

Quantenmechanik II

A. Lichtenstein @ physnet.uni-hamburg.de

Inhaltsverzeichnis

- 1) Vielteilchensysteme & 2. Quantisierung
- 2) Zeitabhängige Störungstheorie
- 3) Atome und Periodensystem
- 4) Moleküle und chemische Bindung
- 5) Relativistische Quantenmechanik
 - Klein-Gordon-Gleichung (Bosonen)
 - Dirac-Gleichung (Fermionen)
- 6) Pfadintegral & QFT

Literatur

- F. Schwabl, "Quantenmechanik für Fortgeschrittene - QM2" Springer
- G. Baym, "Lectures on Quantum Mechanics", Benjamin
- W. Nolting, "Grundkurs: TP, QM II" 5.2, Springer
- H. Bethe & R. Jachiv, "Intermediate Quantum Mechanics", Benjamin

http://theorie.physnet.uni-hamburg.de/group-magno/qm2_11.php

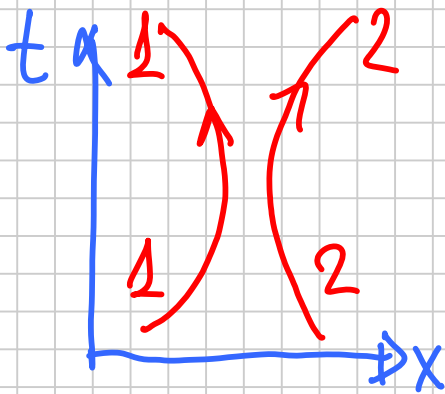
1. Vielteilchensysteme

1.1 Identische Teilchen - Fermionen & Bosonen

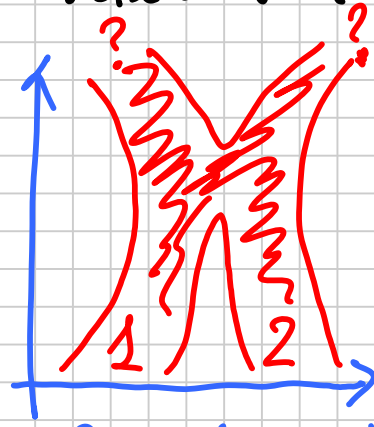
QM-I: 1-Teilchen-Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Vielteilchen-Problem: "identische" Teilchen



Klassisch



Quantenmechanisch

- immer unterscheidbar ($\ll 10^{23}!$) - vollkommen ununterscheidbar!

$\hat{H}$ - symmetrisch in Teilchenkoordinaten

$$\hat{H}(1,2,\dots,N) = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_i V(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

$$|1\rangle \equiv |\vec{r}_1, \sigma_1\rangle$$

Kinetische
Energie

Poten-
tielle
Energie

WW
Wechselwirkung

Wellenfunktion:

$$\psi(1,2,\dots,N) = \langle 1,2,\dots,N | \psi \rangle$$

Orts-
darstellung

Permutationsoperator: $\hat{P}_{ij}$ - vertauscht $i \leftrightarrow j$

$$\hat{P}_{ij} \psi(1,2,\dots,i,\dots,j,\dots,N) = \psi(1,2,\dots,j,\dots,i,\dots,N)$$

Eigenschaften von $\hat{P}_{ij}$:

- $\hat{P}_{ij} \in S_N$ Element der Permutationsgruppe S_N
- mit $N!$ - Elementen

- Wirkung von $\hat{P}_{ij}$ auf Operatoren $\hat{A}(1, \dots, N)$
 $\hat{P}_{ij} \hat{A}(1 \dots i \dots j \dots N) \hat{P}_{ij}^{-1} \stackrel{pt}{=} \hat{A}(1 \dots j \dots i \dots N)$

- $(\hat{P}_{ij})^{-1} = \hat{P}_{ij}^+$ und $\hat{P}^+ \hat{P} = \hat{1}$ - Unitär

- Hamilton-Operator - symmetrisch unter $\hat{P}_{ij} \Rightarrow$

$$[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0, \text{ für } 1 \leq i, j \leq N$$

- für $\forall$ stationären Zustände $|\psi\rangle$ $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$$\hat{H} \hat{P}_{ij} |\psi\rangle = \hat{P}_{ij} \hat{H} |\psi\rangle = E \hat{P}_{ij} |\psi\rangle$$

$|\psi\rangle$ - ist Eigenzustand von $\hat{P}_{ij}$

- Eigenwerte von $\hat{P}_{ij}$

$$\hat{P}_{ij}^2 = 1 \Rightarrow$$

E.V. $\hat{P}_{ij} = \pm 1 \rightarrow$ Symmetrisch
 $\rightarrow$ antisymm. Zustände

Beispiel: $N=3$ $\hat{P}$

abc - 1
bac - $\hat{P}_{12}$
bca - $\hat{P}_{123} = \hat{P}_{12} \cdot \hat{P}_{13}$
acb - $\hat{P}_{23}$
cab - $\hat{P}_{132}$
cba - $\hat{P}_{13}$

$$N! = 3! = 6$$

$$\begin{aligned} \hat{P}_{123} \psi(123) &= \psi(231) \\ \hat{P}_{12} \hat{P}_{13} \psi(123) &= \hat{P}_{12} \psi(321) = \psi(231) \\ \hat{P}_{13} \hat{P}_{12} \psi(123) &= \hat{P}_{13} \psi(231) = \psi(312) \end{aligned}$$

