Wh: Operatoren in 2. Quantisierung

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1^{(i)} \longrightarrow \sum_{\lambda,\mu} h_{\lambda\mu}\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu \qquad \rightarrow \text{Blatt 7}$$

mit $h_{\lambda\mu} = \langle \lambda_i | \hat{H}_1^{(i)} | \mu_i \rangle$

unabhängig von i ← Teilchenindex

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

$$= \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \langle \lambda, \mu | V | \nu \sigma \rangle\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\sigma$$

$\rightarrow$ Blatt 8

Basiswechsel z.B. Erzeuger

$$\hat{a}_\lambda^+ = \sum_\mu \langle \mu | \lambda \rangle \hat{a}_\mu^+$$

Speziell Ortseigenzustand $|\lambda\rangle \rightarrow |\underline{r}\rangle$

$$\underbrace{\hat{a}_{\underline{r}}^+}_{\hat{\varphi}^+(\underline{r})} = \sum_\mu \underbrace{\langle \mu | \underline{r} \rangle}_{\varphi_\mu^*(\underline{r})} \hat{a}_\mu^+$$

z.B. Teilchendichte (Operator): $\hat{n}(\underline{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) = \hat{\varphi}^+(\underline{r}) \hat{\varphi}(\underline{r})$

Berücksichtigung des Spins

Bisher haben wir den Spin weggelassen (man kann ihn sich implizit in der Ortsvariable vorstellen)

Sauberer:

- ersetze $\hat{\psi}(\underline{r}) \longrightarrow \hat{\psi}_\sigma(\underline{r})$ — σ-Komponente des vollen Feldoperators

Feldoperator (Vernichter) $\sigma = \uparrow\downarrow$

mit $\hat{\psi}_\sigma(\underline{r}) = \sum_\mu \varphi_\mu(\underline{r})\, \hat{a}_{\mu,\sigma}$

$\sigma = \uparrow,\downarrow$ (alternativ: $\varphi_{\mu\sigma}(\underline{r})$)

Ortsanteil der Wellenfunktion

Vernichter des Zustands μ mit Spin σ

- Summiere zusätzlich über Spin

z.B. $\hat{n}(\underline{r}) = \sum_\sigma \hat{\psi}^+_\sigma(\underline{r})\hat{\psi}_\sigma(\underline{r})$ Teilchenzahldichte

Vertauschungsregeln: $[\hat{\psi}_\sigma(\underline{r}), \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\underline{r}')]_\mp = \delta_{\sigma\sigma'}\,\delta(\underline{r}-\underline{r}')$

Anwendung: z.B. Paarkorrelationsfunktion $\Rightarrow$ Übung

allgemeine Operatoren in 2. Quantisierung mit Spin

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1^{(i)} = \sum_{\lambda\mu}\sum_{\sigma\sigma'} \langle \lambda\sigma | \hat{H}_1^{(i)} | \mu\sigma' \rangle\, \hat{a}^+_{\lambda\sigma}\hat{a}_{\mu\sigma'}$$

falls speziell $\hat{H}_1^{(i)}$ spin-unabhängig (z.B. kinetische Energie)

$\rightarrow$ Matrixelement: $\langle \lambda\sigma | \hat{H}_1^{(i)} | \mu\sigma' \rangle$

$= \langle \lambda | \hat{H}_1^{(i)} | \mu \rangle \underbrace{\langle \sigma | \sigma' \rangle}_{\delta_{\sigma\sigma'}}$

$\boxed{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0 \quad \sigma \neq \sigma'}$

$$\Rightarrow \hat{H}_1 = \sum_{\lambda\mu}\sum_\sigma \langle \lambda | \hat{H}_1^{(i)} | \mu \rangle\, \hat{a}^+_{\lambda\sigma}\hat{a}_{\mu\sigma}$$

analog Zweiteilchenoperatoren

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

$$= \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu d} \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} \langle \lambda\sigma, \mu\sigma' | V | \nu\sigma'', d\sigma''' \rangle \, \hat{a}^+_{\lambda\sigma} \hat{a}^+_{\mu\sigma'} \hat{a}_{\nu\sigma''} \hat{a}_{d\sigma'''}$$

V spinunabhängig

$$\left(= \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu d} \sum_{\sigma\sigma'} \langle \lambda,\mu | V | \nu,d \rangle \, \hat{a}^+_{\lambda\sigma} \hat{a}^+_{\mu\sigma'} \hat{a}_{\nu\sigma} \hat{a}_{d\sigma'} \right.$$

5) Impulsdarstellung

besonders nützliche Darstellung für translationsinvariante Systeme

Betrachte "Box" mit quaderförmigem Volumen $V = L_x L_y L_z$, wird in alle Raumrichtungen periodisch fortgesetzt

