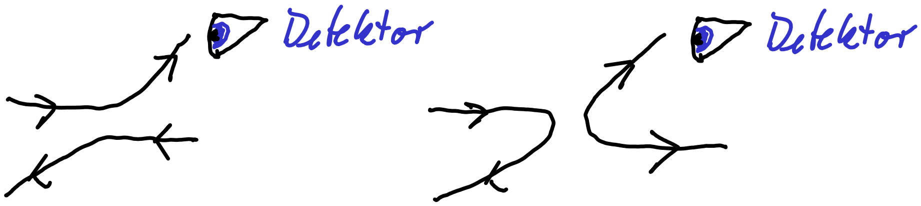
1. Vielteilchensysteme

1.1 N-Teilchenzustände

Im Gegensatz zur klassischen Physik muß in der Quantenmechanik zwischen unterscheidbaren und identischen Teilchen differenziert werden. Dies ist so, da aufgrund der Unschärferelation die individuellen Trajektorien vieler Teilchen nicht unterschieden werden können. z.B. sind folgende Prozesse ununterscheidbar, sofern es sich um die gleiche Sorte Teilchen handelt:



Betrachte nun N identische Teilchen mit Ortseigenzuständen

$|q_1\, q_2 \dots q_N\rangle$ mit $q_i = (\vec{x}_i, m_{s_i})$ ↪ Spinorientierung

Definiere $\int dq_i = \sum_{m_{s_i}} \int dx_i$

Ein N-Teilchenzustand wird konstruiert als direktes Produkt der Einteilchenzustände,

$$|q\ q_2 \dots q_N\rangle = |q_1\rangle \otimes |q_2\rangle \otimes \dots \otimes |q_N\rangle$$

Damit ist er ein Vektor im Produkt-Hilbertraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$$

Wir leiten aus den Eigenschaften der Einteilchenvektoren folgende Zusammenhänge her:

Orthonormalität:

$$\langle q_1 \ldots q_N | q_1' \ldots q_N' \rangle = \delta^3(\vec{x}_1 - \vec{x}_1')\, \delta_{m_{s_1} m_{s_1}'} \cdot \ldots \cdot \delta^3(\vec{x}_N - \vec{x}_N')\, \delta_{m_{s_N} m_{s_N}'}$$

Ist $|\psi\rangle$ ein Zustandsvektor, dann ist die Wellenfunktion

$$\psi(q_1, q_2, \ldots, q_N) = \langle q_1 \ldots q_N | \psi \rangle$$

Der Permutationsoperator P_{ij} vertauscht $i \leftrightarrow j$:

$$P_{ij} |\ldots q_i \ldots q_j \ldots \rangle = |\ldots q_j \ldots q_i \ldots \rangle$$

Umgekehrt erhalten wir aus der Wellenfunktion den Zustand

$$|\psi\rangle = \int dq_1\, dq_2 \ldots dq_N\, \psi(q_1, q_2, \ldots, q_N)\, |q_1 \ldots q_N\rangle$$

Die Permutationsgruppe S_N besteht aus allen Permutationen P von N Objekten, und hat damit $N!$ Elemente.
Jedes P kann als Produkt von elementaren Permutationen P_{ij} (Transpositionen) dargestellt werden. P heißt gerade (ungerade) wenn die Zahl der P_{ij} gerade (ungerade) ist.

Beispiel:

$P = (124)(35)$,

d.h. erst $3 \to 5, 5 \to 3$, dann $1 \to 2, 2 \to 4, 4 \to 1$

$(124) = (14)(12)$ d.h. erst $1 \leftrightarrow 2$, dann $1 \leftrightarrow 4$

1	2	4
2	1	4
4	1	2

Eigenschaften von P:

* $\langle \psi | \psi' \rangle = \langle P\psi | P\psi' \rangle$

$$\int dq_1\, dq_2\, dq_1'\, dq_2'\, \psi^*(q_1, q_2)\, \psi'(q_1', q_2')\, \langle q_1 q_2 | q_1' q_2' \rangle$$

$$= \int dq_1\, dq_2\, \psi^*(q_1, q_2)\, \psi'(q_1, q_2)$$

$$= \int dq_1\, dq_2\, dq_1'\, dq_2'\, \psi^*(q_1, q_2)\, \psi'(q_1', q_2')\, \langle q_2 q_1 | q_2' q_1' \rangle$$

$$= \int dq_1\, dq_2\, \psi^*(q_1, q_2)\, \psi'(q_1, q_2)$$

* P ist unitär:

Mit $\langle\psi|P\psi'\rangle \underset{\text{def.}}{=} \langle P^+\psi|\psi'\rangle$ folgt

$$\langle\psi|P_{12}P_{12}^+|\psi'\rangle = \int dq_1\, dq_2\, \langle\psi|P_{12}|q_1 q_2\rangle\langle q_1 q_2|P_{12}^+|\psi'\rangle$$

$$= \int dq_1\, dq_2\, \langle\psi|q_2 q_1\rangle\langle q_2 q_1|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi'\rangle$$

* $P_{12}^2 = \mathbb{1} \Rightarrow P_{12}$ hat die Eigenwerte ± 1.

