

Feldoperatoren (spezielle Darstellung von Erzeugnis- und Vernichtungsoperatoren)

$$\hat{\psi}^+(\underline{r}) = \sum_{\mu} \underbrace{\psi_{\mu}^+(\underline{r})}_{\langle \mu | \underline{r} \rangle} \hat{a}_{\mu}^{\dagger}$$

erzeugt ein Teilchen an der Stelle  $\underline{r}$

analog  $\hat{\psi}(\underline{r})$

Darstellung von Hamiltonoperatoren.

Ein-Teilchen-Operatoren:  
(Beispiel)

$$\sum_{i=1}^N V(\underline{r}_i) = \dots = \int d\underline{r} \hat{\psi}^+(\underline{r}) V(\underline{r}) \hat{\psi}(\underline{r})$$

↑  
externe Potentiale

erinnert an quantenmechanische Erwartungswert in Ortsdarstellung, mit Ersetzung der Wellenfunktion durch Feldoperatoren  
illustriert Teilchencharakter des Wellenfeldes!

→ Z-Quantisierung

Zweikörper-Operatoren:

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

$$= \dots = \frac{1}{2} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \hat{\psi}^+(\underline{r}) \hat{\psi}^+(\underline{r}') V(\underline{r}, \underline{r}') \hat{\psi}(\underline{r}) \hat{\psi}(\underline{r}')$$

$\hat{\psi}(\underline{r}) \hat{\psi}(\underline{r}')$

### Berücksichtigung des Spins

Bisher haben wir den Spin weggelassen.

- einfachste Möglichkeit: man kann sich den Spin als eingeschlossen in die Ortsvariable denken

$$\dots(\underline{r}) \longrightarrow \dots(\underline{r}, \sigma)$$

- explizit:

ersetze  $\hat{\psi}(\underline{r}) \rightarrow \hat{\psi}_{\sigma}(\underline{r})$  Variante eines Teilchens am Ort  $\underline{r}$  mit Spin  $\sigma$

und summiere zusätzlich über den Spin!

Beispiel: Teilchendichtedichte

klassisch:  $\hat{n}(\underline{r}) = \hat{\psi}^{\dagger}(\underline{r}) \hat{\psi}(\underline{r})$

jetzt:  $\hat{n}(\underline{r}) = \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\underline{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\underline{r})$

Vertauschungselemente

$$[\hat{\varphi}_G(x), \hat{\varphi}_G^+(x')] = \delta(x-x') \delta_G^1$$

Allgemeine Operatoren in Zweiter Quantisierung mit Spin

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

falls  $\hat{H}_1^{(i)}$  spininvariant (z.B. nur kinetische Energie)

$$\langle \lambda G | \hat{H}_1^{(i)} | \mu G' \rangle = \langle \lambda | \hat{H}_1^{(i)} | \mu \rangle \langle G | G' \rangle$$

Annahme: Faktorisiert in Anteil, der von  $\lambda$  bzw.  $\mu$  abhängt und Spinanteil!

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

analog bei Zweiteilchenoperatoren!

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

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

vereinfacht sich, wenn  $V$  spininvariant (Coulomb-Wechselwirkung)

$$\left( \hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \sum_{G, G'} \langle \lambda\mu | V | \nu\sigma \rangle \hat{a}_{\lambda G}^+ \hat{a}_{\mu G'}^+ \hat{a}_{\nu G} \hat{a}_{\sigma G'} \right)$$

## 5) Impulsdarstellung

Besonders nützliche Darstellung für translationsinvariante Systeme!

- externes Potential (falls überhaupt vorhanden), ist konstant  
 $V(\underline{r}_i) = V_0$

- Wechselwirkungen

$$V(\underline{r}_i, \underline{r}_j) \stackrel{!}{=} V(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$$

Relativität

Vorbereitung:

Betrachte Box mit Volumen  $\tilde{V} = L_x L_y L_z$

Die Einheitsnorm-Eigenzustände (im wechselwirkungsfreien Fall) sind:

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

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

$\hat{=}$  Eigenzustände des Impulsoperators

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

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

(falls  $\underline{k} \parallel \underline{x}$ )

Die Eigenzustände  $|\underline{k}\rangle$  sind orthonormal:

$$\begin{aligned} \langle \underline{k}' | \underline{k} \rangle &\stackrel{\text{siehe Abschn. 4.1}}{=} \int_{\tilde{V}} d\underline{r} \langle \underline{r}' | \underline{k}' \rangle \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle = \frac{1}{\tilde{V}} \int_{\tilde{V}} d\underline{r} e^{i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{r}} \\ &= \int_{\tilde{V}} d\underline{r} \varphi_{\underline{k}'}^*(\underline{r}) \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) \\ &= \delta_{\underline{k}, \underline{k}'} \end{aligned}$$

Benutze diese Eigenzustände nun

Zur Darstellung von  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12}$

in 2. Quantisierung!

(d.h.  $\mu, \lambda \rightarrow \underline{k}, \underline{k}'$ )

Einzelteilchenbeitrag:

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m}$$

(Setze externes Potential zunächst gleich Null!)