Die Einteilcheneigenzustände sind die Impulseigenzustände ($\hat{=}$ ebene Welle)

$$\underbrace{\langle \underline{r} | \underline{k} \rangle}_{\varphi_{\underline{k}}(\underline{r})} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$$

mit $\underline{k} = 2\pi \left(\frac{m_x}{L_x}, \frac{m_y}{L_y}, \frac{m_z}{L_z} \right)$

mit $m_\gamma = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$\gamma = x, y, z$

$$\Rightarrow e^{i k_x (x + L_x)} = e^{i k_x x} \quad \text{etc.}$$

Orthogonalität:

$$\langle \underline{k}' | \underline{k} \rangle = \int d\underline{r} \, \langle \underline{k}' | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle$$

$$= \int d\underline{r} \, \varphi^*_{\underline{k}'}(\underline{r}) \, \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$$

Ziel nun: Darstellung der Ein- und Zweiteilchenoperatoren in 2. Quantisierung

Einteilchenoperator (ohne Spin)

sei $$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \xrightarrow{\text{Ortsdarstellung}} \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right)$$

2. Quantisierung:

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

$$= \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} \hat{a}^+_{\underline{k}'} \hat{a}_{\underline{k}} \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$$

$$= \sum_{\underline{k}} \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}} \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} = \sum_{\underline{k}} \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} \hat{n}_{\underline{k}}$$

Besetzungszahloperator

$$\underline{p} = \hbar \underline{k}$$

$$\hat{\underline{p}} | \underline{k} \rangle = \hbar \underline{k} | \underline{k} \rangle$$

Eigenzustände!

Zweiteilchenoperator (ohne Spin)

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

nur Abhängigkeit vom Relativvektor, da translationsinvariantes System!

$$\hat{H}_{12} = \frac{1}{2}\sum_{\underline{k},\underline{k}',\underline{q},\underline{q}'} \langle \underline{k},\underline{q}| V |\underline{k}',\underline{q}'\rangle \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}^+_{\underline{q}} \hat{a}_{\underline{k}'} \hat{a}_{\underline{q}'}$$

betrachte Matrixelement:

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

benutze Fourierdarstellung der Wechselwirkung:

$$V(\underline{r}-\underline{r}') = \frac{1}{V}\sum_{\hat{\underline{k}}} V_{\hat{\underline{k}}} \, e^{i\hat{\underline{k}}\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}$$

$$\Rightarrow \langle \ldots \rangle = \frac{1}{V^2}\int d\underline{r}\int d\underline{r}' \, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}} e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}'} \frac{1}{V}\sum_{\hat{\underline{k}}} V_{\hat{\underline{k}}} e^{i\hat{\underline{k}}(\underline{r}-\underline{r}')} e^{i\underline{k}'\cdot\underline{r}} e^{i\underline{q}'\cdot\underline{r}'}$$

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

$\hat{\ldots}$

Einsetzen in H_{12}

(von den 4 Summen über k, k', q, q' fallen zwei weg aufgrund der Kroneckerdeltas !)

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

Auch die anderen, bisher betrachteten Operatoren (Teilchendichteoperatoren, Feldoperatoren) können in der Impulsdarstellung angegeben werden!

II.5. ~~Erste~~ Anwendung des Formalismus: Fermi- und Bosestatistik

Erinnerung Thermodynamik und Statistik (TP IV)

quantenmechanische Dichteoperator (statist. Operator)

$$\hat{\varrho} = \sum_{k} p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

mit $|\psi_k\rangle$ "reiner" Zustand eines Einteilchen- oder auch Vielteilchensystems

p_k: Gewichtungsfaktoren (Zahlen)

Für $p_k = \delta_{k,k^0}$ liegt nur der reine Zustand $|\psi_{k^0}\rangle$ vor, ansonsten hat man ein Gemisch

Mittel-wert einer Observable $\hat{A}$ in dem Gemisch:

$$\langle \hat{A} \rangle = \underbrace{\sum_k p_k \underbrace{\langle \psi_k | \hat{A} | \psi_k \rangle}_{\text{quantenmechan. Erwartungswert}}}_{\text{statistische Mittelwert}} \quad (\text{falls } |\psi_k\rangle \text{ normiert})$$

Einschieben einer $\hat{1}$

$$= \sum_{k,l} p_k \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_l \rangle \langle \psi_l | \psi_k \rangle$$

$$= \sum_l \langle \psi_l | \sum_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k | p_k \hat{A} | \psi_l \rangle$$

$$= \sum_l \langle \psi_l | \hat{\rho} \hat{A} | \psi_l \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho} \hat{A}$$

„Trace" (Spur)

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

Die genaue Form von $\hat{\rho}$ hängt vom betrachteten statistischen Ensemble ab!!

