$$\hat{a}_\ell(t) = \sum_j G(\ell - j, t)\, \hat{a}_j(0)$$

$$\hat{x}_\ell(t) = x_{ZPF}\,(\hat{a}_\ell(t) + \hat{a}_\ell^+(t)) \;,\quad \hat{p}_\ell(t) = p_{ZPF}\,(-i)\,(\hat{a}_\ell(t) - \hat{a}_\ell^+(t))$$

$$\Rightarrow \langle \hat{x}_\ell(t)\rangle = 2 x_{ZPF}\, \mathrm{Re}\,\langle \hat{a}_\ell(t)\rangle \qquad (\&\ \langle \hat{p}_\ell(t)\rangle = 2 p_{ZPF}\, \mathrm{Im}\,\langle \hat{a}_\ell(t)\rangle)$$

$$= 2 x_{ZPF} \sum_j \mathrm{Re}\,(G(\ell - j, t)\,\hat{a}_j(0))$$

$$= \sum_j (\mathrm{Re}\,G)\cdot \langle \hat{x}_j(0)\rangle \;-\; (\mathrm{Im}\,G)\cdot \frac{\langle \hat{p}_j(0)\rangle}{m\omega}$$

Anfangsbedingungen

übrigens identisch mit
Lösung der klass. Bew. glg.en (wenn auch dort "RWA",
also Streichung stark nichtresonanter
Terme)

"Zweite Quantisierung"

Ganz allgemein: $\hat{H} = \sum_{i,j} \hat{a}_i^+ \tilde{H}_{ij} \hat{a}_j$

$\Rightarrow$ Heisenberg – Bew. gl.:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_i(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{a}_i(t), \hat{H}(t)]$$

$$= \sum_{\tilde{i},j} \frac{1}{i\hbar} \underbrace{[\hat{a}_i(t), \hat{a}_{\tilde{i}}^+(t) \tilde{H}_{\tilde{i}j} \hat{a}_j(t)]}_{\tilde{H}_{\tilde{i}j}\, \delta_{i\tilde{i}}\, \hat{a}_j(t)}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_i(t) = \sum_j \tilde{H}_{ij} \hat{a}_j(t)}$$

Sieht aus wie zeitabhängige SGl für $\tilde{H}$, aber mit

$$\underbrace{\psi_i(t)}_{\in \mathbb{C}} \longmapsto \underbrace{\hat{a}_i(t)}_{\text{Operator auf Hilbertraum zu } \hat{H}}$$

...als ob wir zum 2. Mal quantisiert hätten!

$x, p \xrightarrow{\text{1. Quant.}} \underbrace{\psi(x) \hat{=} \psi_i}_{\in \mathbb{C}} \xrightarrow{\text{"2. Quant."}} \hat{a}_i$

Wellenfeld — Quantenfeldtheorie

Erinnerung:
Normalmoden lösen zeitunabh. SGl:

$$\sum_j \tilde{H}_{ij} \psi_j^{(k)} = \varepsilon_k \psi_i^{(k)}$$

$\Rightarrow$ mit $\hat{a}_i = \sum_k \psi_i^{(k)} \hat{b}_k$ ist

$$\sum_j \tilde{H}_{ij} \hat{a}_j = \sum_k \psi_i^{(k)} \varepsilon_k \hat{b}_k$$

$\hat{b}_k$ sind wie Koeffizienten in einer Entwicklung $\psi_i = \sum_k \psi_i^{(k)} b_k \; \forall \in \mathbb{C}$

Nun allgemein:

$$\hat{a}_\ell(t) = \sum_j G(\ell, j, t)\, \hat{a}_j(0)$$

(Ziel, Start)

(G nicht nur von $\ell - j$ abh., wenn Sys. nicht transl.inv.)

$\Rightarrow$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_\ell(t) = \sum_j i\hbar \left[\frac{d}{dt} G(\ell, j, t)\right] \hat{a}_j(0)$$

$$= \sum_m \tilde{H}_{\ell m}\, \hat{a}_m(t)$$

$$= \sum_{j,m} \tilde{H}_{\ell m}\, G(m, j, t)\, \hat{a}_j(0)$$

Vgl. $\Rightarrow$ Für jedes j und ℓ:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G(\ell, j, t) = \sum_m \tilde{H}_{\ell m}\, G(m, j, t)$$

$\Rightarrow$ G erfüllt auch zeitabh. SGl, mit Anf.bed.:

$$G(\ell, j, t=0) = \delta_{\ell j}$$

Lösung mit Eigenbasis:

Beh.: $$G(\ell, j, t) = \sum_k \psi_\ell^{(k)} \left[\psi_j^{(k)}\right]^* e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t}$$

Bew.: Einsetzen, und $\sum_m \tilde{H}_{\ell m} \psi_m^{(k)} = \varepsilon_k \psi_\ell^{(k)}$ $\Rightarrow$ ✓

$t=0$: $\sum_k \psi_\ell^{(k)} \left[\psi_j^{(k)}\right]^* = \delta_{\ell j}$ ✓

$$= G(\ell, j, t)$$

Bem.: Für nicht-quadratische $\hat{H}$: nicht mehr $\hat{a}_\ell(t) = \sum_j G(\ell, j, t)\hat{a}_j(0)$

sondern $i\hbar \frac{d}{dt}\hat{a}_\ell(t) = \ldots \hat{a}_m(t) + \ldots \underbrace{\hat{a}_n^+(t)\hat{a}_n(t)\hat{a}_m(t)}_{\text{nichtlin. Terme!}} + \ldots$

$$\Rightarrow \quad \hat{a}_\ell(t) = \ldots \hat{a}_j(0) + \ldots \hat{a}_\cdot^+(0)\hat{a}_\cdot(0)\hat{a}_\cdot(0) + \ldots$$

Aber weiterhin mögl. & nützlich:

$$G(\ell, j, t) := \underset{(t>0)}{\langle [\hat{a}_\ell(t), \hat{a}_j^+(0)] \rangle} \in \mathbb{C}$$

(Bem.: Typischerweise definiert man später

$$\underline{\underline{i}} G^R(\ell, j, t) := \theta(t) \langle [\hat{a}_\ell(t), \hat{a}_j^+(0)] \rangle \quad)$$

"retardierte Greensfkt." usw.

