

3 Zweite Quantisierung. Quantenfeldtheorie

3.1 Quantenmechanik identischer Teilchen

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Konsequenzen der Tatsache, dass identische Teilchen eine neue Symmetrie hervorrufen, nämlich bezüglich Permutationen der Teilchen. Diese Symmetrie führt zu tiefgreifenden Unterschieden zwischen klassischen bzw. quantenmechanischen Systemen.

Im Fall von klassischen Teilchen können wir den Zustand eines Systems durch die instantanen Koordinaten und Impulse der Teilchen beschreiben. Als Beispiel betrachten wir zwei klassische Teilchen, deren Positionen und Impulse durch

$$\begin{aligned} q_1(t) &= q(t), & q_2(t) &= q'(t) \\ p_1(t) &= p(t), & p_2(t) &= p'(t) \end{aligned} \tag{3.1}$$

gegeben sind. Da wir annehmen, dass die Teilchen *identisch* sind, sollen die physikalischen Eigenschaften des Systems durch eine Vertauschung der Funktionen in (3.1)

$$\begin{aligned} q_1(t) &= q'(t), & q_2(t) &= q(t) \\ p_1(t) &= p'(t), & p_2(t) &= p(t) \end{aligned} \tag{3.2}$$

unverändert bleiben. Die Beschreibung des Systems ist vollkommen äquivalent in beiden Fällen. Dementsprechend genügt es, eine der beiden Möglichkeiten zu nehmen. Dies bedeutet aber, dass die Teilchen als *unterscheidbar* betrachtet werden können, da wir im Prinzip zwischen den beiden Möglichkeiten durch die Anfangsbedingungen unterscheiden könnten.

Im Gegensatz zum klassischen Fall können wir im quantenmechanischen Fall nicht mehr von Bahnen der Teilchen sprechen. Wir betrachten nochmals zwei Teilchen, welche zur Zeit t_0 weit von einander entfernt sind. Sie werden zu diesem Zeitpunkt durch folgende Wellenfunktionen beschrieben:

$$\psi_0(\vec{x}_1, t_0), \quad \psi'_0(\vec{x}_2, t_0), \tag{3.3}$$

wobei wir annehmen können, dass sie von einander getrennte Wellenpakete darstellen. Die Wellenfunktion des gesamten Systems ist durch

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t = t_0) = \psi_0(\vec{x}_1, t_0) \psi'_0(\vec{x}_2, t_0) \tag{3.4}$$

gegeben. Da die Teilchen identisch sind, ist es auch möglich, die folgende Wellenfunktion für das gesamte System zu haben:

$$\bar{\psi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t = t_0) = \psi_0(\vec{x}_2, t_0) \psi'_0(\vec{x}_1, t_0). \tag{3.5}$$

Falls ψ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung zur Zeit t_0 ist, soll auch $\bar{\psi}$ eine Lösung sein, da wir vorausgesetzt haben, dass

$$H(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = H(\vec{x}_2, \vec{x}_1) \tag{3.6}$$

ist. Hier liegt eine Austauschentartung vor. Wir können sehen, dass ψ und $\bar{\psi}$ tatsächlich verschiedene Zustände sind, da sie orthogonal zueinander sind:

$$\begin{aligned} & \int d^3x_1 d^3x_2 \psi^*(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t_0) \bar{\psi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t_0) \\ &= \underbrace{\int d^3x_1 \psi_0^*(\vec{x}_1, t_0) \psi'_0(\vec{x}_1, t_0)}_{=0} \underbrace{\int d^3x_2 \psi'^*_0(\vec{x}_2, t_0) \psi_0(\vec{x}_2, t_0)}_{=0} = 0, \end{aligned} \quad (3.7)$$

wobei die Integrale verschwinden, da wir angenommen haben, dass zur Zeit t_0 die Wellenpakete miteinander nicht überlappen.

Wir betrachten nun die zeitliche Evolution des Systems, wobei wir annehmen, dass die Teilchen sich einander nähern. Im Allgemeinen wird die Wellenfunktion des Systems nicht die Form eines Produkts haben. Dennoch gibt es immer noch die Möglichkeit, das System mit zwei Wellenfunktionen ψ bzw. $\bar{\psi}$ zu beschreiben, da aufgrund der Gleichung (3.6), beide Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind. D.h. wir können auch eine Linearkombination betrachten, da die Schrödinger-Gleichung linear ist, so dass jede Linearkombination von ψ und $\bar{\psi}$ auch eine Lösung ist. Insbesondere betrachten wir eine symmetrische und eine antisymmetrische Kombination von ψ und $\bar{\psi}$:

$$\begin{aligned} \psi^S &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi + \bar{\psi}), \\ \psi^A &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi - \bar{\psi}). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Die obigen Linearkombinationen sind symmetrisch bzw. antisymmetrisch bezüglich einer Permutation der Teilchen. Auch eine Linearkombination von ψ^S und ψ^A ist eine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Dementsprechend betrachten wir nun

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = \alpha \psi^A(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) + \beta \psi^S(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t), \quad (3.9)$$

wobei $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen (entweder 1 oder 2) bei \vec{x} und das andere bei \vec{x}' zu finden, ist

$$\begin{aligned} P(\vec{x}, \vec{x}') &= |\Psi(\vec{x}, \vec{x}')|^2 + |\Psi(\vec{x}', \vec{x})|^2 \\ &= |\alpha|^2 |\psi^A(\vec{x}, \vec{x}')|^2 + |\beta|^2 |\psi^S(\vec{x}, \vec{x}')|^2 \\ &\quad + \alpha^* \beta \psi^{A*}(\vec{x}, \vec{x}') \psi^S(\vec{x}, \vec{x}') + \beta^* \alpha \psi^{S*}(\vec{x}, \vec{x}') \psi^A(\vec{x}, \vec{x}') \\ &\quad + |\alpha|^2 |\psi^A(\vec{x}', \vec{x})|^2 + |\beta|^2 |\psi^S(\vec{x}', \vec{x})|^2 \\ &\quad + \alpha^* \beta \psi^{A*}(\vec{x}', \vec{x}) \psi^S(\vec{x}', \vec{x}) + \beta^* \alpha \psi^{S*}(\vec{x}', \vec{x}) \psi^A(\vec{x}', \vec{x}) \\ &= 2 [|\alpha|^2 |\psi^A(\vec{x}, \vec{x}')|^2 + |\beta|^2 |\psi^S(\vec{x}, \vec{x}')|^2]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Da alle Linearkombinationen physikalisch äquivalent sind, muss die Wahrscheinlichkeit P unabhängig von α und β sein. Dies ist der Fall nur dann, wenn

$$|\psi^A(\vec{x}, \vec{x}')| = |\psi^S(\vec{x}, \vec{x}')| \quad (3.11)$$

ist. Nun nehmen wir an, dass die Teilchen miteinander nicht wechselwirken. Dies bedeutet, dass die Wellenfunktion des gesamten Systems als Produkt der Ein-Teilchen-Wellenfunktionen geschrieben werden kann, auch dann, wenn die Teilchen sich einander nähern. Mit Hilfe von Gl. (3.4) haben wir

$$|\psi^{S,A}(\vec{x}, \vec{x}')| = \frac{1}{\sqrt{2}} |\psi_0(\vec{x}) \psi'_0(\vec{x}') \pm \psi_0(\vec{x}') \psi'_0(\vec{x})| . \quad (3.12)$$

Für $\vec{x} = \vec{x}'$ führt dies zu

$$|\psi^S(\vec{x}, \vec{x})| = \sqrt{2} |\psi_0(\vec{x}) \psi'_0(\vec{x})| \neq 0 , \quad (3.13)$$

aber $|\psi^A(\vec{x}, \vec{x})| = 0$. Dieser Widerspruch deutet darauf hin, dass im Fall von identischen Teilchen die Wellenfunktion des Systems nicht als beliebige Überlagerung von symmetrischen und antisymmetrischen Zuständen geschrieben werden kann.

3.1.1 Permutationsoperatoren

Wir betrachten zunächst den Fall zweier Teilchen. Sei $\{|u_i\rangle\}$ ein vollständiger Satz von Ein-Teilchen-Zuständen. Eine Basis für Zwei-Teilchen-Zustände kann als Produkt gebildet werden:

$$|u_i^{(1)}\rangle \otimes |u_j^{(2)}\rangle \equiv |u_i^{(1)}; u_j^{(2)}\rangle . \quad (3.14)$$

Nun führen wir einen *Permutationsoperator* ein, der die Teilchen vertauscht:

$$P |u_i^{(1)}; u_j^{(2)}\rangle = |u_i^{(2)}; u_j^{(1)}\rangle . \quad (3.15)$$

Bei einer zweifachen Anwendung des Operators P erhalten wir den ursprünglichen Zustand. Da diese Tatsache unabhängig von den betrachteten Zuständen ist, muss

$$P^2 = 1 \quad (3.16)$$

allgemein gelten. Wir können weiterhin durch Betrachtung von beliebigen Matrixelementen zeigen, dass P hermitesch ist:

$$\langle u_i^{(1)}; u_j^{(2)} | P | u_{i'}^{(1)}; u_{j'}^{(2)} \rangle = \langle u_i^{(1)}; u_j^{(2)} | u_{i'}^{(2)}; u_{j'}^{(1)} \rangle = \delta_{ij'} \delta_{ji'} . \quad (3.17)$$

Da alle Matrixelemente reell sind, folgt $P^\dagger = P$. Schließlich, da $P^2 = 1$ gilt, haben wir

$$PP = P^\dagger P = 1 , \quad (3.18)$$

d.h. P ist unitär.

