Feldoperatoren (spezielle Darstellung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren)

$$\hat{\psi}^+(\underline{r}) = \sum_\mu \underbrace{\varphi^*_\mu(\underline{r})}_{\langle\mu|\underline{r}\rangle} \hat{a}^+_\mu$$ erzeugt ein Teilchen an der Stelle $\underline{r}$

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

Darstellung von Hamiltonoperatoren.

Ein-Teilchen-Operator: (Beispiel)

externes Potential

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

erinnert an quantenmechanischen Erwartungswert in Ortsdarstellung, mit Ersetzung der Wellenfunktionen durch Feldoperatoren

illustriert Teilchencharakter des Wellenfeldes!

$\rightarrow$ 2.-Quantisierung

Zweiteilchen-Operatoren.

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

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

Berücksichtigung des Spins

Bisher haben wir den Spin weggelassen.

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

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

- explizit: ersetze $\hat{\psi}(\underline{r}) \rightarrow \hat{\psi}_\sigma(\underline{r})$ Vernichter eines Teilchens am Ort $\underline{r}$ mit Spin σ

und summiere zusätzlich über den Spin!

Beispiel: Teilchenzahldichte

bisher: $\hat{n}(\underline{r}) = \hat{\psi}^+(\underline{r})\, \hat{\psi}(\underline{r})$

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

Vertauschungsrelation

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

Allgemeine Operatoren in Zweiter 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 $\hat{H}_1^{(i)}$ spinunabhängig (z.B. nur kinetische Energie)

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

Annahme: faktorisiert in Anteil, der von λ bzw. μ abhängt und Spinanteil!

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

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

analog bei Zweiteilchenoperatoren!

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

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

vereinfacht sich, wenn V spinunabhängig (Coulomb-Wechselwirkung)

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

5) Impulsdarstellung

Besonders nützliche Darstellung für translationsinvariante Systeme!

- externes Potential (falls überhaupt vorhanden), ist konstant $V^{\text{extern}}(\underline{r}_i) = V_0$
- Wechselwirkungen
  $$V(\underline{r}_i, \underline{r}_j) \overset{!}{=} \underbrace{V(\underline{r}_i - \underline{r}_j)}_{\text{Relativvektor}}$$

Vorbereitung:

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

Die Einteilchen-Eigenzustände (im wechselwirkungsfreien Fall) sind:

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

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

$\hat{=}$ Eigenzustände des Impulsoperators

mit $\underline{k} = 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right)$ $\quad n_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ $\quad \alpha = x, y, z$

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

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

Die Eigenzustände $|\underline{k}\rangle$ sind orthonormiert.

$$\langle \underline{k}' | \underline{k} \rangle \overset{\text{Schiebe Ortsbasis ein}}{=} \int d\underline{r}\, \langle \underline{k}' | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \underline{k} \rangle = \frac{1}{\tilde{V}} \int d\underline{r}\, e^{i(\underline{k} - \underline{k}')\cdot\underline{r}}$$
$$= \int d\underline{r}\, \varphi^*_{\underline{k}'}(\underline{r}) \varphi_{\underline{k}}(\underline{r})$$
$$= \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$$

Benutze diese Eigenzustände nun zur Darstellung von $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12}$ in 2. Quantisierung! (d.h. $\mu, \lambda \rightarrow \underline{k}, \underline{k}'$)

Einteilchenbeitrag:

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

(setze externes Potential zunächst gleich Null!)

2. Quantisierung: (hier ohne Spin)

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

Auswertung des Matrixelements in Ortsdarstellung

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

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

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

$\hat{n}_{\underline{k}}$ — Besetzungszahloperator zu (diskreter!) Quantenzahl $\underline{k}$

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

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 $\hat{H}_1$:

$$\sum_{\underline{k},\underline{k}'} V_0 \delta_{\underline{k},\underline{k}'} \hat{a}^+_{\underline{k}'} \hat{a}_{\underline{k}} = \sum_{\underline{k}} V_0 \hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}$$

$$= V_0 \sum_{\underline{k}} \underbrace{\hat{a}^+_{\underline{k}} \hat{a}_{\underline{k}}}_{\hat{n}_{\underline{k}}}$$

$$= V_0 \hat{N}$$

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

Teilchenzahloperator

Zweiteilchenoperator in Impulsdarstellung:

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

Relativvektor!