Quanten- klass. Korrespondenz für gekoppelte harmon. Osz.

- Bewgglg. für $\hat{x}_\ell(t)$ usw. entsprechen exakt der klassischen! $\Rightarrow$ Mittelwerte verhalten sich klassisch!

  $\langle \hat{x}_\ell(t) \rangle$, $\langle \hat{p}_\ell(t) \rangle$, bzw. $\langle \hat{a}_\ell(t) \rangle$

- Gauß-Wellenfkt. $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t) \sim \exp\left[-\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}^t A \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} - b^t \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \right]$

  bleibt Gauß, selbst für $F_\ell(t)$ und $\omega_\ell(t)$ beliebig (also solange $\hat{H}$ quadratisch)

- Allgemeine Gauß-Zust.e: gequetschte, kohärente Zust.e

  z.B. Verschiebungsop. $\hat{D}[\alpha] \longmapsto \hat{D}\underbrace{[\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N]}_{\text{verschiebt glz. alle Oszillatoren in Ort und Impuls!}} = \exp\left(\sum_\ell \alpha_\ell \hat{a}_\ell^+ - \alpha_\ell^* \hat{a}_\ell \right)$

  Squeezing-Op. $\hat{S}[\underset{\in \mathbb{C}^{N\times N}}{Z}] = \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\ell,j} Z_{\ell j}^* \hat{a}_\ell \hat{a}_j - \underbrace{\text{h.c.}}_{\text{hermitesch konjugiert}} \right)$

  $= \frac{1}{2} \sum_{\ell j} Z_{\ell j} \hat{a}_j^+ \hat{a}_\ell^+$ hier

- Gauß-Zustände vollständig $\Rightarrow$ charakterisiert durch:

  $\langle \hat{a}_\ell \rangle$ und $\langle \hat{a}_\ell^+ \hat{a}_j \rangle$ und $\langle \hat{a}_\ell \hat{a}_j \rangle$

Abweichung von der RWA

(am Bsp. $\omega_1 = \omega_2 = \omega$)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2) - K\hat{x}_1\hat{x}_2$$

Suche Normalmoden wie klassisch, also $\hat{X}_1 = \dots \hat{x}_1 + \dots \hat{x}_2$, $\hat{X}_2 = \dots \hat{x}_1 + \dots \hat{x}_2$

$\Rightarrow \dots \Rightarrow$ neue Eigenfreq. sind Eigenwerte Ω^2 der Matrix

$$\begin{pmatrix} \omega^2 - \Omega^2 & -\frac{K}{m} \\ -\frac{K}{m} & \omega^2 - \Omega^2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \Omega = \sqrt{\omega^2 \pm \frac{K}{m}}$$

mit $\hbar g = K x_{ZPF}^2 = \frac{K\hbar}{2m\omega}$:

$$\Omega = \sqrt{\omega^2 \pm 2\omega g} \approx \omega \pm g - \omega \cdot \frac{1}{2}\left(\frac{g}{\omega}\right)^2 + \dots$$

RWA — 2te Korrektur

"Kleiner Parameter" $\frac{g}{\omega}$

Neue Koordinaten:

$$\hat{X}_\pm = \frac{\hat{x}_1 \pm \hat{x}_2}{\sqrt{2}}, \quad \hat{P}_\pm = \frac{\hat{p}_1 \pm \hat{p}_2}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow [\hat{X}_\pm, \hat{P}_\pm] = i\hbar \text{ usw.}$$

$$\Rightarrow \hat{a}_+ = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{X}_+}{x_{ZPF,+}} + i\frac{\hat{P}_+}{x_{ZPF,+}}\right)$$

$= \dots$

$= \hat{a}_+^{RWA} \cosh\theta_+ + (\hat{a}_+^{RWA})^+ \sinh\theta_+$

mit $e^{\theta_+} = \sqrt{\frac{\Omega_+}{\omega}} = \left(1 + \frac{2g}{\omega}\right)^{1/4}$

Bem.: RWA – Grundzustand: $|n_1 = 0, n_2 = 0\rangle = |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2$ = Produkt der alten Grundzustände

jenseits von RWA:

$$\underbrace{\ldots}_{\approx 1}|0,0\rangle + \underbrace{\ldots}|1,1\rangle + \ldots|2,0\rangle + \ldots|0,2\rangle + \ldots$$

$\sim O(\frac{1}{\omega})$

kleine Beimischung von Anregung

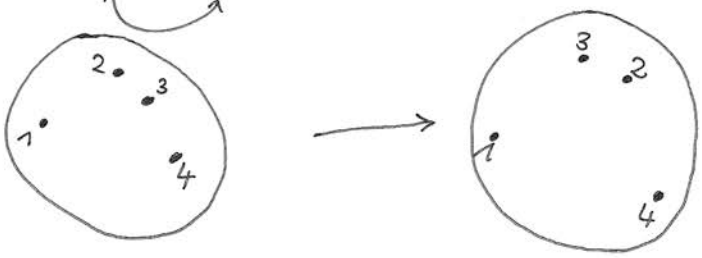
3. Identische Teilchen: Bosonen & Fermionen

Schrödingergleichung: für N identische Teilchen (hier: in 1D)

$$i\hbar\partial_t \Psi(x_1,\dots,x_N,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}\Psi(x_1,\dots,x_N,t) + V(x_1,\dots,x_N)\Psi(x_1,\dots,x_N,t)$$

<u>identisch</u> $\Rightarrow$ V <u>symmetrisch</u> unter Vertauschung von Koordinaten!

$$V(x_1,\dots,x_i,\dots,x_j,\dots,x_N) = V(x_1,\dots,x_j,\dots,x_i,\dots,x_N)$$



<u>Wenn</u> bei $t=0$ Ψ <u>symm.</u> (unter Vertauschung), dann für <u>alle</u> Zeiten!

$$\Psi(\dots,x_i,\dots,x_j,\dots,t=0) = \Psi(\dots,x_j,\dots,x_i,\dots,t=0)$$

$$\Rightarrow \Psi(\dots,t) = \Psi(\dots,t) \quad \forall t$$

Bew.: z.S. der SGl ist symm. wenn Ψ symm.
$\Rightarrow$ Symm. bleibt in jedem Zeitschritt erhalten!