2. Quantisierung: (hier ohne Spin)

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

Ansammlung des Matrixelements ist Ortsdarstellung

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

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

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

$\hat{n}_{\underline{k}}$  ——— Bedeutung: Wigner zu (diskrete!) Quasikristalle  $\underline{k}$

$$\Rightarrow \hat{H}_1 = \sum_{\underline{k}} \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} \hat{n}_{\underline{k}}$$

Falls ein (homogenes!) externes Potential anwesend ist.

$$V(\underline{r}_i) = V_0$$

in diesem Fall gilt:  $\langle \underline{k} | V | \underline{k}' \rangle = V_0 \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$

entsprechender Anteil zu  $\hat{H}_1$ :

$$\begin{aligned} \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} V_0 \delta_{\underline{k}, \underline{k}'} \hat{a}_{\underline{k}'}^+ \hat{a}_{\underline{k}} &= \sum_{\underline{k}} V_0 \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{k}} \\ &= V_0 \sum_{\underline{k}} \underbrace{\hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{k}}}_{\hat{n}_{\underline{k}}} \\ &= V_0 \hat{N} \end{aligned}$$

mit  $\hat{N} = \sum_{\underline{k}} \hat{n}_{\underline{k}}$   
 (Teilchenzahloperator)

Zweitteilchenoperator in Impulsdarstellung:

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} V(\underline{k}_i - \underline{k}_j) \quad \text{Relativvelke!}$$

2. Quantisten: (hier ohne Spin)

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\underline{k}, \underline{k}', \underline{q}, \underline{q}'} \langle \underline{k}, \underline{q} | V | \underline{k}', \underline{q}' \rangle \hat{a}_{\underline{k}}^+ \hat{a}_{\underline{q}}^+ \hat{a}_{\underline{k}'} \hat{a}_{\underline{q}'}$$

Matrixelement wieder auswerten in Ortsdarstellung.

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

bessere Formdarstellung der Wechselwirkung:

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

nur eine Summe, da  $V$  nur von Relativvelke abhängt  
 (Translationsinvarianz!)

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

Einsetzen in (4)

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

## II.5. <sup>Einführung</sup> Anwendung des Formalismus der 2. Quantisierung: Fermi- und Bosestatistik

Erinnerung: quantenmechanische Dichtegemittel (Statistisches Gemittel)

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

Index, der über die indizierten reellen Zustände läuft (kein Wellenvektor!)

$|\psi_{\mu}\rangle$ : "reiner" Zustand eines quantenmechan. Ein- bzw. Vielteilchensystems,  $|\psi_{\mu}\rangle \in \mathcal{H}$  Fall

(z.B. diskrete Systeme)

mit  $\sum_{\mu} p_{\mu} = 1$  — Gemischtzustand

Für  $p_{\mu} = \delta_{\mu, \mu_0}$  liegt nur der reine Zustand  $|\psi_{\mu_0}\rangle$  vor, ansonsten hat man ein "Gemisch".

Erwartungswert einer Observable  $\hat{A}$  im Gemisch

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

(Annahme:  $|\psi_{\mu}\rangle$  orthonormal)

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

Einschränkung  $\mathcal{I} = \sum_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle \langle \psi_{\mu}|$

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

$p_{\mu}$  ist einfach eine Zahl (reell!)

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

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

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

(Spur ("Trace"))

Spur ist unabhängig von der Basis

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{A}$$

es gilt:  $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$ ,  $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ , i.A.  $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$

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

Spezialisiere hier auf grandkanon. Ensemble:  $T, V, \mu$  fest  
 ↑ ↑ ↙  
 Temperatur Volumen chemisches Potential

Teilchenzahl  $N$  fluktuiert!

Zugehörige Dichtegradienten (Herleitung durch Maximierung der Shannon-Entropie)

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

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

$\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $\hat{H}$  Hamiltonoperator  
 ↳ Boltzmannkonstante  $\hat{N}$  Teilchenzahloperator

Ziel nun:

Berechnung der mittleren (chemisch gemittelten) Besetzungszahl eines Einpartikularzustand für Bosonen bzw. Fermionen

Betrachte wechselwirkungsfreie Teilchen (identisch!)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}^{(i)} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(x_i)$$

mit  $\hat{H}^{(i)} |\alpha\rangle = \epsilon_\alpha |\alpha\rangle$  <sup>Eigenwert</sup> <sup>Eigenzustand</sup> gleich für alle Teilchen!

⇒ 2. Ansatz:  $\hat{H} = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}$

Zu berechnen:

mittlere Besetzungszahl :

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

mit  $\hat{H} = \sum_{\alpha'} \epsilon_{\alpha'} \hat{a}_{\alpha'}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha'}$  ,  $N = \sum_{\alpha'} \hat{a}_{\alpha'}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha'}$

Baker-Campbell-Hausdorff Formel

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

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] &= -\beta \sum_{\gamma} (\epsilon_{\gamma} - \mu) \underbrace{[\hat{a}_{\gamma}^{\dagger} \hat{a}_{\gamma}, \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}]}_{\delta_{\gamma\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}} \\ &= \underbrace{-\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)}_{\beta\epsilon_{\alpha}} \underbrace{\hat{a}_{\alpha}^{\dagger}}_{\hat{B}} = \beta\epsilon_{\alpha} \hat{B} \end{aligned}$$

für Bosonen  
und Fermionen!

$$\Rightarrow e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} e^{\beta\epsilon_{\alpha}} = e^{\beta\epsilon_{\alpha}} \hat{B}$$

$$\Rightarrow e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} = e^{-\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)}$$

Einsetzen in den Ausdruck für  $\langle n_{\alpha} \rangle$

$$\hookrightarrow \text{Tr} \hat{\rho} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}$$

Rest nächste VL!

Zentraler Schritt:  
 Vertauschungsregeln für  
 Bosonen, Fermionen!