

Diagrammatische Methoden der theoretischen Physik

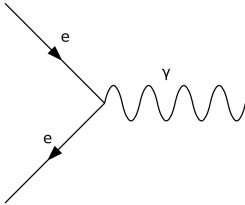
am Beispiel der Goldstone-Diagramme

Philipp Schreiner

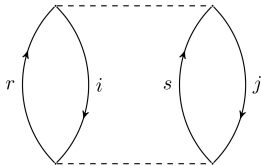
TU Graz

28. November 2019

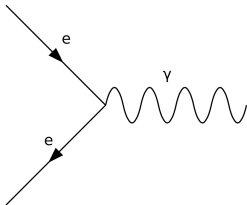
Feynman-Diagramm



Goldstone-Diagramme

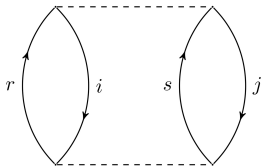


Feynman-Diagramm

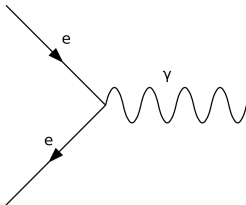


- Diagramme helfen, komplizierte Terme/Zusammenhänge übersichtlich darzustellen

Goldstone-Diagramme

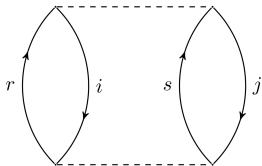


Feynman-Diagramm

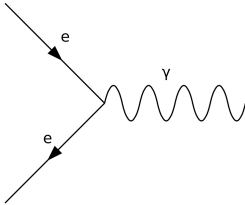


- ▶ Diagramme helfen, komplizierte Terme/Zusammenhänge übersichtlich darzustellen
- ▶ hier: Terme einer Störentwicklung

Goldstone-Diagramme

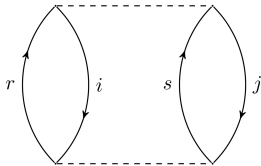


Feynman-Diagramm



- ▶ Diagramme helfen, komplizierte Terme/Zusammenhänge übersichtlich darzustellen
- ▶ hier: Terme einer Störentwicklung
- ▶ zur Verbesserung des Hartree-Fock-Verfahrens (Berechnung von Molekülorbitalen)

Goldstone-Diagramme



Inhalt

Grundlagen

Hartree-Fock

Störungsrechnung

Diagrammatik

Darstellung der Energiekorrekturen

Summation von Diagrammen

Zusammenfassung

Hartree-Fock

Problem:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1}$$

Hartree-Fock

Problem:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1}$$

Ansatz:

$$|\Psi\rangle := \left| \phi_i^{(1)} \phi_j^{(2)} \dots \phi_k^{(N)} \right\rangle = \begin{vmatrix} \phi_i(\mathbf{x}_1) & \phi_j(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_k(\mathbf{x}_1) \\ \phi_i(\mathbf{x}_2) & \phi_j(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_k(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_i(\mathbf{x}_N) & \phi_j(\mathbf{x}_N) & \cdots & \phi_k(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}$$

Hartree-Fock

Forderung:

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_0 \rangle \rightarrow \min$$

Variation in ϕ_m

Hartree-Fock

Forderung:

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_0 \rangle \rightarrow \min$$

Variation in ϕ_m

Lösung:

$$\hat{f}(1) \left| \phi_m^{(1)} \right\rangle = \epsilon_m \left| \phi_m^{(1)} \right\rangle$$

Hartree-Fock

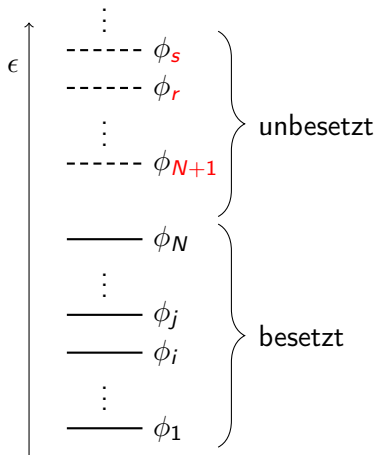
$$\hat{f}(1) = \hat{h}(1) + \hat{v}^{HF}(1) \quad (\text{Fock-Operator})$$