Beispiel: 2 identische Teilchen ($N=2$)

a) Symmetrische $|\psi_s\rangle$

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(1,2) + \psi(2,1)] \quad \text{mit} \quad \hat{P}_{12} \psi_s(1,2) = +\psi_s(1,2)$$

b) Antisymmetrische $|\psi_a\rangle$

$$\psi_a(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(1,2) - \psi(2,1)] \quad \text{mit} \quad \hat{P}_{12} \psi_a(1,2) = -\psi_a(1,2)$$

Man findet empirisch, dass $\forall$ Teilchen -

nur symmetrische $|\psi\rangle$ (mit Spin = 0, 1, 2, ... - Bosonen)

oder
nur antisymmetrische $|\psi\rangle$ (mit Spin = $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ - Fermionen)
haben

Teilchenart	ψ	Spin	Beispiel
Bosonen	Symmetrisch	0, 1, 2, ...	$\gamma, \alpha, \pi, \dots$
Fermionen	antisymmetrisch	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$	$e, p, n, \dots$

Für $\forall \psi$ - N Teilchen:

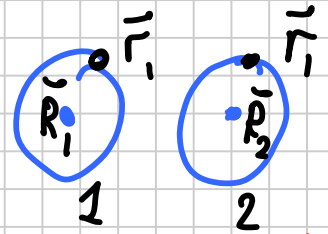
$$\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \begin{cases} +\psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) & \text{- Bosonen} \\ -\psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) & \text{- Fermionen} \end{cases}$$

Zusammengesetzte Teilchen:

$$S_{\text{tot}} = \begin{cases} \text{ganzzahlig} \Rightarrow \text{Bosonen} & - {}^4\text{He} : 2p 2n 2e \\ \text{halbzahlig} \Rightarrow \text{Fermionen} & - {}^3\text{He} : 2p 1n 2e \end{cases}$$

Beispiel: 2 identische Teilchen -

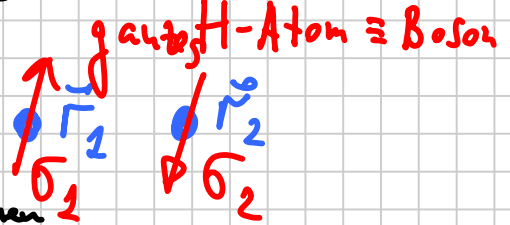
a) 2 Wasserstoff-Atome



$$\psi(1,2) \equiv \psi(\vec{r}_1, \vec{R}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_2) = \left\{ \text{kein Spin: } \vec{r} \otimes \vec{R} ! \right\}$$

$$= -\psi(\vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{r}_1, \vec{R}_2) = -\psi(\vec{r}_1, \vec{R}_2, \vec{r}_2, \vec{R}_1) = \psi(\vec{r}_2, \vec{R}_2, \vec{r}_1, \vec{R}_1)$$

b) 2 Fermionen mit Spin = $\frac{1}{2}$



$|\psi\rangle$ hat einen Orbital (f)- und Spin (χ)-Anteil

$$\psi(1,2) \equiv \psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2)$$

Zwei Spin = $\frac{1}{2}$ -Teilchen $\Rightarrow S_{tot} = 0$ und $S_{tot} = 1$

Singulett ($S=0$)

$$\chi_0(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \chi_0(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi_0(\sigma_2, \sigma_1) & - \text{As.} ! \\ f_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = +f_0(\vec{r}_2, \vec{r}_1) & - \text{S.} ! \end{cases}$$

Triplet ($S=1$)

$$\chi_{1\mu} = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \chi_{1\mu}(\sigma_1, \sigma_2) = +\chi_{1\mu}(\sigma_2, \sigma_1) & - \text{S.} ! \\ f_{1\mu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -f_{1\mu}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) & - \text{As.} ! \end{cases}$$

Pauli-Prinzip: Zwei identische Fermionen i und j können sich NICHT im gleichen Zustand befinden!

$$\psi_F(\dots i, j \dots) = -\psi_F(\dots j, i, \dots)$$

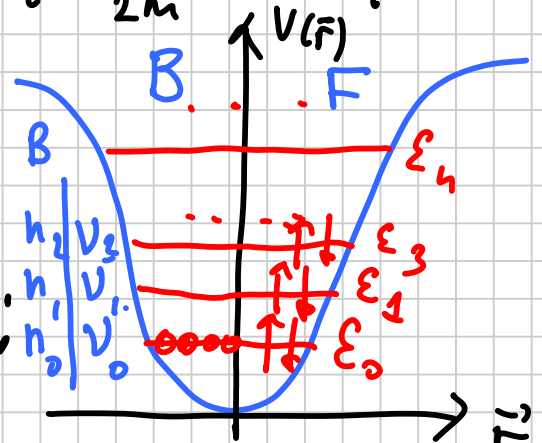
Für $|i\rangle = |j\rangle \Rightarrow \psi_F(\dots i, i, \dots) = 0$

1.2 Zustände nicht-wechselwirkender identischer Teilchen

Ein System N unabhängiger identischer Teilchen:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i \quad \text{mit} \quad \hat{h}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i)$$

V - ein Potentialtopf:



$|\psi\rangle \equiv$ Produkt-Hilbertraum;

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Leftrightarrow \hat{h}_i \psi_v(\vec{r}_i, \sigma_i) = \epsilon_v \psi_v(\vec{r}_i, \sigma_i)$$

$$\begin{cases} \Psi(\vec{r}_1, \sigma_1; \dots, \vec{r}_N, \sigma_N) = \prod_{i=1}^N \psi_{v_i}(\vec{r}_i, \sigma_i) \\ E = \sum_{i=1}^N \epsilon_{v_i} \end{cases} \quad \begin{array}{l} \{\psi_v\}\text{-VONS} \\ \text{- Separationsansatz} \end{array}$$