Nun betrachten wir die möglichen Eigenwerte von P . Falls $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand von P ist, erhalten wir, da $P^2 = 1$ gilt,

$$P^2 |\psi\rangle = \lambda^2 |\psi\rangle \implies \lambda = \pm 1 . \quad (3.19)$$

Die Eigenzustände mit Eigenwert +1 sind symmetrisch und diejenige mit Eigenwert -1 antisymmetrisch.

$$\begin{aligned} P | \psi_S \rangle &= | \psi_S \rangle \\ P | \psi_A \rangle &= - | \psi_A \rangle . \end{aligned} \tag{3.20}$$

Nun betrachten wir den Fall mit $N > 2$ Teilchen. Eine Basis für N -Teilchen-Zustände kann wiederum durch Produkte von Ein-Teilchen-Zuständen gebildet werden.

$$| u_{i_1}^{(1)}, u_{i_2}^{(2)}, \dots, u_{i_N}^{(N)} \rangle = | u_{i_1}^{(1)} \rangle \otimes | u_{i_2}^{(2)} \rangle \otimes \dots \otimes | u_{i_N}^{(N)} \rangle . \tag{3.21}$$

Im Allgemeinen gibt es $N!$ mögliche Permutationen. Wir bezeichnen eine allgemeine Permutation wie folgt:

$$P_{\ell_1 \dots \ell_N} , \quad \text{mit } \ell_j = 1, \dots, N; j = 1, \dots, N . \tag{3.22}$$

Als Beispiel diskutieren wir den Fall $N = 3$. Es gibt $3! = 6$ mögliche Permutationen: $P_{123}, P_{231}, P_{312}, P_{213}, P_{321}$, und P_{132} . Die Anwendung eines Permutationsoperators auf einen Zustand ist z.B. wie folgt:

$$P_{312} | u_{i_1}^{(1)}, u_{i_2}^{(2)}, u_{i_3}^{(3)} \rangle = | u_{i_1}^{(3)}, u_{i_2}^{(1)}, u_{i_3}^{(2)} \rangle = | u_{i_2}^{(1)}, u_{i_3}^{(2)}, u_{i_1}^{(3)} \rangle .$$

Eigenschaften des Permutationsoperators

Die Permutationsoperatoren bilden eine Gruppe:

i) Das Produkt zweier Permutationsoperatoren ist ein Permutationsoperator.

Beispiel: $N = 3$, wobei z.B. $P_{312}P_{213} = P_{132}$

$$\begin{aligned} P_{312}P_{213} | u_{i_1}^{(1)}, u_{i_2}^{(2)}, u_{i_3}^{(3)} \rangle &= P_{312} | u_{i_1}^{(2)}, u_{i_2}^{(1)}, u_{i_3}^{(3)} \rangle \\ &= P_{312} | u_{i_2}^{(1)}, u_{i_1}^{(2)}, u_{i_3}^{(3)} \rangle \\ &= | u_{i_2}^{(3)}, u_{i_1}^{(1)}, u_{i_3}^{(2)} \rangle \\ &= P_{132} | u_{i_1}^{(1)}, u_{i_2}^{(2)}, u_{i_3}^{(3)} \rangle . \end{aligned}$$

ii) Die Identität ist auch ein Permutationsoperator. In unserem Beispiel ist die Identität P_{123} .

iii) Das Inverse einer Permutation ist auch eine Permutation. In unserem Beispiel haben wir

$$\begin{aligned} P_{123}^{-1} &= P_{123} , & P_{231}^{-1} &= P_{312} \\ P_{312}^{-1} &= P_{231} , & P_{213}^{-1} &= P_{213} \\ P_{321}^{-1} &= P_{321} , & P_{132}^{-1} &= P_{132} . \end{aligned}$$

Im Allgemeinen kommutieren Permutationen nicht. In unserem Beispiel kann einfach gesehen werden, dass $P_{213}P_{312} = P_{321} \neq P_{132} = P_{312}P_{213}$.

Eine Permutation, bei der nur zwei Teilchen vertauscht werden, heißt *Transposition*. In unserem Beispiel sind P_{132} , P_{321} , und P_{213} Transpositionen. Wie wir im Fall $N = 2$ gesehen haben, sind Transpositionen hermitesch und unitär. Jeder Permutationsoperator kann als Produkt von Transpositionen ausgedrückt werden. In unserem Beispiel hatten wir $P_{312} = P_{132}P_{213}$. Die *Parität* einer Permutation ist durch die Anzahl von Transpositionen, in die eine Permutation zerlegt werden kann, gegeben. In unserem Beispiel ist P_{132} ungerade aber P_{312} ist gerade. Da eine Permutation ein Produkt von Transpositionen ist und Transpositionen unitär sind, sind Permutationen unitär. Da aber Permutationen im Allgemeinen nicht kommutieren, sind Permutationen i.A. nicht hermitesch, obwohl Transpositionen hermitesch sind.

3.1.2 Symmetrisierungs- und Antisymmetrisierungsoperatoren

In diesem Abschnitt diskutieren wir mögliche Eigenzustände der Permutationsoperatoren. Dabei suchen wir Zustände, die Eigenzustände aller Permutationsoperatoren in einem System mit N Teilchen sind. Jede der $N!$ Permutationen wird durch einen Index p gekennzeichnet. Sei ein Zustand $|\psi\rangle$ so, dass

$$P_p |\psi\rangle = c_p |\psi\rangle \quad \forall p. \tag{3.23}$$

Der einfachste Fall ist derjenige einer Transposition, bei der wir gesehen haben, dass $c_p^{(transp)} = \pm 1$. Da wir angenommen haben, dass $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand aller Permutationen ist, muss er auch ein Eigenzustand aller Transpositionen sein. Darüberhinaus, falls alle Teilchen ununterscheidbar sind, kann der Eigenwert nicht von einer gegebenen Transposition abhängen, so dass der Eigenwert derselbe für alle Transpositionen sein soll, d.h. ± 1 . Somit muss der Eigenwert einer Permutation

$$c_p = (\pm 1)^{n_p} \tag{3.24}$$

sein, wobei n_p die Anzahl der Transpositionen ist, in die die p -te Permutation zerlegt werden kann. Da diese Zahl je nach Parität der Permutation entweder gerade oder ungerade ist, gibt es zwei mögliche Fälle.

a) Total symmetrischer Fall.

$$P_p |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \implies c_p = 1 \quad \forall p. \tag{3.25}$$

b) Total antisymmetrischer Fall.

$$P_p |\psi_A\rangle = \epsilon_p |\psi_A\rangle, \quad \begin{cases} \epsilon_p = +1 & P_p \text{ eine gerade Permutation} \\ \epsilon_p = -1 & P_p \text{ eine ungerade Permutation} \end{cases} \tag{3.26}$$

Die Menge aller total symmetrischen Zustände spannt einen Unterraum des gesamten Hilbertraums, den wir \mathcal{H}_S nennen und dementsprechend \mathcal{H}_A für die total antisymmetrische Zustände. Es ist einfach zu sehen, dass die Zustände dieser zwei Unterräume orthogonal zu einander sind:

$$\langle \psi_S | \psi_A \rangle = \langle \psi_S | P_p^\dagger | \psi_A \rangle = \langle \psi_S | P_p^{-1} | \psi_A \rangle = - \langle \psi_S | \psi_A \rangle, \quad (3.27)$$

wobei wir angenommen haben, dass die Parität von P_p^{-1} ungerade ist.

Schließlich können wir Projektionsoperatoren in die Unterräume \mathcal{H}_S bzw. \mathcal{H}_A aufstellen, so dass wir aus einem beliebigen Zustand Elemente von \mathcal{H}_S bzw. \mathcal{H}_A erhalten können. Wir definieren die folgenden Operatoren

$$S = \frac{1}{N!} \sum_p P_p \quad \text{Symmetrisierungsoperator,} \quad (3.28)$$

$$A = \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p P_p \quad \text{Antisymmetrisierungsoperator,} \quad (3.29)$$

wobei wir über die $N!$ Permutationen summieren. Da P_p unitär ist, ist $P^\dagger = P^{-1}$ auch ein Permutationsoperator. Daraus ergibt sich, dass $S^\dagger = S$ und $A^\dagger = A$, d.h. beide Operatoren sind hermitesch. Darüberhinaus sehen wir, dass für jeden Permutationsoperator P_{p_0} folgendes gilt:

$$\begin{aligned} P_{p_0} S &= \frac{1}{N!} \sum_p P_{p_0} P_p = \frac{1}{N!} \sum_{p'} P_{p'} = S, \\ P_{p_0} A &= \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p P_{p_0} P_p = \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_{p_0}^2 \epsilon_p P_{p_0} P_p \\ &= \epsilon_{p_0} \frac{1}{N!} \sum_p \underbrace{\epsilon_{p_0} \epsilon_p}_{\tilde{\epsilon}_p} \underbrace{P_{p_0} P_p}_{\tilde{P}_p} = \epsilon_{p_0} A. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Mit den obigen Ergebnissen kann man auch zeigen, dass

$$S^2 = S \frac{1}{N!} \sum_p P_p = \frac{1}{N!} \sum_p \underbrace{S P_p}_{=S} = S \quad (3.31)$$

$$A^2 = A \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p P_p = \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p \underbrace{A P_p}_{=\epsilon_p A} = A \quad (3.32)$$

$$SA = S \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p P_p = \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p S P_p = S \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p = 0. \quad (3.33)$$

Die Gleichungen (3.31) und (3.32) zeigen, dass S and A Projektionsoperatoren sind, während (3.33) zeigt, dass sie in orthogonale Unterräume projizieren.

