} \mp \delta_{no}) \dots \\
& \dots + w_{jnmo}^\pm \langle \delta \hat{n}_{im} \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{kl} \rangle - w_{mnio}^\pm \langle \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{mj} \delta \hat{n}_{kl} \rangle \dots \\
& \dots + 2(h_{ml}^* \gamma_{ijkm} - h_{km}^* \gamma_{ijml}) \dots \\
& \dots + (n_{km} w_{lnmo}^\pm - w_{mnko}^\pm n_{ml}) \gamma_{ijn o} \dots \\
& \dots + (w_{lnmo}^\pm \gamma_{ijkm} - w_{mnko}^\pm \gamma_{ijml}) (n_{no} \mp \delta_{no}) \dots \\
& \dots + w_{lnmo}^\pm \langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{km} \delta \hat{n}_{no} \rangle - w_{mnko}^\pm \langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{ml} \rangle. \quad (5.21)
\end{aligned}$$

Gleichung (5.21) kann in einer kompakteren Form geschrieben werden:

$$i\hbar\partial_t\gamma_{ijkl} = [\gamma, h^{(2),\pm}]_{ijkl} + \tilde{\Pi}_{ijkl} + C_{ijkl}. \quad (5.22)$$

Hier wurden folgende Definitionen verwendet:

$$[\gamma, h^{(2),\pm}]_{ijkl} \equiv \sum_m \gamma_{imkl} h_{mj}^\pm + \gamma_{ijkm} h_{ml}^\pm - h_{im}^\pm \gamma_{mjkl} - h_{km}^\pm \gamma_{ijml}, \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\Pi}_{ijkl} \equiv & \frac{1}{2} \sum_{mno} (n_{im} w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj}) \gamma_{nokl} \dots \\
& \dots + (n_{km} w_{lnmo}^\pm - w_{mnko}^\pm n_{ml}) \gamma_{ijn o}, \quad (5.24)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{ijkl} \equiv & \frac{1}{2} \sum_{mno} w_{jnmo}^\pm \langle \delta \hat{n}_{im} \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{kl} \rangle - w_{mnio}^\pm \langle \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{mj} \delta \hat{n}_{kl} \rangle \dots \\
& \dots + w_{lnmo}^\pm \langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{km} \delta \hat{n}_{no} \rangle - w_{mnko}^\pm \langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{ml} \rangle. \quad (5.25)
\end{aligned}$$

Dabei entspricht $[\gamma, h^{(2),\pm}]$ einem Kommutator von γ und einem Zweiteilchen-Hartree-Fock-Hamiltonoperator $h^{(2),\pm}$ und $\tilde{\Pi}$ einem Polarisations-term ähnlich der GW-Näherung der Green-Funktionen, welche eine abgeschirmte Wechselwirkung beschreibt [11]. Man erkennt hier, dass zur Lösung dieser gekoppelten

Gleichungen für γ_{ijkl} die Berechnung des Erwartungswertes eines Produktes von drei Dichtefluktuationsoperatoren $\langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{ml} \rangle$ notwendig ist. Wollte man die Bewegungsgleichung dieses Produktes bestimmen, so würde man Anteile eines Produktes von vier Dichtefluktuationsoperatoren erhalten. Die Lösung des exakten Problems ist also nur über die Lösung einer Hierarchie von unendlich vielen gekoppelten Gleichungen möglich. Der einfachste Ansatz, um die Bewegungsgleichung von γ_{ijkl} zu lösen, ist das Vernachlässigen von Korrelationseffekten höherer Ordnung. Jedoch bietet die SMF-Näherung einen anderen Zugang zu Korrelationseffekten, der hier angewendet werden soll. Hierzu wird der Übergang $\gamma_{ijkl} \rightarrow \gamma_{ijkl}^{(\alpha)}$ gemacht, wobei sich die Lösung durch folgenden Ausdruck ergibt:

$$\gamma_{ijkl} = \int p_\alpha \gamma_{ijkl}^{(\alpha)} d\alpha \approx \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \gamma_{ijkl}^{(k)}. \quad (5.26)$$

Die Bewegungsgleichung lautet somit:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \gamma_{ijkl}^{(\alpha)} = & \frac{1}{2} \sum_{mno} 2(h_{mj}^* \gamma_{imkl}^{(\alpha)} - h_{im}^* \gamma_{mjkl}^{(\alpha)}) \dots \\ & \dots + (n_{im} w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj}) \gamma_{nokl}^{(\alpha)} \dots \\ & \dots + (w_{jnmo}^\pm \gamma_{imkl}^{(\alpha)} - w_{mnio}^\pm \gamma_{mjkl}^{(\alpha)}) (n_{no} \mp \delta_{no}) \dots \\ & \dots + 2(h_{ml}^* \gamma_{ijkm}^{(\alpha)} - h_{km}^* \gamma_{ijml}^{(\alpha)}) \dots \\ & \dots + (n_{km} w_{lnmo}^\pm - w_{mnko}^\pm n_{ml}) \gamma_{ijn o}^{(\alpha)} \dots \\ & \dots + (w_{lnmo}^\pm \gamma_{ijkm}^{(\alpha)} - w_{mnko}^\pm \gamma_{ijml}^{(\alpha)}) (n_{no} \mp \delta_{no}). \end{aligned} \quad (5.27)$$

Aufgrund der Komplexität der Gleichungen sollte sich jedoch ein solcher Ansatz als äußerst aufwendig erweisen. Würde man wie im ursprünglichen SMF-Ansatz die Bewegungsgleichung für 10^4 Anfangsbedingungen lösen, würde der Rechenaufwand sehr groß werden, ohne signifikante Verbesserungen zu liefern, die solch einen Aufwand rechtfertigen würden. Dieser Ansatz wird deswegen im Folgenden nicht weiter verfolgt.

