

Kapitel 3

Vielteilchentheorie in zweiter Quantisierung

3.1 Identische Teilchen und Symmetrisierungspostulat

Zwei Teilchen heißen **identisch**, wenn sie grundsätzlich **ununterscheidbar** sind. Soll heißen, dass jedes der beiden Teilchen in jedem gegebenen Präparations-Mess Aufbau zu den jeweils gleichen statistischen Verteilungen Anlass gibt wie das andere Teilchen. Für das aus N Teilchen zusammengesetzte System erfordert die Quantenmechanik, daran sei erinnert, im Falle identische Teilchen ein zusätzliches Postulat – genannt das **Symmetrisierungspostulat** – das der klassischen Mechanik fremd ist. Demnach gibt es zwei Typen identischer Teilchen – **Bosonen** und **Fermionen**. Die Wellenfunktion eines zusammengesetzten Systems identischer Bosonen

nen ist vollständig symmetrisch, die Wellenfunktion eines zusammengesetzten Systems identischer Fermionen ist vollständig antisymmetrisch unter Permutation der (willkürlichen vergebenden) Teilchennamen. Ausgedrückt mittels Transposition $i \leftrightarrow j$

$$\psi_\eta(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) = \eta \psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (3.1)$$

wobei $\eta = +1$ für Bosonen, und $\eta = -1$ für Fermionen. Das Argument ξ bezeichnet einen vollständigen Satz von ein-Teilchen Quantenzahlen, beispielsweise $\xi = (\vec{x}, m_s)$, wobei \vec{x} Ortskoordinate und m_s magnetische Quantenzahl, $m_s = -s, s+1, \dots, +s$. Das Spin-Statistik Theorem besagt, dass die Spinquantenzahl s – auch genannt “der Spin” – für Fermionen notwendig halbzahlig, für Bosonen hingegen notwendig ganzzahlig.

Vollständig symmetrische bzw. vollständig antisymmetrische Zustände bilden Unterräume die “viel kleiner” sind als der allgemeine N -Teilchen Hilbertraum. Es ist daher ein Gebot der Ökonomie, die theoretische Beschreibung von Systemen identischer Teilchen so vorzunehmen, dass der Permutationssymmetrie automatisch entsprochen wird. Eine solche Beschreibung fungiert in der Literatur unter dem Begriff **zweite Quantisierung**.

Der Terminus “Zweite Quantisierung” ist allerdings grob irreführend: die Quantenmechanik wird nicht noch einmal quantisiert. Vielmehr handelt es sich bei der zweiten Quantisierung lediglich um eine Art Buchhaltung die sich für die Beschreibung von Systemen identischer Teilchen als besonders nützlich erweist.¹

¹Nomologisch geht der Begriff der “zweiten Quantisierung” auf die kanonische Quantisierung einer klassischen Feldtheorie zurück, deren Euler-Lagrangegleichung die Schrödingergleichung der Wellenmechanik ist.

3.2 Symmetrische und Antisymmetrische Zustände

Wir betrachten ein System N gleichartiger (zunächst nicht unbedingt identischer) Teilchen. Gleichartigkeit bedeutet, dass die Hilberträume der einzelnen Teilchen isomorph, der generische Einteilchenhilbertraum hier notiert $\mathcal{H}^{(1)}$. Der Hilbertraum eines Systems N gleichartiger Teilchen ist dann das N -fache Tensorprodukt

$$\mathcal{H}^{(N)} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}^{(1)}. \quad (3.2)$$

wobei der i -te Faktor der Einteilchenhilbertraum von Teilchen i , $i = 1, 2, \dots, N$.

Hat man nun einer beliebige Kollektion von Einteilchenzuständen $\alpha_1, \dots, \alpha_N$, nicht notwendig normiert und paarweise orthogonal, dann ist mit

$$|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle := |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle \quad (3.3)$$

ein Vektor im N -Teilchen Hilbertraum gegeben, zu lesen: Teilchen 1 im Zustand α_1 , Teilchen 2 im Zustand α_2 usw. Achtung: Teilchennummer und Index an α bitte nicht identifiziere. So lese man beispielsweise den Zustand $|\alpha_2 \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle$ "Teilchen 1 im Zustand $\alpha_2 \dots$ ". Kurz: die Teilchennummer ist durch die Position in $|\dots\rangle$ gegeben; die Indices an α nummerieren lediglich die Elemente einer Kollektion von N Einteilchenzuständen. Im übrigen notieren wir hier die Zustände mit runden Klammern – die gewohnten Spitzklammern heben wir uns für später auf.²

Eine Permutation – also der "Teilchaustausch" – wird durch ihre Wirkung auf Produktvektoren dargestellt,

$$\hat{P}|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = |\alpha_{P(1)} \alpha_{P(2)} \cdots \alpha_{P(N)}\rangle. \quad (3.4)$$

²Die hier verwendete Klammer-Typographie ist entlehnt: Negele, Orland "Quantum Many-Particle Systems", Frontiers in Physics Series, Addison Wesley (1988), [ISBN 0-201-12593-5]

Permutationen bilden eine Gruppe. Jede Permutation \hat{P} kann durch endliche Anzahl von Transpositionen dargestellt werden. Die Darstellung ist nicht eindeutig, aber die Anzahl der Transpositionen hat wohlbestimmte Parität (ist entweder gerade oder ungerade), im Folgenden bezeichnet $(-1)^P$. Für $\hat{P} = \hat{P}_1 \hat{P}_2$ ist $(-1)^P = (-1)^{P_1} (-1)^{P_2}$.

Die beiden Operatoren

$$\hat{S}_\eta := \frac{1}{N!} \sum_P \eta^P \hat{P}, \quad \eta = \pm 1 \quad (3.5)$$

sind jeweils Projektor auf den Unterraum der vollständig symmetrischen Zustände (für $\eta = 1$) bzw. vollständig antisymmetrischen Zustände (für $\eta = -1$).

Nimmt man sich nun irgendeinen Produktvektor des $\mathcal{H}^{(N)}$, ist der Vektor

$$|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle_\eta := \sqrt{N!} \hat{S}_\eta |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle \quad (3.6)$$

für $\eta = +1$ vollständig symmetrisch, für $\eta = -1$ antisymmetrisch. Gemäß Symmetrisierungspostulat ist dann der Hilbertraum $\mathcal{H}_\eta^{(N)}$ eines Systems N identischer Teilchen die lineare Hülle aller Geschweiften zu festem η ,

$$\mathcal{H}_\eta^{(N)} = \hat{S}_\eta \mathcal{H}^{(N)}, \quad (3.7)$$

für N identische Bosonen $\eta = 1$, für N identische Fermionen $\eta = -1$.

Wirkt eine Permutation \hat{P} auf einen geschweiften Vektors, so fängt man sich einen Faktor η^P ein. Für Bosonen, wo $\eta = 1$, kommt es also auf die Reihenfolge der Einträge in der geschweiften Klammer nicht an. Für Fermionen, wo $\eta = -1$, kommt es zu einem Vorzeichenwechsel falls die Permutation von ungerader Parität, unter der Transposition $1 \leftrightarrow 2$ etwa $|\alpha_2 \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = -|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$ (eine Transposition hat ungerade Parität). Dem **Pauliprinzip** ist hier automatisch genüge getan: Sie nämlich beispielsweise $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, dann ist nach dem gerade Gesagten

$|\alpha\alpha\alpha_3 \cdots \alpha_N\rangle = -|\alpha\alpha\alpha_3 \cdots \alpha_N\rangle$ und also $|\alpha\alpha\alpha_3 \cdots \alpha_N\rangle = 0$ (mit 0 der Nullvektor im Hilbertraum). Kurz: zwei identische Fermionen können unmöglich ein- und denselben Zustand einnehmen.