3.2 Das Symmetrisierungspostulat. Bosonen und Fermionen

Im Fall zweier ununterscheidbarer Teilchen haben wir gesehen, dass ein Widerspruch entsteht, wenn wir beliebige Überlagerungen von symmetrischen und antisymmetrischen Zuständen zulassen. Wir haben auf der anderen Seite gesehen, dass es im allgemeinen Fall von N ununterscheidbaren Teilchen möglich ist, beliebige Zustände in den Unterraum total symmetrischer bzw. antisymmetrischer Zustände zu projizieren. Damit könnten wir den Widerspruch beseitigen. Dennoch bleibt dann die Frage offen, was mit den übrigen Zuständen geschehen soll.

Um dieses Problem zu vermeiden, führen wir das Symmetrisierungspostulat ein: *Die physikalische Zustände eines Systems mit N identischen Teilchen sind entweder total symmetrisch oder total antisymmetrisch bezüglich Permutationen der Teilchen. Die Teilchen mit symmetrischen Zuständen werden Bosonen und die Teilchen mit antisymmetrischen Zuständen werden Fermionen genannt.*

Damit haben wir ein zusätzliches Postulat, worauf die Quantenmechanik beruht. Als Folge dieses Postulats ist es nicht mehr möglich, die Zustände eines Hilbertraums für N identische Teilchen als Produktzustände zu bilden. Die Produktzustände müssen symmetrisiert bzw. antisymmetrisiert werden. Den Unterraum der Bosonen bzw. Fermionen nennen wir \mathcal{H}_S bzw. \mathcal{H}_A .

Zu diesem Zeitpunkt mag dieses Postulat willkürlich erscheinen. Wir haben aber schon im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik gesehen, dass der Spin auch postuliert werden musste. Erst in der relativistischen Quantenmechanik konnte durch die Dirac-Gleichung gezeigt werden, dass es Teilchen mit dieser neuen Quantenzahl gibt. In Bezug auf Bosonen und Fermionen gibt es ein sogenanntes Spin-Statistik-Theorem, das besagt, dass in einer lokalen relativistischen Quantenfeldtheorie in vier Raumzeit-Dimensionen Teilchen mit halbzahligem Spin Fermionen und Teilchen mit ganzzahligem Spin Bosonen sind. Andere Spins sind nicht erlaubt, da, wie wir in der nichtrelativistischen Quantenmechanik gesehen haben, die Algebra der Drehimpulsoperatoren in drei Raumdimensionen (d.h. die $SU(2)$ Algebra) nur Eigenwerte des Operators \vec{S}^2 der Form $s(s+1)$ mit s halb- oder ganzzahlig zulässt. Bisher wurde keine Verletzung des Symmetrisierungspostulats beobachtet. Dennoch können Systeme in niedrigen Dimensionen Abweichungen von der obigen Regel zeigen. Wir diskutieren diesen Punkt im Folgenden qualitativ.

- $d = 1$. Wir stellen uns hier ein rein ein-dimensionales System mit Teilchen vor, die sich nicht durchdringen können (*hard-core*). Da die Reihenfolge der Teilchen während der Zeitevolution des Systems nicht geändert werden kann, sind Austauschprozesse ausgeschlossen. Demnach spielen die statistischen Eigenschaften der Teilchen keine Rolle. In der Tat ist es in einer Dimension möglich, sog. *hard-core* Bosonen in Fermionen mittels der *Jordan-Wigner-Transformation* exakt abzubilden. Es ist sogar möglich allgemeinere Statistiken aufzustellen. Darüberhinaus ist es in einer Dimension möglich, die niederenergetischen Prozesse von Bosonen (auch von solchen, die keine *hard-core* Bosonen sind) durch

Fermionen und umgekehrt zu beschreiben. Dies wird durch eine Abbildung, welche unter dem Namen *Bosonisierung* bekannt ist, durchgeführt. Obwohl die hier erwähnten Tatsachen in dieser Vorlesung nicht diskutiert werden können, ist es nützlich zu wissen, dass solche Möglichkeiten vorhanden sind.

- $d = 2$. In diesem Fall haben wir Teilchen in einer Ebene. Wir stellen uns zwei solcher Teilchen vor. Wie bereits diskutiert, bringen wir zwei Teilchen durch zweimalige Anwendung einer Transposition zurück in ihren Anfangszustand. Jedoch können wir uns ein Fädchen vorstellen, das die beiden Teilchen verbindet. Damit können wir die Zustände vor und nach der zweifachen Permutation durch die Windungszahl des Fädchens unterscheiden. Dies zeigt, dass in zwei Dimensionen eine zusätzliche topologische Eigenschaft der Pfade während der zeitlichen Evolution des Systems zu neuen Phänomenen wie der *fraktionellen Statistik* führen kann. Die Konsequenzen der fraktionelle Statistik können im *fraktionellen Quanten-Hall-Effekt* experimentell beobachtet werden.
- $d = 3$. In diesem Fall erlauben die topologischen Eigenschaften des Raumes keinen Unterschied wie in zwei Dimensionen, so dass die Teilchen entweder Bosonen oder Fermionen sind.

Mit dem Symmetrisierungspostulat wird das Problem der Austauschentartung gelöst, da nur Zustände, welche entweder zu \mathcal{H}_S oder \mathcal{H}_A gehören, zugelassen werden. In diesen Fällen führt eine Permutation nicht zu einem neuen Zustand, vielmehr ist der Zustand gegenüber einer Permutation invariant:

$$\begin{aligned}
 i) \text{ Bosonen: } S | \psi \rangle &= | \psi \rangle . \\
 \implies P | \psi \rangle &= PS | \psi \rangle = S | \psi \rangle = | \psi \rangle . \quad (3.34)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 ii) \text{ Fermionen: } A | \psi \rangle &= | \psi \rangle . \\
 \implies P_p | \psi \rangle &= P_p A | \psi \rangle = \epsilon_p A | \psi \rangle = \epsilon_p | \psi \rangle . \quad (3.35)
 \end{aligned}$$

In diesem Fall erzeugt die Permutation nur Zustände, die linear abhängig vom ursprünglichen Zustand sind.

3.2.1 Besetzungszahl-Zustand für Bosonen

Wir betrachten ein System mit N Teilchen, wobei jedes Teilchen Ein-Teilchen-Zustände $|u_i\rangle$ mit $i = 1, \dots, \infty$, besetzen kann. Falls die Ein-Teilchen-Zustände $|u_i\rangle$ eine Basis bilden, können wir eine Basis für die N Teilchen mittels des Tensorprodukts $|u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle$ aufstellen, wobei n_i die Anzahl der Teilchen im Zustand $|u_i\rangle$ ist. Selbstverständlich muss

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N \quad (3.36)$$

gelten. Die obige Diskussion gilt für unterscheidbare Teilchen. Falls die Teilchen ununterscheidbar sind, müssen wir den Projektor S auf die Produktzustände anwenden, so dass die physikalischen Zustände die folgende Form haben:

$$S|u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle = \frac{1}{N!} \sum_p P_p |u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle. \quad (3.37)$$

Um den obigen Zustand normieren zu können, diskutieren wir im Folgenden die Wirkung der Permutationsoperatoren auf die Produktzustände. Bei der Permutationen in der Gl. (3.37) gibt es welche, die die Teilchen innerhalb eines gegebenen Zustands $|u_i^{n_i}\rangle$ vertauschen. Gegeben n_i Teilchen gibt es $n_i!$ solcher Permutationen. Diese Permutationen ändern den Zustand $|u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle$ nicht. Es gibt insgesamt $\prod_{j=1}^{\infty} n_j!$ solche Permutationen.

Andere Permutationen ändern den Vektor $|u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle$. Um dies zu sehen, betrachten wir die Vektoren $|u_1^{n_1}\rangle$ und $|u_2^{n_2}\rangle$ näher. Wir können sie wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} |u_1^{n_1}\rangle &= |u_1^{(1)}, \dots, u_1^{(\alpha)}, \dots, u_1^{(n_1)}\rangle, \\ |u_2^{n_2}\rangle &= |u_2^{(n_1+1)}, \dots, u_2^{(\beta)}, \dots, u_2^{(n_1+n_2)}\rangle. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Nun stellen wir uns eine Transposition zwischen dem α -ten Teilchen im Zustand 1 mit $1 \leq \alpha \leq n_1$ und dem β -ten Teilchen im Zustand 2 mit $n_1 + 1 \leq \beta \leq n_1 + n_2$ vor. Da nach der Transposition das α -te Teilchen sich im Zustand 2 befindet und das β -te Teilchen im Zustand 1, haben wir einen vom Anfangszustand verschiedenen Zustand. Darüberhinaus sind sie orthogonal, da die Zustände $|u_i\rangle$ Basiszustände sind.