Bosonen:

$$\hat{\Psi}_B(1, \dots, N) = \sum_{\hat{P} \in S_N} \hat{P} \{ \psi_{v_1}(\vec{r}_1, \sigma_1) \cdot \dots \cdot \psi_{v_N}(\vec{r}_N, \sigma_N) \}$$

Fermionen:

$$\hat{\Psi}_F(1, \dots, N) = \sum_{\hat{P} \in S_N} (-1)^P \hat{P} \{ \psi_{v_1}(\vec{r}_1, \sigma_1) \cdot \dots \cdot \psi_{v_N}(\vec{r}_N, \sigma_N) \}$$

mit: $(-1)^P = \begin{cases} +1, & \text{für gerade } \hat{P} \\ -1, & \text{für ungerade } \hat{P} \end{cases}$ (= Anzahl an Paarvertauschungen)

Ψ_F = Slater-Determinante:

$$\Psi_F(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{v_1}(1) & \dots & \psi_{v_1}(N) \\ \psi_{v_2}(1) & \dots & \psi_{v_2}(N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{v_N}(1) & \dots & \psi_{v_N}(N) \end{vmatrix}$$

Pauli:
 $v_i = v_j$
 $\Rightarrow \Psi_F = 0$

Norm:

$$\langle \Psi_F | \Psi_F \rangle = N!$$

und

$$\langle \Psi_B | \Psi_B \rangle = \frac{N!}{n_1! \dots n_N!}$$

wobei n_{v_i} die Zahl der Teilchen im Zustand $|v_i\rangle$ ist.

Grundzustand

B: $\Psi_B^0(1, \dots, N) = \psi_0(1) \cdots \psi_0(N), \quad E_0 = N\varepsilon_0$

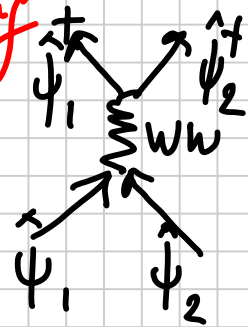
F:
$$E = \begin{cases} 2 \sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_i & - N \text{-gerade} \\ 2 \sum_{i=1}^{(N-1)/2} \varepsilon_i + \varepsilon_{\frac{N+1}{2}} & - N \text{-ungerade} \end{cases}$$



1.3 Formalismus der zweiten Quantisierung

$$H(p, q) \xrightarrow{1Q} \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) \xrightarrow{2Q} \hat{\psi}, \hat{\psi}^\dagger$$

$\hat{H}\psi = E\psi$



Besetzungszahl-Darstellung: $|\Psi\rangle = |n_{v_1}, \dots, n_{v_n}\rangle$

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

a) Spinlose Bosonen

$|\Psi_v\rangle \rightarrow |n_v\rangle$ Einteilchen-Zustand (VONS)

Wir definieren die Operatoren $\hat{a}_v, \hat{a}_v^\dagger$ mit den Eigenschaften:

$$\hat{a}_v |n_v\rangle = \sqrt{n_v} |n_v - 1\rangle \quad \text{-- Vernichtungsoperator}$$

$$\hat{a}_v^\dagger |n_v\rangle = \sqrt{n_v + 1} |n_v + 1\rangle \quad \text{-- Erzeugungsoperator}$$

Ferner gilt:

$$\langle n_v | \hat{a}_v^\dagger = \sqrt{n_v} \langle n_v - 1 |$$

$$\langle n_v | \hat{a}_v = \sqrt{n_v + 1} \langle n_v + 1 |$$

Mit diesen Operatoren ändern wir die Zahl der Bosonen in einem Zustand $|v\rangle$

Wir führen das Vakuum $|0\rangle$ ein:

- den Zustand ohne Teilchen: $\langle 0|0\rangle = 1$

$$\forall v: \hat{a}_v |0\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle 0| \hat{a}_v^\dagger = 0$$

Operatoren mit diesen Eigenschaften müssen die folgende Kommutationbeziehung erfüllen

$$[\hat{a}_v, \hat{a}_v^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}_v, \hat{a}_v] = [\hat{a}_v^\dagger, \hat{a}_v^\dagger] = 0$$

Zustand $|n_v\rangle$:

$$|n_v\rangle = \frac{(\hat{a}_v^\dagger)^{n_v}}{\sqrt{n_v!}} |0\rangle$$

Teilchenzahl-Operator $\hat{n}_v$:

$$\hat{n}_v = \hat{a}_v^\dagger \hat{a}_v$$

mit:

$$\hat{n}_v |n_v\rangle = n_v |n_v\rangle$$

Zustand mit vielen Bosonen: $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$

$$\text{z.B. } |n_1, n_2\rangle \sim \sum_{\hat{P} \in S_{n_1+n_2}} \hat{P} \{ \psi_1(\vec{r}_1) \dots \psi_1(\vec{r}_{n_1}) \psi_2(\vec{r}_{n_1+1}) \dots \psi_2(\vec{r}_{n_1+n_2}) \}$$

2. Quant.

$$|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \left\{ \dots \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \dots \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \right\} |0\rangle$$

Die allgemeine Formulierung:

$$\hat{a}_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1 \dots (n_i-1) \dots\rangle$$

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1 \dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i+1} |n_1 \dots (n_i+1) \dots\rangle$$

ferner:

$$\langle n_1 \dots n_i \dots | \hat{a}_i^\dagger = \sqrt{n_i} \langle n_1 \dots (n_i-1) \dots |$$

$$\langle n_1 \dots n_i \dots | \hat{a}_i = \sqrt{n_i+1} \langle n_1 \dots (n_i+1) \dots |$$