Das Skalarprodukt geschweifter Vektoren ist schnell bestimmt

$$\begin{aligned} \eta\{\alpha_1\alpha_2 \cdots \alpha_N|\beta_1\beta_2 \cdots \beta_N\}_\eta &= N!(\alpha_1 \cdots \alpha_N | \underbrace{\hat{S}_\eta^\dagger \hat{S}_\eta}_{=\hat{S}_\eta^2=\hat{S}_\eta} |\beta_1 \cdots \beta_N) \\ &= \sum_P \eta^P (\alpha_1|\beta_{P(1)}) (\alpha_2|\beta_{P(2)}) \cdots (\alpha_N|\beta_{P(N)}) \\ &:= \begin{vmatrix} (\alpha_1|\beta_1), & \cdots & , & (\alpha_1|\beta_N) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (\alpha_N|\beta_1), & \cdots & , & (\alpha_N|\beta_N) \end{vmatrix}_\eta \end{aligned} \quad (3.8)$$

wobei letztere Gleichung für Fermionen ($\eta = -1$) die sog. **Slaterdeterminante**, und für Bosonen ($\eta = +1$) die sog. **Permanente**. Die Permanente erhält man aus der Determinante, indem man aller negativen Vorzeichen in der Determinantenformel durch “+” ersetzt.

3.3 Leiteroperatoren

Sei nun $|\beta\rangle$ irgendein Einteilchen-Zustand. Dann sind **Erzeugungsoperatoren** erklärt

$$\hat{a}_\beta^\dagger |\beta_1 \cdots \beta_N\rangle_\eta := |\beta\beta_1 \cdots \beta_N\rangle_\eta \quad (3.9)$$

Der Erzeuger \hat{a}_β^\dagger fügt dem N -Teilchensystem ein weiteres Teilchen im Zustand β hinzu. Offensichtlich verknüpft er Hilberträume zu verschiedener Teilchenzahl. Seine Bühne ist der **Fockraum**, d.i. die direkte Summe entsprechend symmetrisierter

Vielteilchenhilberträumen

$$\mathcal{F}_\eta := \mathcal{H}_\eta^{(0)} \oplus \mathcal{H}_\eta^{(1)} \oplus \mathcal{H}_\eta^{(2)} \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_\eta^{(N)} \oplus \mathcal{H}_\eta^{(N+1)} \oplus \cdots \quad (3.10)$$

Neu ist hier der “0-Teilchen Hilbertraum $\mathcal{H}_\eta^{(0)}$ ”. Er ist eindimensional, der eine Basisvektor notiert $|0\rangle$, genannt der **Vakuuzustand**. Ein Erzeuger \hat{a}_β^\dagger , wirkend auf das Vakuum, erzeugt den Einteilchenzustand $|\beta\rangle = \hat{a}_\beta^\dagger|0\rangle$.

Der dem Einteilchenzustand $|\beta\rangle$ zugeordnete **Vernichtungsoperator** ist durch Adjunktion erklärt, $\hat{a}_\beta = (\hat{a}_\beta^\dagger)^\dagger$, ergänzt um die Feststellung $\hat{a}_\beta|0\rangle = 0$ wo o der Nullvektor im Fockraum (nicht zu verwechseln mit dem Vakuum!). Mit ein wenig Fummelerei findet man die Wirkung eines Vernichters auf einen Geschweiften

$$\hat{a}_\beta|\beta_1 \cdots \beta_N\rangle_\eta = \sum_{i=1}^N \eta^{i-1}(\beta|\beta_i)|\beta_1 \cdots \beta_{i-1} \mathbb{X}_i \beta_{i+1} \cdots \beta_N\rangle_\eta \quad (3.11)$$

wobei \mathbb{X}_i zu lesen ist “ β_i weglassen”. Zum Beweis von (3.11) rufe man sich in Erinnerung, dass ein Operator über alle seine Matrixelemente vollständig charakterisiert

werden kann. Entsprechend

$$\begin{aligned}
\{\alpha_1 \cdots \alpha_{N-1} | \hat{a}_\beta | \beta_1 \cdots \beta_N\} &= \{\beta_1 \cdots \beta_n | \hat{a}_\beta^\dagger | \alpha_1 \cdots \alpha_{N-1}\}^* \\
&= \{\beta_1 \cdots \beta_n | \beta \alpha_1 \cdots \alpha_{N-1}\}^* \\
&= \left| \begin{array}{cccc} (\beta_1 | \beta) & (\beta_1 | \alpha_1) & \cdots & (\beta_1 | \alpha_{N-1}) \\ (\beta_2 | \beta) & (\beta_2 | \alpha_1) & \cdots & (\beta_2 | \alpha_{N-1}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\beta_N | \beta) & (\beta_N | \alpha_1) & \cdots & (\beta_N | \alpha_{N-1}) \end{array} \right|_\eta^* \\
&= \left\{ \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta_i | \beta) \{\beta_1 \cdots \cancel{\beta}_i \cdots \beta_N | \alpha_1 \cdots \alpha_n\} \right\}^* \\
&= \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta | \beta_i) \{\alpha_1 \cdots \alpha_{N-1} | \beta_1 \cdots \cancel{\beta}_i \cdots \beta_N\} \quad (3.12)
\end{aligned}$$

und da hier die geschweiften α -Kets ganz beliebig, folgt die Behauptung (3.11).

Die Algebra der Leiteroperatoren ist nun schnell bestimmt,

$$\hat{a}_{\beta_1}^\dagger \hat{a}_{\beta_2}^\dagger - \eta \hat{a}_{\beta_2}^\dagger \hat{a}_{\beta_1}^\dagger = 0, \quad (3.13)$$

$$\hat{a}_{\beta_1} \hat{a}_{\beta_2} - \eta \hat{a}_{\beta_2} \hat{a}_{\beta_1} = 0, \quad (3.14)$$

$$\hat{a}_{\beta_1} \hat{a}_{\beta_2}^\dagger - \eta \hat{a}_{\beta_2}^\dagger \hat{a}_{\beta_1} = (\beta_1 | \beta_2). \quad (3.15)$$

Relation (3.13) resultiert aus der Symmetrie der Geschweiften unter Transposition, Relation (3.14) ist die adjungierte Version von (3.13), und zum Beweis von (3.15) betrachte man zunächst

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\beta_1} \hat{a}_{\beta_2}^\dagger | \alpha_1 \cdots \alpha_N \rangle_\eta &= \hat{a}_{\beta_1} | \beta_2 \alpha_1 \cdots \alpha_N \rangle_\eta \\
&= (\beta_1 | \beta_2) + \sum_{i=1}^N \eta^i (\beta_1 | \alpha_i) | \beta_2 \alpha_1 \cdots \cancel{\alpha}_i \cdots \alpha_N \rangle_\eta, \quad (3.16)
\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\beta_2}^\dagger \hat{a}_{\beta_1} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle_\eta &= \hat{a}_{\beta_2}^\dagger \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta_1 | \alpha_i) |\alpha_1 \cdots \mathbb{X}_i \cdots \alpha_N\rangle_\eta \\ &= \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta_1 | \alpha_i) |\beta_2 \alpha_1 \cdots \mathbb{X}_i \cdots \alpha_N\rangle_\eta, \end{aligned} \quad (3.17)$$

multipliziere dies mit η , bilde die Differenz zu (3.16), und bestatige abschließend Relation (3.15).