* Sei $\mathcal{O}$ ein hermitescher Operator und $\langle\mathcal{O}\rangle$ observabel.

Für ununterscheidbare Teilchen muß gelten:

$$\langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle = \langle P_{12}\psi|\mathcal{O}|P_{12}\psi\rangle = \langle\psi|P_{12}^+\mathcal{O}P_{12}|\psi\rangle = \langle\psi|P_{12}\mathcal{O}P_{12}|\psi\rangle$$

Weiterhin können wir zerlegen:

$$\langle\varphi|\mathcal{O}|\psi\rangle = \frac{1}{4}\{\langle\varphi+\psi|\mathcal{O}|\varphi+\psi\rangle - \langle\varphi-\psi|\mathcal{O}|\varphi-\psi\rangle$$
$$+ i\langle\varphi-i\psi|\mathcal{O}|\varphi-i\psi\rangle - i\langle\varphi+i\psi|\mathcal{O}|\varphi+i\psi\rangle\}$$

Für jeden dieser Terme gilt obige Identität, so daß allgemein: $\mathcal{O} = P_{12}\mathcal{O}P_{12} \Leftrightarrow [\mathcal{O}, P_{12}] = 0$

Meßbare Größen entsprechen hermiteschen Operatoren, die mit P_{12} vertauschen.

* Insbesondere gilt dies für den Hamiltonoperator H:
$[H, P] = 0$

* Auf die Darstellung des Zustands als Wellenfunktion hat P_{12} den Effekt:

$$P_{12}\,\psi(q_1, q_2) = \langle q_1, q_2|P_{12}|\psi\rangle = \langle q_2, q_1|\psi\rangle = \psi(q_2, q_1)$$

Aufgrund der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen muß gelten:

$$P_{ij} |\cdots q_i \cdots q_j\rangle = |\cdots q_j \cdots q_i\rangle \stackrel{!}{=} \lambda_{ij} |\cdots q_i \cdots q_j\rangle,$$

wobei λ ein unwesentlicher Phasenfaktor ist ($|\lambda_{ij}|=1$).

Da $P_{ij}^2 = 1$ ist, kommen nur $\lambda_{ij} = \pm 1$ in Frage.

Nun bemerken wir, daß

$P_{ij} = P_{1i}\, P_{2j}\, P_{12}\, P_{2j}\, P_{1i}$ (von rechts zu lesen) ist.

12 ij
i2 1j
ij 12
ji 12
j2 1i
12 ji

Deshalb ist $P_{ij}|\psi\rangle = \lambda_{1i}^2 \lambda_{2j}^2 \lambda_{12} |\psi\rangle = \lambda_{12}|\psi\rangle$

Damit sind entweder alle $\lambda_{ij} \equiv \lambda = +1$ oder $\lambda_{ij} \equiv \lambda = -1$.

Wir unterscheiden:

$\lambda = +1$: Total symmetrischer Zustand:

kann aus einem beliebigen Zustand durch den Symmetrisierungsoperator gewonnen werden:

$$S_+ |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\sigma P_\sigma |\psi\rangle$$

z.B.

$$\langle q_1 q_2 q_3 | S_+ |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} \big(\psi(q_1,q_2,q_3) + \psi(q_2,q_1,q_3) + \psi(q_3,q_2,q_1) + \psi(q_1,q_3,q_2) + \psi(q_2,q_3,q_1) + \psi(q_3,q_1,q_2)\big)$$

$\lambda = -1$: Total antisymmetrischer Zustand:

$$S_- |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\sigma (-1)^{|\sigma|} P_\sigma |\psi\rangle$$

Hier bezeichnet $|\sigma|$ die Zahl der Transpositionen, aus denen P_σ sich zusammensetzen läßt.

z.B.

$$\langle q_1 q_2 q_3 | S_- | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} \Big(\psi(q_1, q_2, q_3) - \psi(q_2, q_1, q_3) - \psi(q_3, q_2, q_1)$$
$$- \psi(q_1, q_3, q_2) + \psi(q_2, q_3, q_1) + \psi(q_3, q_1, q_2) \Big)$$

Da der symmetrisierte und der antisymmetrisierte Zustand zueinander orthogonal sind, haben wir

$\mathcal{H}_N^{(+)}$: Hilbertraum der symmetrischen Zustände
$\mathcal{H}_N^{(-)}$: Hilbertraum der antisymmetrischen Zustände
Teilchen, die Zustände in $\mathcal{H}_N^{(+)}$ ($\mathcal{H}_N^{(-)}$) annehmen, nennen wir Bosonen (Fermionen).