Hartree-Fock

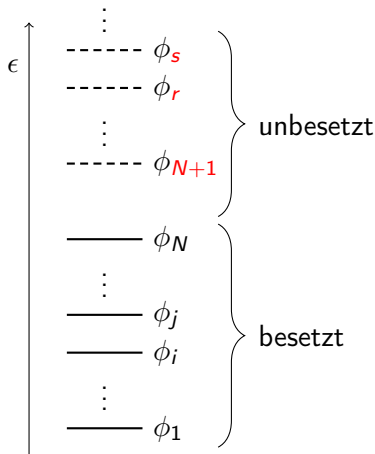
$$\hat{f}(1) = \hat{h}(1) + \hat{v}^{HF}(1) \quad (\text{Fock-Operator})$$

Frage nach optimalen Orbitalen \Leftrightarrow Eigenwertproblem von $\hat{f}(1)$

Hartree-Fock



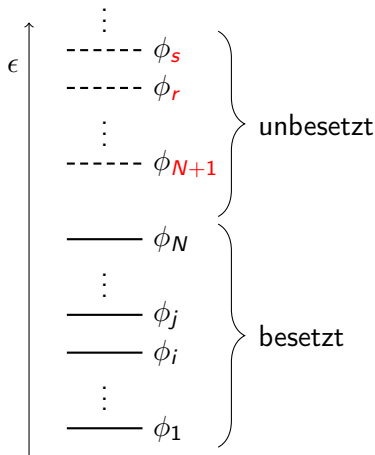
Hartree-Fock



Grundzustand:

$$|\Psi_0\rangle = |\phi_1^{(1)} \dots \phi_i^{(i)} \phi_j^{(j)} \dots \phi_N^{(N)}\rangle$$

Hartree-Fock



Grundzustand:

$$|\Psi_0\rangle = |\phi_1^{(1)} \dots \phi_i^{(i)} \phi_j^{(j)} \dots \phi_N^{(N)}\rangle$$

angeregte Zustände:

$$|\Psi_i^r\rangle = |\phi_1^{(1)} \dots \phi_r^{(i)} \phi_j^{(j)} \dots \phi_N^{(N)}\rangle$$

$$|\Psi_{ij}^{rs}\rangle = |\phi_1^{(1)} \dots \phi_r^{(i)} \phi_s^{(j)} \dots \phi_N^{(N)}\rangle$$

Hartree-Fock

$$\cancel{\hat{H} |\Psi_0\rangle = E_0 |\Psi_0\rangle} \quad (\text{keine Eigenzustände})$$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1}$$

Hartree-Fock

$$\cancel{\hat{\mathcal{H}} |\Psi_0\rangle = E_0 |\Psi_0\rangle} \quad (\text{keine Eigenzustände})$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \hat{h}(i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 |\Psi_0\rangle = \sum_{i=1}^N \epsilon_i |\Psi_0\rangle \quad (\text{Eigenzustände } \checkmark)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{f}(i) = \sum_{i=1}^N \left(\hat{h}(i) + \hat{v}^{HF}(i) \right)$$

Hartree-Fock

$$\hat{\mathcal{V}} = \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_0 = \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1}}_{\text{exakte WW}} - \underbrace{\sum_{i=1}^N \hat{\mathcal{V}}^{HF}(i)}_{\text{genäherte WW}}$$

Hartree-Fock

$$\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}_0 = \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1}}_{\text{exakte WW}} - \underbrace{\sum_{i=1}^N \hat{V}^{HF}(i)}_{\text{genäherte WW}}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

⇒ Ausgangspunkt für Störungsrechnung!