Vertauschungsregeln:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0$$

Teilchenzahl-operator:

$$\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

mit:

$$\hat{N} |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \left(\sum_i n_i\right) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$$

b) Fermionen mit $S = \frac{1}{2}$

Pauli-Prinzip: $n_i = \{0, 1\}$

Einteilchenzustand $|n\rangle = \{|0\rangle, |1\rangle\}$ Hilbert-Raum

Erzeugungs- ($\hat{a}_\mu$) und Vernichtungs- ($\hat{a}_\mu^\dagger$) Operatoren:

$$\hat{a}_\mu |0\rangle = 0, \quad \hat{a}_\mu |1\rangle = |0\rangle$$

$$\hat{a}_\mu^\dagger |0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{a}_\mu^\dagger |1\rangle = 0 \quad \leftarrow \text{Pauli!}$$

in Basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$: $\hat{a}_\mu = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ und $\hat{a}_\mu^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Antikommutationsrelationen:

$$\{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\mu^\dagger\} = 1 \quad \text{und} \quad \{\hat{a}_\mu, \hat{a}_\mu\} = \{\hat{a}_\mu^\dagger, \hat{a}_\mu^\dagger\} = 0$$

wobei: $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv [\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

Dann $(\hat{a}_\mu^\dagger)^2 |0\rangle = 0$ d.h. $(\hat{a}_\mu^\dagger)^2 = 0$ und $(\hat{a}_\mu)^2 = 0$

Teilchenzahl - Operator:

$$\hat{n}_\mu = \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu$$

$$\hat{n}_\mu |n_\mu\rangle = n_\mu |n_\mu\rangle \quad \text{mit Eigenwerten } n_\mu = 0, 1$$

Betrachten wir den Fall zweier Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ mit Fermionen des gleichen Spins:

$$|n_1, n_2\rangle = (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} |0\rangle$$

Reihenfolge ist wichtig!

Antikommutationsrelation:

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$$

2 Zustände:

$$\{|n_1, n_2\rangle\} = \{|0, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle\}$$

Es gelten hier folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned} \hat{a}_1^+ |0,0\rangle &= |1,0\rangle, \quad \hat{a}_1^+ |0,1\rangle = -|1,1\rangle, \quad \hat{a}_1^+ |1,0\rangle = 0, \quad \hat{a}_1^+ |1,1\rangle = 0 \\ \hat{a}_1 |0,0\rangle &= 0, \quad \hat{a}_1 |0,1\rangle = 0, \quad \hat{a}_1 |1,0\rangle = |0,0\rangle, \quad \hat{a}_1 |1,1\rangle = -|0,1\rangle \\ \hat{a}_2^+ |0,0\rangle &= |0,1\rangle, \quad \hat{a}_2^+ |0,1\rangle = 0, \quad \hat{a}_2^+ |1,0\rangle = |1,1\rangle, \quad \hat{a}_2^+ |1,1\rangle = 0 \\ \hat{a}_2 |0,0\rangle &= 0, \quad \hat{a}_2 |0,1\rangle = |0,0\rangle, \quad \hat{a}_2 |1,0\rangle = 0, \quad \hat{a}_2 |1,1\rangle = |1,0\rangle \end{aligned}$$

z.B. $\hat{a}_1^+ |0,1\rangle = \hat{a}_1^+ \underbrace{\hat{a}_2^+}_{|0,1\rangle} |0\rangle = -\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^+ |0\rangle = -|1,1\rangle$

$\hat{a}_2^+ |1,0\rangle = \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^+ |0\rangle = |1,1\rangle$

$\{\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+\} = 0 = \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^+$

Beachte die Vorzeichen!

$\rightarrow$	$ 0,0\rangle$	$ 0,1\rangle$	$ 1,0\rangle$	$ 1,1\rangle$
$\hat{a}_1^+$	$ 1,0\rangle$	$- 1,1\rangle$	0	0
$\hat{a}_1$	0	0	$ 0,0\rangle$	$- 0,1\rangle$
$\hat{a}_2^+$	$ 0,1\rangle$	0	$ 1,1\rangle$	0
$\hat{a}_2$	0	$ 0,0\rangle$	0	$ 1,0\rangle$

Vielteilchen-Zustand: (N)

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_N\rangle = (\hat{a}_N^+)^{n_N} \dots (\hat{a}_i^+)^{n_i} \dots (\hat{a}_2^+)^{n_2} (\hat{a}_1^+)^{n_1} |0\rangle$$

mit $\hat{a}_i |0\rangle = 0$ und Anti-Kommutationsregeln!

$(\hat{a}_i^+)^0 = \hat{1}$

Teilchenzahl-Operator:

$$\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

Beispiel: 3 Zustände:

$$\hat{a}_2^\dagger |1, 0, 1\rangle = \hat{a}_2^\dagger (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1^\dagger |0\rangle) = -\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger |0\rangle = -|111\rangle$$

$\underbrace{\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1^\dagger}_{|1, 0, 1\rangle}$

$$\hat{a}_2 |0, 1, 1\rangle = \hat{a}_2 (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2^\dagger |0\rangle) = -\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger |0\rangle = \{a_2, a_2^\dagger\} = 1$$

$\underbrace{\hat{a}_3^\dagger}_{|0, 1, 1\rangle} \quad \underbrace{\hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger}_{\{a_2, a_2^\dagger\} = 1}$

$$= -\hat{a}_3^\dagger (1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) |0\rangle = -|0, 0, 1\rangle$$

$\underbrace{1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2}_{=1}$

Mit Spin: S , $\sigma = -S, -S+1, \dots, S$

$\hat{a}_{\mu\sigma}^\dagger$ ($a_{\mu\sigma}$) – erzeugt (vernichtet) ein Fermion mit spin σ im Eineteilchenzustand μ : $|\mu, \sigma\rangle$