Wir erhalten das Pauli-Verbot:
Zwei Fermionen können nicht gleichzeitig im selben Einteilchenzustand sein.

Für $|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle$

$|\varphi\rangle$ → Einteilchenzustand

folgt

$$|\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle = P_{12} |\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle = - |\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle = 0$$

1.2 Fockraum für Bosonen

Sei $\hat{\lambda}$ eine Einteilchenobservable: $\hat{\lambda}|\lambda_\alpha\rangle = \lambda_\alpha|\lambda_\alpha\rangle$,

Zunächst nehmen wir an, daß α abzählbar ist und damit

$\langle\lambda_\alpha|\lambda_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$

Die $|\lambda_\alpha\rangle$ sind eine Basis von $\mathcal{H}_1$:

$$\sum_\alpha |\lambda_\alpha\rangle\langle\lambda_\alpha| = \mathbb{1} \in \mathcal{H}_1$$

Nehmen wir nun N identische Bosonen an, die sich in

$$\bigotimes_N \mathcal{H} = \underbrace{\mathcal{H}\otimes\ldots\otimes\mathcal{H}}_{N \text{ mal}}$$ befinden.

Die Basiszustände von $\mathcal{H}_N^{(+)}$ sind:

$$|n_1, n_2, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \ldots}} S_+ |\lambda_{\alpha_1}\lambda_{\alpha_2}\cdots\lambda_{\alpha_N}\rangle$$

Dabei haben wir die Besetzungszahlen n_k eingeführt, die angeben wie viele der N Teilchen sich im Zustand $|\lambda_k\rangle$ befinden (oder wie häufig λ_k in $\{\lambda_{\alpha_1}, \lambda_{\alpha_2}, \ldots, \lambda_{\alpha_N}\}$ vorkommt).

Es muß gelten $\sum_k n_k = N$.

Der Fockraum ist die direkte Summe der $\mathcal{H}_N^{(+)}$ für alle N:

$$\mathcal{F}^{(+)} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^{(+)}$$

Dabei besteht $\mathcal{H}_0^{(+)}$ allein aus dem Vakuumzustand $|0\rangle$.

Die $|n_1, n_2, \ldots\rangle$ bilden eine Basis des Fockraums:

$$\langle n_1, n_2, \ldots | n_1', n_2', \ldots\rangle = \delta_{n_1 n_1'}\delta_{n_2 n_2'} \cdots \quad \text{(Orthonormalität)}$$

$$\sum_{n_1, n_2, \ldots = 0}^{\infty} |n_1, n_2, \ldots\rangle\langle n_1, n_2, \ldots| = \mathbb{1} \in \mathcal{F}^{(+)} \quad \text{(Vollständigkeit)}$$

Wir nennen diese Basis Besetzungszahlbasis und die

darauf fussende Darstellung Besetzungszahldarstellung.
Wir führen nun die Erzeugungs- und Vernichtungs=operatoren mittels ihrer Wirkung auf die Basiszustände ein.

Erzeugungsoperator:

$$a_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i+1}\, |n_1, n_2, \dots, n_i+1, \dots \rangle$$

Vernichtungsoperator:

$$a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i}\, |n_1, n_2, \dots, n_i-1, \dots \rangle$$

Wie die Notation suggeriert, ist a_i^+ ist der zu a_i adjungierte Operator:

$$\langle \dots n_i' \dots | (a_i^+)^+ | \dots n_i \dots \rangle = \sqrt{n_i'+1}\, \langle \dots n_i'+1 | \dots n_i \dots \rangle$$

$$= \sqrt{n_i'+1}\, \delta_{n_i'+1, n_i} = \sqrt{n_i}\, \delta_{n_i'+1, n_i}$$

(wir haben hier angenommen, daß die übrigen durch „…" angedeuteten Besetzungszahlen übereinstimmen)

$$\Rightarrow (a_i^+)^+ | \dots n_i \dots \rangle$$

$$= \sum_{n_i'=0}^{\infty} | \dots n_i' \dots \rangle \langle \dots n_i' \dots | (a_i^+)^+ | \dots n_i \dots \rangle$$

$$= \sqrt{n_i}\, | \dots n_i - 1 \dots \rangle$$

Es gelten die Vertauschungsrelationen

$$[a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0$$

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}$$

Für $i \neq j$ sind diese Relationen klar, ebenso für die erste Zeile im Falle $i=j$.
Es bleibt zu zeigen, daß $[a_i, a_i^+] = 1$ ist.