Störungsrechnung

Problem:

$$\hat{\mathcal{H}} |\Phi_0\rangle = (\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}) |\Phi_0\rangle = \mathcal{E}_0 |\Phi_0\rangle$$

mit $\hat{\mathcal{H}}_0 |\Psi_n\rangle = E_n^{(0)} |\Psi_n\rangle$ exakt lösbar

$|\Phi_0\rangle \dots$ exakter Grundzustand

$|\Psi_n\rangle \dots$ exakte Eigenzustände von $\hat{\mathcal{H}}_0$

Störungsrechnung

Problem:

$$\hat{\mathcal{H}} |\Phi_0\rangle = (\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}) |\Phi_0\rangle = \mathcal{E}_0 |\Phi_0\rangle$$

mit $\hat{\mathcal{H}}_0 |\Psi_n\rangle = E_n^{(0)} |\Psi_n\rangle$ exakt lösbar

$|\Phi_0\rangle \dots$ exakter Grundzustand

$|\Psi_n\rangle \dots$ exakte Eigenzustände von $\hat{\mathcal{H}}_0$

Gesucht: $\mathcal{E}_0 \dots$ wahre Grundzustandsenergie

Störungsrechnung

Idee:

$$\mathcal{E}_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} \dots$$

$$E_0^{(0)} = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{H}}_0 | \Psi_0 \rangle$$

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{V}} | \Psi_0 \rangle$$

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{V}} | \Psi_n \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Störungsrechnung

Speziell für Hartree-Fock:

- ▶ $E_0^{(1)}$ liefert keine Verbesserung
- ▶ Für den Term zweiter Ordnung:

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_n \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1} - \sum_{i=1}^N \hat{v}^{HF}(i)$$

$$|\Psi_n\rangle = |\Psi_i^r\rangle, |\Psi_{ij}^{rs}\rangle, |\Psi_{ijk}^{rst}\rangle, \dots$$

Störungsrechnung

Speziell für Hartree-Fock:

- ▶ $E_0^{(1)}$ liefert keine Verbesserung
- ▶ Für den Term zweiter Ordnung:

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_n \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N r_{ij}^{-1} - \sum_{i=1}^N \hat{v}^{HF}(i)$$

$$|\Psi_n\rangle = \cancel{|\Psi_i^r\rangle}, |\Psi_{ij}^{rs}\rangle, \cancel{|\Psi_{ijk}^{rst}\rangle}, \dots$$

Störungsrechnung

Energiekorrektur zweiter Ordnung für Hartree-Fock:

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_n \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Störungsrechnung

Energiekorrektur zweiter Ordnung für Hartree-Fock:

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_n \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

Störungsrechnung

Energiekorrektur zweiter Ordnung für Hartree-Fock:

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi_0 | \hat{V} | \Psi_n \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

$$W_{ij,rs} := \left\langle \phi_i^{(1)} \phi_j^{(2)} \left| r_{12}^{-1} \right| \phi_r^{(1)} \phi_s^{(2)} \right\rangle$$

$$\hat{f}(1) \left| \phi_m^{(1)} \right\rangle = \epsilon_m \left| \phi_m^{(1)} \right\rangle$$

Darstellung der Energiekorrekturen

Wollen Energiekorrekturterm 2. Ordnung darstellen:

$$\begin{aligned}
 E_0^{(2)} &= \frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} \\
 &\stackrel{\text{✂}}{=} \frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ij}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} - \frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}
 \end{aligned}$$

Darstellung der Energiekorrekturen

Wollen Energiekorrekturterm 2. Ordnung darstellen:

$$E_0^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

$$\stackrel{\text{↯}}{=} \frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ij}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} - \frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

Brauchen:

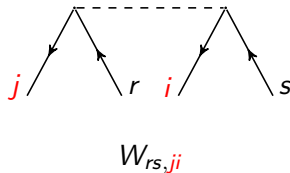
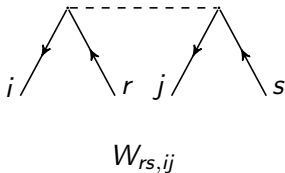
- ▶ Matrixelemente im Zähler
- ▶ Energien der Orbitale im Nenner
- ▶ Vorfaktor und Vorzeichen
- ▶ Summationen

Matrixelemente, Energien im Nenner und Summation

$$\sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

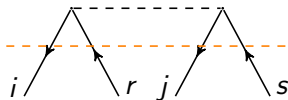
Matrixelemente, Energien im Nenner und Summation

$$\sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$



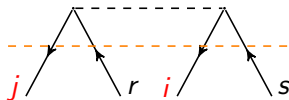
Matrixelemente, Energien im Nenner und Summation

$$\sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$



$W_{rs,ij}$

$$\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s$$



$W_{rs,ji}$

$$\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s$$

Darstellung der Energiekorrekturen

$$\sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

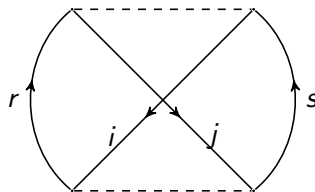
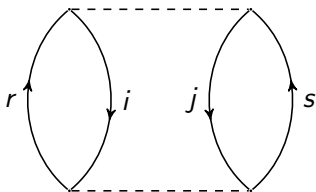
Brauchen:

- ▶ Matricelemente im Zähler ✓ (Interaktionslinien)
- ▶ Energien der Orbitale im Nenner ✓ (gedachte Linien)
- ▶ Vorfaktor und Vorzeichen
- ▶ Summationen ✓ (alle vorkommenden Indizes)

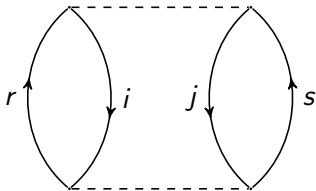
Außerdem:

- ▶ Mehrere Matricelemente in Zähler

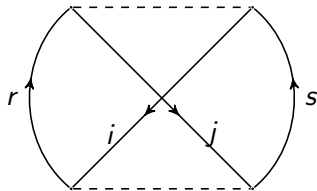
Coulomb- und Austausch-Diagramm



Coulomb- und Austausch-Diagramm

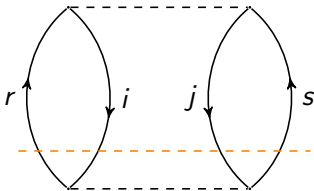


$$\underline{W_{ij,rs} W_{rs,ij}}$$

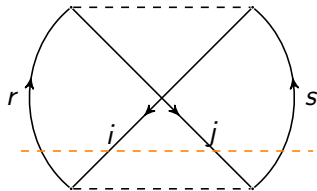


$$\underline{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}$$

Coulomb- und Austausch-Diagramm

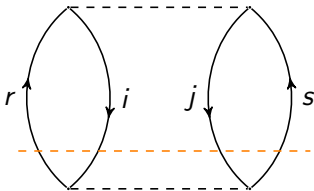


$$\frac{W_{ij,rs} W_{rs,ij}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

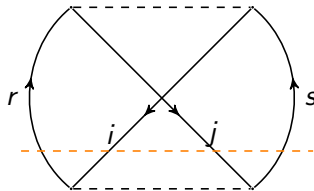


$$\frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

Coulomb- und Austausch-Diagramm

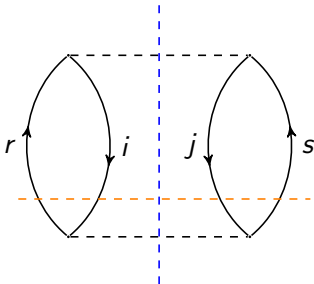


$$\sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ij}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

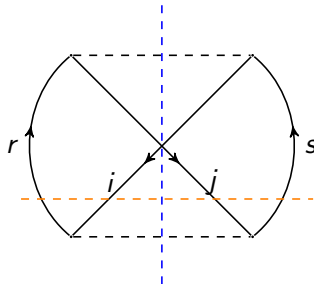


$$\sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

Coulomb- und Austausch-Diagramm

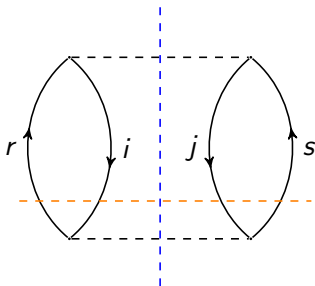


$$\frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ij}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