Im Einteilchenhilbertraum $\mathcal{H}^{(1)}$ wahlen wir nun eine Orthonormalbasis φ_ν ,

$$\sum_{\nu \in \mathbb{I}} |\varphi_\nu\rangle \langle \varphi_\nu| = \hat{1}^{(1)}, \quad \langle \varphi_{\nu'} | \varphi_\nu \rangle = \delta_{\nu'\nu}. \quad (3.18)$$

wobei ν fur einen vollstandigen Satz von Quantenzahlen steht. Im Falle von Wasserstoffeigenfunktionen beispielsweise $\mathbb{I} = \{n\ell m \sigma \mid n = 1, 2, \dots; \ell = 0, 1, \dots, n-1; m = -\ell, \ell+1, \dots, \ell; \sigma = \pm 1\}$.³

Orthonormalitat der Einteilchenzustande bedeutet, dass Faktoren vom Typ $(\nu_i | \nu_j)$ entweder gleich eins (namlich genau dann, wenn $\nu_i = \nu_j$), oder gleich Null (in allen anderen Fallen). In Konsequenz

- nimmt die Algebra der Leiteroperatoren, Gl. (3.13)–(3.15), die Form an

$$\begin{aligned} [\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}^\dagger] &= \delta_{\nu\nu'}, & [\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}] &= [\hat{a}_\nu^\dagger, \hat{a}_{\nu'}^\dagger] = 0 & \text{BOSONEN} & (3.19) \\ \{\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}^\dagger\} &= \delta_{\nu\nu'}, & \{\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}\} &= \{\hat{a}_\nu^\dagger, \hat{a}_{\nu'}^\dagger\} = 0 & \text{FERMIONEN} & (3.20) \end{aligned}$$

wobei wir hier auch die in der Literatur zuweilen verwendeten Notation fur den Fermionischen **Antikommutator** eingefuhrt haben, $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$,

³In der ‘‘Ortsdarstellung’’ $|\vec{x}\sigma\rangle$ ist \mathbb{I} uberabzahlbar; Vollstandigkeit und Orthogonalitat wird notiert $\sum_\sigma \int d^3x |\vec{x}\sigma\rangle \langle \vec{x}\sigma| = \hat{1}^{(1)}$, $\langle \vec{x}'\sigma' | \vec{x}\sigma \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \delta_{\sigma'\sigma}$.

- und das in (3.8) berechnete Skalarprodukt geschweifter ist genau dann verschieden von Null, wenn es eine Permutation P gibt, die die Bra-Liste $\nu'_1 \cdots \nu'_N$, wo $\nu'_i \in \mathbb{I}$, auf die Ket-Liste $\nu_1 \cdots \nu_N$ abbildet. In diesem Falle

$$\eta\{\nu'_1\nu'_2\cdots\nu'_N|\nu_1\nu_2\cdots\nu_n\}_\eta = \eta^P \prod_{\nu} n_{\nu}! \quad (3.21)$$

mit Konvention $0! = 1$, wobei $n_{\nu} = 0, 1, \dots$ angibt, wie oft der Index ν in der Liste $\nu_1 \cdots \nu_N$ erscheint, bzw. wie häufig der Einteilchenzustand φ_{ν} im geschweiften Zustand $|\nu_1 \cdots \nu_N\rangle$ besetzt ist.

Da nach (3.21) ein Geschweifter vollständig durch Besetzungszahlen n_{ν} parametrisierbar ist, verwendet man gerne die sog. **Besetzungszahldarstellung** um Basiszustände im Fockraum zu beschreiben. Dazu gibt man sich eine willkürliche Ordnung der Indexmenge \mathbb{I} vor, meist diktiert von der Vorschrift wachsender Einteilchenenergien, nummeriert die Einteilchenzustände entsprechend durch, und notiert Basiszustände dann in der Form $|n_1 n_2 \cdots n_{\nu} \cdots\rangle$, wobei n_1 die Zahl der Teilchen im Einteilchenzustand φ_1 , n_2 die Zahl der Teilchen im Einteilchenzustand φ_2 usw. In dieser Darstellung ist die Wirkung der Leiteroperatoren besonders transparent,

$$\hat{a}_{\nu}|n_1 n_2 \cdots n_{\nu} \cdots\rangle = \sqrt{n_{\nu}}|n_1 n_2 \cdots n_{\nu} - 1 \cdots\rangle, \quad (3.22)$$

$$\hat{a}_{\nu}^{\dagger}|n_1 n_2 \cdots n_{\nu} \cdots\rangle = \sqrt{n_{\nu} + 1}|n_1 n_2 \cdots n_{\nu} + 1 \cdots\rangle. \quad (3.23)$$

Als Korellar erhalten wir hier

$$\hat{a}_{\nu}^{\dagger}\hat{a}_{\nu}|n_1 n_2 \cdots n_{\nu} \cdots\rangle = n_{\nu}|n_1 n_2 \cdots n_{\nu} \cdots\rangle. \quad (3.24)$$

und taufen

$$\hat{n}_{\nu} := \hat{a}_{\nu}^{\dagger}\hat{a}_{\nu} \quad (3.25)$$

den **Besetzungszahloperator**. Diese Notation ist insbesondere in der Quantenoptik gebräuchlich, wo Moden des Strahlungsfeldes die Rolle der Einteilchenzustände übernehmen, und n_ν also die Zahl der Photonen in der Mode φ_ν . Moden sind übrigens (normierte) Lösungen der Helmholtzgleichung – aber das haben Sie ja schon der Elektrodynamik-Vorlesung gelernt

3.4 Feldoperatoren

Ein Wechsel der Einteilchenbasis $\varphi_\nu \rightarrow \chi_\mu$ wird beschrieben

$$|\chi_\mu\rangle = \sum_\nu u_{\mu\nu}^* |\varphi_\nu\rangle \quad (3.26)$$

worin $u_{\mu\nu} = (\chi_\mu | \varphi_\nu)$ bzgl. der Indizes eine unitäre $\dim\mathcal{H}^{(1)} \times \dim\mathcal{H}^{(1)}$ Matrix. Unter dem Basiswechsel transformieren Leiteroperatoren gemäß

$$\hat{\Psi}_\mu^\dagger = \sum_\nu u_{\mu\nu}^* \hat{a}_\nu^\dagger, \quad \hat{\Psi}_\mu = \sum_\nu u_{\mu\nu} \hat{a}_\nu, \quad (3.27)$$

wobei zur besseren Kenntlichmachung die Leiteroperatoren der χ -Basis mit dem Buchstaben $\hat{\Psi}$ benannt werden. Vergleich von (3.26) und (3.27) fördert zu Tage, dass Erzeuger wie Basiskets transformieren, Vernichter wie Basisbras.

