

Impulsdarstellung

nützliche Darstellung für translationsinvariante Systeme:

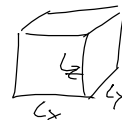
externes Potential : $V^{\text{ext}}(r_i) = V_0 = \text{const}$

Wechselwirkung : $\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \hat{V}(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$
 Relativinvariant!

Bemerkung:

Effektive Wechselwirkung
 könnte auch von den
 Absolut-Positionen abhängen,
 wird nur von Relativvektoren

Betrachte System in einer Box mit Volumen $V = L_x L_y L_z$,
 diese Box wird in alle Raumrichtungen periodisch fortgesetzt



Die Eigenfunktionszustände für die wechselwirkungsfreie Teilchen ($\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$)
 sind dann Eigenzustände des Impulsoperators!

Ansatz: $\varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}}$ ebene Wellen

mit $\underline{k} = 2\pi \left(\frac{m_x}{L_x}, \frac{m_y}{L_y}, \frac{m_z}{L_z} \right)$ mit $m_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\alpha = x, y, z$

$\Rightarrow e^{i k_x (x + L_x)} = e^{i k_x x}$ Periodizität

Die Eigenfunktionen sind orthogonal

$\langle \underline{k}' | \underline{k} \rangle = \int_{\underline{r}} \langle \underline{k}' | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle$ Einstrichen Ortsbasis
 $= \int_{\underline{r}} \varphi_{\underline{k}'}^*(\underline{r}) \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \frac{1}{V} \int_{\underline{r}} e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{r}} = \int_{\underline{k}, \underline{k}'}$

Ziel nun: Darstellung des Hamiltonians in \mathbb{Z} -Quantisierung mit diesen Zuständen

\Rightarrow benötigte Matrixelemente von \hat{H}_1 und \hat{H}_{12}

Einheitsoperator

Sei $\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$ (also zunächst $V^{\text{extern}}(x_i) = 0$)

2. Quantisierung (allg. $\hat{H}_1 = \sum_{\mu, \nu} h_{\mu\nu} \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu$)

$$\hat{H}_1 = \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} \langle \underline{k} | \frac{p^2}{2m} | \underline{k}' \rangle \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'}$$

Eigenzustände werden also durch die Quantenzahlen $\underline{k}, \underline{k}'$ charakterisiert!!

(und $p = \hbar \underline{k}$)

Übergang in Ortsdarstellung $\hat{p} = \int d\underline{r} | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} |$

$$= \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'} \int d\underline{r} \underbrace{\langle \underline{k} | \underline{r} \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\underline{k} \cdot \underline{r}}} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \right) \underbrace{\langle \underline{r} | \underline{k}' \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}' \cdot \underline{r}}}$$

$$= \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'} \frac{1}{V} \int d\underline{r} e^{-i\underline{k} \cdot \underline{r}} \underbrace{\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \right) e^{i\underline{k}' \cdot \underline{r}}}_{\frac{\hbar^2 (\underline{k}')^2}{2m}}$$

$$= \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'} \frac{\hbar^2 (\underline{k}')^2}{2m} \underbrace{\frac{1}{V} \int d\underline{r} e^{i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{r}}}_{\delta_{\underline{k}, \underline{k}'}} = \sum_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$= \sum_{\underline{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{n}_{\underline{k}} \quad \text{Besetzungszahloperator für Zustand } \underline{k}$$

$\hat{n}_{\underline{k}} = \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}}$

Beispiel:

Zustand durch ein konstantes externes Potential $V^{\text{extern}}(x_i) = V_0$

mit $\langle \underline{k} | V_0 | \underline{k}' \rangle = V_0 \langle \underline{k} | \underline{k}' \rangle = V_0 \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$

\Rightarrow Zustandsumme $\sum_{\underline{k}, \underline{k}'} V_0 \delta_{\underline{k}, \underline{k}'} \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}'} = \sum_{\underline{k}} V_0 \hat{a}_{\underline{k}}^\dagger \hat{a}_{\underline{k}} = V_0 \sum_{\underline{k}} \hat{n}_{\underline{k}} = V_0 \hat{N}$

\hat{N} Gesamtteilchenzahl

Zwei-Teilchen

$$\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \hat{V}(|x_i - x_j|)$$

2. Quantisierung

allg. $\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu, \lambda, \delta} \langle \mu, \nu | \hat{V} | \lambda, \delta \rangle \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\lambda \hat{a}_\delta$

hier: $\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\underline{k}, \underline{k}', q, q' \\ \text{Vorfaktor-Summe!}}} \langle \underline{k}, q | \hat{V} | \underline{k}', q' \rangle \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_{\underline{k}'} \hat{a}_{q'}$

Matrixelement: (Einschleusen von zwei mal Ortsraum) $\rightarrow \langle \underline{k}, q | \langle \underline{k}', q' | \langle \underline{r} | V | \underline{r}' \rangle \langle \underline{r} | \underline{k}' \rangle \langle \underline{r} | q \rangle$