$$a_i a_i^+ - a_i^+ a_i |\ldots n_i \ldots\rangle = \sqrt{n_i+1}\, a_i |\ldots n_i+1 \ldots\rangle - \sqrt{n_i}\, a_i^+ |\ldots n_i-1 \ldots\rangle$$

$$= \left(\sqrt{n_i+1}\sqrt{n_i+1} - \sqrt{n_i}\sqrt{n_i}\right) |\ldots n_i \ldots\rangle = |\ldots n_i \ldots\rangle$$

Der Besetzungszahloperator N_i hat als Eigenwert die Zahl der Teilchen im Zustand $|\lambda_i\rangle$:

$$N_i = a_i^+ a_i$$

$$N_i |\ldots n_i \ldots\rangle = a_i^+ \sqrt{n_i}\, |\ldots n_i - 1 \ldots\rangle = n_i |\ldots n_i \ldots\rangle$$

Abschließend bemerken wir noch, daß wir die Basiszustände durch Wirkung der Erzeugungsoperatoren auf $|0\rangle$ erhalten:

$$|n_1, n_2, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \ldots}} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \ldots |0\rangle$$

1.3 Ein- und Mehrteilchenoperatoren

Ein Operator für ein N-Teilchensystem sei eine Summe von Einteilchenoperatoren:

$$T = t_1 + t_2 + \ldots + t_N = \sum_i t_i$$

z.B. kinetische Energie $t_i = \frac{1}{2} m \vec{p}_i^{\,2}$

Für eines dieser Teilchen bezeichnen wir den Operator als t (d.h. wir unterdrücken den Index i). In der Basis $|\lambda_\alpha\rangle$ hat er die Matrixelemente

$$t_{\varrho\sigma} = \langle\lambda_\varrho | t | \lambda_\sigma\rangle,$$

so daß gilt: $t = \sum_{\varrho\sigma} t_{\varrho\sigma} |\lambda_\varrho\rangle\langle\lambda_\sigma|$

Für das N-Teilchensystem ist damit

$$T = \sum_{\varrho\sigma} t_{\varrho\sigma} \sum_{i=1}^{N} |\lambda_\varrho\rangle_i \langle\lambda_\sigma|_i$$

Dabei ist

$$|\lambda_{\alpha_1} \lambda_{\alpha_2} \cdots \lambda_{\alpha_N}\rangle = |\lambda_{\alpha_1}\rangle_1 \otimes |\lambda_{\alpha_2}\rangle_2 \otimes \ldots \otimes |\lambda_{\alpha_N}\rangle_N$$

Wir möchten T durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren darstellen.

Sei zunächst $e \neq \sigma$.

$$\sum_i |\lambda_e\rangle_i \langle\lambda_\sigma|_i \, |\ldots, n_e, \ldots, n_\sigma, \ldots\rangle$$

$$= \sum_i |\lambda_e\rangle_i \langle\lambda_\sigma|_i \, S_+ \, |\lambda_{\alpha_1} \lambda_{\alpha_2} \ldots \lambda_{\alpha_N}\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! \, n_2! \cdot \ldots}}$$

$$= S_+ \underbrace{\sum_i |\lambda_e\rangle_i \langle\lambda_\sigma|_i}_{\text{symmetrisch} \rightarrow \text{kommutiert mit } S_+} |\lambda_{\alpha_1} \lambda_{\alpha_2} \ldots \lambda_{\alpha_N}\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! \, n_2! \cdot \ldots}}$$

Wenn der Zustand $|\lambda_\sigma\rangle$ n_σ-fach besetzt ist, dann ergeben sich n_σ Terme, in denen $|\lambda_\sigma\rangle$ durch $|\lambda_e\rangle$ ersetzt wird. Damit ist

$$\ldots = n_\sigma \sqrt{n_e + 1} \, \frac{1}{\sqrt{n_\sigma}} \, |\ldots, n_e + 1, \ldots, n_\sigma - 1, \ldots\rangle$$

$$= a_e^+ a_\sigma \, |\ldots, n_e, \ldots, n_\sigma, \ldots\rangle$$

Für $e = \sigma$ folgt analog: $a_\sigma^+ a_\sigma \, |\ldots, n_\sigma, \ldots\rangle$

Damit ist gezeigt, daß

$$\sum_{i=1}^N |\lambda_e\rangle_i \langle\lambda_\sigma|_i = a_e^+ a_\sigma ,$$

und damit ist

$$T = \sum_{e,\sigma} t_{e\sigma} \sum_{i=1}^N |\lambda_e\rangle_i \langle\lambda_\sigma|_i = \sum_{e,\sigma} t_{e\sigma} \, a_e^+ a_\sigma .$$

Betrachte nun den Zweiteilchenoperator

$$t = \sum_{\substack{e,\sigma,\\ \tau,\omega}} t_{e\tau,\sigma\omega} \, |\lambda_e \lambda_\tau\rangle\langle\lambda_\sigma \lambda_\omega|$$

mit

$$t_{\varrho\tau,\sigma\omega} = \langle \lambda_\varrho \lambda_\tau | t | \lambda_\sigma \lambda_\omega \rangle$$

Für das N-Teilchensystem ist dann

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\varrho,\sigma,\\ \tau,\omega}} \sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{N} t_{\varrho\tau,\sigma\omega} |\lambda_\varrho\rangle_i |\lambda_\tau\rangle_j \langle\lambda_\sigma|_i \langle\lambda_\omega|_j$$

Ein Beispiel für so einen Operator ist

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^2}$$ (Abstoßung zwischen zwei Elektronen).