Solche Teilchen: <u>"Bosonen"</u>

Einzige Alternative (in >2D): <u>"Fermionen"</u>,

Ψ <u>anti</u>symm.:

$$\Psi(\dots,x_i,\dots,x_j,\dots) = -\Psi(\dots,x_j,\dots,x_i,\dots)$$

$\Rightarrow$ auch für $\forall t$

Teilchen mit:

Spin $0, 1, 2, \ldots$ $\Leftrightarrow$ Bosonen

(ganzzahlig) (z.B. $\underbrace{{}^1H}_{1p\,\&\,1e^-}$, ${}^4He, \ldots$, neutr. Atome mit gerader Zahl von Neutronen)

Spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$ $\Leftrightarrow$ Fermionen

(z.B. $e^-, p^+, n, {}^3He, \ldots$, neutr. Atome mit unger. Zahl von Neutronen)

(Bew. in relativist. QFT: "Spin-Statistik-Theorem")

Konstruiere Ψ mit passender Symmetrie!

(→ Basis im Vielteilchen-Hilbertraum)

Einfachstes Bsp.: $\Psi(x_1, \ldots, x_N) = \phi(x_1) \cdot \ldots \cdot \phi(x_N)$ ⇒ Bosonen (aber sehr spezielle)

Nicht gut: $\Psi(x_1, x_2, x_3) = \phi_3(x_1)\,\phi_5(x_2)\,\phi_5(x_3)$ ist weder symm. noch antisymm.!

(ϕ_3, ϕ_5: Wellenfunktionen aus einer Einteilchenbasis)

Aber: Symmetrisierung mögl.!

Hier: $$\Psi_{(\text{symm.})} = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big[\phi_3(x_1)\phi_5(x_2)\phi_5(x_3) + \phi_5(x_1)\phi_3(x_2)\phi_5(x_3) + \phi_5(x_1)\phi_5(x_2)\phi_3(x_3)\Big]$$ ist symm. (& normiert)

Allgemein, für Bosonen:

- Gegeben Einteilchenbasis $\phi_j(x)$
- Gegeben: "Besetzte" Zustände $(j_1, j_2, \ldots, j_N)$

⇒ sei

$$\Psi(x_1, \ldots, x_N) := \frac{1}{\sqrt{N_P}} \sum_P P\left[\phi_{j_1}(x_1)\,\phi_{j_2}(x_2) \ldots \phi_{j_N}(x_N)\right]$$

N_P: Anzahl der Permut. für diesen Fall

$\sum_P$: Summe über alle verschiedenen Permutationen von $j_1, j_2, \ldots, j_N$

Bezeichnungsweise: Liste auf, wie oft ein gegebener Einteilchenzustand besetzt ist (z.B.: $\phi_5(x)$)

$$|\Psi\rangle \equiv |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$$

M = Zahl der Einteilchen-Basiszustände

"Besetzungszahldarstellung"

Es gilt natürlich: $\sum_{j=1}^{M} n_j = N$

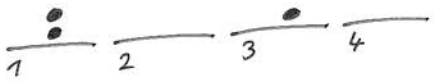
Bsp.: für $\Psi \sim \phi_3(x_1)\phi_5(x_2)\phi_5(x_3) + \dots \Rightarrow |\Psi\rangle = |0,0,1,0,2,0,\dots\rangle$ ($n_3 = 1$, $n_5 = 2$)

Vollständige Vielteilchenbasis:

Alle Konfigurationen (mit $\sum_j n_j = N$)

z.B. für 3 Teilchen (& 4 Zustände):

$|3,0,0,0\rangle$
$|2,1,0,0\rangle$
$|2,0,1,0\rangle$ → graphisch:
$\vdots$
$|0,1,0,2\rangle$
$\vdots$



Später: Exakte Analogie, für Bosonen:

Einteilchenzustand j ↔ Oszillator j

n_j = Zahl der Teilchen im ϕ_j ↔ Zahl der Anregungen in j

Teilchenzahl N ↔ Gesamtzahl der Anregungen (erhalten in RWA)

Für Fermionen: Bsp.: $\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_3(x_1)\phi_5(x_2) - \phi_5(x_1)\phi_3(x_2)\right)$

Allg.: $\Psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N_p}} \sum_P \zeta(P)\, P\left[\phi_{j_1}(x_1) \cdot \dots \cdot \phi_{j_N}(x_N)\right]$

wieder alle Permut. von $j_1, \dots, j_N$

$\zeta(P)$ = "Signum" der Permutation

$= \begin{cases} +1 & \text{für gerade Zahl v. ....} \\ -1 & \text{für ungerade Zahl von Vertausch.} \end{cases}$

$$\Rightarrow \quad \Psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \underbrace{\left[\phi_{j_\ell}(x_i)\right]_{\ell i}}_{N \times N\text{-Matrix}}$$

z.B.

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{pmatrix} \phi_3(x_1) & \phi_3(x_2) \\ \phi_5(x_1) & \phi_5(x_2) \end{pmatrix}$$

wieder

$$|\Psi\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$$

aber jetzt: $\underline{n_j = 0 \text{ oder } 1}$

"Pauli – Prinzip"!

Keine Doppelbesetzung!

Denn

$$\det \begin{pmatrix} \boxed{\phi_3(x_1) \quad \dots \quad \phi_3(x_N)} \\ \phi_5(x_1) \quad \dots \quad \phi_5(x_N) \\ \boxed{\phi_3(x_1) \quad \dots \quad \phi_3(x_N)} \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv 0$$

(~~dass~~ Zwei Zeilen gleich!)