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{V^2} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' e^{-i\underline{k} \cdot \underline{r}} e^{-iq \cdot \underline{r}} V(\underline{r} - \underline{r}') e^{i\underline{k}' \cdot \underline{r}'} e^{iq' \cdot \underline{r}'}$$

benutze Fourierdarstellung des Wechselwirkungs:

$$V(\underline{r} - \underline{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot (\underline{r} - \underline{r}')} \quad V_{\underline{k}} \quad \text{Nun eine Summe, da } V \text{ nur von Relativvektor abhängt!}$$

$$\Rightarrow \langle \dots \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\underline{k}} V_{\underline{k}} \underbrace{\frac{1}{V} \int d\underline{r} e^{i(\underline{k} + q' - \underline{k}) \cdot \underline{r}}}_{\delta_{q', \underline{k} - \underline{k}}} \underbrace{\frac{1}{V} \int d\underline{r}' e^{i(\underline{k}' - \underline{k} - q) \cdot \underline{r}'}}_{\delta_{\underline{k}', \underline{k} + q}}$$

Einschieben in \hat{H}_{12} : Von der insgesamt 5 Summe über Wellenvektoren fällt ~~zwei~~ zwei weg aufgrund der Kronecker-Deltas!

$$\hat{H}_{12} = \frac{1}{2V} \sum_{\underline{k}} \sum_{\underline{k}'} \sum_q V_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_{q+\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}-\underline{k}'}$$

II.5. Fermi- und Bosestatistik

Erinnern Thermodynamik und Statistik (TP IV)

Quantenmechanische Dichtegenerater (Statistische Generater)

$$\hat{\mathcal{G}} = \sum_{\underline{k}} p_{\underline{k}} |\psi_{\underline{k}}\rangle \langle \psi_{\underline{k}}| \quad \underline{k}: \text{zählt mögliche Zustände}$$

$|\psi_{\underline{k}}\rangle$: "reine" Zustand eines Einteilchen- oder Vielteilchen Systems

$p_{\underline{k}}$: Gewichtungsfaktor:

Für $p_{\underline{k}} = \delta_{\underline{k}, \underline{k}_0}$ liegt nur der "reine" Zustand vor, ansonsten hat man ein Gemisch

$$\sum_{\mu} p_{\mu} = 1$$

Erwartungswert einer Observablen \hat{A} im Gemisch $\left(\begin{array}{l} \text{Bau: Normal-Zustand} \\ \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \end{array} \right)$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \psi_{\mu} | \hat{A} | \psi_{\mu} \rangle$$

$$= \sum_{\mu} \sum_{\nu} p_{\mu} \langle \psi_{\mu} | \hat{A} | \psi_{\nu} \rangle \langle \psi_{\nu} | \psi_{\mu} \rangle \quad \text{mit } \sum_{\nu} |\psi_{\nu}\rangle \langle \psi_{\nu}| = \hat{1}$$

$$= \sum_{\mu} \sum_{\nu} \langle \psi_{\nu} | \psi_{\mu} \rangle p_{\mu} \langle \psi_{\mu} | \hat{A} | \psi_{\nu} \rangle = \sum_{\nu} \langle \psi_{\nu} | \sum_{\mu} p_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle \langle \psi_{\mu}| \hat{A} | \psi_{\nu} \rangle$$

$$= \sum_{\nu} \langle \psi_{\nu} | \hat{\rho} \hat{A} | \psi_{\nu} \rangle = \text{Tr } \hat{\rho} \hat{A}$$

(Spur (Trace) ^{eig.})

$$\text{es gilt: } \text{Tr } \hat{\rho} = 1, \hat{\rho}^{\dagger} = \hat{\rho}$$

Die genaue Form von $\hat{\rho}$ hängt von behalteter "Ensemble" ab
(im zeitunabhängigen Fall)

Spezialisiere hier auf den großkanon. Fall.

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad \begin{array}{l} \text{Temperatur} \\ \text{Boltzmannkonstante} \end{array}$$

T, μ fest

$$\text{mit } Z_{GK} = \text{Tr } e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$$

μ : chemisches Potential

\hat{H}, \hat{N} : Hamiltonian, Teilchenanzahloperator

Ziel: Bedeutung der chemisch gemittelten Besetzungszahl $\bar{n}_x = \bar{a}_x^{\dagger} a_x$
eines Einzelteilchenzustands x
für Bosonen und Fermionen!

$$\rightarrow \langle \bar{n}_x \rangle$$

Betrachte wieder unabhängigen Fall:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 = \sum_{i=1}^N \hat{H}(i)$$

mit $\hat{H}|i\rangle = \epsilon_i |i\rangle$ für alle Teilchen i

$$\Rightarrow \text{Hamiltonoperator in 2. Quantisierung: } \hat{H} = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}$$

Mittlere Besetzungszahl.

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{\alpha} \rangle &= \langle \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} \\ &= \frac{1}{Z_{\text{GU}}} \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} \end{aligned}$$

Für das weitere Vorgehen benutzen wir die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

hier ohne Beweis!