Ein wichtiger Spezialfall ist die Transformation auf die ‘‘Ortsbasis’’, $|x\rangle = \sum_\nu |\varphi_\nu\rangle (\varphi_\nu | x)$. In Erinnerung an $(x | \varphi_\nu) = \varphi_\nu(x)$ (der Einteilchenzustand φ_ν in der Ortsdarstellung), und unter expliziter Berücksichtigung der Spinfreiheitsgrade (für Fermionen bezeichnet man die magnetische Quantenzahl gerne $\sigma = -2s, -2s+1, \dots, 2s$ – also $\sigma = \pm 1$ für Elektronen – um Bruchzahlen zu vermeiden),

$$\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x) = \sum_\nu \varphi_{\nu\sigma}^*(x) \hat{a}_{\nu\sigma}^\dagger, \quad \hat{\Psi}_\sigma(x) = \sum_\nu \varphi_{\nu\sigma}(x) \hat{a}_{\nu\sigma} \quad (3.28)$$

Die hier eingeführten **Feldoperatoren** genügen den Vertauschungsrelationen

$$\left[\hat{\Psi}_\sigma(x), \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(x') \right]_\eta = \sum_{\nu} \sum_{\nu'} \varphi_{\nu\sigma}(x) \varphi_{\nu'\sigma'}(x')^* \underbrace{\left[\hat{a}_{\nu\sigma}, \hat{a}_{\nu'\sigma'}^\dagger \right]_\eta}_{\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\nu\nu'}} \quad (3.29)$$

$$= \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{\nu} \varphi_{\nu\sigma}(x) \varphi_{\nu\sigma}(x') = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(x - x'), \quad (3.30)$$

alle anderen Kommutatoren bzw Antikommutatoren gleich Null.

Die Feldoperatoren spielen in der Festkörperphysik und der Elementarteilchenphysik eine wichtige Rolle. Ihre physikalische Bedeutung erschließt sich aus der Wirkung auf das Vakuum,

$$\langle 0 | \hat{\Psi}_{\sigma'}(x') \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x) | 0 \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(x - x') \quad (3.31)$$

gelesen “der Operator $\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x)$ erzeugt eine Teilchen mit Spinpolarisation σ am Ort x ”, kryptisch notiert $\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x)|0\rangle = |1_{x,\sigma}\{0\}'\rangle$, wobei $\{0\}'$ die Bedeutung “alle Einteilchenzustände außer dem (oder den) Genannten unbesetzt”.

3.5 Observable in Fockdarstellung

Observable eines Systems identischer Teilchen sind notwendig invariant unter Permutationen – schließlich ist in einem solchen System kein Teilchen vor den anderen ausgezeichnet. Ein gutes Beispiel ist der Hamiltonoperator eines N -Teilchensystems. In der Notation der QM-I

$$\hat{H}^{(N)} = \underbrace{\sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m}}_{:= \hat{H}_0^{(N)}} + \underbrace{\sum_{i=1}^N V(\vec{q}_i) + \sum_{(i,j)} V(\hat{q}_i, \hat{q}_j)}_{:= \hat{V}^{(N)}} \quad (3.32)$$

wobei \hat{q}_i, \hat{p}_i Orts- und Impulsoperatoren von Teilchen i , und die Summe $\sum_{(i,j)}$ eine Summe über alle Paare. Permutationsinvarianz von $\hat{H}^{(N)}$ bedeutet, dass jedes Teilchen – wäre es isoliert – der gleich Dynamik unterliegt wie jedes andere Teilchen, und jedes Paar genauso wechselwirkt wie jedes andere Paar.

Der Operator $\hat{H}_0^{(N)}$ ist vom Typ **single-body**, soll heißen er ist eine Summe von Operatoren die jeweils nur in dem Hilbertraum eines Teilchen wirken. Der Operator $\hat{V}^{(N)}$ ist vom Typ **two-body** – jeder Summand in der Paarsumme wirkt nur im Produktraum zweier Teilchen.

Um einen gegebenen single-body $\hat{O}^{(N)} = \sum_{i=1}^N \hat{O}^{(1)}(i)$ im Fockraum darzustellen wählen wir als Einteilchenbasis φ_ν die Eigenvektoren von $\hat{O}^{(1)}$,

$$\hat{O}^{(1)}|\varphi_\nu\rangle = \lambda_\nu|\varphi_\nu\rangle. \quad (3.33)$$

Dann sind alle Produktvektoren $|\nu_1 \dots \nu_N\rangle$ Eigenvektoren von $\hat{O}^{(N)}$,

$$\hat{O}^{(N)}|\nu_1 \dots \nu_N\rangle = \left(\sum_\nu n_\nu \lambda_\nu \right) |\nu_1 \dots \nu_N\rangle \quad (3.34)$$

wo n_ν die Zahl der Vorkommisse von φ_ν in $|\nu_1 \dots \nu_N\rangle$. Da $\hat{O}^{(N)}$ mit \hat{S}_η kommutiert lässt sich aus () die Wirkung von $\hat{O}^{(N)}$ auf die Basiszustände $|n_1 \dots n_\nu \dots\rangle$ im Fockraum ablesen, $\hat{O}^{(N)}|n_1 \dots n_\nu \dots\rangle = (\sum_\nu n_\nu \lambda_\nu) |n_1 \dots n_\nu \dots\rangle$, und da ein Operator vollständig durch seine Wirkung auf eine Basis charakterisiert ist, lautet die Darstellung von $\hat{O}^{(N)}$ im Fockraum $\hat{O} = \sum_\nu \lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu$. Um uns hier von der speziellen

Wahl der Eigenbasis zu befreien, vollziehen wir einen Basiswechsel $\varphi_\nu \rightarrow \chi_\mu$,

$$\hat{O} = \sum_\nu \lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu \quad (3.35)$$

$$= \sum_{\nu'\nu} (\varphi_{\nu'} | \hat{O}^{(1)} | \varphi_\nu) \hat{a}_{\nu'}^\dagger \hat{a}_\nu \quad (3.36)$$

$$= \sum_{\mu'\mu} \sum_{\nu'\nu} (\varphi_{\nu'} | \chi_{\mu'})(\chi_{\mu'} | \hat{O}^{(1)} | \chi_\mu) (\chi_\mu | \varphi_\nu) \hat{a}_{\nu'}^\dagger \hat{a}_\nu \quad (3.37)$$

$$= \sum_{\mu'\mu} (\chi_{\mu'} | \hat{O}^{(1)} | \chi_\mu) \hat{\Psi}_{\mu'}^\dagger \hat{\Psi}_\mu \quad (3.38)$$

Die **Teilchendichte**, beispielsweise, ist single-body. In der Notation der QM-I $\hat{\rho}^{(N)}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{x} - \hat{q}_i)$; dargestellt mittels Feldoperatoren (man wähle für χ die Ortsbasis – vgl. (3.28)),

$$\hat{\rho}(\vec{x}) = \sum_\sigma \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}). \quad (3.39)$$

Mittels Teilchendichte bestimmt sich die Zahl der Teilchen im Raumgebiet G gemäß $\hat{N}_G = \int_G \hat{\rho}(\vec{x}) d^3x$. Im Gegensatz zum Feldoperator $\hat{\Psi}$ ist \hat{N}_G eine Messgröße. Insbesondere ist die **Gesamtteilchenzahl**

$$\hat{N} = \int \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}) d^3x \quad (3.40)$$

nun eine Observable, und nicht länger – wie noch in (3.32) – ein Parameter.