Antikommutationsregeln:

$$\{\hat{a}_{\mu\sigma}, \hat{a}_{\mu'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\{\hat{a}_{\mu\sigma}, a_{\mu'\sigma'}\} = 0$$

$$\{\hat{a}_{\mu\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mu'\sigma'}^\dagger\} = 0$$

1.4 Feldoperatoren

✓ QM-System mit Einteilchen-VONS $\{\psi_i(\vec{r})\}$

Definition der Feldoperatoren:

def:

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_i \psi_i(\vec{r}) \hat{a}_i$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_i \psi_i^*(\vec{r}) \hat{a}_i^\dagger$$

Operator $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$ ($\hat{\psi}(\vec{r})$) erzeugt (vernichtet) ein Teilchen im Ortseigenzustand $|\vec{r}\rangle$

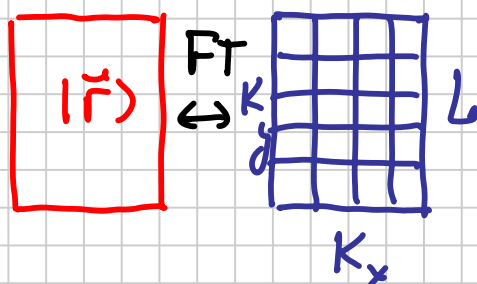
Beispiel - ebene Wellen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

mit $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(k_x, k_y, k_z)$
 $V = L^3$

$$\hat{\psi}_0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{\vec{k}0}$$

$$\hat{\psi}_0^\dagger(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{\vec{k}0}^\dagger$$



Die Feldoperatoren erfüllen die folgenden Kommutationsrel. $\begin{pmatrix} B+ \\ F- \end{pmatrix}$

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')]_{\pm} &= \sum_{ij} \psi_i(\vec{r}) \psi_j^*(\vec{r}') [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_{\pm} \\ &= \sum_{ij} \psi_i(\vec{r}) \psi_j^*(\vec{r}') \delta_{ij} = \sum_i \psi_i(\vec{r}) \psi_i^*(\vec{r}') \stackrel{\text{VONS}}{=} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned}$$

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')]_{\pm} = [\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')]_{\pm} = 0$$

Bosonen	Fermionen
$[\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')] = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'}$	$\{\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\} = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'}$
$[\psi_\sigma(\vec{r}), \psi_{\sigma'}(\vec{r}')] = 0$	$\{\psi_\sigma(\vec{r}), \psi_{\sigma'}(\vec{r}')\} = 0$
$[\psi_\sigma^\dagger(\vec{r}), \psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')] = 0$	$\{\psi_\sigma^\dagger(\vec{r}), \psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\} = 0$

Einteilchenzustand:

$$|\vec{r}\sigma\rangle = \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) |0\rangle \quad \leftarrow \text{Vakuum} \quad \Leftrightarrow \langle \vec{r}\sigma| = \langle 0| \hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$$

dann:

$$\psi_\sigma(\vec{r}) = \langle \vec{r}\sigma | \psi \rangle = \langle 0 | \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) | \psi \rangle$$

Beachte: $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$ ist nicht die Wellenfunktion!

Ferner gilt:

$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) |0\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle 0 | \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) = 0$$

Vielteilchenzustände (in Ortsraum)

$$|\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2, \dots, \vec{r}_N\sigma_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}_{\sigma_N}^\dagger(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) |0\rangle$$

und

$$\langle \vec{r}_1\sigma_1 \dots \vec{r}_N\sigma_N | = \langle 0 | \hat{\psi}_{\sigma_1}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}_{\sigma_N}(\vec{r}_N) \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

Mit den Vertauschungsrelationen der $\hat{\psi}^\dagger$:

$$|\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2, \dots, \vec{r}_N\sigma_N\rangle = \pm \frac{B}{F} |\vec{r}_2\sigma_2, \vec{r}_1\sigma_1, \dots, \vec{r}_N\sigma_N\rangle$$

— antisymmetrisch erfüllt!

Wirkung von $\hat{\psi}^\dagger$ & $\hat{\psi}$ auf $|n\rangle$ -N-Teilchenzustände

$$\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) |\vec{r}_1 \sigma_1, \dots, \vec{r}_N \sigma_N\rangle = \sqrt{N+1} |\vec{r}_1 \sigma_1, \dots, \vec{r}_N \sigma_N, \vec{r} \sigma\rangle$$

und

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) |\vec{r}_1 \sigma_1, \dots, \vec{r}_N \sigma_N\rangle &= \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}_1) |0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[\delta(\vec{r} - \vec{r}_N) \delta_{\sigma\sigma_N} \pm \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}_N) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \right] \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}_{N-1}) \dots \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}_1) |0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\delta(\vec{r} - \vec{r}_N) \delta_{\sigma\sigma_N} |\vec{r}_1 \sigma_1, \dots, \vec{r}_{N-1} \sigma_{N-1}\rangle \pm \right. \\ &\quad \pm \delta(\vec{r} - \vec{r}_{N-1}) \delta_{\sigma\sigma_{N-1}} |\vec{r}_1 \sigma_1, \dots, \vec{r}_{N-2} \sigma_{N-2}, \vec{r}_N \sigma_N\rangle \pm \dots \\ &\quad \dots \left. (\pm 1)^{N-1} \delta(\vec{r} - \vec{r}_1) \delta_{\sigma\sigma_1} |\vec{r}_2 \sigma_2, \dots, \vec{r}_N \sigma_N\rangle \right] \end{aligned}$$

Skalarprodukt (ohne Spin)

$$\langle \vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_{N'} | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle = \frac{\delta_{NN'}}{N!} \sum_{\hat{P} \in S_N} (\pm 1)^{P_{\text{F}}} \hat{P} \delta(\vec{r}'_1 - \vec{r}_1) \dots \delta(\vec{r}'_N - \vec{r}_N)$$

$\hat{P}_i$ - die Indizes $\vec{r}'_i \leftrightarrow \vec{r}_j$ permutiert

N-Teilchenzustand $|\Phi\rangle$:

$$|\Phi\rangle = \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) |\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\rangle$$

↑
quadratintegrabel.