Ein anderer Ansatz ist es, auf Basis der SMF-Näherung $\langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{ml} \rangle$ durch $\overline{\Delta n_{ij}^{(\alpha)} \Delta n_{no}^{(\alpha)} \Delta n_{ml}^{(\alpha)}}$ zu ersetzen. Dies führt zu $C_{ijkl} \rightarrow C_{ijkl}^{\text{SMF}}$:

$$i\hbar \partial_t \gamma_{ijkl} = [\gamma, h^{(2),\pm}]_{ijkl} + \tilde{\Pi}_{ijkl} + C_{ijkl}^{\text{SMF}}. \quad (5.28)$$

Mit folgender Definition:

$$\begin{aligned} C_{ijkl}^{\text{SMF}} \equiv & \frac{1}{2} \sum_{mno} w_{jnmo}^{\pm} \overline{\Delta n_{im}^{(\alpha)} \Delta n_{no}^{(\alpha)} \Delta n_{kl}^{(\alpha)}} - w_{mnio}^{\pm} \overline{\Delta n_{no}^{(\alpha)} \Delta n_{mj}^{(\alpha)} \Delta n_{kl}^{(\alpha)}} \dots \\ & \dots + w_{lnmo}^{\pm} \overline{\Delta n_{ij}^{(\alpha)} \Delta n_{km}^{(\alpha)} \Delta n_{no}^{(\alpha)}} - w_{mnko}^{\pm} \overline{\Delta n_{ij}^{(\alpha)} \Delta n_{no}^{(\alpha)} \Delta n_{ml}^{(\alpha)}}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Wie im ursprünglichen SMF-Ansatz wird der quantenmechanische Erwartungswert durch den statistischen ersetzt, womit für $\overline{\Delta n_{ij}^{(\alpha)} \Delta n_{no}^{(\alpha)} \Delta n_{ml}^{(\alpha)}}$ folgt:

$$\overline{\Delta n_{ij}^{(\alpha)} \Delta n_{no}^{(\alpha)} \Delta n_{ml}^{(\alpha)}} = \int p_{\alpha} \Delta n_{ij}^{(\alpha)} \Delta n_{no}^{(\alpha)} \Delta n_{ml}^{(\alpha)} d\alpha, \quad (5.30)$$

bzw. für eine endliche Anzahl von Propagationen:

$$\overline{\Delta n_{ij}^{(\alpha)} \Delta n_{no}^{(\alpha)} \Delta n_{ml}^{(\alpha)}} \approx \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \Delta n_{ij}^{(k)} \Delta n_{no}^{(k)} \Delta n_{ml}^{(k)}. \quad (5.31)$$

Die Bewegungsgleichung für $\Delta n_{ij}^{(\alpha)}$ ergibt sich dabei aus der Ersetzung von $\delta \hat{n}_{ij} \rightarrow \Delta n_{ij}^{(\alpha)}$. Damit folgt aus Gleichung (5.11):

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \Delta n_{ij}^{(\alpha)} = & [\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)}, \mathbf{h}^*]_{ij} + [\mathbf{n}, \mathbf{U}(\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)})]_{ij} + [\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)}, \mathbf{U}(\mathbf{n})]_{ij} \dots \\ & \dots + [\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)}, \mathbf{U}(\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)})]_{ij} - \frac{1}{2} \sum_{knl} w_{jnkl}^{\pm} \gamma_{iknl} - w_{knjl}^{\pm} \gamma_{nlkj} \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} = & [\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)}, \mathbf{h}^{\pm}]_{ij} + [\mathbf{n}, \mathbf{U}(\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)})]_{ij} + [\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)}, \mathbf{U}(\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)})]_{ij} \dots \\ & \dots - I_{ij}^{\pm}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Wie beim SMF-Ansatz sollen auch hier die Anfangszustände normalverteilt

sein. Eine mögliche Verallgemeinerung besteht darin, andere Verteilungsfunktionen anzunehmen.

Dieses Erweiterte Stochastic-Mean-Field-Schema (ESMF) lässt sich folgendermaßen zusammenfassen:

$$\begin{aligned}
 i\hbar\partial_t n_{ij} &= [\mathbf{n}, \mathbf{h}^\pm]_{ij} + I_{ij}^\pm, \\
 i\hbar\partial_t \gamma_{ijkl} &= [\gamma, h^{(2),\pm}]_{ijkl} + \tilde{\Pi}_{ijkl} + C_{ijkl}^{\text{SMF}}, \\
 i\hbar\partial_t \Delta n_{ij}^{(\alpha)} &= [\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)}, \mathbf{h}^\pm]_{ij} + [\mathbf{n}, \mathbf{U}(\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)})]_{ij} + [\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)}, \mathbf{U}(\Delta \mathbf{n}^{(\alpha)})]_{ij} - I_{ij}^\pm.
 \end{aligned}$$