Matrixelemente in der Besetzungszahlbasis

(führt auf 2. Quantisierung von Fermionen / Bosonen)

Typische Operatoren:

$$\sum_{\ell=1}^{N} V(x_\ell) \quad \text{oder} \quad \sum_{\ell=1}^{N} \hat{p}_\ell \quad \text{etc.}$$

} "Einteilchenoperatoren" (wirken auf jedes Teilchen einzeln)

Darstellung in der Einteilchenbasis:

$$V(x)\phi_i(x) = \sum_{j=1}^{M} \phi_j(x) \underbrace{\langle j|V|i\rangle}_{= \int dx\, \phi_j^*(x) V(x) \phi_i(x)}$$

allgemein:

$$V(x) = \sum_{i,j=1}^{M} |j\rangle \underbrace{\langle j|V|i\rangle}_{\text{Matrixelemente}} \langle i|$$

$\Rightarrow$ elementarer "Übergang": $|j\rangle\langle i|$

$\Rightarrow$ Betrachte Einteilchenoperator

$$\sum_{\ell=1}^{N} |j\rangle_\ell \langle i|$$

(i, j fest; später: $\sum$ über i und j)

↑ wirke auf Koordinate x_ℓ

Beispiel: Schreibe $\phi_3(x_1)\phi_5(x_2)\phi_5(x_3)$ als $|3\rangle_1 \otimes |5\rangle_2 \otimes |5\rangle_3$

$$\left(\sum_{\ell=1}^{3} |4\rangle_\ell \langle 5|\right) |3\rangle_1 \otimes |5\rangle_2 \otimes |5\rangle_3$$

$$= |3\rangle_1 \otimes |4\rangle_2 \otimes |5\rangle_3 + |3\rangle_1 \otimes |5\rangle_2 \otimes |4\rangle_3$$

$\Rightarrow$ wie wirkt das auf die symmetrisierten Wellenfkt.en?

Bosonen

$|n_1, n_2, \dots, n_M\rangle$ entspricht

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N_P}} \cdot \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P}\left[\phi_{j_1}(x_1) \dots \phi_{j_N}(x_N)\right]$$

N_P = Anzahl der verschiedenen Permutationen von $j_1, \dots, j_N$

$$= \frac{N!}{n_1!\, n_2! \, \dots \, n_M!}$$

Bsp.: $(3\,5\,5), (5\,3\,5), (5\,5\,3)$: $\frac{3!}{2!} = 3$ Permutationen

$$\left(\sum_{l=1}^{N} |j\rangle_l \langle i|\right) |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_M\rangle$$

$$= \underbrace{\text{Faktor}}_{\substack{\| \\ ?}} \cdot |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_M\rangle$$

Falls $n_j = 0$: Es wird jeder Term in der neuen Basisfkt. genau einmal erzeugt

$$\left(\sum_{l=1}^{3} |4\rangle_l \langle 5|\right) \frac{1}{\sqrt{3}} \Big(|3\rangle_1 \otimes |5\rangle_2 \otimes |5\rangle_3 + |5\rangle_1 \otimes |3\rangle_2 \otimes |5\rangle_3 + |5\rangle_1 \otimes |5\rangle_2 \otimes |3\rangle_3 \Big)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} \Big(3\,\overset{4}{\cancel{5}}\,5 + 3\,5\,4 + 4\,3\,5 + 5\,3\,4 + 4\,5\,3 + 5\,4\,3 \Big)$$

$$= \sqrt{2} \cdot \underbrace{\frac{1}{\sqrt{3!}} (\dots)}_{\hat{=}\, |n_3 = 1, n_4 = 1, n_5 = 1\rangle}$$

Beachte: anderer Normierungsfaktor!

Also (für $n_j = 0$):

$$\left(\sum_{\ell=1}^{N} |j\rangle_\ell\langle i|\right) |n_1,\dots,n_M\rangle = \underbrace{\sqrt{\frac{N_p'}{N_p}}}_{\sqrt{\frac{n_i!\, n_j!}{(n_i-1)!(n_j+1)!}} \overset{n_j=0}{=} \sqrt{n_i}} \cdot |n_1,\dots,n_i-1,\dots,n_j+1,\dots,n_M\rangle$$

Falls $n_j \neq 0$:

$$3\,5\,5 + 5\,3\,5 + 5\,5\,3$$

$$\downarrow\ |3\rangle\langle 5|$$

$$\underline{3\,3\,5} + \underline{3\,5\,3} + \underline{3\,3\,5} + \underline{5\,3\,3} + \underline{3\,5\,3} + \underline{5\,3\,3}$$

$\Rightarrow$ jeder Term wird n_j+1 mal erzeugt!

$\Rightarrow$ Allgemein:

$$\left(\sum_{\ell=1}^{N} |j\rangle_\ell\langle i|\right) |n_1,\dots,n_M\rangle = (n_j+1) \cdot \underbrace{\sqrt{\frac{N_p'}{N_p}}}_{\sqrt{\frac{n_i}{n_j+1}}} \cdot |n_1,\dots,n_i-1,\dots,n_j+1,\dots,n_M\rangle$$

$$= \sqrt{(n_j+1)\, n_i}\ |\dots,n_i-1,\dots,n_j+1,\dots\rangle$$

Aha! Das ist genau das Matrixelement zu

$$\hat{a}_j^+ \hat{a}_i$$

$\Rightarrow \left(\sum_{\ell=1}^{N} |j\rangle_\ell\langle i|\right)$ ist äquivalent dazu,

(denn die Matrixelemente sind dieselben!)