Auch ein wichtiger single-body ist der **Gesamtimpuls**, in Ortsdarstellung der QM-I $\hat{\vec{P}}^{(N)} = \frac{\hbar}{i} \sum_{i=1}^N \vec{\nabla}_i$. Dargestellt mittels Feldoperatoren

$$\hat{\vec{P}} = \frac{\hbar}{i} \sum_i \int \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}) \vec{\nabla}_x \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}) d^3x. \quad (3.41)$$

Analog konstruiert man die Darstellung eines two-body $\hat{O}^{(N)} = \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{O}^{(2)}(i,j)$ im Fockraum

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mu\mu'} \hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mu'}^{\dagger} (\chi_{\lambda\lambda'} \chi_{\mu\mu'} | \hat{O}^{(2)} | \chi_{\lambda\lambda'} \chi_{\mu\mu'}) \hat{\Psi}_{\mu} \hat{\Psi}_{\lambda} \quad (3.42)$$

wobei hier die Reihenfolge der Operatoren zu beachten ist. Der Beweis ist ist etwas fummelig. Motiviert wird (3.42) durch die Feststellung, dass $\sum_{\langle i,j \rangle} \hat{O}^{(2)}(i,j) = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \hat{O}^{(2)}(i,j)$, und $\sum_{j \neq i} \hat{O}^{(2)}(i,j)$ für festes i single body, also wie in (3.38) darzustellen. Das Zwischenresultat ist dann wiederum single-body, erneut wie in (3.38) darzustellen. Fertig ist die Laube (und insbesondere auch die ‘Merkregel’ für die Reihenfolge der Indices in (3.42).

Für den Hamilton (3.32) ergibt sich dann

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{x}) d^3x + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \iint \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{x}') \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{x}) d^3x d^3x' \quad (3.43)$$

wobei hier eine spin-unabhängige Wechselwirkung vorausgesetzt wurde.

3.6 Dynamik

Dynamik in Systemen identischer Teilchen beschreibt man zweckmäßigerweise im Heisenbergbild. Da letztlich alle Observable lediglich gewisse Funktionale des Feldoperators $\hat{\Psi}$ und seines Adjungierten, lautet das grundlegende dynamische Gesetz

$$\dot{\hat{\Psi}}_{\sigma}(\vec{x}, t) = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{x}, t) \right], \quad (3.44)$$

worin \hat{H} der Hamiltonoperator des Systems.

Für ein System ohne Paarwechselwirkung, beschrieben durch den Hamiltonoperator \hat{H}_0 (die erste Zeile in Gl. (3.43)) ergibt sich hier,

$$i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_\sigma(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}, t) \right) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}, t) \quad (3.45)$$

Kurz: die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion der “Ein-Teilchen Quantenmechanik” ist die Heisenberggleichung für den Feldoperator einer Quantenfeldtheorie N nicht wechselwirkender identischer Teilchen!

Für das System mit Paarwechselwirkung, also Hamilton wie in (3.43) ergibt sich

$$i\hbar\dot{\hat{\Psi}}_\sigma(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}, t) \right) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}, t) + \left(\sum_{\sigma'} \int V(\vec{x}, \vec{x}') \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{x}') \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}') d^3x' \right) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}). \quad (3.46)$$

Der hier gegenüber (3.45) neu hinzugekommene Term beschreibt die am Ort wirkende potentielle Energie der Paarwechselwirkung: die “woanders” (am Ort \vec{x}') vorliegende Teilchendichte $\hat{\rho}(\vec{x}')$ wichtet die WW-Energie zwischen hier ($= \vec{x}$) und woanders ($= \vec{x}'$), die gesamte potentielle Energie der Wechselwirkung dann gegeben durch die Summe ($= \int d^3x$) über alle “woanders”.

Gl. (3.46) ist eine nichtlineare Integro-Differentialgleichung. Schon der Typ verrät, dass sie i.A. nicht exakt lösbar ist. Man ist – wie so häufig – auf Näherungsverfahren angewiesen. Die Entwicklung solcher Verfahren, insbesondere ihre Anwendungen müssen wir den Spezialvorlesungen überlassen. Hier ist keine Zeit dafür. Tempus fugit ...

3.7 Aufgaben

▷ Aufgabe 3-1 (Bindungsenergie von Metallen)

Ein Stück Metall, aber auch ein Plasma, wird gerne als wechselwirkende Elektrogas beschrieben, das sich vor einem gleichförmig verteilten positiven Hintergrund befindet, wobei der Hintergrund so beschaffen ist, dass das Gesamtsystem elektrisch neutral ist. Vernachlässigt wird dabei, dass die positiven Ladungen in Wirklichkeit in den Ionenrümpfen lokalisiert sind, und dass deren Dynamik im Prinzip auch zu berücksichtigen ist. Allerdings sind die Ionenrümpfe i.A. viel schwerer als die Elektronen, so dass deren Bewegung in der Tat guten Gewissens vernachlässigt werden kann. Die Annahme der gleichförmig verschmierten positiven Hintergrundladung ist etwas dramatischer; das hier vorgestellt Modell vermittelt daher einen eher qualitativen Einblick in die Physik von Metallen.

Wir interessieren uns für die Eigenschaften im Inneren des Metalls (engl. *bulk*). Wir nehmen an, dass das System würfelförmig mit Seitenlängen L ; der Limes $L \rightarrow \infty$ wird am Ende vollzogen. Im unendlich ausgedehnten, homogenen System sind alle physikalischen Eigenschaften invariant unter räumlichen Translationen. Wir dürfen die "Box"-Randbedingungen daher getrost durch periodische Randbedingungen für die Einteilchenwellenfunktionen ersetzen. Eine den Randbedingungen und Symmetrien angepasste Basis von Einteilchenwellenfunktionen sind dann ebene Wellen

$$\varphi_{\vec{k}\sigma}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \chi_{\sigma} \quad (3.47)$$

wo $V = L^3$ das Volumen des Quantisierungswürfels, die erlaubten Wellenvektoren durch die periodischen Randbedingungen bestimmt,

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L}, \quad i = X, Y, Z, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.48)$$

und χ_σ Paulispinoren für die Spin-Polarisationszustände “rauf” und “runter” bezüglich einer irgendwie gewählten Z -Richtung,

$$\chi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

In Erinnerung an die Elektrodynamik-Vorlesungen lässt sich der Hamiltonoperator des Gesamtsystems, bestehend aus N Elektronen und dem positiven Hintergrund, nun schreiben

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{el}} + \hat{H}_{\text{b}} + \hat{H}_{\text{el-b}} \quad (3.50)$$

wo

$$\hat{H}_{\text{el}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i \neq j}^N \frac{e^{-\mu|\hat{r}_i - \hat{r}_j|}}{|\hat{r}_i - \hat{r}_j|}, \quad (3.51)$$

der Hamiltonoperator der Elektronen,

$$\hat{H}_{\text{b}} = \frac{1}{2} e^2 \iiint \frac{\varrho(\vec{x})\varrho(\vec{x}')e^{-\mu|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x d^3x' \quad (3.52)$$

der Hamiltonoperator des positiven Hintergrunds mit Ladungsdichte $\varrho = N/V$, und

$$\hat{H}_{\text{el-b}} = -e^2 \sum_{i=1}^N \int \frac{\varrho(\vec{x})e^{-\mu|\vec{x} - \hat{r}_i|}}{|\vec{x} - \hat{r}_i|} d^3x \quad (3.53)$$

die Wechselwirkungsenergie der Elektronen mit dem positiven Hintergrund.⁴ Der hier eingeführte konvergenzerzeugende Faktor dient dazu, die Existenz der Integrale zu sichern; am Ende der Rechnung wird μ nach Null geschickt. Dabei wird allerdings

⁴In SI-Einheiten ist das hier verwendete e^2 zu ersetzen durch $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$.

zuerst der thermodynamische Limes $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ mit $\varrho := N/V = \text{const.}$ vollzogen, und erst im Anschluss $\mu \rightarrow \infty$.⁵

(a) Berechnen Sie \hat{H}_b , und bestätigen

$$\hat{H}_b = \frac{1}{2} \frac{N^2 4\pi}{V \mu^2}. \quad (3.54)$$

(b) Berechnen Sie $\hat{H}_{\text{el-b}}$, und bestätigen

$$\hat{H}_{\text{el-b}} = -e^2 \frac{N^2 4\pi}{V \mu^2}. \quad (3.55)$$

Hinweis: Im Prinzip ist $\hat{H}_{\text{el-b}}$ ein nichttrivialer Einteilchenoperator. Im vorliegenden Fall darf allerdings die Translationsinvarianz ausgeschlachtet werden
...