Die Verbesserung von ESMF im Vergleich zum bisherigen SMF-Ansatz stellt dabei der Ausdruck I_{ij}^\pm dar, welcher zu einer Kopplung an die Bewegungsgleichung von γ_{ijkl} führt. Im ursprünglichen SMF-Ansatz tritt hier $I_{ij,\text{SMF}}^\pm$ auf (vgl. Gleichung (4.5)). Es gelingt mit diesem Ansatz also, Dreiteilchenkorrelationseffekte zu berücksichtigen, welche aufgrund ihres enormen Aufwandes an Rechenleistung bisher üblicherweise vernachlässigt worden waren. Die Propagationen von verschiedenen $\Delta n_{ij}^{(\alpha)}$ und die Mittelung dieser sind von der selben Größenordnung wie die Propagationen von γ_{ijkl} , was einen deutlichen Gewinn gegenüber der Propagation von $\langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{kl} \delta \hat{n}_{mn} \rangle$ darstellt.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Bewegungsgleichung für Zweiteilchenkorrelationen $\langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{kl} \rangle$ hergeleitet und Ansätze präsentiert zur Approximation von Dreiteilchenkorrelationen unter Verwendung der SMF-Näherung. Besonders hervorzuheben ist der Ansatz zur Näherung von C_{ijkl} , da die hier entwickelte Verbesserung des SMF-Ansatzes eine einfache Möglichkeit liefert, Dreiteilchenkorrelationen zu beschreiben. Aufgrund der vorteilhaften Skalierung des Rechenaufwandes des ESMF-Ansatzes gegenüber einer Propagation von Dreiteilchengrößen bietet eine Verallgemeinerung somit eine mögliche Verbesserung anderer Methoden wie beispielsweise der Green-Funktionen. Wie im Appendix "Zusammenhang zwischen γ und Green-Funktionen" gezeigt, lassen sich aus γ Zweiteilchen-Green-Funktionen ableiten, womit die Übertragung auf diesen Ansatz gezeigt werden kann. Ein Ausblick für diese Arbeit stellt somit eine Anwendung auf den Green-Funktionsformalismus dar. Insbesondere eine Verallgemeinerung auf mehrzeitige Größen, wie sie im Falle der Green-Funktionen auftreten, erweist sich als interessant. Des Weiteren sollte eine Erweiterung des G1-G2 Schemas [12] durch den hier gefundenen Ansatz möglich sein. Um also die Validität des Ansatzes zu prüfen, ist der naheliegendste Schritt, numerische Berechnungen durchzuführen, um so zu zeigen, dass es sich tatsächlich um eine Verbesserung bereits bekannter Verfahren handelt.

7 Appendix

7.1 Zusammenhang zwischen γ und Green-Funktionen

Betrachtet man die Definition der Green-Funktion, so fällt auf, dass γ_{ijkl} eine ähnliche Struktur wie die korrelierte Zweiteilchen-Green-Funktion hat. Aus diesem Grund ist es interessant, den Formalismus der Green-Funktionen näher zu betrachten. Grundlage hierzu bilden Refs. [6],[13] und [14]. Folgende Definitionen stellen den Ausgangspunkt für weitere Betrachtungen dar:

$$G_{ij}^{(1)}(t_1, t'_1) = -\frac{i}{\hbar} \langle \mathcal{T} \{ \hat{a}_i(t_1) \hat{a}_j^\dagger(t'_1) \} \rangle, \quad (7.1)$$

$$G_{ij}^>(t_1, t'_1) = -\frac{i}{\hbar} \langle \hat{a}_i(t_1) \hat{a}_j^\dagger(t'_1) \rangle \quad (t_1 \geq t'_1), \quad (7.2)$$

$$G_{ij}^<(t_1, t'_1) = \mp \frac{i}{\hbar} \langle \hat{a}_j^\dagger(t'_1) \hat{a}_i(t_1) \rangle \quad (t'_1 \geq t_1), \quad (7.3)$$

$$G_{ijkl}^{(2)}(t_1, t_2, t'_1, t'_2) = -\frac{1}{\hbar^2} \langle \mathcal{T} \{ \hat{a}_i(t_1) \hat{a}_j(t_2) \hat{a}_l^\dagger(t'_2) \hat{a}_k^\dagger(t'_1) \} \rangle. \quad (7.4)$$

Außerdem gilt folgende Relation:

$$G_{ij}^>(t, t) - G_{ij}^<(t, t) = -\frac{i}{\hbar} \delta_{ij}. \quad (7.5)$$

Da es sich bei $\gamma_{ijkl}(t)$ um eine Größe handelt, die lediglich von einer Zeit abhängt, sollen die folgenden Betrachtungen für Green-Funktionen für den Fall $t_1 = t'_1 = t_2 = t'_2$ vorgenommen werden. Hier gilt dann $G_{ij}^{(1)}(t_1, t'_1) = G_{ij}^>(t_1, t'_1)$. Es ergibt sich für $\gamma_{ijkl}(t)$:

$$\gamma_{ijkl}(t) = \langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{kl} \rangle = \langle (\hat{n}_{ij} - n_{ij})(\hat{n}_{kl} - n_{kl}) \rangle \quad (7.6)$$

$$= \langle \hat{n}_{ij} \hat{n}_{kl} \rangle - \langle \hat{n}_{ij} \rangle \langle \hat{n}_{kl} \rangle \quad (7.7)$$

$$= \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle. \quad (7.8)$$

Interessant ist das Produkt von vier Operatoren, da dieses zu einer Zweiteilchen-Green-Funktion führt:

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l = (\mp \delta_{ij} \pm \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger) (\mp \delta_{kl} \pm \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger) \quad (7.9)$$

$$\begin{aligned} &= \delta_{ij} \delta_{kl} - \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger \delta_{ij} - \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \delta_{kl} + \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger \\ &= \delta_{ij} \delta_{kl} - \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger \delta_{ij} - \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \delta_{kl} + \hat{a}_j (\mp \delta_{il} \pm \hat{a}_l \hat{a}_i^\dagger) \hat{a}_k^\dagger \\ &= \delta_{ij} \delta_{kl} - \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger \delta_{ij} - \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \delta_{kl} \mp \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \delta_{il} \pm \hat{a}_j \hat{a}_l \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \\ &= \delta_{ij} \delta_{kl} - \hat{a}_l \hat{a}_k^\dagger \delta_{ij} - \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \delta_{kl} \mp \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \delta_{il} + \hat{a}_j \hat{a}_l \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Damit folgt nun:

$$-\frac{1}{\hbar^2} \gamma_{ijkl} = -\frac{1}{\hbar^2} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{i}{\hbar} G_{lk}^> \delta_{ij} + \frac{i}{\hbar} G_{ji}^> \delta_{lk} \pm \frac{i}{\hbar} G_{jk}^> \delta_{il} + G_{jlik}^{(2)} - G_{ji}^< G_{lk}^< \quad (7.11)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{i}{\hbar} \delta_{ij} \left(-\frac{i}{\hbar} \delta_{kl} - G_{lk}^> \right) + \frac{i}{\hbar} G_{ji}^> \delta_{lk} \pm \frac{i}{\hbar} G_{jk}^> \delta_{il} + G_{jlik}^{(2)} - G_{ji}^< G_{lk}^< \\ &= \frac{i}{\hbar} G_{lk}^< \delta_{ij} + \frac{i}{\hbar} G_{ji}^> \delta_{lk} \pm \frac{i}{\hbar} G_{jk}^> \delta_{il} + G_{jlik}^{(2)} - G_{ji}^< G_{lk}^< \\ &= G_{lk}^< \left(\frac{i}{\hbar} \delta_{ij} - G_{ji}^< \right) + \frac{i}{\hbar} G_{ji}^> \delta_{lk} \pm \frac{i}{\hbar} G_{jk}^> \delta_{il} + G_{jlik}^{(2)} \\ &= -G_{lk}^< G_{ji}^> + \frac{i}{\hbar} G_{ji}^> \delta_{lk} \pm \frac{i}{\hbar} G_{jk}^> \delta_{il} + G_{jlik}^{(2)} \\ &= G_{ji}^> \left(\frac{i}{\hbar} \delta_{lk} - G_{lk}^< \right) \pm \frac{i}{\hbar} G_{jk}^> \delta_{il} + G_{jlik}^{(2)} \\ &= -G_{ji}^> G_{lk}^> \pm \frac{i}{\hbar} G_{jk}^> \delta_{il} + G_{jlik}^{(2)} \\ &= -G_{ji}^> G_{lk}^> \mp G_{jk}^> (G_{li}^> - G_{li}^<) + G_{jlik}^{(2)} \\ &= -G_{ji}^> G_{lk}^> \mp G_{jk}^> G_{li}^> \pm G_{jk}^> G_{li}^< + G_{jlik}^{(2)}, \end{aligned} \quad (7.12)$$

womit für $G_{jlik}^{(2)}$ folgt:

$$G_{jlik}^{(2)} = G_{ji}^> G_{lk}^> \pm G_{jk}^> G_{li}^> \mp G_{jk}^> G_{li}^< - \frac{1}{\hbar^2} \gamma_{ijkl}. \quad (7.13)$$

Die ersten beiden Terme sind jeweils Produkte von Einteilchen-Green-Funktionen für $t_1 = t'_1$. Teilt man die Zweiteilchen-Green-Funktion $G_{ijkl}^{(2)}$ in einen Hartree-Fock- und einen Korrelationsanteil auf, so erhält man folgende Form:

$$G_{ijkl}^{(2)}(t_1, t_2, t'_1, t'_2) = G_{ijkl}^{\text{HF}}(t_1, t_2, t'_1, t'_2) + \mathcal{G}_{ijkl}^{\text{corr}}(t_1, t_2, t'_1, t'_2) \quad (7.14)$$

$$\begin{aligned} &= G_{ik}^{(1)}(t_1, t'_1)G_{jl}^{(1)}(t_2, t'_2) \pm G_{il}^{(1)}(t_1, t'_2)G_{jk}^{(1)}(t_2, t'_1)\dots \\ &\dots + \mathcal{G}_{ijkl}^{\text{corr}}(t_1, t_2, t'_1, t'_2). \end{aligned} \quad (7.15)$$

Man kann somit sofort die korrelierte Zweiteilchen-Green-Funktion identifizieren:

$$\mathcal{G}_{jlik}^{\text{corr}} = \mp G_{jk}^> G_{li}^< - \frac{1}{\hbar^2} \gamma_{ijkl} \quad (7.16)$$

$$= \mp G_{li}^< \left(G_{jk}^< - \frac{i}{\hbar} \delta_{jk} \right) - \frac{1}{\hbar^2} \gamma_{ijkl}. \quad (7.17)$$

Zu bedenken ist, dass hier alle Größen lediglich eine t -Abhängigkeit haben und nicht wie für allgemeine Green-Funktionen eine Abhängigkeit von mehreren Zeiten. Zusammenfassend kann somit gezeigt werden, dass eine Übertragung des erweiterten SMF-Ansatzes auf den Green-Funktionsformalismus möglich ist.

7.2 Zusammenhang mit der BBGKY-Hierarchie

Ein anderer Formalismus zur Lösung von Vielteilchenproblemen ist die BBGKY-Hierarchie der reduzierten Dichteoperatoren.¹³ Hier bezeichnen $F_1, F_{12}, \dots, F_{1\dots s}$ Einteilchen-, Zweiteilchen- und s -Teilchendichten. Im Rahmen der Cluster-Entwicklung für die reduzierten Dichteoperatoren lassen sich Vielteilchendichteoperatoren durch Korrelationsoperatoren und Einteilchendichteoperatoren darstellen. Für Zweiteilchen- und Dreiteilchendichteoperatoren

¹³Siehe für eine genaue Herleitung und Diskussion der BBGKY-Hierarchie die Referenzen [6] und [8].