$\Rightarrow$ Einteilchenoperatoren:

immer von der Form: $\sum_{i,j=1}^{M} \hat{a}_j^+ \underbrace{\langle j|A|i\rangle}_{\text{Matrixelemente in Einteilchenbasis}} \hat{a}_i$

und $\hat{a}_j^{(+)}$: sind wie bei Oszillatoren

$\Rightarrow$ auch hier:

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

"Bosonische Vertauschungsrelationen"

Besetzungszahlop.: $\hat{n}_j = \hat{a}_j^+ \hat{a}_j$

$\hat{n}_j |\ldots, n_j, \ldots\rangle = n_j |\ldots, n_j, \ldots\rangle$

Fermionen

"Einfacher" weil immer $\frac{1}{\sqrt{N!}}$, und $n_j \in \{0,1\}$

Aber: Vorzeichen!

$$\left(\sum_{\ell=1}^{N} |j\rangle_\ell \langle i|\right) \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{bmatrix} |j_1\rangle_1 & \cdots & |j_1\rangle_N \\ |j_2\rangle_1 & \cdots & |j_2\rangle_N \\ |i\rangle_1 & \cdots & |i\rangle_N \end{bmatrix}$$

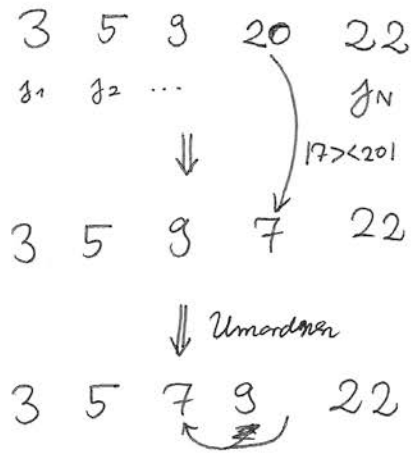
sei Ordnung immer $j_1 \le j_2 \le \ldots \le j_N$ für alle Basiszustände (!)

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{bmatrix} \vdots & & \vdots \\ |j\rangle_1 & \cdots & |j\rangle_N \\ \vdots & & \vdots \end{bmatrix} \leftarrow \text{aus } i \text{ wurde } j$$

$\Rightarrow$ evtl. jetzt: "falsche" Reihenfolge

$\Rightarrow$ ordne Zeilen um

Bsp.:



Benachbarte Zeilen vertauscht $\Rightarrow$ $\det(\text{vorher}) = -\det(\text{nachher})$

allg.: $\ominus$, wenn neuer Zustand an ungrader Zahl vorbeigezogen, um Reihenfolge zu korrigieren!

Führe passende Erzeuger / Vernichter ein:

$$c\hat{a}_i \,|\, n_1, \ldots, n_i = 1, \ldots\rangle = \begin{Bmatrix} -1 \\ \text{oder} \\ +1 \end{Bmatrix} \cdot \,|\ldots, n_i = 0, \ldots\rangle$$

"-1", falls ungrade Zahl von besetzten Zuständen unter i, also $\sum_{j=1}^{i-1} n_j$ ungrade

und

$$c\hat{a}_i^+ \,|\, n_1, \ldots, n_i = 0, \ldots\rangle = \begin{Bmatrix} -1 \\ \text{oder} \\ +1 \end{Bmatrix} \cdot \,|\ldots, n_i = 1, \ldots\rangle$$

selbe Regel

$\Rightarrow$

$$\hat{c}_j^+ \hat{c}_i \,|\ldots, n_i = 1, \ldots, n_j = 0, \ldots\rangle = \begin{Bmatrix} -1 \\ \text{oder} \\ +1 \end{Bmatrix} \,|\ldots, n_i = 0, \ldots n_j = 1, \ldots\rangle$$

-1, wenn $i \rightsquigarrow j$ an ungrader Zahl von besetzten Zust.en vorbei

$\Rightarrow$ für Fermionen:

$$\sum_{e=1}^{N} |g\rangle_e \langle i| \;\hat{=}\; \hat{c}_g^+ \hat{c}_i$$

& deshalb:

$$\sum_{i,g=1}^{M} \hat{c}_g^+ \langle g|V|i\rangle \hat{c}_i \quad \text{als Ein.t. operator!}$$

Eigenschaften der $\hat{c}_g$?

$$(\hat{c}_g^+)^2 = 0 \quad (\text{weil } n_g = 2 \text{ nicht erlaubt})$$

$$(\hat{c}_g)^2 = 0$$

$$\underbrace{\hat{c}_g^+ \hat{c}_g}_{\substack{\text{gilt 1,} \\ \text{wenn } n_g=1}} + \underbrace{\hat{c}_g \hat{c}_g^+}_{\substack{\text{gilt 1, wenn} \\ n_g=0 \text{ am Anfang}}} = 1$$

~~$\hat{c}_g^+ \hat{c}_g + \hat{c}_g \hat{c}_g^+$~~

$$\hat{c}_i \hat{c}_g |n_1, \ldots, n_i=1, \ldots, n_g=1, \ldots\rangle = \underbrace{(-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k} (-1)^{\sum_{k=1}^{g-1} n_k}}_{\text{hier } n_g=0} |\ldots, n_i=0, \ldots, n_g=0, \ldots\rangle$$

$$= (-1)^{\sum_{k=i}^{g-1} n_k} |\ldots\rangle$$

↑ falls $i<g$

$$\hat{c}_g \hat{c}_i |\ldots, n_i=1, \ldots, n_g=1, \ldots\rangle = \underbrace{(-1)^{\sum_{k=1}^{g-1} n_k} (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} n_k}}_{\text{hier } n_i=0} |\ldots\rangle$$

falls $i<g$ $\longrightarrow$ $(-1)^{\sum_{k=i}^{g-1} n_k - 1}$ ↳ weil $n_i=0$ war

$$\Rightarrow \hat{c}_i \hat{c}_g = -\hat{c}_g \hat{c}_i$$

↳ auch für $i>g$

Bsp.:

$$\hat{c}_3\,\hat{c}_7\;|n_2=1,\ n_3=1,\ n_5=1,\ n_7=1\rangle$$

$$= (-1)\cdot(-1)\cdot\;|n_2=1,\ n_5=1\rangle$$

$$\hat{c}_7\,\hat{c}_3\;|\ldots\rangle = (+1)\cdot(-1)\;\;|n_2=n_5=1\rangle$$

analog:

$$\hat{c}_i^{+}\hat{c}_j = -\hat{c}_j^{+}\hat{c}_i \quad \text{für } i\neq j$$

$\Rightarrow$ insgesamt:

"fermionische Vertauschungsregeln"

Anti-kommutator $\rightarrow$

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \hat{c}_i\hat{c}_j + \hat{c}_j\hat{c}_i = 0$$

$$\{\hat{c}_i^{+}, \hat{c}_j^{+}\} = 0$$

$$\{\hat{c}_i^{+}, \hat{c}_j\} = \delta_{ij}$$

Wechselwirkungsoperatoren

(2-Teilchen WW)

damit keine Doppelzählung: z.B. $V(x_1,x_2)=\frac{e^2}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}$ nur einmal!