(nehme hier thermodyn. Gleichgewicht an: $\hat{\rho}$ zeitunabhängig)

Spezialisiere hier auf großkanonische Ensemble

$\Longleftrightarrow T, V, \mu$

Temperatur, Volumen, chemisches Potential

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

$\sim GK$

$$\text{mit } Z_{GK} = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

großkanonische Zustandssumme

Ziel nun: Berechne der mittleren Besetzungszahl eines Einteilchenzustands α für Bosonen und Fermionen (keine Wechselwirkungen!)

Hamiltonian:
$$\hat{H} = \hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\left(\frac{p_i^2}{2m} + V(r_i)\right)}_{H^{(i)}}$$

es gelte: $\hat{H}^{(i)}|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle$ gelöst!

$\Rightarrow$ 2. Quantisierung: $\hat{H} = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha$

mittlere Besetzungszahl

$$\langle \hat{n}_\alpha \rangle = \langle \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\, \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha$$
$$= \frac{1}{Z_{GK}} \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha$$

Benutze folgende Formel (Baker-Campbell-Hausdorff Formel)
$\rightarrow$ Übung

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

setze hier $\hat{A} = -\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})$
$\hat{B} = \hat{a}_\alpha^+$

benutze $\hat{A} = -\beta\Big(\underbrace{\sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha}_{\hat{H}} - \mu \underbrace{\sum_\alpha \overbrace{\hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha}^{\hat{n}_\alpha}}_{\hat{N}}\Big)$

$$\Rightarrow [\hat{A},\hat{B}] = -\beta\sum_\gamma(\varepsilon_\gamma - \mu)\underbrace{[\hat{a}_\gamma^+\hat{a}_\gamma, \hat{a}_\alpha^+]}_{\delta_{\gamma\alpha}\hat{a}_\alpha^+}$$

sowohl für Bosonen als auch für Fermionen!

$$\Rightarrow [\hat{A},\hat{B}] = \underbrace{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}_{p_\alpha}\underbrace{\hat{a}_\alpha^+}_{\hat{B}} \equiv p_\alpha\hat{B}$$

Zahl

also
$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + p_\alpha\hat{B} + \frac{1}{2!}\underbrace{[\hat{A}, p_\alpha\hat{B}]}_{p_\alpha^2\hat{B}} + \ldots$$
$$= \hat{B}\left(1 + p_\alpha + \frac{1}{2!}p_\alpha^2 + \ldots\right) = \hat{B}e^{p_\alpha} \quad \Big| \cdot e^{\hat{A}} \text{ von rechts}$$

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

Einsetzen der expliziten Ausdrücke

$$e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{a}_\alpha^+ = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}\hat{a}_\alpha^+ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \quad (*)$$

Einsetzen in Ausdruck für $\langle\hat{n}_\alpha\rangle$

$$\langle\hat{n}_\alpha\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\,\hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\alpha = \frac{1}{Z_{GK}}\mathrm{Tr}\,e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\alpha$$

$$= \frac{1}{Z_{GK}}\underbrace{e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}}_{\text{Zahl!}}\mathrm{Tr}\,\hat{a}_\alpha^+ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{a}_\alpha$$

Zykl. Invarianz der Spur

$$= \frac{1}{Z_{GK}}e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}\mathrm{Tr}\,\hat{a}_\alpha\hat{a}_\alpha^+ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}$$

$$\boxed{[\hat{a}_\alpha,\hat{a}_\alpha^+]_\pm = 1}$$

$$= e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\underbrace{\hat{a}_\alpha\hat{a}_\alpha^+}_{1\pm\hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\alpha}$$

$$= e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}\left(\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} \pm \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\,\hat{a}_\alpha^+\hat{a}_\alpha\right)$$

$$\langle n_\alpha\rangle = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha-\mu)}\left(1 \pm \langle n_\alpha\rangle\right)$$

Durch Verwendung der Kommutatorrelation haben wir also $\langle n_\alpha\rangle$ auf der rechten Seite "reproduziert"!!

Auflösen nach $\langle n_\alpha \rangle$:

$$\langle n_\alpha \rangle \left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}\right) = e^{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle n_\alpha \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)} \mp 1}}$$

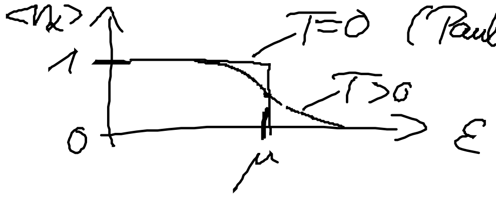
oberes Vorzeichen: Bosonen
unteres " : Fermionen

Bose-Einstein bzw. Fermi-Dirac Statistik!

Bekanntes Ergebnis aus der Quantenstatistik!

Bemerkungen:

- Für Fermionen erhält man die bekannte Fermifunktion.



- Bosonen: Nenner in der Verteilung kann Null werden
  $\Rightarrow$ Bose-Einstein-Kondensation