Ortsraum:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N | \Phi \rangle &= \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \langle \vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N | \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\hat{P} \in S_N} (\pm 1)^P \hat{P} \Phi(\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_N) - \text{richtige Vertauschungsphase!} \end{aligned}$$

Fock-Raum:

QM-System mit n -Teilchen: $\mathcal{H}_n$ -Hilbertraum

$$\psi^\dagger(\vec{r}): \mathcal{H}_n \rightarrow \mathcal{H}_{n+1}$$

$$\psi(\vec{r}): \mathcal{H}_n \rightarrow \mathcal{H}_{n-1}$$

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n \quad - \text{Fockraum}$$

$$|\Psi\rangle = \{ |0\rangle_0, |\psi_1\rangle_1, |\psi_1, \psi_2\rangle_2, |\psi_1, \psi_2, \psi_3\rangle_3, \dots, |\psi_1 \dots \psi_n\rangle_n \dots \}$$

$$\text{wobei } |\psi_1 \dots \psi_n\rangle \in \mathcal{H}_n$$

Norm:

$$\langle \psi' | \psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi'_1 \psi'_2 \dots \psi'_n | \psi_1 \psi_2 \dots \psi_n \rangle_n$$

Vakuumzustand $|0\rangle$ und Nullvektor $\emptyset$

$\mathcal{H}_n$ - ein vollständiger Vektorraum mit Skalarprodukt

$$\exists \emptyset\text{-Vektor: } x \in \mathcal{H}_n : \langle x | x \rangle = 0 \Rightarrow x = \emptyset$$

$$\forall x \in \mathcal{H}_n : x + \emptyset = x$$

Beachten: Vakuum $|0\rangle$ -zustand ohne Teilchen
Orthogonal: $\langle 0 | 0 \rangle = 1$

$\Rightarrow$ Nicht zu verwechseln mit Nullvektor!

Vielteilchenzustand: $|h_1, h_2, \dots, h_i, \dots\rangle$

Vakuum: $|0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$

Fockraum: $\mathcal{F} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots$

dann!

Vakuum: $|0\rangle = (1, 0_1, 0_2, \dots) \rightarrow \langle 0|0\rangle = 1$

Nullvektor: $\emptyset = (0, 0_1, 0_2, \dots) \rightarrow \langle \emptyset|\emptyset\rangle = 0$

$$\mathcal{F}: \boxed{\mathcal{H}_0}_{|0\rangle} + \boxed{\mathcal{H}_1}_{|1\rangle} + \boxed{\mathcal{H}_2}_{|\dots\rangle} + \dots$$

$\hat{a}$ $\hat{a}^\dagger$

$$\hat{a}_i^\dagger | \dots 1_i \dots \rangle = \emptyset_{n+1}$$

$$a_i | \dots 0_i \dots \rangle = \emptyset_{n-1}$$

1.5 Allgemeine Einteilchen- und Mehrteilchenoperatoren

a) 1-Teilchenoperator: 2-Q

Einteilchenoperator in N-Teilchensystem:

$$\hat{T} = \hat{t}_1 + \hat{t}_2 + \dots + \hat{t}_N = \sum_{\alpha} \hat{t}_{\alpha}$$

z.B.: $\hat{t}_{\alpha} = \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m} + V(\vec{r}_{\alpha})$

Für 1-Teilchen - Matrixelemente in Basis $|i\rangle$:

$$t_{ij} = \langle i | \hat{T} | j \rangle, \text{ mit VONS } |i\rangle$$

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = \hat{1}$$

$$\Rightarrow \hat{1} \hat{1} = \sum_{ij} t_{ij} |i\rangle \langle j|$$

N -Teilchensystem:

$$\hat{T} = \sum_{ij} t_{ij} \sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha}$$

$\xrightarrow{\quad} \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j$?

Für Bosonen, $\forall |h_1, h_2, \dots\rangle$

Zunächst für $i \neq j$

$$\sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} |h_1, h_2, \dots\rangle \stackrel{?}{=} \sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{N! h_1! \dots h_N!}} \sum_{\hat{P} \in S_N} \hat{P} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle$$

$[\hat{P}, \hat{n}_i] = 0$

$$\stackrel{?}{=} \sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} \frac{1}{\sqrt{N! h_1! \dots h_N!}} \sum_{\hat{P} \in S_N} \hat{P} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\hat{P} \in S_N} \sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \frac{1}{\sqrt{h_1! \dots h_N!}}$$

$i \neq j \rightarrow \langle j | j \rangle_{\alpha} = 1$

$$= \underbrace{h_j}_{\text{Faktor}} \cdot \underbrace{\sqrt{h_i+1}}_{\text{Norm}} \cdot \frac{1}{\sqrt{h_j}} |\dots, h_i+1, \dots, h_j-1, \dots\rangle$$

$\sqrt{h_i+1} \cdot \sqrt{h_j}$

$$\equiv \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j |\dots, h_i, \dots, h_j, \dots\rangle$$