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{\ell,m=1\\ \ell\neq m}}^{N} V(x_\ell,x_m) = \frac{1}{2}\left\{\sum_{\ell,m=1}^{N} V(x_\ell,x_m) - \sum_{\ell=1}^{N} V(x_\ell,x_\ell)\right\}$$

erster Teil $\hat{=}$

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{\ell,m\\ j_1,j_2\\ i_1,i_2}} |j_2\rangle_m |j_1\rangle_\ell \underbrace{\langle j_1,j_2|V|i_1,i_2\rangle}_{\|} \langle i_1|_\ell \langle i_2|_m$$

$$\int dx_1 dx_2\ \phi^*_{j_1}(x_1)\phi^*_{j_2}(x_2)V(x_1,x_2)\phi_{i_1}(x_1)\phi_{i_2}(x_2)$$

$$\hat{=}\ \frac{1}{2}\sum_{\substack{i_1,i_2\\ j_1,j_2}} \langle j_1,j_2|V|i_1,i_2\rangle \underbrace{\left(\sum_{m=1}^{N}|j_2\rangle_m\langle i_2|_m\right)}_{\hat{a}^+_{j_2}\hat{a}_{i_2}} \underbrace{\left(\sum_{\ell=1}^{N}|j_1\rangle_\ell\langle i_1|\right)}_{\hat{a}^+_{j_1}\hat{a}_{i_1}}$$

zweiter Teil:

$$-\frac{1}{2}\sum_{\ell=1}^{N} V(x_\ell,x_\ell) \hat{=} -\frac{1}{2}\sum_{i,j}\langle j|V(x,x)|i\rangle\ \hat{a}^+_j\hat{a}_i$$

schönere Ordnung:

$$\hat{a}^+_{j_2}\hat{a}_{i_2}\hat{a}^+_{j_1}\hat{a}_{i_1} = \hat{a}^+_{j_1}\hat{a}^+_{j_2}\hat{a}_{i_2}\hat{a}_{i_1} + \hat{a}^+_{j_2}\hat{a}_{i_1}\delta_{i_2,j_1}$$

↑ sowohl für Bosonen, als auch für Fermionen (!)

führt zu:

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{j_2,i_1\\ j_1}} \underbrace{\langle j_1,j_2|V|i_1,j_1\rangle}_{=\int dx_1 dx_2\ \phi^*_{j_1}(x_1)\,\phi^*_{j_2}(x_2)\,V(x_1,x_2)\,\phi_{i_1}(x_1)\,\phi_{j_1}(x_2)} \hat{a}^+_{j_2}\hat{a}_{i_1}$$

Es gilt: $\sum_{j_1}\phi^*_{j_1}(x_1)\,\phi_{j_1}(x_2) = \delta(x_1-x_2)$

$\Rightarrow$

$\sim$ führt zu $\frac{1}{2}\sum_{j_2,i_1} \hat{a}^+_{j_2}\hat{a}_{i_1} \int dx\, \phi^*_{j_2}(x)\, V(x_1,x)\, \phi_{i_1}(x)$

$\Rightarrow$ kürzt gerade zweiten Teil!

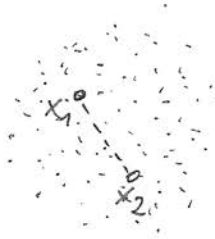
$\Rightarrow$

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{\ell,m=1\\ \ell\neq m}}^{N} V(x_\ell, x_m) \;\hat{=}\; \frac{1}{2}\sum_{\substack{i_1,i_2\\ j_1,j_2}} \hat{a}^+_{j_1}\hat{a}^+_{j_2}\hat{a}_{i_2}\hat{a}_{i_1} \langle j_1 j_2 | V | i_1 i_2 \rangle$$

gilt für Bosonen & Fermionen!

Bsp.: • WW: $V(x_1-x_2)$
• Bosonen in einem Orbital j d.h.
betrachte erst mal nur $i_1=i_2=j_1=j_2=j$:

$$\langle j,j|V|j,j\rangle = \int dx_1 dx_2 \underbrace{|\phi_j(x_1)|^2}_{\text{Dichte}} \underbrace{|\phi_j(x_2)|^2}_{\text{Dichte}} V(x_1-x_2)$$



$$\hat{a}^+_j\hat{a}^+_j\hat{a}_j\hat{a}_j = \hat{a}^+_j\,(\hat{a}_j\hat{a}^+_j + \underbrace{[\hat{a}^+_j,\hat{a}_j]}_{-1})\hat{a}_j$$
$$= \hat{n}_j^2 - \hat{n}_j$$
$$= \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1)$$

$\Rightarrow$ $\hat{H}_{WW} = \frac{1}{2}\langle j,j|V|j,j\rangle \underbrace{\hat{n}_j(\hat{n}_j-1)}_{\text{keine "Selbstwechselwirkung"}} + \ldots$ (Übergänge)...
(also $\hat{n}_j=1 \Rightarrow$ keine WW) ✓

- Fermionen in 2 Orbitalen i, j $(i \neq j)$

folgende Terme ändern <u>nicht</u> die Besetzungszahlen:

$$\frac{1}{2}\Big(\hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_j \hat{c}_i \langle i,j|V|i,j\rangle + \hat{c}_j^+ \hat{c}_i^+ \hat{c}_i \hat{c}_j \langle j,i|V|j,i\rangle + \hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_i \hat{c}_j \langle i,j|V|j,i\rangle + \hat{c}_j^+ \hat{c}_i^+ \hat{c}_j \hat{c}_i \langle j,i|V|i,j\rangle \Big)$$

- Es ist $\langle i,j|V|i,j\rangle = \langle j,i|V|j,i\rangle$ (weil $V(x_1-x_2)=V(x_2-x_1)$)
- Bei den unteren beiden Termen: $\hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_i \hat{c}_j = -\hat{c}_i^+ \hat{c}_i \hat{c}_j^+ \hat{c}_j$ etc.