2. Quantisieren (hier ohne Spin)

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

Matrixelement wieder auswerten in Ortsdarstellung.

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

benutze Fourierdarstellung der Wechselwirkung:

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

nur eine Summe, da V nur vom Relativvektor abhängt (Translationsinvarianz!)

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

Einsetzen in (*)

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

II. 5. Einfache Anwendung des Formalismus der 2. Quantisierung: Fermi- und Bosestatistik

Erinnerung: quantenmechanischer Dichteoperator (statistischer Operator)

$$\hat{\rho} = \sum_{n} p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

Index, der über die involvierten reinen Zustände läuft (kein Wellenvektor!)

$|\psi_n\rangle$: "reiner" Zustand eines quantenmechan. Ein- bzw. Vielteilchensystems, $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}^{Fock}$

(z.B. diskrete Systeme)

mit $\sum_{n} p_n = 1$ Gewichtungsfaktoren

Für $p_n = \delta_{n,n_0}$ liegt nur der reine Zustand $|\psi_{n_0}\rangle$ vor, ansonsten hat man ein "Gemisch"

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

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_{n} p_n \langle\psi_n|\hat{A}|\psi_n\rangle$$

(Annahme: $|\psi_n\rangle$ normiert)

$$= \sum_{n,l} p_n \langle\psi_n|\hat{A}|\psi_l\rangle\langle\psi_l|\psi_n\rangle$$

Einschieben $1 = \sum_{l} |\psi_l\rangle\langle\psi_l|$

$$= \sum_{n,l} \langle\psi_l|\psi_n\rangle\, p_n \langle\psi_n|\hat{A}|\psi_l\rangle$$

p_n ist einfach eine Zahl (reell!)

$$= \sum_{n,l} \langle\psi_l|\psi_n\rangle\langle\psi_n|p_n\hat{A}|\psi_l\rangle$$

$$= \langle\psi_l|\underbrace{\sum_{n}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|p_n}_{\hat{\rho}}\hat{A}|\psi_l\rangle$$

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

Spur ("Trace")

Spur ist unabhängig von der Basis

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

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

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

Spezialisiere hier auf großkanon. Ensemble : T , V , μ fest

Temperatur

Volumen

chemisches Potential

Teilchenzahl N fluktuiert!

Zugehöriger Dichteoperator (Herleitung durch Maximierung der Shannon-Entropie)

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

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

grosskanonische Zustandssumme

$\beta = \frac{1}{k_B T}$, $\hat{H}$ Hamiltonoperator

Boltzmann-Konstante

$\hat{N}$ Teilchenzahloperator

Ziel nun:

Berechnung der mittleren (thermisch gemittelten) Besetzungszahl eines Einteilchenzustands für Bosonen bzw. Fermionen

Betrachte wechselwirkungsfreie Teilchen (identisch!)

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

Eigenwerte

Eigenzustände

mit $\hat{H}^{(i)} |\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle$ gleich für alle Teilchen!

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

Zu berechnen:

mittlere Besetzungszahl:

$$\langle \hat{n}_\alpha \rangle = \langle \hat{a}^+_\alpha \hat{a}_\alpha \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\, \hat{a}^+_\alpha \hat{a}_\alpha$$

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

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

Baker-Campbell-Hausdorff Formel

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

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

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

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

für Bosonen und Fermionen!

$$= \underbrace{-\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)}_{\beta_\alpha} \underbrace{\hat{a}^+_\alpha}_{\hat{B}} = \beta_\alpha \hat{B}$$

$$\Longrightarrow e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} e^{\beta_\alpha} = e^{\beta_\alpha} \hat{B}$$

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

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

$\llcorner \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}\, \hat{a}^+_\alpha \hat{a}_\alpha$

Rest nächste VL!

$\boxed{\text{Zentraler Schritt: Vertauschungsregeln für Erzeuger, Vernichter!}}$