Entsprechend zum Einteilchenfall ist

$$\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{N} t_{\varrho\tau,\sigma\omega} |\lambda_\varrho\rangle_i |\lambda_\tau\rangle_j \langle\lambda_\sigma|_i \langle\lambda_\omega|_j = a_\varrho^+ a_\tau^+ a_\sigma a_\omega$$

und somit

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\varrho,\sigma,\\ \tau,\omega}} t_{\varrho\tau,\sigma\omega} a_\varrho^+ a_\tau^+ a_\omega a_\sigma$$

1.4 Fermionen

Im Gegensatz zu Bosonen muß hier antisymmetrisiert werden

$$S_- |\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\sigma (-1)^{|\sigma|} P_\sigma |\varphi\rangle$$

Wir bemerken, daß sich die Basiszustände von $\mathcal{H}_N^{(-)}$ durch die sogenannte Slater-Determinante darstellen lassen:

$$S_- |\lambda_{\alpha_1} \lambda_{\alpha_2} \dots \lambda_{\alpha_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\lambda_{\alpha_1}\rangle_1 & |\lambda_{\alpha_1}\rangle_2 & \cdots & |\lambda_{\alpha_1}\rangle_N \\ \vdots & & & \\ |\lambda_{\alpha_N}\rangle_1 & |\lambda_{\alpha_N}\rangle_2 & \cdots & |\lambda_{\alpha_N}\rangle_N \end{vmatrix}$$

Wir bemerken, daß als eine Konsequenz des Pauli-Verbots dies Determinante verschwindet wenn $\lambda_{\alpha_i} = \lambda_{\alpha_j}$ für ein $i \neq j$.
Wiederum führen wir die Besetzungszahlbasis ein:

$$|n_1, n_2, \ldots\rangle = S_- |\lambda_{\alpha_1} \lambda_{\alpha_2} \ldots \lambda_{\alpha_N}\rangle$$

Mit obiger Bemerkung sehen wir, daß nur $n_i = 0, 1$ erlaubt sind.

Beachte auch, daß z.B.

$$S_- |\lambda_\alpha \lambda_\beta\rangle = -S_- |\lambda_\beta \lambda_\alpha\rangle$$

Eine eindeutige Definition erhalten wir, indem wir vereinbaren, daß z.B nach aufsteigenden Werten λ_{α_i} sortiert wird.
Der Fockraum ist hier:

$$\mathcal{F}^{(-)} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^{(-)}$$

Wiederum hat $\mathcal{H}_0^{(-)}$ „das Vakuum" $|0\rangle$ (nicht zu verwechseln mit dem Nullvektor) als einzigen Basisvektor.
Analog zum Bose-Fall gilt:

$$\langle n_1, n_2, \ldots | n_1', n_2', \ldots\rangle = \delta_{n_1 n_1'} \delta_{n_2 n_2'} \cdots \quad \text{(Orthonormalität)}$$

$$\sum_{n_1, n_2, \ldots = 0}^{1} |n_1, n_2, \ldots\rangle\langle n_1, n_2, \ldots| = \mathbb{1} \in \mathcal{F}^{(-)} \quad \text{(Vollständigkeit)}$$

Erzeuger und Vernichter sind nun jedoch anders definiert:

$$a_i^+ |n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = (-1)^{r_i} (1 - n_i) |n_1, n_2, \ldots, n_i + 1, \ldots\rangle$$

$$a_i |n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = (-1)^{r_i} n_i |n_1, n_2, \ldots, n_i - 1, \ldots\rangle$$

mit $r_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$ (stellt antisymmetrie sicher)

Der Faktor $(1-n_i)$ erzwingt das Pauli-Verbot.