Für $i=j$

$$\sum_{\alpha} |i\rangle_{\alpha} \langle i|_{\alpha} | \dots h_i \dots \rangle = | \dots h_i \dots \rangle \equiv \hat{a}_i^{\dagger} a_i | \dots h_i \dots \rangle$$

Also, gilt für beliebige N ,

$$\sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} = \hat{a}_i^{\dagger} a_j$$

Einteilchenoperator:

$$\hat{T} = \sum_{i,j} t_{ij} \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j$$

mit $t_{ij} = \langle i | \hat{T} | j \rangle$

Spezialfall H_0 :

$$t_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij}$$

$$\hat{H}_0 = \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^{\dagger} a_i \equiv \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i$$

und $\hat{H}_0 | n_1, n_2, \dots \rangle = \left(\sum_i \varepsilon_i n_i \right) | n_1, n_2, \dots \rangle$

b) 2-Teilchenoperator: 2Q

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} U^{(2)}(\vec{r}_{\alpha}, \vec{r}_{\beta})$$

α β
 $\frac{1}{2} : \sum \rightarrow \alpha \beta + \beta \alpha$

2Q:

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,m} \langle i,j | U^{(2)} | k,m \rangle \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j^{\dagger} a_m a_k$$

beachten!

mit:

$$\langle i, j | U^{(2)} | k, m \rangle = \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \psi_i^*(\vec{r}) \psi_j^*(\vec{r}') U(\vec{r}, \vec{r}') \psi_k(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}')$$

Beweis: (für Bosonen)

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{i, j, k, m} \langle i, j | U^{(2)} | k, m \rangle |i\rangle_{\alpha} |j\rangle_{\beta} \langle k|_{\alpha} \langle m|_{\beta}$$

$$\forall |n_1, \dots\rangle: \text{ und } i \neq j, k \neq m$$

$$\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_{\alpha} |j\rangle_{\beta} \langle k|_{\alpha} \langle m|_{\beta} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots, n_m, \dots\rangle$$

$$= n_k n_m \frac{1}{\sqrt{n_k} \sqrt{n_m}} \sqrt{n_i+1} \sqrt{n_j+1} |\dots, n_i+1, \dots, n_j+1, \dots, n_k-1, \dots, n_m-1, \dots\rangle$$

$$\equiv \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_k \hat{a}_m |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_k, \dots, n_m\rangle$$

$\hat{a}_m \hat{a}_k$ für B.

Für Fermionen und Bosonen:

$$\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_{\alpha} |j\rangle_{\beta} \langle k|_{\alpha} \langle m|_{\beta} = \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_{\alpha} \langle k|_{\alpha} |j\rangle_{\beta} \langle m|_{\beta} =$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} |i\rangle_{\alpha} \langle k|_{\alpha} |j\rangle_{\beta} \langle m|_{\beta} - \underbrace{\langle k|j\rangle}_{\delta_{kj}} \sum_{\alpha} |i\rangle_{\alpha} \langle m|_{\alpha} =$$

$\delta_{kj} \equiv [\hat{a}_k, \hat{a}_j^+]_{\pm} \stackrel{B}{=} a_k a_j^+ - a_j^+ a_k$

$$= \hat{a}_i^+ \hat{a}_k \hat{a}_j^+ \hat{a}_m - \hat{a}_i^+ [\hat{a}_k, \hat{a}_j^+]_{\pm} \hat{a}_m$$

$$= \pm \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_k \hat{a}_m \pm \hat{a}_m \hat{a}_k$$

Zusammenfassung: Für 1 & 2-Teilchenoperatoren

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$$

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} U_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k$$

mit $t_{ij} = \langle i | \hat{T}(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r}) | j \rangle$

$$U_{ijkl} = \langle i, j | \hat{U}^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') | k, l \rangle$$

c) 1 & 2-Teilchenoperatoren in Feldoperatoren

Einteilchen:

Kinetische Energie

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \sum_{ij} \hat{a}_i^\dagger t_{ij} \hat{a}_j = \sum_{ij} \int d\vec{r} \underbrace{\hat{a}_i^\dagger \psi_i^*(\vec{r})}_{\int \rightarrow \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right] \underbrace{\psi_j(\vec{r}) \hat{a}_j}_{\int \rightarrow \hat{\psi}(\vec{r})} = \\ &= \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right] \hat{\psi}(\vec{r}) = \\ \text{part. } \hat{\psi}(t=0) &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{r} (\vec{\nabla} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})) \cdot (\vec{\nabla} \hat{\psi}(\vec{r})) \end{aligned}$$

Potential

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \sum_{ij} \hat{a}_i^\dagger V_{ij} \hat{a}_j = \sum_{ij} \int d\vec{r} \hat{a}_i^\dagger \psi_i^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}) \hat{a}_j = \\ &= \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) V(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Zweiteilchen-WW:

$$\begin{aligned}\hat{U} &= \frac{1}{2} \sum_{ijkm} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger U_{ijkm} \hat{a}_m \hat{a}_k = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijkm} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \hat{a}_i^\dagger \psi_i^*(\vec{r}) \hat{a}_j^\dagger \psi_j^*(\vec{r}') U^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{a}_m \psi_m(\vec{r}') \hat{a}_k \psi_k(\vec{r}) = \\ &= \frac{1}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \underbrace{\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') U^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r})}_{\substack{\vec{r} \\ \text{beachten!}}}\end{aligned}$$

d) Teilchendichte-Operator

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r})$$

L $\uparrow$ $\quad$ $\uparrow$ R

Beweis: $\forall \varphi, \varphi'$ im Ortsraum:

$$\begin{aligned}L: \langle \varphi' | \hat{\rho}(\vec{r}) | \varphi \rangle &= \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \langle \varphi' | \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N \rangle \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N | \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) | \varphi \rangle \\ &= \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \langle \varphi' | \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N \rangle \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N | \varphi \rangle = \\ &= N \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-1} \langle \varphi' | \vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N-1}, \vec{r} \rangle \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N-1}, \vec{r} | \varphi \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}R: \langle \varphi' | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) | \varphi \rangle &= \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-1} \langle \varphi' | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) | \vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N-1} \rangle \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N-1} | \hat{\psi}(\vec{r}) | \varphi \rangle \\ &= N \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-1} \langle \varphi' | \vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N-1}, \vec{r} \rangle \langle \vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N-1}, \vec{r} | \varphi \rangle\end{aligned}$$

q.e.d.