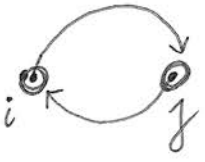
$\Rightarrow$ zusammenfassend: $(i \neq j)$

$$\hat{H}_{WW} = \hat{n}_i \hat{n}_j \cdot \Big(\underbrace{\langle i,j|V|i,j\rangle}_{\parallel} - \underbrace{\langle i,j|V|j,i\rangle}_{\downarrow} \Big) + \dots \text{(Übergänge)}$$

$$\int dx_1 dx_2 \, |\phi_i(x_1)|^2 V(x_1,x_2) |\phi_j(x_2)|^2$$

$$= \int dx_1 dx_2 \, \phi_i^*(x_1)\phi_j(x_2) \cdot V(x_1,x_2) \cdot \phi_j^*(x_2)\phi_i(x_2)$$

"Austauschterm"
"vertauscht Fermionen"
$\Rightarrow \ominus$-Zeichen



sehr wichtig

Hamiltonoperator für ein Vielteilchensystem

Am besten: Wähle Energieeigenbasis des Einteilchenproblems

$$\hat{H}_{(1\text{ Teilchen})} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$$

Dann:

$$\langle i | \hat{H}_{(1T.)} | j \rangle = \varepsilon_j \delta_{i,j}$$

ε_j: Einteilchen-Energieniveaus

$\Rightarrow$

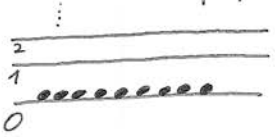
$$\hat{H} = \sum_j \varepsilon_j \hat{a}_j^+ \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i_1, i_2 \\ j_1, j_2}} \hat{a}_{j_1}^+ \hat{a}_{j_2}^+ \hat{a}_{i_2} \hat{a}_{i_1} \langle j_1, j_2 | V | i_1, i_2 \rangle$$

- für Bosonen und Fermionen (nur Vertauschungsrelationen verschieden)
- WW sieht aus wie anharmonische Oszillatoren (für Bosonen)
- Teilchenzahl N kommt nicht mehr explizit vor
- Quantenzahl j kann aus mehreren Qu.zahlen bestehen
  z.B. beim Atom: $j \hat{=} (n, \ell, m, m_s)$ — m_s: Spinprojektion: $\pm \frac{1}{2}$

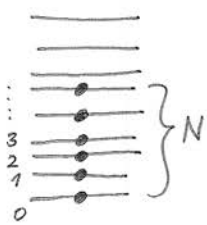
Ohne WW: Grundzustand?

Für Bosonen: besetze Einteilchen-GZ (sei $j=0$) mit allen Teilchen!

$$|\Psi\rangle = (\hat{a}_0^+)^N \underbrace{|0\rangle}_{\text{"Vakuum"} = |0,0,0,\ldots\rangle \text{ (keine Teilchen)}}$$



Für Fermionen: besetze die niedrigsten N Zustände



"Fermisee"

$$|\Psi\rangle = \prod_{j=0}^{N-1} \hat{c}_j^+ |0\rangle$$

Basiswechsel (der Einteilchenbasis)

$$\hat{b}_k = \sum_\ell \langle k|\ell\rangle \hat{a}_\ell$$

(für Fermionen & Bosonen)

$\langle k|\ell\rangle$: k = neue Basis, ℓ = alte Basis

(Bew.: gehe zurück auf Def. von $\hat{a}_j^+ \hat{a}_i$ über $\sum_{\ell=1}^{N} |j_\ell\rangle\langle i_\ell|$)

und umgekehrt:

$$\hat{a}_\ell = \sum_k \langle \ell|k\rangle \hat{b}_k$$

Ortsbasis

$$\hat{\psi}(x) = \sum_\ell \langle x|\ell\rangle \hat{a}_\ell = \sum_\ell \phi_\ell(x)\, \hat{a}_\ell$$

$$\hat{a}_\ell = \int dx\, \langle \ell|x\rangle \hat{\psi}(x) = \int dx\, \phi_\ell^*(x)\, \hat{\psi}(x)$$

für Bosonen:

$$\left[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^+(x')\right] = \sum_{\ell,\tilde{\ell}} \phi_\ell(x)\, \phi_{\tilde{\ell}}^*(x') \underbrace{\left[\hat{a}_\ell, \hat{a}_{\tilde{\ell}}^+\right]}_{\delta_{\ell,\tilde{\ell}}}$$

$$= \sum_\ell \phi_\ell(x)\, \phi_\ell^*(x') = \delta(x-x')$$

(in 3D: $= \delta^3(\vec{x}-\vec{x}')$)

$$\left[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')\right] = \ldots = 0 = \left[\hat{\psi}^+(x), \hat{\psi}^+(x')\right]$$

für Fermionen:

$$\{\hat\psi(x), \hat\psi^+(x')\} = \sum_{\ell,\tilde\ell} \phi_\ell(x)\, \phi^*_{\tilde\ell}(x') \underbrace{\{\hat c_\ell, \hat c^+_{\tilde\ell}\}}_{\delta_{\ell,\tilde\ell}}$$

$$= \ldots = \delta(x-x')$$

$$\{\hat\psi(x), \hat\psi(x')\} = 0 = \{\hat\psi^+(x), \hat\psi^+(x')\}$$

Vorteil der Ortsbasis: potentielle Energie (auch WW) besonders einfach:

Einteilchenpotential:

$$\sum_{i,j} \hat a^+_j \langle j|U|i\rangle \hat a_i = \int d\tilde x\, dx \sum_{i,j} \phi_j(\tilde x)\, \underbrace{\langle j|U|i\rangle}_{\int dy\, \phi^*_j(y) U(y) \phi_i(y)}\, \phi^*_i(x)\, \hat\psi^+(\tilde x)\hat\psi(x)$$

$$= \int dx\, \hat\psi^+(x) U(x) \hat\psi(x)$$

$$\sum_j \phi^*_j(y)\phi_j(\tilde x) = \delta(\tilde x - y) \quad \text{und}$$

$$\sum_i \phi^*_i(x)\phi_i(y) = \delta(x-y)$$

WW:

$$\hat H_{WW} = \ldots = \frac{1}{2}\int dx_1\, dx_2\, \hat\psi^+(x_1)\hat\psi^+(x_2) V(x_1,x_2) \hat\psi(x_2)\hat\psi(x_1)$$

Kinetische Energie?