Nun können wir die Norm des Vektors (3.37) berechnen.

$$\begin{aligned} &\langle u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots | S^\dagger S | u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots \rangle \\ &= \langle u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots | \underbrace{SS}_{=S} | u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_p \langle u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots | P_p | u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots \rangle \\ &= \frac{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!}{N!}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Somit sehen wir, dass gegeben eine Basis von Ein-Teilchen-Zuständen $\{|u_i\rangle\}$ ein normierter Zustand für N Bosonen durch

$$|\psi_S\rangle = \left(\frac{N!}{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!} \right)^{\frac{1}{2}} S |u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle \quad (3.40)$$

gegeben ist.

Als nächstes diskutieren wir die Aufstellung einer Basis in \mathcal{H}_S . Wie vorhin betrachten wir eine Basis des N -Teilchensystems, die durch ein Produkt von Einzelteilchen-Zuständen gegeben ist. Sie bilden eine Basis von \mathcal{H} , dem Hilbertraum, der als Tensorprodukt der Hilberträume der einzelnen Teilchen erhalten wurde. Der Unterraum der total symmetrischen Zustände bezüglich Permutationen ist \mathcal{H}_S mit $\mathcal{H}_S \subset \mathcal{H}$. Somit ist jeder Vektor $|\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S$ auch ein Element von \mathcal{H} , so dass er in der Basis von \mathcal{H} entwickelt werden kann.

$$|\psi_S\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} a_{i_1, \dots, i_N} |u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)}\rangle \quad (3.41)$$

Aus der Diskussion im Abs. 3.1.1 wissen wir, dass falls $|\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S$, dann gilt $S|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle$, so dass

$$|\psi_S\rangle = S|\psi_S\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} a_{i_1, \dots, i_N} S|u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)}\rangle \quad (3.42)$$

Da $S|u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)}\rangle$ Elemente von \mathcal{H}_S sind und $|u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)}\rangle$ eine Basis in \mathcal{H} bilden, ist zu erwarten, dass sie ebenfalls eine Basis von \mathcal{H}_S bilden. Um zu sehen, dass dies tatsächlich der Fall ist, führen wir den Vektor

$$|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = cS|u_1^{n_1}, \dots, u_i^{n_i}, \dots\rangle \quad (3.43)$$

ein und diskutieren seine Eigenschaften.

i) Skalarprodukt.

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | n'_1, \dots, n'_i, \dots \rangle \neq 0, \quad (3.44)$$

nur dann, wenn $n_i = n'_i$ für $i = 1, 2, \dots$. Dies kann verstanden werden, indem wir den Vektor $|u_1^{n_1}, \dots, u_i^{n_i}, \dots\rangle$ betrachten. Falls zwei Vektoren eine unterschiedliche Anzahl von Teilchen in einem gegebenen Zustand haben, bedeutet dies, dass es Teilchen gibt, welche in verschiedenen Zuständen bei den jeweiligen Vektoren sind. Somit sind diese Vektoren orthogonal zueinander.

ii) Normierung.

Wie wir in (3.39) gesehen haben, ist die Normierungskonstante durch

$$c = \left(\frac{N!}{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.45)$$

gegeben

iii) Basis.

Die Gleichung (3.42) zeigt, dass jeder Zustand \mathcal{H}_S durch Zustände proportional zu $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ entwickelt werden kann. Darüberhinaus wurde in *i)* und *ii)* gezeigt, dass diese Zustände orthonormal sind. Demnach bilden sie eine Basis von \mathcal{H}_S .

Nachdem wir eine Basis von \mathcal{H}_S gefunden haben, müssen wir sehen, welche Folgen die Ununterscheidbarkeit der Teilchen für die Koeffizienten in der Entwicklung (3.42) hat. Dafür schreiben wir die Summe in (3.42) über alle mögliche Zustände für N Teilchen als eine Summe über alle mögliche Besetzungszahlen mit der Bedingung, dass die Gesamtzahl der Teilchen N ist, und eine Summe über alle mögliche Zustände, die mit einer gegebenen Konfiguration der Besetzungszahlen verträglich ist.

$$\sum_{i_1, \dots, i_N} = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_j, \dots \\ \sum_i n_i = N}} \sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ (n_1, \dots, n_j, \dots)}} \quad (3.46)$$

Damit ergibt sich

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{c} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_j, \dots \\ \sum_i n_i = N}} \sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ (n_1, \dots, n_j, \dots)}} a_{i_1, \dots, i_N} |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (3.47)$$

Nun erinnern wir daran, dass die Teilchen identisch sind. Demnach sind, für eine gegebene Konfiguration der Besetzungszahlen n_1, \dots, n_j, \dots , die Koeffizienten a_{i_1, \dots, i_N} unabhängig von der jeweiligen Verteilung der Teilchen in den verschiedenen Zuständen, d.h.

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ (n_1, \dots, n_j, \dots)}} a_{i_1, \dots, i_N} &= a_{n_1, \dots, n_j, \dots} \sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ (n_1, \dots, n_j, \dots)}} \\ &= a_{n_1, \dots, n_j, \dots} \frac{N!}{n_1! \dots n_j! \dots}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Mit Berücksichtigung des Koeffizienten $1/c$ in (3.47) können wir folgende Koeffizienten definieren:

$$c_{n_1, \dots, n_j, \dots} = \sqrt{\frac{N!}{n_1! \dots n_j! \dots}} a_{n_1, \dots, n_j, \dots}, \quad (3.49)$$

so dass

$$|\psi_S\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots} |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle, \quad (3.50)$$

wobei

$$\sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} |c_{n_1, \dots, n_j, \dots}|^2 = 1, \quad (3.51)$$

mit der Bedingung (3.36).

3.2.2 Bose-Einstein-Statistik

Nachdem wir eine formale Beschreibung des Hilbertraums \mathcal{H}_S und die Aufstellung einer Basis ausgehend von einer Ein-Teilchen-Basis erreicht haben, erinnern wir an einige Begriffe der Statistischen Physik, die grundlegend sind, um ein System mit N Teilchen zu behandeln.

Wenn wir mit einer makroskopischen Anzahl von Teilchen arbeiten, wobei i.A. eine Temperatur definiert ist, können wir physikalische Eigenschaften des Systems mit Hilfe einer statistischen Beschreibung ausgehend von den Energieniveaus des Systems errechnen. In diesem Fall haben wir eine statistische Mischung von Zuständen und die statistischen Eigenschaften können mit der Dichtematrix ρ beschrieben werden. Bei der statistischen Mischung von Zuständen ordnen wir eine Wahrscheinlichkeit p_n zu einem Zustand $|\psi_n\rangle$ ein, so dass die Dichtematrix durch

$$\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \quad (3.52)$$

gegeben ist. Aus dieser Definition erhalten wir die Grundeigenschaften der Dichtematrix.

i) Normierung.

$$\text{Tr}\rho = 1 . \quad (3.53)$$

i) Erwartungswert eines Operators.

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) . \quad (3.54)$$

Kanonisches Ensemble

Hier betrachten wir ein System mit $N \gg 1$ Teilchen bei einer Temperatur T . Die Temperatur des Systems wird durch den Kontakt mit einem Wärmebad festgelegt. Wir nehmen an, dass die Wände des Systems einen Energieaustausch erlauben aber, dass die Anzahl der Teilchen im System ('1' genannt) konstant bleibt, d.h. es findet kein Austausch von Teilchen mit dem Bad statt. In diesem Fall haben wir ein *kanonisches Ensemble*. Im folgenden diskutieren wir, wie man die Dichtematrix für dieses statistische Ensemble erhält.

Wir nehmen an, dass das gesamte System (System 1 + Wärmebad) isoliert ist, so dass die gesamte Energie durch die Summe der Energien gegeben ist:

$$E = E_1 + E_2 = \text{cte} . \quad (3.55)$$

Mit '2' kennzeichnen wir das Wärmebad. Es wird angenommen, dass das Wärmebad viel größer als das System 1 ist, so dass $E_2 \gg E_1$ ist, da die Energie eine extensive Größe ist. Die Wahrscheinlichkeit, im System 1 eine Energie E_1 zu haben, muss

proportional zur Anzahl von Zuständen im System 2, welche mit einer Energie E_2 verträglich sind:

$$p(E_1) \sim \Gamma_2(E_2) . \quad (3.56)$$

Ein Maß für die Anzahl der Zustände bei einer gegebenen Energie ist durch die Entropie gegeben:

$$S_2(E_2) = k_B \ln \Gamma_2(E_2) , \quad (3.57)$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante ist. Für S_2 können

$$S_2(E_2) = S_2(E - E_1) \simeq S_2(E) - E_1 \frac{\partial S}{\partial E} \quad (3.58)$$

schreiben. Aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik

$$dE = TdS - PdV \quad (3.59)$$

haben wir beim konstanten Volumen

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T} , \quad (3.60)$$

so dass sich aus den Gln. (3.57) und (3.58) ergibt

$$\Gamma_2(E_2) \sim \exp \left[\frac{S_2(E)}{k_B} \right] \exp \left(-\frac{E_1}{k_B T} \right) . \quad (3.61)$$

Durch Einsetzen dieses Ergebnisses in die Gl. (3.56) erhalten wir

$$p(E_1) \sim \exp \left(-\frac{E_1}{k_B T} \right) . \quad (3.62)$$

Damit erhalten wir die Wahrscheinlichkeit, eine Energie E_1 bei gegebener Temperatur T zu haben. Somit wird die Dichtematrix die folgende Form haben:

$$\rho = \frac{\exp(-\beta H)}{\text{Tr} \exp(-\beta H)} , \quad (3.63)$$

wobei $\beta = (k_B T)^{-1}$ ist.