folgt somit:

$$F_{12} = F_1 F_2 + g_{12}, \quad (7.18)$$

$$F_{123} = F_1 F_2 F_3 + F_1 g_{23} + F_2 g_{13} + F_3 g_{12} + g_{123}. \quad (7.19)$$

g_{12} bezeichnet hier den Zweiteilchen- und g_{123} den Dreiteilchenkorrelationsoperator. Durch Berücksichtigung der Spin-Statistik und unter Verwendung der Cluster-Entwicklung bekommt die BBGKY-Hierarchie folgende Form:

$$i\hbar\partial_t F_1 - [\overline{H}_1, F_1] = \text{Tr}_2[V_{12}^\pm, g_{12}], \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t g_{12} - [\overline{H}_{12}^0, g_{12}] - (\hat{V}_{12}g_{12} - g_{12}\hat{V}_{12}^\dagger) &= (\hat{V}_{12}F_1F_2 - F_1F_2\hat{V}_{12}^\dagger)\dots \\ \dots + \Pi_{12}^{(1)} + \Pi_{12}^{(2)} + \text{Tr}_3[V_{13} + V_{23}, g_{123}](1 + \epsilon P_{13} + \epsilon P_{23}). \end{aligned} \quad (7.21)$$

Hier werden folgende Definitionen verwendet:

$$H_1^{HF} \equiv \text{Tr}_2 V_{12}^\pm F_2, \quad (7.22)$$

$$V_{12}^\pm \equiv V_{12} \Lambda_{12}^\pm, \quad (7.23)$$

$$\hat{V}_{12} \equiv (1 + \epsilon F_1 + \epsilon F_2) V_{12}, \quad (7.24)$$

$$\overline{H}_{12}^0 \equiv H_1 + H_2 + H_1^{HF} + H_2^{HF}, \quad (7.25)$$

$$\Pi_{12}^{(1)} \equiv \text{Tr}_3[V_{13}, F_1] g_{23} \Lambda_{23}^\pm. \quad (7.26)$$

$\Pi_{12}^{(2)}$ ergibt sich durch Ersetzung von $1 \longleftrightarrow 2$ und $\epsilon = \pm 1$ entspricht der Unterscheidung zwischen Bosonen und Fermionen. Des Weiteren bezeichnen H_1 und H_2 den zum jeweiligen Einteilchendichteoperator gehörigen Hamiltonoperator und V_{12} den Operator, der die Wechselwirkung der beiden Dichten beschreibt.

Aufgrund der Struktur der Gleichungen kann man nun Größen vergleichen und die Äquivalenz beider Ansätze zeigen. Dabei gilt für die reduzierten Dichteoperatoren folgender Zusammenhang mit den Erzeugungs- und Ver-

nichtungsoperatoren der zweiten Quantisierung:

$$\langle i_1 \dots i_s | F_{1 \dots s}^\pm | k_1 \dots k_s \rangle = \langle \hat{a}_{i_1}^\dagger \dots \hat{a}_{i_s}^\dagger \hat{a}_{k_s} \dots \hat{a}_{k_1} \rangle. \quad (7.27)$$

Unterschiede treten auf, da in beiden Ansätzen die Reihenfolge der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren differieren. So gilt für den Fall von γ_{ijkl} :

$$\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle + \gamma_{ijkl}. \quad (7.28)$$

Um also Größen identifizieren zu können, muss zunächst Gleichung (7.28) umgeformt werden:

$$\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j \rangle = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle - \delta_{kj} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \rangle \quad (7.29)$$

$$= \langle \hat{n}_{ij} \rangle \langle \hat{n}_{kl} \rangle + \langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{kl} \rangle - \delta_{kj} \langle \hat{n}_{il} \rangle \quad (7.30)$$

$$= n_{ij} n_{kl} - \delta_{kj} n_{il} + \gamma_{ijkl}. \quad (7.31)$$

D.h. $\gamma_{ijkl} - \delta_{jk} n_{il} \longrightarrow g_{12}$. Um nun Größen zu identifizieren, muss von der Bewegungsgleichung von γ_{ijkl} die Bewegungsgleichung von n_{il} abgezogen werden.

Es folgt damit:

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t\{\gamma_{ijkl} - \delta_{kj}n_{il}\} &= \frac{1}{2} \sum_{mno} 2(h_{mj}^* \gamma_{imkl} - h_{im}^* \gamma_{mjkl}) \dots \\
&\dots + (n_{im} w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj}) \gamma_{nokl} \dots \\
&\dots + (w_{jnmo}^\pm \gamma_{imkl} - w_{mnio}^\pm \gamma_{mjkl}) (n_{no} \mp \delta_{no}) \dots \\
&\dots + w_{jnmo}^\pm \langle \delta \hat{n}_{im} \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{kl} \rangle - w_{mnio}^\pm \langle \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{mj} \delta \hat{n}_{kl} \rangle \dots \\
&\dots + 2(h_{ml}^* \gamma_{ijkm} - h_{km}^* \gamma_{ijml}) \dots \\
&\dots + (n_{km} w_{lnmo}^\pm - w_{mnko}^\pm n_{ml}) \gamma_{ijn} \dots \\
&\dots + (w_{lnmo}^\pm \gamma_{ijkm} - w_{mnko}^\pm \gamma_{ijml}) (n_{no} \mp \delta_{no}) \dots \\
&\dots + w_{lnmo}^\pm \langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{km} \delta \hat{n}_{no} \rangle - w_{mnko}^\pm \langle \delta \hat{n}_{ij} \delta \hat{n}_{no} \delta \hat{n}_{ml} \rangle \dots \\
&\dots - \delta_{kj} \{ n_{im} [2h_{ml}^* + w_{lnmo}^\pm (n_{no} \mp \delta_{no})] \dots \\
&\dots - [2h_{im}^* + w_{mnio}^\pm (n_{no} \mp \delta_{no})] n_{ml} \dots \\
&\dots + (w_{lnmo}^\pm \gamma_{imno} - w_{mnio}^\pm \gamma_{noml}) \}. \tag{7.32}
\end{aligned}$$