Wir zeigen wiederum, daß in der Tat a_i^+ zu a adjungiert ist.

$$\langle \dots n_i' \dots | (a_i^+)^+ | \dots n_i \dots \rangle = (1-n_i')(-1)^{\tau_i} \langle \dots n_i'+1 \dots | \dots n_i \dots \rangle$$

$$= (1-n_i')(-1)^{\tau_i} \delta_{n_i'+1, n_i} = (2-n_i)(-1)^{\tau_i} \delta_{n_i'+1, n_i}$$

Damit ist

$$(a_i^+)^+ | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sum_{n_i'=0}^{1} | n_1, n_2, \dots, n_i', \dots \rangle \langle \dots, n_i', \dots | (a_i^+)^+ | \dots, n_i, \dots \rangle$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{für } n_i = 0 \\ (-1)^{\tau_i} | n_1, n_2, \dots, 0, \dots \rangle & \text{für } n_i = 1 \end{cases}$$

$$= a_i | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle$$

Es gelten Antivertauschungsregeln:

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^+, a_j^+\} = 0$$

$$\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij}$$

Wir zeigen zunächst $\{a_i^+, a_j^+\} = 0$. Für $i=j$ ist dies unmittelbar klar, wegen des Pauli-Verbots. Für $i \neq j$:

$$a_i^+ a_j^+ | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle = (1-n_j)(-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k} a_i^+ | \dots, n_i, \dots, n_j+1, \dots \rangle$$

$$= (1-n_j)(-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} n_k} (1-n_i)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k} | \dots, n_i+1, \dots, n_j+1, \dots \rangle$$

$$= \underbrace{(-1)(1-n_i)(-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k} a_j^+ | \dots, n_i+1}_{\text{Darum!}}, \dots, n_j, \dots \rangle$$

$$= (-1) a_j^+ a_i^+ | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle$$

Die Aussage $\{a_i, a_j\} = 0$ für $i \neq j$ folgt durch Adjunktion.

Nun zu $\{a_i, a_i^+\} = 1$:

$$(a_i a_i^+ + a_i^+ a_i) | \dots, n_i, \dots \rangle$$

$$= (1-n_i)(-1)^{\tau_i} a_i | \dots, n_i + 1, \dots \rangle + n_i (-1)^{\tau_i} a_i^+ | \dots, n_i - 1, \dots \rangle$$

$$= (1-n_i)(n_i+1) \left[(-1)^{\tau_i} \right]^2 | \dots, n_i, \dots \rangle$$

$$+ n_i (2-n_i) \left[(-1)^{\tau_i} \right]^2 | \dots, n_i, \dots \rangle$$

$$= -2n_i^2 + 2n_i + 1 | \dots, n_i, \dots \rangle = | \dots, n_i, \dots \rangle$$

Die Besetzungszahlbasiszustände lassen sich wiederum als $|n_1, n_2, \dots \rangle = (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots |0\rangle$ konstruieren.

Analog zum Bose-Fall kann man sich leicht überlegen, daß man Ein- und Mehrteilchenoperatoren durch deren Matrixelemente und Erzeuger-/Vernichter darstellen kann. Das Resultat ist in seiner Form identisch:

$$T = \sum_{\varrho, \sigma} t_{\varrho \sigma} a_\varrho^+ a_\sigma$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\varrho, \sigma, \\ \tau, \omega}} t_{\varrho \tau, \sigma \omega} a_\varrho^+ a_\tau^+ a_\omega a_\sigma$$

1.5 Feldoperatoren

Bisher ist λ_α eine abzählbare Basis. Wir wechseln nun zu den kontinuierlichen Orts- und Impulsdarstellungen und untersuchen Zusammenhänge zwischen diesen. Definiere

$|q\rangle = |\vec{x}; m_s\rangle \qquad \varphi_\alpha(q) = \langle q | \lambda_\alpha \rangle$

$|p\rangle = |\vec{p}; m_s\rangle \qquad \tilde{\varphi}_\alpha(p) = \langle p | \lambda_\alpha \rangle$

und

$$\int dq = \sum_{m_s=-s}^{s} \int d^3x \quad , \quad \int dp = \sum_{m_s=-s}^{s} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$$

Für einen Basiswechsel $|\lambda_\alpha\rangle \rightarrow |\chi_\beta\rangle$ ist:

$$|\chi_\beta\rangle = \sum_\alpha \langle\lambda_\alpha|\chi_\beta\rangle |\lambda_\alpha\rangle$$

Die gleiche Transformation muß für Erzeuger und Vernichter gelten, also

$b_\beta^+ = \sum_\alpha \langle\lambda_\alpha|\chi_\beta\rangle a_\alpha^+$ erzeugt ein Teilchen im Zustand $|\chi_\beta\rangle$

$b_\beta = \sum_\alpha \langle\lambda_\alpha|\chi_\beta\rangle a_\alpha$ vernichtet ein Teilchen im Zustand $|\chi_\beta\rangle$

Wir definieren neu:

$a^+(p) = \sum_\alpha \langle\lambda_\alpha|p\rangle a_\alpha^+ = \sum_\alpha \hat{\varphi}_\alpha^*(p)\, a_\alpha^+$ Erzeugt Teilchen im Impulseigenzustand $|p\rangle$

$$a(p) = \sum_\alpha \hat{\varphi}_\alpha(p)\, a_\alpha$$

$\psi^+(q) = \sum_\alpha \langle\lambda_\alpha|q\rangle a_\alpha^+ = \sum_\alpha \varphi_\alpha^*(q)\, a_\alpha^+$ Erzeugt Teilchen im Ortseigenzustand $|q\rangle$

$$\psi(q) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(q)\, a_\alpha$$

$\psi(q)$ heißt **Feldoperator**. In unserer Definition ist implizit, daß er für $s \neq 0$ mehrere, nämlich $2s+1$ Komponenten $\psi_{m_s}(\vec{x})$ hat. Es ist wichtig zu bemerken, daß im Gegensatz zur Wellenfunktion dies in der Tat ein Operator ist.