Ersetze $U(x) \rightsquigarrow \partial_x^2$ $\Rightarrow$ also erhalten wir nun:

$$\int d\tilde x\, dx\, \hat\psi^+(\tilde x)\hat\psi(x) \int dy\, \delta(y-\tilde x) \underbrace{\partial_y^2 \delta(y-x)}_{\partial_x^2 \delta(y-x)}$$

$$= \int dx\, \hat\psi^+(x)\, \partial_x^2 \hat\psi(x)$$

$=$ 2× partielle Integration in x, & dann: führe $\int d\tilde x$, $\int dy$ aus

[Falls Bedenken: Betrachte diskrete Differenzen auf Gitter statt ∂_x]

$\Rightarrow$ In Ortsbasis:

$$\hat{H} = \int dx\ \hat{\psi}^+(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + U(x)\right)\hat{\psi}(x)$$

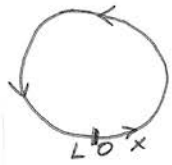
$$+ \frac{1}{2}\int dx_1 dx_2\ \hat{\psi}^+(x_1)\hat{\psi}^+(x_2)\ V(x_1,x_2)\ \hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)$$

(auch hier: für Bosonen oder Fermionen)

Impulsbasis

Falls $U(x) \equiv 0$: Ebene Wellen als Eint. basis!

Periodische Randbedingungen:



$$|k\rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}}, \quad k = n\frac{2\pi}{L}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

(aber keine Einschränkung, keine Brillouinzone, weil kein Gitter!)

$$\left[3D:\ |\vec{k}\rangle = \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{L^3}}\right]$$

$$\vec{k} = (n_1, n_2, n_3)\cdot\frac{2\pi}{L}, \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Falls doch ein Potential:

$$\sum_{k',k} \hat{a}^+_{k'} \underbrace{\langle k'|U|k\rangle}_{\parallel} \hat{a}_k$$

$$\int \frac{dx}{L^d}\, e^{-i\underbrace{(k'-k)}_{\downarrow}x}\, U(x)$$

$d =$ Dimension

"Impulsänderung durch Streuung am Potential"

WW: vereinfacht sich für <u>translationsinvariantes</u> Potential $V(x_1-x_2)$

dann:

$$\langle \vec{k}_1', \vec{k}_2' | V | \vec{k}_1, \vec{k}_2 \rangle$$

$$= \iint \frac{d\vec{x}_1}{L^d}\frac{d\vec{x}_2}{L^d}\, e^{-i[(\vec{k}_1'-\vec{k}_1)\vec{x}_1 + (\vec{k}_2'-\vec{k}_2)\vec{x}_2]}\, V(\vec{x}_1-\vec{x}_2)$$

über Ld Volumen

$$\approx \int \frac{d\vec{X}}{L^d}\, e^{-i[\vec{k}_1'-\vec{k}_1+\vec{k}_2'-\vec{k}_2]\vec{X}} \int \frac{d\vec{y}}{L^d}\, e^{-i[(\vec{k}_1'-\vec{k}_1)-(\vec{k}_2'-\vec{k}_2)]\frac{\vec{y}}{2}}\, V(\vec{y})$$

Vol.

darf über den <u>ganzen</u> Raum genommen werden, wenn $V(\vec{y})$ schnell genug abklingt. ("$\approx$" bezieht sich auf diese Näherung)

$$\left.\begin{aligned} \vec{x}_1 &= \vec{X} + \frac{\vec{y}}{2} \\ \vec{x}_2 &= \vec{X} - \frac{\vec{y}}{2} \end{aligned}\right\}$$ Schwerpkt. & Relativkoord.

[Bem.: Jacobidet. $=1$ für diese Koord.trafo]

$$= \underbrace{\delta_{\vec{k}_1'-\vec{k}_1+\vec{k}_2'-\vec{k}_2,\,\vec{0}}}_{\downarrow} \cdot \overbrace{\int \frac{d\vec{y}}{L^d}\, e^{-i\vec{q}\vec{y}}\, V(\vec{y})}^{\equiv \tilde{V}(\vec{q})}$$

<u>Impulserhaltung</u>

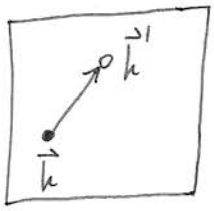
(wg. Transl. invarianz!)

"Impulsübertrag"

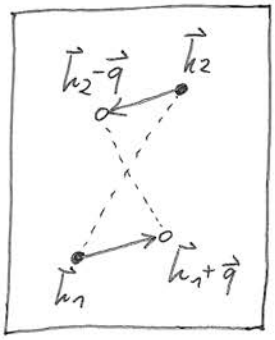
$$\vec{q} \equiv \vec{k}_1' - \vec{k}_1 = -(\vec{k}_2' - \vec{k}_2)$$

(Erinnerung: $\int_0^L dx\, e^{ikx} = \begin{cases} 0 & \text{für } k = n\frac{2\pi}{L} \text{ mit } n \neq 0 \\ L & \text{für } k = 0 \end{cases}$)

$\Rightarrow$ In Impulsbasis:



$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}',\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}'} \tilde{u}(\vec{k}'-\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k}}$$



$$+ \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{q}} \hat{a}^+_{\vec{k}_1+\vec{q}} \hat{a}^+_{\vec{k}_2-\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{k}_2} \hat{a}_{\vec{k}_1}$$

wobei $\tilde{u}(\vec{q}) := \int \frac{d\vec{x}}{L^d} e^{-i\vec{q}\vec{x}} u(\vec{x})$ usw.