Großkanonisches Ensemble

In diesem Fall werden auch Teilchenzahlfluktuationen erlaubt. D.h. das System kann sowohl Energie als auch Teilchen mit dem Wärmebad austauschen. Die Teilchenzahlfluktuationen verursachen i.A. eine Fluktuation der Energie. Sie kann durch Einführung des *chemischen Potentials* beschrieben werden:

$$\mu = \left. \frac{\partial E}{\partial N} \right|_V . \quad (3.64)$$

Da N eigentlich eine diskrete Größe ist, ist die kleinste Änderung der Teilchenzahl $\Delta N = 1$, so dass das chemische Potential die Änderung der Energie beschreibt, wenn die Anzahl der Teilchen um eins erhöht wird. Um die Dichtematrix in diesem Fall zu erhalten, wiederholen wir die Diskussion für das kanonische Ensemble unter Berücksichtigung der Änderung der Teilchenzahl. Der erste Hauptsatz der Thermodynamik lautet in diesem Fall

$$dE = TdS - PdV + \mu dN . \quad (3.65)$$

Daraus erhalten wir bei konstantem Volumen

$$dS = \frac{1}{T} (dE - \mu dN) . \quad (3.66)$$

Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass $E_1 \ll E_2$ und $N_1 \ll N_2$ gilt, wobei die gesamte Energie $E = E_1 + E_2$ und die gesamte Anzahl der Teilchen $N = N_1 + N_2$ erhalten bleiben, ist die Wahrscheinlichkeit die Energie E_1 und die Anzahl von Teilchen N_1 im System 1 vorzufinden

$$p(E_1, N_1) \sim \Gamma_2(E_2, N_2) . \quad (3.67)$$

Für die Entropie erhalten wir

$$\begin{aligned} S_2(E_2, N_2) &= S_2(E - E_1, N - N_1) \\ &\simeq S_2(E, N) - E_1 \frac{\partial S}{\partial E} - N_1 \frac{\partial S}{\partial N} \\ &= S_2(E, N) - \frac{E_1}{T} - \frac{\mu N_1}{T} . \end{aligned} \quad (3.68)$$

Damit ergibt sich

$$p(E_1, N_1) \sim \exp \left[-\frac{1}{k_B T} (E_1 - \mu N_1) \right] . \quad (3.69)$$

Dementsprechend ist die Dichtematrix in diesem Fall

$$\rho = \frac{\exp \left[-\beta (H - \mu \hat{N}) \right]}{\text{Tr} \exp \left[-\beta (H - \mu \hat{N}) \right]} , \quad (3.70)$$

wobei \hat{N} der Teilchenzahloperator ist.

Bose-Einstein-Statistik

Nachdem wir die Dichtematrix im kanonischen und im großkanonischen Ensemble bestimmt haben, diskutieren wir, wie sie im Unterraum \mathcal{H}_S wirken. Wir betrachten hier das sog. *ideale Bose-Gas*, d.h. ein Ensemble von N Bosonen, welche

miteinander nicht wechselwirken. In diesem Fall kann der Hamiltonoperator des gesamten Systems als Summe von N Hamiltonoperatoren geschrieben werden:

$$H = H^{(1)} + H^{(2)} + \dots + H^{(N)} . \quad (3.71)$$

Die Energieniveaus werden mit $\varepsilon_i, i = 1, \dots, \infty$ gekennzeichnet. Die Zustandssumme ist wie folgt:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \exp \left[-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right] \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \langle n_1 \dots n_\infty | \exp \left[-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right] | n_1 \dots n_\infty \rangle . \end{aligned} \quad (3.72)$$

Der Teilchenzahloperator wirkt auf die Besetzungszustände wie folgt:

$$\hat{N} | n_1 \dots n_\infty \rangle = \sum_i n_i | n_1 \dots n_\infty \rangle , \quad (3.73)$$

während für den Hamiltonoperator gilt

$$H | n_1 \dots n_\infty \rangle = \sum_i \varepsilon_i n_i | n_1 \dots n_\infty \rangle . \quad (3.74)$$

Wenn wir die obigen Ergebnisse in die Gl. (3.72) einsetzen, erhalten wir

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \langle n_1 \dots n_\infty | \exp \left[\beta \left(\mu \sum_i n_i - \sum_i \varepsilon_i n_i \right) \right] | n_1 \dots n_\infty \rangle \\ &= \sum_{n_1} \exp [\beta (\mu n_1 - \varepsilon_1 n_1)] \times \dots \times \sum_{n_\infty} \exp [\beta (\mu n_\infty - \varepsilon_\infty n_\infty)] \\ &= \prod_i \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \exp [\beta (\mu - \varepsilon_i)] \right\}^n}_{\text{geometrische Reihe}} = \prod_i \frac{1}{1 - \exp [\beta (\mu - \varepsilon_i)]} . \end{aligned} \quad (3.75)$$

Aus der Zustandssumme ist es möglich, den Erwartungswert des Teilchenzahloperators zu erhalten:

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle &= \frac{\text{Tr} \hat{N} \rho}{\text{Tr} \rho} = \frac{\text{Tr} \hat{N} \exp \left[-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right]}{\text{Tr} \exp \left[-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right]} \\ &= k_B T \left. \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \text{Tr} \exp \left[-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right] \right|_{T, V} \\ &= k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left\{ \prod_i \frac{1}{1 - \exp [\beta (\mu - \varepsilon_i)]} \right\} \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\exp [\beta (\varepsilon_i - \mu)] - 1} . \end{aligned} \quad (3.76)$$

Da der Erwartungswert von \hat{N} die Summe der mittleren Besetzungszahlen \tilde{n}_i für die jeweiligen Niveaus i ist, erhalten wir das wohlbekannte Ergebnis

$$\tilde{n}_i = \frac{1}{\exp [\beta(\varepsilon_i - \mu)] - 1} . \quad (3.77)$$

Daraus ist es möglich zu zeigen, dass die Besetzungszahl des tiefsten Niveaus von freien Bosonen für $T \rightarrow 0$ im thermodynamischen Limes divergiert. Dies ist die sog. *Bose-Einstein-Kondensation*. Wir diskutieren sie hier nicht weiter. Dennoch zieht sie, wie die Quantenmechanik identischer Teilchen zu Phänomenen führt, die radikal anders sind als diejenigen in der klassische Physik.

3.2.3 Fermionen und das Ausschlußprinzip. Slater-Determinante.

Wir können hier im Grunde genommen das Gleiche wie bei den Bosonen im Abs. 3.2.1 wiederholen. Dennoch müssen wir darauf achten, dass wir nun mit Teilchen in \mathcal{H}_A zu tun haben. Für einen gegebenen Zustandsvektor $|u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle$ wie im bosonischen Fall müssen wir nun den Antisymmetrisierungsoperator anwenden, um den Zustand in den Unterraum \mathcal{H}_A zu projizieren.

$$A |u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle = \frac{1}{N!} \sum_p (-1)^p P_p |u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle . \quad (3.78)$$

Wir bemerken nun, dass, falls $n_i \geq 2$ für irgendeinen Zustand i ist, dieser Zustand symmetrisch bezüglich einer Transposition von zwei Teilchen in diesem Zustand ist. Dies bedeutet, dass

$$|u_1^{n_1}, \dots, u_i^{n_i}, \dots\rangle = \frac{1}{2} [1 + P_{\alpha_i \beta_i}] |u_1^{n_1}, \dots, u_i^{n_i}, \dots\rangle \quad (3.79)$$

ist. Jedoch haben wir schon in Abs. 3.1.1 gesehen, dass

$$P_p A = A P_p = (-1)^p A . \quad (3.80)$$

Die Identität hat gerade Parität aber eine Transposition hat ungerade Parität, so dass

$$A [1 + P_{\alpha_i \beta_i}] = A - A = 0 \quad (3.81)$$

gilt. Dies bedeutet, dass, wenn der Operator A auf einen Zustand mit $n_i \geq 2$ für irgendeinen Zustand i wirkt, er ihn vernichtet. Diese Tatsache entspricht dem Pauli-Ausschlußprinzip, das besagt, dass zwei Fermionen nicht denselben Zustand besetzen können. Demnach kann im Fall von Fermionen jeder Ein-Teilchen-Zustand höchstens einfach besetzt sein, d.h. $n_i = 0$ oder 1 .