Die (Anti-)Vertauschungsrelationen müssen leicht modifiziert werden, weil wir die Spektren von $\vec{x}$ und $\vec{p}$ im Gegensatz zu λ als kontinuierlich annehmen. Um uns das Aufschreiben einiger Terme zu ersparen, bezeichnen wir

$[\,,\,]_- := [\,,\,]$ und $[\,,\,]_+ := \{\,,\,\}$

Es gilt:

$$[\psi(q), \psi(q')]_\pm = 0 \qquad [a(p), a(p')]_\pm = 0$$
$$[\psi^+(q), \psi^+(q')]_\pm = 0 \qquad [a^+(p), a^+(p')]_\pm = 0$$
$$[\psi(q), \psi^+(q')]_\pm = \delta(q-q') \qquad [a(p), a^+(p')]_\pm = \delta(p-p')$$

wobei natürlich $-$ ($+$) für Bosonen (Fermionen) gilt.

Wir erinnern daran, vereinbart zu haben

$\delta(q-q') = \delta^3(\vec{x}-\vec{x}')\,\delta_{m_s m_s'}$ und $\delta(p-p') = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\vec{p}-\vec{p}')\,\delta_{m_s m_s'}$

Wegen der kontinuierlichen Spektren gilt also

$$[\psi(q), \psi^+(q')]_\pm = \sum_{\alpha\beta} \varphi_\alpha(q)\,\varphi_\beta^*(q')\,[a_\alpha, a_\beta^+]_\pm = \sum_\alpha \varphi_\alpha(q)\,\varphi_\alpha^*(q') = \delta(q-q')$$

$$[a(p), a^+(p')]_\pm = \sum_{\alpha\beta} \tilde{\varphi}_\alpha(p)\,\tilde{\varphi}_\beta^*(p')\,[a_\alpha, a_\beta^+]_\pm = \sum_\alpha \tilde{\varphi}_\alpha(p)\,\tilde{\varphi}_\alpha^*(p') = \delta(p-p')$$

Mit $\langle p|q\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\,\delta_{m_s m_s'}$

können wir zwischen Orts- und Impulsbasis wechseln:

$$\psi^+(q) = \sum_\alpha \langle\lambda_\alpha|q\rangle\, a_\alpha^+ = \int dp \sum_\alpha \langle\lambda_\alpha|p\rangle\langle p|q\rangle\, a_\alpha^+$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \sum_\alpha \langle\lambda_\alpha|p\rangle\, a_\alpha^+$$

$$\longrightarrow \psi_{m_s}^+(\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\, a^+(\vec{p}, m_s)$$

Betrachte nun den Hamiltonoperator

$$H = \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + U(\vec{x}_i, \vec{s}_i)\right)}_{\text{Einteilchen}} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} V(\vec{x}_i, \vec{s}_i; \vec{x}_j, \vec{s}_j)}_{\text{Zweiteilchen}}$$

Wir benutzen nun unsere Ergebnisse für Ein- und Zweiteilchenoperatoren in der Besetzungszahlbasis.

Für die Basiszustände $|\lambda_\alpha\rangle$ finden wir:

$$H = \sum_{\varrho,\sigma} \langle \lambda_\varrho | \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + U(\vec{x},\vec{s}) | \lambda_\sigma \rangle a_\varrho^+ a_\sigma$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\varrho,\sigma,\\ \tau,\omega}} \langle \lambda_\varrho \lambda_\tau | V(\vec{x}_1, \vec{s}_1; \vec{x}_2, \vec{s}_2) | \lambda_\sigma \lambda_\omega \rangle a_\varrho^+ a_\tau^+ a_\omega a_\sigma$$