Definiere die Größe, welche es zu identifizieren gilt:

$$\chi_{ijkl} \equiv \gamma_{ijkl} - \delta_{kj}n_{il}. \tag{7.33}$$

Nun soll in Gleichung (7.32) zuerst der Einteilchenbeitrag identifiziert werden:

$$\sum_m h_{mj}^* \gamma_{imkl} - h_{im}^* \gamma_{mjkl} + h_{ml}^* \gamma_{ijkm} - h_{km}^* \gamma_{ijml} - h_{ml}^* \delta_{kj} n_{im} + h_{im}^* \delta_{kj} n_{ml} \quad (7.34)$$

$$= \sum_m h_{ml}^* \{ \gamma_{ijkm} - \delta_{kj} n_{im} \} - h_{im}^* \{ \gamma_{mjkl} - \delta_{kj} n_{ml} \} + h_{mj}^* \gamma_{imkl} - h_{km}^* \gamma_{ijml} \quad (7.35)$$

$$= \sum_m h_{ml}^* \chi_{ijkm} - h_{im}^* \chi_{mjkl} + h_{mj}^* \{ \gamma_{imkl} - \delta_{mk} n_{il} + \delta_{mk} n_{il} \} \dots \\ \dots - h_{km}^* \{ \gamma_{ijml} - \delta_{mj} n_{il} + \delta_{mj} n_{il} \} \quad (7.36)$$

$$= \sum_m h_{ml}^* \chi_{ijkm} - h_{im}^* \chi_{mjkl} + h_{mj}^* \chi_{imkl} - h_{km}^* \chi_{ijml} + h_{mj}^* \delta_{mk} n_{il} - h_{km}^* \delta_{mj} n_{il} \quad (7.37)$$

$$= \sum_m h_{ml}^* \chi_{ijkm} - h_{im}^* \chi_{mjkl} + h_{mj}^* \chi_{imkl} - h_{km}^* \chi_{ijml}. \quad (7.38)$$

Dieser Ausdruck entspricht $[H_1 + H_2, g_{12}]$. Analog ergibt sich die Rechnung bezüglich des Wechselwirkungsanteils, der durch Berücksichtigung von $i\hbar\partial_t(\delta_{kj}n_{il})$ auftritt. Um die anderen Terme zuweisen zu können, ist es allerdings notwendig, die Dreiteilchenfluktuationen näher zu betrachten, da auch hier g_{123} nur indirekt enthalten ist.

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m \hat{a}_n = \pm \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \hat{a}_l \quad (7.39) \\ = \pm (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \{ \mp \delta_{kn} \pm \hat{a}_n \hat{a}_k^\dagger \} \hat{a}_m \hat{a}_l) \\ = -\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_l \delta_{kn} + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_l \\ = -\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_l \delta_{kn} + \hat{a}_i^\dagger \{ \mp \delta_{jn} \pm \hat{a}_n \hat{a}_j^\dagger \} \{ \mp \delta_{km} \pm \hat{a}_m \hat{a}_k^\dagger \} \hat{a}_l \\ = -\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_l \delta_{kn} + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \delta_{jn} \delta_{km} - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \delta_{jn} - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \delta_{km} + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l. \quad (7.40)$$

Den Erwartungswert dieses Ausdrucks kann man mithilfe folgender Formel berechnen:

$$\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C} \rangle = ABC + A\langle \delta\hat{B}\delta\hat{C} \rangle + B\langle \delta\hat{A}\delta\hat{C} \rangle + C\langle \delta\hat{A}\delta\hat{B} \rangle + \langle \delta\hat{A}\delta\hat{B}\delta\hat{C} \rangle. \quad (7.41)$$

Damit folgt nun:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m \hat{a}_n \rangle &= -n_{il}n_{jm}\delta_{kn} - \gamma_{iljm}\delta_{kn} + n_{im}\delta_{jl}\delta_{kn} + n_{il}\delta_{jn}\delta_{km}\dots \\ &\dots - n_{im}n_{kl}\delta_{jn} - \gamma_{imkl}\delta_{jn} - n_{in}n_{jl}\delta_{km} - \gamma_{injl}\delta_{km}\dots \\ &\dots + n_{in}n_{jm}n_{kl} + n_{in}\gamma_{jmk}l + n_{jm}\gamma_{inkl} + n_{kl}\gamma_{injm}\dots \\ &\dots + \xi_{injmkl} \end{aligned} \quad (7.42)$$

mit der Definition $\xi_{iljmn} \equiv \langle \delta\hat{n}_{il}\delta\hat{n}_{jm}\delta\hat{n}_{kn} \rangle$. In diesem Ausdruck gilt es nun g_{123} zu identifizieren:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m \hat{a}_n \rangle &= n_{in}n_{jm}n_{kl} + n_{in}\chi_{jmk}l + n_{jm}\chi_{inkl} + n_{kl}\chi_{injm}\dots \\ &\dots - \delta_{km}\chi_{injl} - \delta_{kn}\chi_{iljm} - \delta_{jn}\chi_{imkl} - \delta_{jn}\delta_{mk}n_{il}\dots \\ &\dots + \xi_{injmkl}. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Man kann hier die Größe bestimmen, die g_{123} entspricht:

$$\eta_{injmkl} \equiv \xi_{injmkl} - \delta_{km}\chi_{injl} - \delta_{kn}\chi_{iljm} - \delta_{jn}\chi_{imkl} - \delta_{jn}\delta_{mk}n_{il}. \quad (7.44)$$

Des Weiteren ist es notwendig, in den restlichen Termen aus Gleichung (7.32) χ_{ijkl} für γ_{ijkl} einzusetzen.