Um die Norm des Zustands zu erhalten, können wir die Rechnung in (3.39) wiederholen, wobei $n_i = 0$ oder 1 sein kann. Damit erhalten wir

$$|\psi_A\rangle = \sqrt{N!} A |u_1^{n_1}, u_2^{n_2}, \dots, u_j^{n_j}, \dots\rangle. \quad (3.82)$$

Eine total antisymmetrische Wellenfunktion kann ausgehend von Ein-Teilchen-Zuständen in der Form einer sog. *Slater-Determinante* erhalten werden. Um dies zu sehen, schreiben wir $|\psi_A\rangle$ so um, dass wir explizit die Ein-Teilchen-Zustände, welche besetzt sind, sehen können:

$$\begin{aligned} |\psi_A\rangle &= \sqrt{N!} A |u_1^{(1)}, u_2^{(2)}, \dots, u_N^{(N)}\rangle \\ &= \sqrt{N!} \frac{1}{N!} \sum_p (-1)^p P_p |u_1^{(1)}, u_2^{(2)}, \dots, u_N^{(N)}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_N} |u_1^{(i_1)}, u_2^{(i_2)}, \dots, u_N^{(i_N)}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |u_1^{(i_1)}\rangle & |u_1^{(i_2)}\rangle & \dots & |u_1^{(i_N)}\rangle \\ |u_2^{(i_1)}\rangle & |u_2^{(i_2)}\rangle & \dots & |u_2^{(i_N)}\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ |u_N^{(i_1)}\rangle & |u_N^{(i_2)}\rangle & \dots & |u_N^{(i_N)}\rangle \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (3.83)$$

In der dritten Zeile oben haben wir das Levi-Civita-Symbol in N Dimensionen eingeführt. Dabei wird über wiederholte Indizes summiert. Das Levi-Civita-Symbol sorgt dafür, dass das richtige Vorzeichen der Parität der Permutation entsprechend vorkommt. Dieser Ausdruck entspricht der Determinante einer Matrix $|u_i^{(j)}\rangle$. Durch die Slater-Determinante wird das Ausschlußprinzip explizit berücksichtigt, da eine Determinante verschwindet, falls zwei Spalten oder Reihen gleich sind.

Die Besetzungszustände können in derselben Art und Weise erhalten werden, wie sie für Bosonen im Abs. 3.2.1 eingeführt wurden. Wir brauchen nur zu berücksichtigen, dass im Fall von Fermionen die Besetzungszahlen nur die Werte $n_i = 0, 1$ annehmen können. Ohne die Schritte, die wir im Fall von Bosonen gemacht haben, zu wiederholen, bemerken wir, dass die Besetzungszustände wie folgt erhalten werden können.

$$|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = cA |u_1^{n_1}, \dots, u_i^{n_i}, \dots\rangle, \quad (3.84)$$

wobei die unten stehenden Eigenschaften gelten.

i) Skalarprodukt.

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | n'_1, \dots, n'_i, \dots \rangle \neq 0, \quad (3.85)$$

nur dann, wenn $n_i = n'_i$ für $i = 1, 2, \dots$ mit $n_i = 0, 1$.

ii) Normierung.

Wie wir in (3.82) gesehen haben, ist die Normierungskonstante c durch

$$c = \sqrt{N!} \tag{3.86}$$

gegeben.

iii) Basis.

Aus denselben Gründen wie im Abs. 3.2.1 bilden die Zustände $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ eine Basis von \mathcal{H}_A .

Genauso wie im bosonischen Fall [Gl. (3.41)] kann ein total antisymmetrischer Zustand als eine lineare Überlagerung von Elementen der Basis in \mathcal{H} ausgedrückt werden, da $\mathcal{H}_A \subset \mathcal{H}$.

$$\begin{aligned} |\psi_A\rangle &= A |\psi_A\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} a_{i_1, \dots, i_N} A |u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)}\rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{i_1, \dots, i_N} a_{i_1, \dots, i_N} \sum_p \epsilon_p P_p |u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)}\rangle, \end{aligned} \tag{3.87}$$

wobei P_p die Teilchen permutiert. Diese Tatsache wird im Folgenden durch die Notation unten explizit zum Ausdruck gebracht.

$$P_p \longrightarrow P_p [(1), \dots, (N)] . \tag{3.88}$$

Wegen des Pauli-Ausschlußprinzips kann die Summe über Indizes i_1, \dots, i_N nur Terme beinhalten, bei denen alle Indizes von i_1 bis i_N verschieden sind. Daraus folgt, dass, wenn wir, wie es im Fall der Bosonen gemacht wurde, von einer Summe über Zustände zu einer Summe über Besetzungszahlen übergehen,

$$\sum_{i_1, \dots, i_N} = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_j, \dots \\ \sum_i n_i = N}} \sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ (n_1, \dots, n_j, \dots)}} , \tag{3.89}$$

die zweite Summe oben, welche für eine gegebene Verteilung der Besetzungszahlen durchgeführt wird, gleichbedeutend zu einer Permutation der Indizes i_i bis i_N ist:

$$\sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ (n_1, \dots, n_j, \dots)}} = \sum_p P_p (i_1, \dots, i_N) . \tag{3.90}$$

Dann erhalten wir für (3.87)

$$\begin{aligned} |\psi_A\rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_j, \dots \\ \sum_i n_i = N}} \sum_{p'} P_{p'} (i_1, \dots, i_N) a_{i_1, \dots, i_N} \\ &\quad \times \sum_p \epsilon_p P_p [(1), \dots, (N)] |u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)}\rangle . \end{aligned} \tag{3.91}$$

Da die Permutationen eine Gruppe bilden, können wir sie wie folgt zerlegen:

$$\begin{aligned}
 P_p [(1), \dots, (N)] &= P_{p'} [(1), \dots, (N)] P_{p'}^{-1} [(1), \dots, (N)] \\
 &\quad \times P_p [(1), \dots, (N)] \\
 &= P_{p'} [(1), \dots, (N)] P_{\bar{p}} [(1), \dots, (N)] .
 \end{aligned} \tag{3.92}$$

Weiterhin gilt

$$\epsilon_p = \epsilon_{p'} \epsilon_{\bar{p}} . \tag{3.93}$$

Mit den obigen Umformungen ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \sum_{p'} P_{p'} (i_1, \dots, i_N) a_{i_1, \dots, i_N} \sum_p \epsilon_p P_p [(1), \dots, (N)] | u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)} \rangle & \\
 = \sum_{p'} P_{p'} (i_1, \dots, i_N) a_{i_1, \dots, i_N} \epsilon_{p'} P_{p'} [(1), \dots, (N)] & \\
 \times \sum_{\bar{p}} \epsilon_{\bar{p}} P_{\bar{p}} [(1), \dots, (N)] | u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)} \rangle . & \tag{3.94}
 \end{aligned}$$

Nun bemerken wir, dass, falls wir eine Permutation der Zustände gegeben durch die Indizes i_1, \dots, i_N durchführen und dieselbe Permutation für die Teilchen vorgenommen wird, der Zustandsvektor $| u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)} \rangle$ sich nicht ändert. Daraus folgt, dass wir die Summe über Permutationen p' und \bar{p} im obigen Ausdruck unabhängig voneinander betrachten können, d.h.

$$\begin{aligned}
 (3.94) &= \left[\sum_{p'} P_{p'} (i_1, \dots, i_N) a_{i_1, \dots, i_N} \epsilon_{p'} \right] \\
 &\quad \times \left[\sum_{\bar{p}} \epsilon_{\bar{p}} P_{\bar{p}} [(1), \dots, (N)] | u_{i_1}^{(1)}, \dots, u_{i_N}^{(N)} \rangle \right] .
 \end{aligned} \tag{3.95}$$

Der erste Term auf der rechten Seite der obigen Gleichung ist Null, falls die Koeffizienten a_{i_1, \dots, i_N} symmetrisch bezüglich Permutationen sind. Dies bedeutet, dass sie antisymmetrisch bezüglich Transpositionen sein müssen. Da jede Permutation als Produkt von Transpositionen ausgedrückt werden kann, müssen die Koeffizienten a_{i_1, \dots, i_N} die Parität der Permutation haben, d.h.

$$P_p (i_1, \dots, i_N) a_{i_1, \dots, i_N} = \epsilon_p a_{i_1, \dots, i_N} . \tag{3.96}$$

Daraus erhalten wir

$$\sum_{p'} \epsilon_{p'} P_{p'} (i_1, \dots, i_N) a_{i_1, \dots, i_N} = N! a_{i_1, \dots, i_N} \equiv \sqrt{N!} c_{n_1, \dots, n_j, \dots} . \tag{3.97}$$

Mit dem obigen Ergebnis und (3.84) haben wir schließlich

$$|\psi_A\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots} |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle, \quad (3.98)$$

wobei

$$\sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} |c_{n_1, \dots, n_j, \dots}|^2 = 1. \quad (3.99)$$

3.2.4 Fermi-Dirac-Statistik

Die Argumente, welche im Abs. 3.2.2 zur Dichtematrix (3.63) für das kanonische Ensemble und zu (3.70) für das großkanonische Ensemble geführt haben, waren allgemeiner Natur und gelten auch im Fall der Fermionen.

Der Allgemeinheit halber betrachten wir die Zustandssumme im großkanonischen Ensemble. Wie im Abs. 3.2.2 betrachten wir ein System nichtwechselwirkender Teilchen, dass in diesem Fall das *ideale Fermi-Gas* ist.