Angesichts Ihrer in (a) und (b) gewonnenen Einsichten darf der Hamiltonoperator (3.50) reduziert werden

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} e^2 \frac{N^2 4\pi}{V \mu^2} + \hat{H}_{\text{el}}. \quad (3.56)$$

Der Hamiltonoperator der Elektronen ist die Summe aus kinetischer Energie \hat{T} und potentieller Energie der Coulombwechselwirkung \hat{V} .

⁵Äquivalent wird in jedem Schritt angenommen, dass $\mu^{-1} \ll L$. Mit dieser Annahme darf der Integrationsnullpunkt beliebig verschoben werden, weil Oberflächenkorrekturen in diesem Regime nichts beitragen.

- (c) Bestimmen Sie den Operator der kinetische Energie in zweiter Quantisierung, und bestätigen

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\sigma}, \quad (3.57)$$

wo $\hat{a}_{\vec{k}\sigma}$ fermionischer Teilchenvernichtungsoperator. Interpretieren Sie Ihren Befund als "kinetische Energie jeder Mode multipliziert mit der Besetzungszahl der Mode".

- (d) Bestimmen Sie die potentielle Energie der Coulombwechselwirkung der Elektronen in zweiter Quantisierung, und bestätigen

$$\hat{V} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}-\vec{q}\sigma_2} \hat{a}_{\vec{p}\sigma_2} \hat{a}_{\vec{k}\sigma_1}. \quad (3.58)$$

Die Größe $\hbar\vec{q}$ firmiert auch unter dem Begriff "Impulsübertrag". Wüssten Sie, warum?

- (e) Bestimmen Sie den $\vec{q} = 0$ -Beitrag \hat{V} , vergleichen ihn mit dem c -Zahl Beitrag in (3.56), und bestätigen Sie schließlich für den thermodynamischen Limes

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\sigma} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \frac{4\pi}{q^2} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}-\vec{q}\sigma_2} \hat{a}_{\vec{p}\sigma_2} \hat{a}_{\vec{k}\sigma_1}. \quad (3.59)$$

wobei \sum' bedeutet, dass der $\vec{q} = 0$ -Term ausgeschlossen ist. Bewundern Sie Ihr Resultat: alle potentiell problematischen c -Zahl Anteile sind verschwunden!

An dieser Stelle ist es nun angebracht, dimensionslose Größen einzuführen. Das System wird von zwei Längenskalen regiert: dem mittleren Teilchenabstand r_0 , eingeführt über das spezifische Volumen (Volumen pro Teilchen)

$$V = \frac{4\pi}{3} r_0^3 N, \quad (3.60)$$

und den Bohrschen Radius, der durch die Coulombwechselwirkung definiert ist

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}. \quad (3.61)$$

Das dimensionslose Verhältnis dieser beiden Längenskalen,

$$r_s := \frac{r_0}{a_0} \quad (3.62)$$

vermittelt offensichtlich ein Mass für die Dichte des Systems.

(f) Führen Sie dimensionslose Größen ein,

$$\bar{V} := \frac{V}{r_0^3}, \quad \bar{\vec{k}} := r_0 \vec{k}, \quad \bar{\vec{p}} := r_0 \vec{p}, \quad \bar{\vec{q}} := r_0 \vec{q}, \quad (3.63)$$

und überzeugen Sie sich, dass (3.59) in dimensionsloser Form geschrieben wird

$$\hat{H} = \frac{e^2}{a_0 r_s^2} \left[\sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\sigma} + \frac{r_s}{2\bar{V}} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}' \sum_{\sigma_1\sigma_2} \frac{4\pi}{\vec{q}^2} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}-\vec{q},\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}\sigma_2} \hat{a}_{\vec{k}\sigma_1} \right]. \quad (3.64)$$

Die Gestalt (3.64) offenbart eine wichtiges Resultat: im Regime hoher Dichte, $r_s \rightarrow 0$, ist die potentielle Energie der Coulombwechselwirkung in fermionischen Systemen lediglich eine kleine Störung! Für genügend dichte Systeme ist das Ideale Fermigas – trotz der brutalen Coulombwechselwirkung – eine hervorragende Näherung, und Effekte der Wechselwirkung können gut und gerne in erster Ordnung Störungstheorie bestimmt werden!

(g) Zeigen Sie, dass die Grundzustandsenergie pro Elektron im Limes hoher Dichte

$$\frac{E_0}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left[\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + \dots \right]. \quad (3.65)$$

in führender Ordnung (= erste Ordnung) Störungstheorie. Plotten Sie E_0/N als Funktion von r_s . Bestätigen Sie, dass diese Funktion bei $r_s = 4.83$, $E_0/N = -1.29\text{eV}$ ein Minimum aufweist. Vergleichen Sie diese Werte mit den Werten von Natrium unter Laborbedingungen $r_s^{\text{Na}} = 3.96$, $(E_0/N)^{\text{Na}} = -1.13\text{eV}$ und erfreuen sich an der schönen Übereinstimmung.

Der erste Term in (3.65) ist nichts anderes als die kinetische Energie des idealen Fermigases, der zweite Term das Resultat der ersten Ordnung Störungstheorie (philosophieren Sie mal über das negative Vorzeichen), die weiteren Terme, die hier mit ... angedeutet sind laufen unter dem Begriff "Korrelationsenergie". In Spezialvorlesungen lernen Sie diese zu berechnen.