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t\chi_{ijkl} = & \frac{1}{2} \sum_{mno} 2(h_{mj}^*\chi_{imkl} - h_{im}^*\chi_{mjkl})\dots \\
& \dots + (n_{im}w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj})(\chi_{nokl} + \delta_{ok}n_{nl})\dots \\
& \dots + (w_{jnmo}^\pm\chi_{imkl} - w_{mnio}^\pm\chi_{mjkl})(n_{no} \mp \delta_{no})\dots \\
& \dots + w_{jnmo}^\pm(\eta_{imnokl} + \delta_{ok}\chi_{imnl} + \delta_{mn}\chi_{iokl} + \delta_{mk}\chi_{ilno} + \delta_{mn}\delta_{ok}n_{il})\dots \\
& \dots - w_{mnio}^\pm(\eta_{nomjkl} + \delta_{jk}\chi_{noml} + \delta_{om}\chi_{njk} + \delta_{ok}\chi_{nlmj} + \delta_{om}\delta_{jk}n_{nl})\dots \\
& \dots + 2(h_{ml}^*\chi_{ijkm} - h_{km}^*\chi_{ijml})\dots \\
& \dots + (n_{km}w_{lnmo}^\pm - w_{mnko}^\pm n_{ml})(\chi_{ijn} + \delta_{jn}n_{io})\dots \\
& \dots + (w_{lnmo}^\pm\chi_{ijkm} - w_{mnko}^\pm\chi_{ijml})(n_{no} \mp \delta_{no})\dots \\
& \dots + w_{lnmo}^\pm(\eta_{ijkmno} + \delta_{mn}\chi_{ijko} + \delta_{kj}\chi_{imno} + \delta_{jn}\chi_{iokm} + \delta_{kj}\delta_{mn}n_{io})\dots \\
& \dots - w_{mnko}^\pm(\eta_{ijnoml} + \delta_{om}\chi_{ijnl} + \delta_{jn}\chi_{ioml} + \delta_{jm}\chi_{ilno} + \delta_{om}\delta_{jn}n_{il})\dots \\
& \dots - \delta_{kj}\{w_{lnmo}^\pm(\chi_{imno} + \delta_{mn}n_{io}) - w_{mnio}^\pm(\chi_{noml} + \delta_{om}n_{nl})\}. \quad (7.45)
\end{aligned}$$

Außerdem fällt auf, dass alle Terme wegfallen, die lediglich linear in der Dichte sind.

Es folgt somit:

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t\chi_{ijkl} = & \frac{1}{2} \sum_{mno} 2(h_{mj}^*\chi_{imkl} - h_{im}^*\chi_{mjkl})\dots \\
& \dots + (n_{im}w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj})(\chi_{nokl} + \delta_{ok}n_{nl})\dots \\
& \dots + (w_{jnmo}^\pm\chi_{imkl} - w_{mnio}^\pm\chi_{mjkl})(n_{no} \mp \delta_{no})\dots \\
& \dots + w_{jnmo}^\pm(\eta_{imnokl} + \delta_{ok}\chi_{imnl} + \delta_{mn}\chi_{iokl} + \delta_{mk}\chi_{ilno})\dots \\
& \dots - w_{mnio}^\pm(\eta_{nomjkl} + \delta_{jk}\chi_{noml} + \delta_{om}\chi_{n,jkl} + \delta_{ok}\chi_{nlmj})\dots \\
& \dots + 2(h_{ml}^*\chi_{ijkm} - h_{km}^*\chi_{ijml})\dots \\
& \dots + (n_{km}w_{lnmo}^\pm - w_{mnko}^\pm n_{ml})(\chi_{ijnno} + \delta_{jn}n_{io})\dots \\
& \dots + (w_{lnmo}^\pm\chi_{ijkm} - w_{mnko}^\pm\chi_{ijml})(n_{no} \mp \delta_{no})\dots \\
& \dots + w_{lnmo}^\pm(\eta_{ijkmno} + \delta_{mn}\chi_{ijkno} + \delta_{kj}\chi_{imno} + \delta_{jn}\chi_{iokm})\dots \\
& \dots - w_{mnko}^\pm(\eta_{ijnoml} + \delta_{om}\chi_{ijnl} + \delta_{jn}\chi_{ioml} + \delta_{jm}\chi_{ilno})\dots \\
& \dots - \delta_{kj}\{w_{lnmo}^\pm\chi_{imno} - w_{mnio}^\pm\chi_{noml}\}. \tag{7.46}
\end{aligned}$$

Unter Verwendung von $w_{ijkl}^\pm = w_{jilk}^\pm = \pm w_{jikl}^\pm = \pm w_{ijlk}^\pm$ erhalt man:

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t\chi_{ijkl} = & \frac{1}{2} \sum_{mno} 2(h_{mj}^*\chi_{imkl} - h_{im}^*\chi_{mjkl})\dots \\
& \dots + (n_{im}w_{jnmo}^\pm - w_{mnio}^\pm n_{mj})(\chi_{nokl} + \delta_{ok}n_{nl})\dots \\
& \dots + (w_{jnmo}^\pm\chi_{imkl} - w_{mnio}^\pm\chi_{mjkl})n_{no}\dots \\
& \dots + w_{jnmo}^\pm\eta_{imnokl}\dots \\
& \dots - w_{mnio}^\pm(\eta_{nomjkl} + \delta_{ok}\chi_{nlmj})\dots \\
& \dots + 2(h_{ml}^*\chi_{ijkm} - h_{km}^*\chi_{ijml})\dots \\
& \dots + (n_{km}w_{lnmo}^\pm - w_{mnko}^\pm n_{ml})(\chi_{ijnno} + \delta_{jn}n_{io})\dots \\
& \dots + (w_{lnmo}^\pm\chi_{ijkm} - w_{mnko}^\pm\chi_{ijml})n_{no}\dots \\
& \dots + w_{lnmo}^\pm(\eta_{ijkmno} + \delta_{jn}\chi_{iokm})\dots \\
& \dots - w_{mnko}^\pm\eta_{ijnoml}. \tag{7.47}
\end{aligned}$$