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \exp \left[-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right] \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \langle n_1 \cdots n_\infty | \exp \left[-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right] | n_1 \cdots n_\infty \rangle \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_\infty} \langle n_1 \cdots n_\infty | \exp \left[\beta \left(\mu \sum_i n_i - \sum_i \varepsilon_i n_i \right) \right] | n_1 \cdots n_\infty \rangle \\ &= \prod_i \sum_{n=0}^1 \left\{ \exp \left[\beta(\mu - \varepsilon_i) \right] \right\}^n = \prod_i \left\{ 1 + \exp \left[\beta(\mu - \varepsilon_i) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.100)$$

Aus der Zustandssumme können wir wie im Fall der Bosonen den Erwartungswert des Teilchenzahloperators erhalten:

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle &= k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left(\prod_i \left\{ 1 + \exp \left[\beta(\mu - \varepsilon_i) \right] \right\} \right) \\ &= k_B T \sum_i \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left(1 + \exp \left[\beta(\mu - \varepsilon_i) \right] \right) \\ &= \sum_i \frac{1}{1 + \exp \left[-\beta(\mu - \varepsilon_i) \right]}. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Daraus resultiert die *Fermi-Dirac-Verteilung*.

$$\tilde{n}_i = \frac{1}{1 + \exp \left[-\beta(\mu - \varepsilon_i) \right]}. \quad (3.102)$$

Im Limes $T \rightarrow 0$ (d.h. $\beta \rightarrow \infty$) ist einfach zu sehen, dass

$$\tilde{n}_i = \begin{cases} 1 & \text{for } \varepsilon_i < \mu \\ 0 & \text{for } \varepsilon_i > \mu \end{cases} \quad (3.103)$$

folgt. Dementsprechend ist $\mu(T = 0) = E_F$, wobei E_F die Fermi-Energie ist, d.h. die Energie des höchsten besetzten Zustands.

3.3 Die Schrödinger-Gleichung für N identische Teilchen.

Nachdem wir die Struktur der Zustände für N identische quantenmechanische Teilchen diskutiert haben, wollen wir den Hamilton-Operator und die Schrödinger-Gleichung diskutieren, um zu sehen, wie der gesamte Formalismus im Fall vieler Teilchen arbeitet.

Wir betrachten einen Hamilton-Operator in einer allgemeinen Gestalt mit einem kinetischen Anteil und einem Wechselwirkungsterm, der der Einfachheit halber paarweise Wechselwirkungen beinhaltet.

$$H = \sum_{i=1}^N T_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V_{ij} . \quad (3.104)$$

Die Schrödinger-Gleichung sieht folgendermaßen aus

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle = H | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle . \quad (3.105)$$

Um eine Lösung zu erhalten, verfahren wir wie in den Abs. 3.2.1 und 3.2.3. Zuerst nehmen wir Ein-Teilchen-Zustände $| u_i \rangle$, welche eine vollständige Basis von Ein-Teilchen-Zuständen $\{| u_i \rangle\}$ bilden. Eine Basis im Hilbertraum von N Teilchen wird mit Produktzuständen gebildet. Da diese N -Teilchen-Zustände eine Basis bilden, sind sie zeitunabhängig. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung kann durch eine Linearkombination solcher Zustände angegeben werden

$$| \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} a(\alpha_1, \dots, \alpha_N, t) | u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle , \quad (3.106)$$

wobei die Zeitabhängigkeit in den Koeffizienten der Entwicklung beinhaltet ist. Der nächste Schritt besteht darin, zwischen Bosonen und Fermionen zu unterscheiden, d.h. je nach Art der Teilchen sollen die N -Teilchen-Zustände entweder auf \mathcal{H}_S oder auf \mathcal{H}_A projiziert werden. Wir betrachten zuerst den bosonischen Fall, da wir gesehen haben, dass dieselben Schritte im Fall von Fermionen unternommen werden können, wobei allerdings das Pauli-Ausschlußprinzip berücksichtigt werden muß. Selbstverständlich muß man auch auf die notwendigen Vorzeichenänderungen achten.

3.3.1 Bosonen

Im Fall von Bosonen wenden wir den total symmetrischen Projektor S an:

$$\begin{aligned} S | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} a(\alpha_1, \dots, \alpha_N, t) S | u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle, \end{aligned} \quad (3.107)$$

wobei für die zweite Gleichung (3.50) benutzt wurde. Wie wir in Gl. (3.49) gesehen haben, gilt

$$c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) = \sqrt{\frac{N!}{n_1! \dots n_j! \dots}} a(\alpha_1, \dots, \alpha_N, t). \quad (3.108)$$

Nun können wir den obigen Zustand in die Schrödinger-Gleichung (3.105) einsetzen. Dabei betrachten wir zuerst die linke Seite der Gleichung, d.h. die Zeitableitung.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle = i\hbar \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} \frac{\partial}{\partial t} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle. \quad (3.109)$$

Als nächstes multiplizieren wir von links mit $\langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} |$,

$$\begin{aligned} i\hbar \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \frac{\partial}{\partial t} S | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle \\ = i\hbar \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} \frac{\partial}{\partial t} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (3.110)$$

Wegen der Orthogonalität der Ein-Teilchen-Zustände bleiben nur solche N -Teilchen-Zustände, bei denen dieselbe Anzahl von Teilchen in den jeweiligen Ein-Teilchen-Zuständen sowohl in $| n_1, \dots, n_j, \dots \rangle$ als auch in $\langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} |$ vorhanden ist. Dies bedeutet, dass nur ein Term in der Summe übrig bleibt. Der Überlapp gibt nach Gl. (3.43)

$$\begin{aligned} \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle \\ = \sqrt{\frac{N!}{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!}} \frac{1}{N!} \underbrace{\sum_p \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | P_p | u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle}_{= \prod_{j=1}^{\infty} n_j!} \\ = \sqrt{\frac{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!}{N!}}, \end{aligned} \quad (3.111)$$

wobei $\prod_{j=1}^{\infty} n_j!$ durch die Konfiguration von $| u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$ bestimmt wird. Schließlich erhalten wir

$$i\hbar \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \frac{\partial}{\partial t} S | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle = \sqrt{\frac{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!}{N!}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t). \quad (3.112)$$

Nun betrachten wir den kinetischen Anteil.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N T_i S | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle \\ = \sum_{i=1}^N T_i \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (3.113)$$

Wiederum multiplizieren wir von links mit $\langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} |$:

$$\begin{aligned} \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \sum_{i=1}^N T_i S | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle \\ = \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \sum_{i=1}^N T_i | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (3.114)$$

Um die Matrixelemente für den Operator T_i zu erhalten, verwenden wir nochmals (3.43)

$$\begin{aligned} \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \sum_{i=1}^N T_i | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle \\ = \sqrt{\frac{N!}{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!}} \frac{1}{N!} \sum_{i=1}^N \sum_p \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | T_i P_p | u_{\beta_1}^{(1)}, \dots, u_{\beta_N}^{(N)} \rangle, \end{aligned} \quad (3.115)$$

wobei wir Indizes β eingeführt haben, welche i.A. verschieden von den Indizes α sind. Jedoch müssen sie mit der spezifischen Konfiguration von n_1, \dots, n_j, \dots verträglich sein. Da T_i ein Ein-Teilchen-Operator ist, der auf das Teilchen i wirkt, lässt er alle anderen Teilchen unberührt. Dies bedeutet, dass alle Niveaus β_j , in denen das Teilchen i nicht vorhanden ist, dieselbe Anzahl von Teilchen wie in den Niveaus α_j , $j \neq i$ haben müssen. Daraus resultiert:

- i) Die Anzahl von Teilchen in Niveaus verschieden von α_i und β_i in der Summe über n_1, \dots, n_j, \dots in Gl. (3.114) ist auf diejenige Anzahl beschränkt, die vom Zustand $| u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$ bestimmt wird.
- ii) Die Summe über Permutationen in (3.115) gibt einen Faktor

$$\left(\prod_{\beta_\ell \neq \beta_i, \alpha_i} n_{\beta_\ell}! \right) (n_{\alpha_i} - 1)! (n_{\beta_i} - 1)!, \quad (3.116)$$

wobei wir berücksichtigt haben, dass es $(n_{\alpha_i} - 1)$ Teilchen im Niveau α_i und $(n_{\beta_i} - 1)$ im Niveau β_i gibt, welche unberührt vom Operator T_i bleiben.