▷ Aufgabe 3-2 (Bose-Einstein Kondensate)

[Ist noch keine Aufgabe, sondern eine unvollständig vorgerechnete Anwendung]

Unter einem Bose-Einstein Kondensat versteht man einen Vielteilchenzustand identischer Bosonen bei dem ein bestimmter Einteilchenzustand – meist der Einteilchen Grundzustand – makroskopisch besetzt ist, die anderen Einteilchenzustände hingegen thermisch. Das Kondensat bildet sich in einem Phasenübergang zweiter Ordnung, wenn die Temperatur unter den Wert einer kritischen Temperatur T_c fällt. Bemerkenswert ist dabei, dass die Bose-Einstein Kondensation in einem idealen – das heißt nicht-wechselwirkenden – System auftritt. Im Unterschied zu anderen Phasenübergängen zweiter Ordnung – der Ferromagnetismus etwa – ist einzig und allein die

Symmetrie der Wellenfunktion für diesen Phasenübergang verantwortlich. Ursprünglich vorausgesetzt durch Sathandra Nath Bose,⁶ wurden Bose-Einstein Kondensate in nahezu idealer Form erstmals Mitte der 1990er Jahre in verdünnten Alkaligasen realisiert.⁷

Wir konzentrieren uns hier auf Spin-0 Bosonen im Tieftemperaturzustand, also $T \ll T_c$, vereinfachend $T = 0$. Das System sei hinreichend verdünnt, so dass Dreikörperstöße keine Rolle spielen. Der Hamiltonoperator, in zweiter Quantisierung, ist dann von der Form

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\Psi}(x) d^3x + \frac{1}{2} \iint \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x') V(x, x') \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x') d^3x d^3x' \quad (3.85)$$

wobei die Feldoperatoren der Bose-Algebra genügen,

$$\left[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(x') \right] = \delta^{(3)}(x - x'), \quad (3.86)$$

$$\left[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x') \right] = \left[\hat{\Psi}^\dagger(x), \hat{\Psi}^\dagger(x') \right] = 0. \quad (3.87)$$

In der Kondensatphase bewegen sich die Teilchen langsam. Ihre Wechselwirkung ist von der s-Wellenstreuung dominiert und das Wechselwirkungspotential kann getrost

⁶Z. Phys. **26**, 178 (1924).

⁷Für ⁸⁷Rb durch die Gruppe von Carl Wieman und Eric Cornell am JILA (Andersen et al., Science **269**, 198 (1995); für ²³Na in der Gruppe von Wolfgang Ketterle am MIT (Davis et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 2969 (1995)). Etwa zeitgleich gab es Hinweise für Kondensation in ⁷Li, obwohl in diesem System die Streulänge negativ ist. Kondensation des ursprünglichen Favoriten – das war spinpolarisierter Wasserstoff – gelang drei Jahre später in der Gruppe von Kleppner (Phys. Rev. Lett. **81**, 2811 (1998)).

durch ein Pseudopotential ersetzt werden,

$$V(x, x') = \underbrace{\frac{4\pi\hbar^2 a_0}{m}}_{:=\tilde{V}} \delta^{(3)}(x - x') \quad (3.88)$$

worin a_0 die Streulänge der s -Wellenstreuung im Limes $k \rightarrow 0$.

Translationsinvarianz bzw Homogenität legt eine Entwicklung nach ebenen Wellen nahe. Im kubischen Volumen $V = L^3$, mit periodischen Randbedingungen

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_k \frac{e^{ikx}}{\sqrt{V}} \hat{a}_k \quad \text{bzw.} \quad \hat{a}_k = \int_V \hat{\Psi}(x) \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{V}} d^3x. \quad (3.89)$$

Die Algebra der Felooperatoren () impliziert die Bose-Algebra der Leiteroperatoren

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}, \quad (3.90)$$

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] = 0. \quad (3.91)$$

Angedrückt in Leiteroperatoren liest sich der Hamiltonoperator ()

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{\tilde{V}}{2V} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \hat{a}_{k_4}^\dagger \hat{a}_{k_3}^\dagger \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} \quad (3.92)$$

$$\begin{aligned} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \hat{a}_{k_4}^\dagger \hat{a}_{k_3}^\dagger \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} &= \underbrace{\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0}_{\tilde{n}_0(\tilde{n}_0-1)} + 4\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \sum_{k \neq 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \\ &+ \sum_{k \neq 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_{-k} \\ &+ O(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) \end{aligned} \quad (3.93)$$

$$\hat{H} = N\frac{g}{2} + \sum_{k \neq 0} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g \right) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{g}{2} \sum_{j \neq 0} \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{a}_k \hat{a}_{-k} \right) \quad (3.94)$$

$$\hat{b}_k = u_k \hat{a}_k + v_k \hat{a}_{-k}^\dagger, \quad (3.95)$$

$$\hat{b}_k^\dagger = u_k \hat{a}_k^\dagger + v_k \hat{a}_{-k} \quad (3.96)$$

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \Leftrightarrow \begin{cases} \begin{bmatrix} \hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger \end{bmatrix} &= \delta_{kk'} \\ \begin{bmatrix} \hat{b}_k, \hat{b}_{k'} \end{bmatrix} &= 0 \\ \begin{bmatrix} \hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger \end{bmatrix} &= 0 \end{cases} \quad (3.97)$$

$$\hat{a}_k = u_k \hat{b}_k - v_k \hat{b}_{-k}^\dagger, \quad (3.98)$$

$$\hat{a}_k^\dagger = u_k \hat{b}_k^\dagger - v_k \hat{b}_{-k} \quad (3.99)$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= N\frac{g}{2} + \sum_{k \neq 0} \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g \right) v_k^2 - g u_k v_k \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g \right) (u_k^2 + v_k^2) + g(-2u_k v_k) \right] \left(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \hat{b}_{-k}^\dagger \hat{b}_{-k} \right) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \underbrace{\left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g \right) (-2u_k v_k) + g(u_k^2 + v_k^2) \right]}_{=0} \left(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{-k} \right) \end{aligned}$$

$$u_k^2 + v_k^2 = \cosh(2\alpha_k) = \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g}{\varepsilon_k}, \quad 2u_k v_k = \sinh(2\alpha_k) = \frac{g}{\varepsilon_k} \quad (3.100)$$

$$\varepsilon_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g\right)^2 - g^2} \quad (3.101)$$

$$\hat{H} = N \frac{g}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \left[\varepsilon_k - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - g \right] + \sum_{k \neq 0} \varepsilon_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \quad (3.102)$$

$$\varepsilon_k \propto \begin{cases} \sqrt{\frac{g}{m}} \frac{\hbar k}{m} & \text{für } k \rightarrow 0 \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + g - \frac{4gm}{\hbar^2 k^2} & \text{für } k \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.103)$$

Lösungen zu den Aufgaben

▷ Lösung 3-1

Die Ladungsdichte des positiven Hintergrunds ist homogen, $\varrho(\vec{x}) = \varrho$, mit $\varrho = N/V$ wegen Ladungsneutralität des Gesamtsystems. Der Beitrag (??)

$$\hat{H}_b = \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^2 \iint \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} d^3x d^3x' \quad (3.66)$$

$$= \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int d^3x \underbrace{\int \frac{e^{-\mu|\vec{y}|}}{|\vec{y}|} d^3y}_{=V} \quad (3.67)$$

$$= \frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \quad (3.68)$$

Die Wechselwirkungsenergie der Elektronen mit dem positiven Hintergrund, \hat{H}_{e1-b} ist im Prinzip “Single Body” (d.h. eine Summe von Einteilchenoperatoren). Im endlichen Volumen V ist der Wert eines Integrals $\int_V f(\vec{x} - \vec{r}_i) d^3x$ also zunächst \vec{r}_i -abhängig. Im thermodynamischen Limes wird das System aber translationsinvariant, d.h. die Integrationsvariable dürfen verschoben werden, $\vec{x} - \vec{r}_i := \vec{y}$, ohne dass

der Wert des Integrals im Limes $V \rightarrow \infty$ von \vec{r}_i abhänge. Entsprechend

$$\hat{H}_{\text{el-b}} = -e^2 \sum_{i=1}^N \frac{N}{V} \int \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{r}_i|}}{|\vec{x}-\vec{r}_i|} \quad (3.69)$$

$$= -e^2 \sum_{i=1}^N \frac{N}{V} \int \frac{e^{-\mu|\vec{y}|}}{|\vec{y}|} d^3y \quad (3.70)$$

$$= -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \quad (3.71)$$

Die kinetische Energie ist ‐Single-Body‐, also eine Summe von Einteilchenoperatoren $\hat{t} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. Matrixelemente von \hat{t} in der Basis ebener Wellen sind schnell berechnet,

$$\langle \vec{k}\sigma | \hat{t} | \vec{k}'\sigma' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\chi_\sigma^\dagger \chi'_{\sigma'}}_{\delta_{\sigma\sigma'}} \frac{1}{V} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \Delta e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}} d^3x = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (3.72)$$

und also die kinetische Energie, in zweiter Quantisierung

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \quad (3.73)$$

Die potentielle Energie ist ‐Two-Body‐, also eine Summe von Zweiteilchenoperatoren. Notiert in zweiter Quantisierung (beachte die Reihenfolge der Operatoren),