2- Teilchenoperator: (mit Spin- σ : $\hat{\rho} = \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})$)

$$\begin{aligned}
 \hat{U} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{U}^{(2)}(\vec{r}_{\alpha}, \vec{r}_{\beta}) = \frac{1}{2} \left[\sum_{\alpha, \beta} \hat{U}(\vec{r}_{\alpha}, \vec{r}_{\beta}) - \sum_{\alpha} \hat{U}(\vec{r}_{\alpha}, \vec{r}_{\alpha}) \right] = \\
 &= \frac{1}{2} \left[\int d\vec{r} \int d\vec{r}' \underbrace{\sum_{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha})}_{\downarrow} U(\vec{r}, \vec{r}') \underbrace{\sum_{\beta} \delta(\vec{r}' - \vec{r}_{\beta})}_{\downarrow} - \int d\vec{r} \sum_{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}) U(\vec{r}, \vec{r}) \right] = \\
 &= \frac{1}{2} \left[\int d\vec{r} \int d\vec{r}' \sum_{\sigma \sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) U(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') - \int d\vec{r} \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) U(\vec{r}, \vec{r}) \right] = \\
 &= \pm \frac{1}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \sum_{\sigma \sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') U(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma \sigma'} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') U^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \quad \sim \text{q.e.d.}
 \end{aligned}$$

$\delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma \sigma'} \pm \psi^{\dagger} \psi$

$\pm \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})$

Zusammen:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{U}$$

$$\hat{T} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int d\vec{r} (\vec{\nabla} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})) \cdot (\vec{\nabla} \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}))$$

$$\hat{V} = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) V(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})$$

$$\hat{U}_{ww} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma \sigma'} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') U^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})$$

Teilchenstromdichte:

$$\hat{\vec{J}}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) (\vec{\nabla} \hat{\psi}(\vec{r})) - (\vec{\nabla} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})) \hat{\psi}(\vec{r}) \right]$$

Spindichte (für $\hat{S} = \frac{1}{2}$ Fermionen) $\sigma \rightarrow s = \pm \frac{1}{2}$

$$\hat{\vec{S}}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2} \sum_{s,s'} \hat{\psi}_s^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma}_{ss'} \hat{\psi}_{s'}(\vec{r})$$

wobei $\vec{\sigma}_{ss'}$ - Pauli-Matrizen

$$\sigma_{ss'}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{ss'}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{ss'}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Impulsraum: (FT)

$$\hat{\rho}_{\vec{q}} = \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{k},s} \hat{a}_{\vec{k},s}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},s}$$

$$\hat{\vec{S}}_{\vec{q}} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\vec{k},s,s'} \hat{a}_{\vec{k},s}^\dagger \vec{\sigma}_{ss'} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},s'}$$

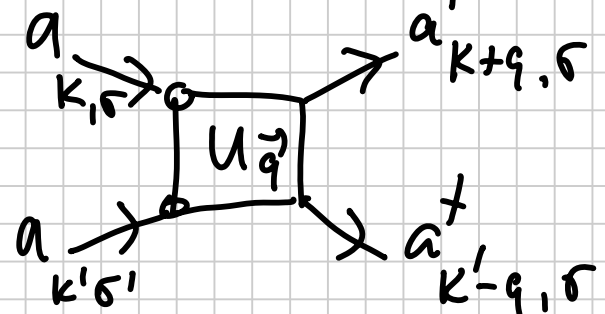
$$\hat{\vec{J}}_{\vec{q}} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k},s} (\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}) \hat{a}_{\vec{k},s}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},s}$$

Vol.

$$\hat{U}_{ww} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \sum_{\sigma,\sigma'} U_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}',\sigma'} \hat{a}_{\vec{k},\sigma}$$

mit:

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}}$$



Beweis: $\vec{k} = \frac{2\pi}{L} (k_x, k_y, k_z)$, $\Omega = L^3$

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

ww: $U(\vec{r}-\vec{r}')$ $\langle \varphi_{\vec{k}} | \varphi_{\vec{k}'} \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$

$$\langle \vec{p}', \vec{k}' | U(\vec{r}-\vec{r}') | \vec{p}, \vec{k} \rangle =$$

$$= \frac{1}{\Omega^2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{p}'\vec{r}} e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} U(\vec{r}-\vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{p}\vec{r}'} =$$

$$= \frac{1}{\Omega^3} \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{p}'\vec{r} - i\vec{k}'\vec{r}' + i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}') + i\vec{k}\vec{r} + i\vec{p}\vec{r}'} =$$

$$e^{i\vec{r}(-\vec{p}'+\vec{q}+\vec{p})} e^{i\vec{r}'(-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{k})}$$

$$= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}} \delta_{-\vec{p}'+\vec{q}+\vec{p}} \delta_{-\vec{k}'-\vec{q}+\vec{k}}$$

$$\vec{p}' = \vec{p} + \vec{q}$$

$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q}$$