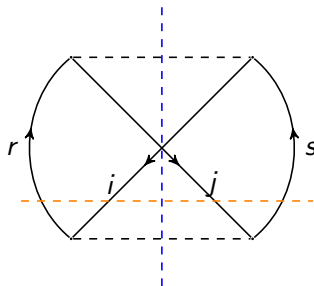


$$\frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

Coulomb- und Austausch-Diagramm

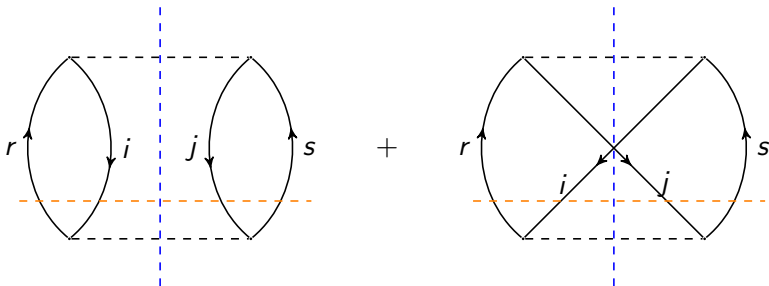


$$\frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ij}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$



$$-\frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

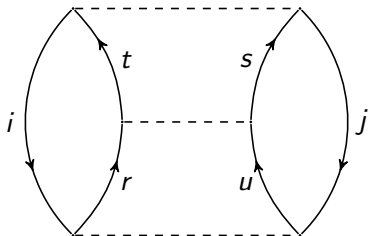
Coulomb- und Austausch-Diagramm



$$E_0^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ij}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} - \frac{1}{2} \sum_{ijrs} \frac{W_{ij,rs} W_{rs,ji}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

Diagramme höherer Ordnung

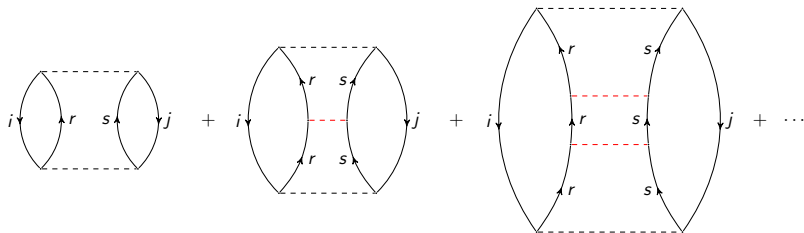
- ▶ Coulomb- und Austauschdiagramm sind die Diagramme für die Energiekorrektur zweiter Ordnung (2 Interaktionslinien)
- ▶ Terme n -ter Ordnung können mit n Interaktionslinien dargestellt werden. z.B. $n = 3$



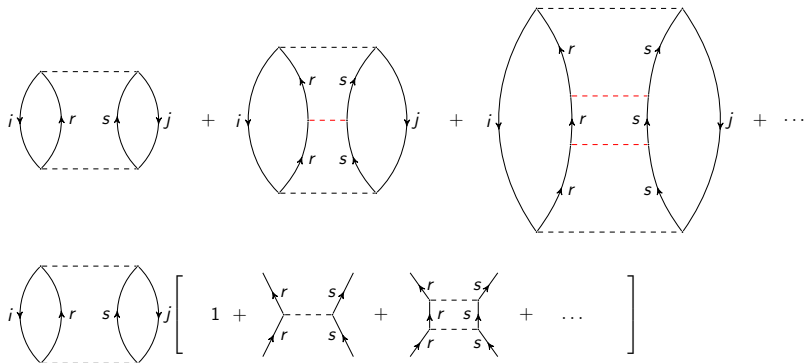
$$\frac{1}{2} \sum_{ijrstu} \frac{W_{ij,ru} W_{ru,ts} W_{ts,ij}}{(\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_u)(\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_t - \epsilon_s)}$$

- (i) **Interaktionslinie** $\Leftrightarrow W_{le\ re, la\ ra}$ *im Zähler*
- (ii) **Interaktionslinien-Paar** $\Leftrightarrow \sum \epsilon_{\downarrow} - \sum \epsilon_{\uparrow}$ *im Nenner*
- (iii) *Summe über alle Indizes*
- (iv) **Vorzeichen** $\Leftrightarrow (-)^{\text{geschlossene Kurven}}$
- (v) **Horizontal spiegelsymmetrisch** \Leftrightarrow Faktor $1/2$
- (vi) *Der Energiekorrekturterm n -ter Ordnung ergibt sich aus der Summe aller Graphen n -ter Ordnung*