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'\sigma'} \sum_{\vec{p}'\tau'} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{p}\tau} \langle \vec{k}'\sigma' \vec{p}'\tau' | \hat{v} | \vec{k}\sigma \vec{p}\tau \rangle \hat{a}_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}'\tau'}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}\tau} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}, \quad (3.74)$$

und es verbleibt die Matrixelemente $\langle \vec{k}'\sigma'\vec{p}'\tau'|\hat{v}|\vec{k}\sigma\vec{p}\tau\rangle$ der (abgeschirmten) Coulombwechselwirkung $\hat{v} = e^2 \frac{e^{-\mu|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}$ zu berechnen:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}'\sigma'\vec{p}'\tau'|\hat{v}|\vec{k}\sigma\vec{p}\tau\rangle &= e^2 \underbrace{\chi_{\sigma'\tau'}^\dagger \chi_{\sigma\tau}}_{\delta_{\sigma'\sigma} \delta_{\tau'\tau}} \frac{1}{V^2} \iint e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}_1} e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{x}_2} \frac{e^{-\mu|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_1} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}_2} d^3x_1 d^3x_2 \\ &= e^2 \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{\tau'\tau} \frac{1}{V^2} \int e^{-i(\vec{k}'+\vec{p}'-\vec{k}-\vec{p})\cdot\vec{x}} d^3x \int \frac{e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{y}} e^{-\mu|\vec{y}|}}{|\vec{y}|} d^3y \end{aligned} \quad (3.75)$$

$$= \frac{e^2}{V} \frac{4\pi}{(\vec{k}-\vec{k}')^2 + \mu^2} \delta_{\vec{k}'+\vec{p}',\vec{k}+\vec{p}} \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{\tau'\tau} \quad (3.76)$$

und also

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}'\sigma'} \sum_{\vec{p}'\tau'} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{p}\tau} \frac{4\pi}{(\vec{k}-\vec{k}')^2 + \mu^2} \delta_{\vec{k}'+\vec{p}',\vec{k}+\vec{p}} \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{\tau'\tau} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}\tau}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'\sigma'} \hat{a}_{\vec{p}'\tau'} \quad (3.77) \\ &= \frac{e^2}{2V} \sum_{\sigma\tau} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}-\vec{q}\tau}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}\tau} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \quad (3.78) \end{aligned}$$

Die letzten beiden Kroneckerdeltas in Gl. (3.76) sind Ausdruck der Spinunabhängigkeit der Coulombwechselwirkung, das Kronecker $\delta_{\vec{k}'+\vec{p}',\vec{k}+\vec{p}}$ ist Ausdruck der Impulserhaltung. Entsprechend wird in Gl. (3.77) nur über Prozesse summiert, bei denen die Summe der einlaufenden Impulse gleich der Summe der auslaufenden Impulse. Impulserhaltung gestattet es, die Summe über die vier Wellenvektoren $\vec{k}, \vec{p}, \vec{k}', \vec{p}'$ auf eine Summe über drei unabhängige Variable zu reduzieren, in Gl. (3.78) sind das neben den einlaufenden Impulsen \vec{k}, \vec{p} der Impulsübertrag $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k} = -(\vec{p}' - \vec{p})$.

Für den Limes $\mu \rightarrow 0$ bedarf nur der Summand zu $\vec{q} = 0$ einer Extrabehandlung,

und die erfolgt unter Ausnützung der Antikommutator-Algebra,

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\sigma\tau} \sum_{\vec{k}\vec{p}} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}\tau}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}\tau} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} &= \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\sigma\tau} \sum_{\vec{k}\vec{p}} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}\tau} \left(\hat{a}_{\vec{p}\tau}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\sigma} - \delta_{\sigma\tau} \delta_{\vec{k}\vec{p}} \right) \\ &= \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \left(\hat{N}^2 - \hat{N} \right) \end{aligned} \quad (3.79)$$

Unter der Annahme eines Zustandes mit definierter Gesamtzahl der Elektronen liefert () lediglich einen c -Zahl Beitrag zum Hamiltonoperator (man ersetze \hat{N} durch den Eigenwert N). Der erste Term in () ist extensiv; er kompensiert den c -Zahl Beitrag von $\hat{H}_b + \hat{H}_{el-b}$. Der zweite Term ist intensiv; er verschwindet im thermodynamischen Limes (zunächst $L \rightarrow \infty$ und $N \rightarrow \infty$ mit N/V fix, dann $\mu \rightarrow 0$).

Im Grundzustand des idealen Fermigas. hier bezeichnet $|\Phi_0\rangle$, sind alle Spinorbitale mit Impulsen $\hbar\vec{k}$ bis zu einer Obergrenze $\hbar k_F$ einfach besetzt. Entsprechend

$$N = \langle \Phi_0 | \hat{N} | \Phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k}\sigma} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\vec{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle = \sum_{\substack{|\vec{k}| \leq k_F \\ \vec{k}\lambda}} \frac{V}{2\pi^3} \sum_{\sigma} \int_{|\vec{k}| \leq k_F} d^3k = \frac{V k_F^3}{3\pi^2} \quad (3.80)$$

womit die Abhängigkeit des Fermimpulses k_F von der Elektronenzahl N etabliert wäre,

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \approx 1.92 r_0^{-1} \quad (3.81)$$

also Fermiwellenlänge von Ordnung des mittleren Teilchenabstands.

Verbleiben zwei Möglichkeiten, entweder

$$\vec{k} + \vec{q}, \sigma = \vec{k}, \sigma, \quad \vec{p} - \vec{q}, \tau = \vec{p}, \tau \quad (3.82)$$

oder

$$\vec{k} + \vec{q}, \sigma = \vec{p}, \tau, \quad \vec{p} - \vec{q}, \tau = \vec{k}, \sigma \quad (3.83)$$

Die erste Paarung entfällt, da $\vec{q} = 0$ aus der Summe ausgeschlossen. Verbleibt einzig die zweite Möglichkeit, und die liefert

$$\delta_{\vec{k}+\vec{q},\vec{p}}\delta_{\sigma\tau}\langle\Phi_0|\hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger\hat{a}_{\vec{k},\sigma}^\dagger\hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{a}_{\vec{k},\sigma}|\Phi_0\rangle = -\delta_{\vec{k}+\vec{q},\vec{p}}\delta_{\sigma\tau}\langle\Phi_0|\hat{n}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{n}_{\vec{k},\sigma}|\Phi_0\rangle \quad (3.84)$$

[Muss noch fortgesetzt werden ...]