Setze: $\hat{A} = -\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})$

$$\hat{B} = \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}$$

$$\hat{A} = -\beta \left(\underbrace{\sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}}_{\hat{H}} - \mu \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} \right) = -\beta \sum_{\alpha} (\epsilon_{\alpha} - \mu) \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}$$

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = -\beta \sum_{\gamma} (\epsilon_{\gamma} - \mu) \underbrace{[\hat{a}_{\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{\gamma}, \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}]}_{\delta_{\gamma\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}} \quad \text{ohne Beweis}$$

Search for bosons as well for fermions!

$$= -\beta \sum_{\gamma} (\epsilon_{\gamma} - \mu) d_{\gamma\alpha} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger}$$

$$= -\beta (\epsilon_{\alpha} - \mu) \underbrace{\bar{a}_{\alpha}^{\dagger}}_{\vec{B}} \equiv p_{\alpha} \vec{B} \quad \text{mit } p_{\alpha} = \beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)$$

Zahl!

Einsetzen in die Formel!

$$e^{\hat{A}} \vec{B} e^{-\hat{A}} = \vec{B} + p_{\alpha} \vec{B} + \frac{1}{2!} \underbrace{[\hat{A}, p_{\alpha} \vec{B}]}_{p_{\alpha}^2 \vec{B}} + \dots$$

$$= \vec{B} (1 + p_{\alpha} + \frac{1}{2!} p_{\alpha}^2 + \dots) = \vec{B} e^{p_{\alpha}} = e^{p_{\alpha}} \vec{B}$$

Multiplizieren von rechts mit $e^{\hat{A}}$

$$e^{\hat{A}} \vec{B} = e^{p_{\alpha}} \vec{B} e^{\hat{A}}$$

$$\text{bzw.: } e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger} = e^{-\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger} e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)} \quad (*)$$

Einsetzen in Ausdruck für die mittlere Besetzungszahl

$$\langle \bar{n}_{\alpha} \rangle = \frac{1}{Z_{GK}} \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger} \bar{a}_{\alpha}$$

$$\stackrel{(*)}{=} \frac{1}{Z_{GK}} \text{Tr} e^{\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger} e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)} \bar{a}_{\alpha}$$

Zykl. Invarianz
der Spur

$$= e^{-\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)} \frac{1}{Z_{GK}} \text{Tr} (\bar{a}_{\alpha} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger} e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)})$$

$$= e^{-\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)} \frac{1}{Z_{GK}} \text{Tr} (e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)} \bar{a}_{\alpha} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger})$$

$$= e^{-\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)} \text{Tr} \underbrace{\vec{B} \bar{a}_{\alpha} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger}}_{\vec{1} \pm \bar{a}_{\alpha}^{\dagger} \bar{a}_{\alpha}}$$

$$= e^{-\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)} \left(\underbrace{\text{Tr} \vec{B}}_1 \pm \text{Tr} \vec{B} \bar{a}_{\alpha}^{\dagger} \bar{a}_{\alpha} \right)$$

benutze:

$$[\bar{a}_{\alpha}, \bar{a}_{\alpha}^{\dagger}]_{\pm} = \vec{1}$$

Boson
Fermion

$$= e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \left(1 \pm \underbrace{\frac{\sum_{n_k} \frac{\partial^2}{\partial n_k^2}}{n_k}}_{\langle \hat{n}_k \rangle} \right)$$

insgesamt:

$$\langle \hat{n}_k \rangle = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \left(1 \pm \underbrace{\langle \hat{n}_k \rangle}_{\substack{\text{Boson} \\ \text{Fermion}}} \right)$$

Auflösung:

$$\langle \hat{n}_k \rangle = \langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} \mp 1}$$

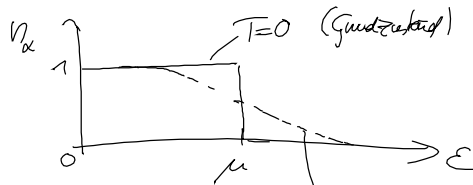
mittlere
Besetzungszahl

als Funktion der Temperatur
und des chem. Potentials!

Bekanntes Ergebnis aus der Quantenstatistik!

Bemerkungen:

- Für Fermionen: „Fermi-Dirac-Statistik“: $\langle n_k \rangle^{\text{Fermi}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}$



Alle Zustände bis zur Fermienergie
sind genau einmal besetzt
Folge des Pauli-Prinzips!

$T > 0$: Aufweichen der „Fermienergie“!

- Für Bosonen: „Bose-Einstein-Statistik“: $\langle n_k \rangle^{\text{Boson}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}$

Man sieht: Der Nenner kann Null werden (typisch für tiefste Zustand)

\Rightarrow „Bose-Einstein-Kondensat“

makroskopische Besetzung des Grundzustands!

(alle Bosonen können gleichzeitig das tiefste Energieniveau besetzen!)

II.6. Heitner-Fock-Verfahren in Zweiter Quantisierung