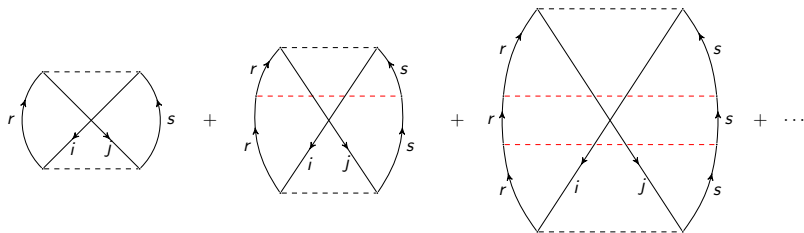
Summation von Diagrammen



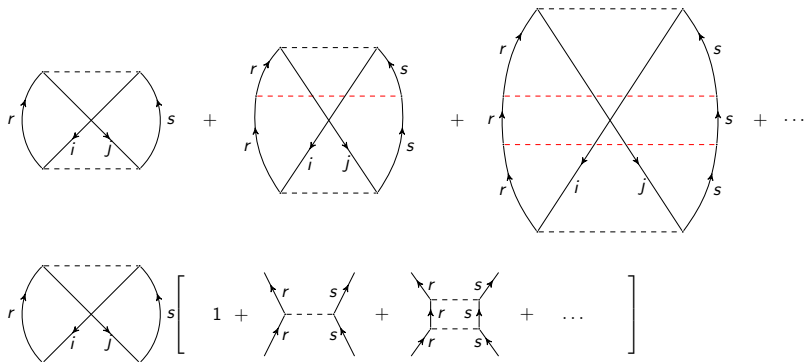
Summation von Diagrammen



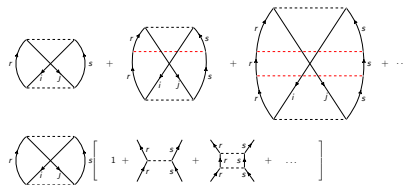
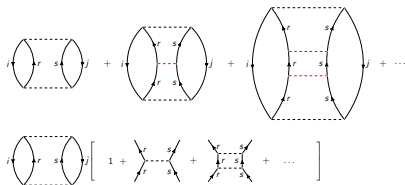
Summation von Diagrammen



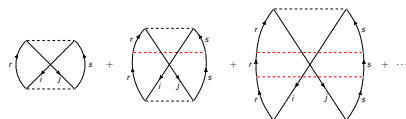
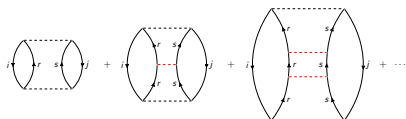
Summation von Diagrammen



Summation von Diagrammen



Summation von Diagrammen



$$\left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \right]$$

$$\left[\text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \dots \right]$$

↓ + ↓

$$\left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} \right] \left[1 + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \right]$$

Summation von Diagrammen

$$\left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } i \text{ and } j \text{ connected by two parallel lines } r \text{ and } s \\ \text{Diagram 2: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossed lines } r \text{ and } s \end{array} \right] \left[1 + \begin{array}{c} \text{Diagram 3: } r \text{ and } s \text{ lines with a dashed line between them} \\ \text{Diagram 4: } r \text{ and } s \text{ lines with two dashed lines between them} \end{array} + \dots \right]$$

Summation von Diagrammen

$$\underbrace{\left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } i \text{ and } j \text{ connected by two parallel lines } r \text{ and } s \\ \text{Diagram 2: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossing lines } r \text{ and } s \end{array} \right]}_{E_0^{(2)}} \left[\begin{array}{c} 1 + \text{Diagram 3: } i \text{ and } j \text{ connected by two lines } r \text{ and } s \text{ with a dashed line between them} \\ \text{Diagram 4: } i \text{ and } j \text{ connected by two lines } r \text{ and } s \text{ with two dashed lines between them} \\ \dots \end{array} \right]$$

$$\underbrace{\left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } i \text{ and } j \text{ connected by two parallel lines } r \text{ and } s \\ \text{Diagram 2: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossing lines } r \text{ and } s \end{array} \right]}_{E_0^{(2)}} \left[\begin{array}{c} 1 + \frac{W_{rs,rs}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} + \left(\frac{W_{rs,rs}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} \right)^2 + \dots \end{array} \right]_{\text{geometrische Reihe}}$$