An diesem Punkt ist es nun möglich, eine Identifikation der einzelnen Terme durchzuführen. Alle Terme, in denen η_{ijklmn} auftritt, lassen sich als $\text{Tr}_3[V_{13} + V_{23}, g_{123}](1 + \epsilon P_{13} + \epsilon P_{23})$ identifizieren. Terme, die quadratisch in n_{ij} sind, sollten Termen wie $\hat{V}_{12}F_1F_2 - F_1F_2\hat{V}_{12}^\dagger$ entsprechen. Des Weiteren stimmen Terme, in welchen Ausdrücke wie $\delta_{ij}\chi_{klmn}$ auftreten, mit $\hat{V}_{12}g_{12} - g_{12}\hat{V}_{12}^\dagger$ überein. Außerdem ist eine Identifikation der Hartree-Fock-Beiträge $[H_1^{\text{HF}} + H_2^{\text{HF}}, g_{12}]$ mit Termen der Form $(w_{jnm}^\pm\chi_{imkl} - w_{mno}^\pm\chi_{mjkl})n_{no}$ möglich. Abschließend entsprechen die Polarisationsbeiträge $\Pi_{12}^{(1)}$ und $\Pi_{12}^{(2)}$ Termen der folgenden Struktur: $(n_{im}w_{jnm}^\pm - w_{mno}^\pm n_{mj})\chi_{nokl}$. Es fällt also auf, dass obwohl F_1, F_2 etc. problemlos mit n_{ij} in Verbindung gebracht werden können, die Korrelationsoperatoren g_{12}, g_{123} etc. nur indirekt in Größen wie $\langle\delta\hat{n}_{ij}\delta\hat{n}_{kl}\rangle$ etc. enthalten sind. Hilfsgrößen wie χ_{ijkl} und ξ_{ijklmn} müssen definiert werden, um die Äquivalenz der Korrelationsgrößen zu zeigen und diese ineinander zu überführen.

Hier muss jedoch hervorgehoben werden, dass eine eindeutige Identifikation der einzelnen Terme an diesem Punkt noch nicht vorliegt. V_{12}^\dagger enthält beispielsweise Einteilchendichten F_1 und F_2 , sodass ein quadratisches Auftreten von n_{ij} nicht ausreicht, um eine vollständige Äquivalenz zu zeigen. Zusätzlich sollte η_{ijklmn} äquivalent sein zu g_{123} . Es treten in der Bewegungsgleichung von g_{12} jedoch sechs Terme auf, die g_{123} enthalten. Die Bewegungsgleichung von χ_{ijkl} enthält allerdings lediglich vier Terme mit η_{ijklmn} . Einzig $[\bar{H}_{12}^0, g_{12}]$ und $\Pi_{12}^{(1)} + \Pi_{12}^{(2)}$ lassen sich an diesem Punkt eindeutig zuordnen. Der Nachweis der vollständigen Äquivalenz konnte im Rahmen dieser Arbeit somit nicht erbracht werden und stellt eine Aufgabe für die Zukunft dar.

Literatur

1. Lacroix, D., Hermanns, S., Hinz, C. M. & Bonitz, M. Ultrafast dynamics of finite Hubbard clusters: A stochastic mean-field approach. *Physical Review B* **90**. <https://doi.org/10.1103/physrevb.90.125112> (Sep. 2014).
2. Schwabl, F. *Quantenmechanik* <https://doi.org/10.1007/978-3-662-09627-7> (Springer Berlin Heidelberg, 1990).
3. Fließbach, T. *Quantenmechanik* <https://doi.org/10.1007/978-3-662-58031-8> (Springer Berlin Heidelberg, 2018).
4. Schwabl, F. *Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)* <https://doi.org/10.1007/978-3-540-85076-2> (Springer Berlin Heidelberg, 2008).
5. Nolting, W. *Grundkurs Theoretische Physik 7* <https://doi.org/10.1007/978-3-642-25808-4> (Springer Berlin Heidelberg, 2015).
6. Bonitz, M. *Introduction to Quantum Field Theory and Quantum Statistics* Unveröffentlichtes Skript. 2020.
7. Ayik, S. A stochastic mean-field approach for nuclear dynamics. *Physics Letters B* **658**, 174–179. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2007.09.072> (Jan. 2008).
8. Bonitz, M. *Quantum Kinetic Theory* <https://doi.org/10.1007/978-3-319-24121-0> (Springer International Publishing, 2016).
9. Hubbard, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**, 238–257. <https://doi.org/10.1098/rspa.1963.0204> (Nov. 1963).
10. Hermanns, S., Schlünzen, N. & Bonitz, M. Hubbard nanoclusters far from equilibrium. *Physical Review B* **90**. <https://doi.org/10.1103/physrevb.90.125111> (Sep. 2014).

11. Joost, J.-P., Schlünzen, N. & Bonitz, M. *The G1–G2 Scheme: Dramatic Acceleration of Nonequilibrium Green Functions Simulations Within the Hartree–Fock-GKBA* 2020. eprint: [arXiv:2002.12717](https://arxiv.org/abs/2002.12717).
12. Schlünzen, N., Joost, J.-P. & Bonitz, M. Achieving the Scaling Limit for Nonequilibrium Green Functions Simulations. *Physical Review Letters* **124**. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.124.076601> (Feb. 2020).
13. Balzer, K. & Bonitz, M. *Nonequilibrium Green's Functions Approach to Inhomogeneous Systems* <https://doi.org/10.1007/978-3-642-35082-5> (Springer Berlin Heidelberg, 2013).
14. Stefanucci, G. & van Leeuwen, R. *Nonequilibrium Many-Body Theory of Quantum Systems* <https://doi.org/10.1017/cbo9781139023979> (Cambridge University Press, 2009).

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne unerlaubte fremde Hilfe angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Weiterhin versichere ich, dass die den benutzten Quellen wörtlich oder inhaltlich entnommen Stellen als solche kenntlich gemacht wurden und ich die vorliegende Arbeit nicht an anderer Stelle eingereicht habe.

Ort, Datum

Erik Kresten Schroedter