Dabei beziehen sich $\vec{x}_1, \vec{s}_1$ auf ϱ, σ und $\vec{x}_2, \vec{s}_2$ auf τ, ω.
In der Ortsbasis ist dies

$$H = \sum_{\varrho,\sigma} \int dq\, dq' \langle \lambda_\varrho | q \rangle a_\varrho^+ \langle q' | \lambda_\sigma \rangle a_\sigma \langle q | \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + U(\vec{x},\vec{s}) | q' \rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{\varrho,\sigma,\\ \tau,\omega}} \int dq\, dq'\, dq''\, dq''' \langle \lambda_\varrho | q \rangle a_\varrho^+ \langle \lambda_\tau | q' \rangle a_\tau^+ \langle q''' | \lambda_\omega \rangle a_\omega$$

$$* \langle q'' | \lambda_\sigma \rangle a_\sigma \langle q\, q' | V(\vec{x}_1, \vec{s}_1; \vec{x}_2, \vec{s}_2) | q''\, q''' \rangle$$

$$= \int dq\, \psi^+(q) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + U(q) \right) \psi(q)$$

$$+ \frac{1}{2} \int dq\, dq'\, \psi^+(q) \psi^+(q') V(q,q') \psi(q') \psi(q)$$

Wir haben hier angenommen, daß in der Ortsdarstellung die Potentiale U, V spinunabhängige Funktionen sind so daß z.B.

$$\langle q\, q' | V(\vec{x}_1; \vec{x}_2) | q''\, q''' \rangle = V(\vec{x}'', \vec{x}''') \delta^3(\vec{x} - \vec{x}'') \delta^3(\vec{x}' - \vec{x}''')$$

Für den kinetischen Operator haben wir benutzt, daß

$$\int d^3x\, d^3x' \langle \vec{x} | \vec{\nabla}_y^2 | \vec{x}' \rangle = \int d^3x\, d^3x'\, d^3y\, \delta^3(\vec{x} - \vec{y})\, \vec{\nabla}_y^2\, \delta^3(\vec{x}' - \vec{y})$$

$$= \int d^3x\, d^3x'\, \vec{\nabla}_x^2\, \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') = \int d^3x\, d^3x'\, \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')\, \vec{\nabla}_x^2 = \int d^3x\, \vec{\nabla}_x^2$$

1.6 Bewegungsgleichung für den Feldoperator

Wir wollen die Zeitabhängigkeit im Feldoperator isolieren, d.h. diesen Operator im Heisenbergbild auswerten.

$$\underbrace{\psi(\vec{x},t)}_{\text{Heisenberg}} = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\underbrace{\psi(\vec{x},0)}_{\text{Schrödinger}}\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$$

$\longrightarrow$

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) &= -H\,e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\psi(\vec{x},0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} + e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\,\psi(\vec{x},0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,H \\
&= \left[\psi(\vec{x},t),H\right] \\
&= -e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\left[H,\psi(\vec{x},0)\right]e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}
\end{aligned}$$

Wir benutzen nun die Identität

$$[AB,C] = A[B,C]_{\pm} \mp [A,C]_{\pm}B = ABC \pm ACB \mp (AC \pm CA)B = ABC - CAB$$

Damit ist im Folgenden offenbar nützlich, im Fermionischen (Bosonischen) Fall die oberen (unteren) Vorzeichen zu nutzen.

Dann sind (H wie im letzten Abschnitt)

$$\int dq' \left[\underbrace{\psi^{+}(q')}_{A}\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{q'}^{2} + U(q')\right)\psi(q')}_{B}, \underbrace{\psi(q)}_{C}\right]$$

$$= \int dq' \,\underbrace{(\mp 1)\left[\psi^{+}(q'),\psi(q)\right]_{\pm}}_{=-\delta(q-q')}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{q'}^{2} + U(q')\right)\psi(q')$$

$$= -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^{2} + U(q')\right)\psi(q)$$

und

$$\frac{1}{2}\int dq'\,dq''\left[\psi^+(q')\,\psi^+(q'')\;V(q',q'')\,\psi(q'')\,\psi(q'),\;\psi(q)\right]$$

$$=\frac{1}{2}\int dq'\,dq''\,V(q',q'')\left[\psi^+(q')\,\psi^+(q''),\,\psi(q)\right]\psi(q'')\,\psi(q')$$

$$=\frac{1}{2}\int dq'\,dq''\,V(q',q'')\Big\{\psi^+(q')\underbrace{\left[\psi^+(q''),\,\psi(q)\right]_\pm}_{\pm\delta(q''-q)}\mp\underbrace{\left[\psi^+(q'),\psi(q)\right]}_{-\delta(q'-q)}\psi^+(q'')\Big\}\psi(q'')\,\psi(q')$$

$$=\pm\frac{1}{2}\int dq'\,V(q',q)\,\psi^+(q')\,\psi(q)\,\psi(q')-\frac{1}{2}\int dq''\,V(q,q'')\,\psi^+(q'')\,\psi(q'')\,\psi(q)$$

$$=-\int dq'\;V(q',q)\,\psi^+(q')\,\psi(q')\,\psi(q)$$

Es folgt die Schrödinger-Feldgleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+U(q)\right)\psi(q,t)+\int dq'\;V(q',q)\,\psi^+(q')\,\psi(q')\,\psi(q)$$