Summation von Diagrammen

$$\underbrace{\left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } i \text{ and } j \text{ connected by two parallel lines } r \text{ and } s. \\ \text{Diagram 2: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossing lines } r \text{ and } s. \end{array} \right]}_{E_0^{(2)}} \left[\begin{array}{c} 1 + \text{Diagram 3: } i \text{ and } j \text{ connected by two lines } r \text{ and } s \text{ with a dashed line between them.} \\ \text{Diagram 4: } i \text{ and } j \text{ connected by two lines } r \text{ and } s \text{ with a dashed line and a crossing.} \\ \dots \end{array} \right]$$

$$\underbrace{\left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } i \text{ and } j \text{ connected by two parallel lines } r \text{ and } s. \\ \text{Diagram 2: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossing lines } r \text{ and } s. \end{array} \right]}_{E_0^{(2)}} \underbrace{\left[1 + \frac{W_{rs,rs}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} + \left(\frac{W_{rs,rs}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} \right)^2 + \dots \right]}_{\text{geometrische Reihe}}$$

$$\frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} \frac{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s - W_{rs,rs}}$$

Summation von Diagrammen

$$\underbrace{\left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } i \text{ and } j \text{ connected by two separate loops } r \text{ and } s. \\ \text{Diagram 2: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossed loops } r \text{ and } s. \end{array} \right]}_{E_0^{(2)}} \left[\begin{array}{c} 1 + \text{Diagram 3: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossed lines } r \text{ and } s. \\ \text{Diagram 4: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossed lines } r \text{ and } s \text{ with an internal loop.} \\ \dots \end{array} \right]$$

$$\underbrace{\left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: } i \text{ and } j \text{ connected by two separate loops } r \text{ and } s. \\ \text{Diagram 2: } i \text{ and } j \text{ connected by two crossed loops } r \text{ and } s. \end{array} \right]}_{E_0^{(2)}} \left[1 + \frac{W_{rs,rs}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} + \left(\frac{W_{rs,rs}}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} \right)^2 + \dots \right]_{\text{geometrische Reihe}}$$

$$\frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s} \frac{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s - W_{rs,rs}}$$

$$\frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s - W_{rs,rs}}$$

Summation von Diagrammen

Energiekorrektur zweiter Ordnung:

$$E_0^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s}$$

Summe der Folge aus Coulomb- und Austauschdiagrammen:

$$\frac{1}{4} \sum_{ijrs} \frac{|(W_{ij,rs} - W_{ij,sr})|^2}{\epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_r - \epsilon_s - W_{rs,rs}}$$

Zusammenfassung

- Es ist gelungen, gezielt Diagramme aus jeder störungstheoretischen Ordnung ausfindig zu machen, welche sich exakt aufsummieren lassen

Zusammenfassung

- ▶ Es ist gelungen, gezielt Diagramme aus jeder störungstheoretischen Ordnung ausfindig zu machen, welche sich exakt aufsummieren lassen
- ▶ Möglich durch die übersichtliche Darstellung in der Diagrammatik

Zusammenfassung

- ▶ Es ist gelungen, gezielt Diagramme aus jeder störungstheoretischen Ordnung ausfindig zu machen, welche sich exakt aufsummieren lassen
- ▶ Möglich durch die übersichtliche Darstellung in der Diagrammatik
- ▶ Teil des Störoperators konnte so exakt gelöst werden

Zusammenfassung

- ▶ Es ist gelungen, gezielt Diagramme aus jeder störungstheoretischen Ordnung ausfindig zu machen, welche sich exakt aufsummieren lassen
- ▶ Möglich durch die übersichtliche Darstellung in der Diagrammatik
- ▶ Teil des Störoperators konnte so exakt gelöst werden
- ▶ Weitere Summen von Diagrammen führen zu noch mehr Termen im Energienenner

Ausblick

- ▶ Goldstone-Diagramme können auch zur Beweisführung des **Linked-Cluster-Theorems** benutzt werden

Ausblick

- ▶ Goldstone-Diagramme können auch zur Beweisführung des **Linked-Cluster-Theorems** benutzt werden
- ▶ Dieses garantiert die **Größenkonsistenz** der Störungsrechnung in allen Ordnungen

Fragen