Auf der anderen Seite haben wir i.A. Matrixelemente der Gestalt

$$\langle u_{\alpha_i}^{(i)} | T_i | u_{P(\beta_i)}^{(i)} \rangle, \quad (3.117)$$

wobei $P(\beta_i)$ den Zustand kennzeichnet, zu dem das Teilchen i nach der Permutation P geht. Da die Teilchen ununterscheidbar sind, tritt dasselbe Matrixelement für alle Teilchen im Niveau β_i auf. Dies gibt einen weiteren Faktor n_{β_i} . Unter Berücksichtigung dieses Faktors können wir die Summe über Permutationen auf eine Summe über die Niveaus β_i , welche durch die Permutationen erreicht werden, umwandeln. Obwohl es i.A. viel mehr Niveaus als diejenigen gibt, die durch Permutationen erreicht werden können, können wir die Summe auf alle möglichen Niveaus ausdehnen, solange wir den Faktor n_{β_i} berücksichtigen. Wir können die obige Diskussion zusammenfassen, indem wir (3.114) mit den entsprechenden Änderungen umschreiben:

$$(3.114) = \sum_{\beta} \sqrt{\frac{N!}{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!}} \frac{1}{N!} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) n_{\beta}! \\ \times \sum_i \prod_{\beta_{\ell} \neq \alpha_i} n_{\beta_{\ell}}! (n_{\alpha_i} - 1)! \langle u_{\alpha_i}^{(i)} | T_i | u_{\beta} \rangle, \quad (3.118)$$

wobei die Summe über n_1, \dots, n_j, \dots nicht mehr vorhanden ist, da die Besetzungszahlen n_1, \dots, n_j, \dots festgelegt wurden. Dennoch müssen wir noch die Werte, die sie annehmen diskutieren. Da der Operator T_i einen Zustand $| u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$, bei dem das Teilchen i im Zustand $| u_{\alpha_i}^{(i)} \rangle$ ist, mit einem Zustand $| u_{\beta_1}^{(1)}, \dots, u_{\beta_N}^{(N)} \rangle$, bei dem das Teilchen i im Zustand $| u_{\beta}^{(i)} \rangle$ ist, verbindet, muß der Zustand $| u_{\beta_1}^{(1)}, \dots, u_{\beta_N}^{(N)} \rangle$ $n_{\beta} + 1$ Teilchen im Niveau β haben, falls der Zustand $| u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$ n_{β} Teilchen in diesem Niveau hat. Dementsprechend muß der Zustand $| u_{\beta_1}^{(1)}, \dots, u_{\beta_N}^{(N)} \rangle$ $n_{\alpha_i} - 1$ Teilchen im Niveau α_i haben. Darüberhinaus können wir, da die Teilchen ununterscheidbar sind, von einer Summe über Teilchen i zu einer Summe über Niveaus α übergehen:

$$\sum_i \langle u_{\alpha_i}^{(i)} | T_i | u_{\beta} \rangle \rightarrow \sum_{\alpha} \langle \alpha | T | \beta \rangle n_{\alpha}, \quad (3.119)$$

wobei wir die Anzahl der Teilchen n_{α} in jedem Niveau α berücksichtigt haben. Bevor wir zum Endergebnis kommen, müssen wir zwei Fälle berücksichtigen. Bisher haben wir angenommen, dass i.A. die Zustände $| \alpha \rangle$ und $| \beta \rangle$ verschieden sind. Es könnte aber der Fall eintreten, in dem der Operator T nichtverschwindende Matrixelemente für $| \alpha \rangle = | \beta \rangle$ hat. In diesem Fall hat der Zustand $| u_{\beta_1}^{(1)}, \dots, u_{\beta_N}^{(N)} \rangle$ dieselbe Anzahl von Teilchen im Zustand $| \alpha \rangle$ wie der Zustand $| u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$. Wenn wir

dies berücksichtigen, erhalten wir

$$\begin{aligned}
 (3.118) = & \sum_{\alpha} \sqrt{\frac{n_1! \cdots n_{\alpha}! \cdots}{N!}} c_{n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots}(t) \langle \alpha | T | \alpha \rangle_{n_{\alpha}} \\
 & + \sum_{\alpha \neq \beta} \sqrt{\frac{n_1! \cdots (n_{\alpha} - 1)! \cdots (n_{\beta} + 1)! \cdots}{N!}} c_{n_1, \dots, n_{\alpha} - 1, \dots, n_{\beta} + 1, \dots}(t) \\
 & \times \langle \alpha | T | \beta \rangle_{n_{\alpha}} . \quad (3.120)
 \end{aligned}$$

Bevor wir den Wechselwirkungsterm diskutieren, betrachten wir die Schrödinger-Gleichung mit dem kinetischen Term allein. Auf der einen Seite haben wir (3.112), wo die Besetzungszahlen dieselben wie in $| u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$ sind. Auf der anderen Seite haben wir in (3.120) Besetzungszahlen, die sich um eins in den Niveaus α und β unterscheiden. Dies führt zu

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{n_1, \dots}(t) = & \sum_{\alpha} \langle \alpha | T | \alpha \rangle_{n_{\alpha}} c_{n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots}(t) \\
 & + \sum_{\alpha \neq \beta} \langle \alpha | T | \beta \rangle \sqrt{n_{\alpha} (n_{\beta} + 1)} \\
 & \times c_{n_1, \dots, n_{\alpha} - 1, \dots, n_{\beta} + 1, \dots}(t) . \quad (3.121)
 \end{aligned}$$

Wir sehen, dass wir schon im nichtwechselwirkenden Fall einen Satz von gekoppelten Differentialgleichungen mit einer im Prinzip unendlichen Anzahl von Gleichungen erhalten. Dies zeigt, dass die Behandlung eines Systems vieler Teilchen in *erster Quantisierung* sehr kompliziert werden kann.

Nun betrachten wir den Wechselwirkungsanteil.

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V_{ij} S | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle \\
 & = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V_{ij} \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle . \quad (3.122)
 \end{aligned}$$

Wiederum multiplizieren wir die Gleichung von links mit $\langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} |$,

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | V_{ij} S | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | V_{ij} | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) \\
 &\times \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \sqrt{\frac{N!}{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!}} \frac{1}{N!} \sum_p \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | V_{ij} P_p | u_{\beta_1}^{(1)}, \dots, u_{\beta_N}^{(N)} \rangle. \quad (3.123)
 \end{aligned}$$

Dieselben Argumente wie für die kinetische Energie können hier wiederholt werden. Jedoch müssen wir die Tatsache berücksichtigen, dass der Wechselwirkungsterm einen Zwei-Teilchen-Operator beinhaltet, so dass zwei Zustände betroffen sind. Die Matrixelemente, die wir betrachten müssen, haben die Gestalt

$$\langle u_{\alpha_i}^{(i)} u_{\alpha_j}^{(j)} | V_{ij} | u_{\beta_i}^{(i)} u_{\beta_j}^{(j)} \rangle. \quad (3.124)$$

Dies bedeutet, dass der Zustand $| u_{\beta_1}^{(1)}, \dots, u_{\beta_N}^{(N)} \rangle$ i.A. $n_{\alpha_i} - 1$, $n_{\alpha_j} - 1$, $n_{\beta_i} + 1$, und $n_{\beta_j} + 1$ Teilchen hat, falls der Zustand $| u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$ n_{α_i} , n_{α_j} , n_{β_i} , and n_{β_j} Teilchen in den entsprechenden Zuständen hat. Wie im Fall der Ein-Teilchen-Operatoren gehen wir von einer Summe über Teilchen über zu einer Summe über Zustände. Dennoch müssen wir berücksichtigen, dass $i \neq j$ ist, so dass wir unterscheiden müssen, ob die zwei Teilchen im selben Zustand sind oder nicht.

- i) Teilchen in verschiedenen Zuständen. Da wir zwei verschiedene Zustände haben, ist $i \neq j$.

$$\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}} \langle u_{\alpha_i}^{(i)} u_{\alpha_j}^{(j)} | \longrightarrow \sum_{\alpha \neq \alpha'} n_{\alpha} n_{\alpha'} \langle \alpha \alpha' |. \quad (3.125)$$

- ii) Teilchen im selben Zustand. Da $i \neq j$ sein muß, gibt es n_{α} Möglichkeiten für ein Teilchen, während es nur $n_{\alpha} - 1$ Möglichkeiten für das Andere gibt.

$$\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}} \langle u_{\alpha_i}^{(i)} u_{\alpha_j}^{(j)} | \longrightarrow \sum_{\alpha} n_{\alpha} (n_{\alpha} - 1) \langle \alpha \alpha |. \quad (3.126)$$

Unter Berücksichtigung der obigen Diskussion erhalten wir

$$\begin{aligned}
 (3.123) \longrightarrow & \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\prod_{j=1}^{\infty} n_j!}{N!}} \sum_{\substack{\alpha, \alpha' \\ \beta, \beta'}} n_{\alpha} (n_{\alpha'} - \delta_{\alpha \alpha'}) \langle \alpha \alpha' | V | \beta \beta' \rangle \\
 & \times c_{n_1, \dots, n_{\alpha}-1, \dots, n_{\beta}+1, \dots, n_{\alpha'}-1, \dots, n_{\beta'}+1, \dots}. \quad (3.127)
 \end{aligned}$$

Wie bei der kinetischen Energie müssten wir die verschiedenen Fälle mit $\alpha = \beta$ usw. betrachten. Es gibt insgesamt 15 verschiedene Möglichkeiten. Sie entsprechen dem Fall mit allen Indizes verschieden voneinander (ein Fall), zwei gleiche Indizes und alle anderen verschieden (6 Fälle), paarweise gleiche Indizes aber unterschiedliche Paare (drei Fälle), drei Indizes gleich (4 Fälle) und alle gleich (ein Fall). Wir diskutieren hier zwei dieser Fälle, um exemplarisch zu sehen, welche Faktoren dabei entstehen.

i) $\alpha \neq \alpha', \alpha \neq \beta, \alpha \neq \beta', \alpha' \neq \beta, \alpha' \neq \beta', \beta \neq \beta'$.

In diesem Fall haben wir einen Faktor $n_\alpha n_{\alpha'}$ wie in Gl. (3.125) diskutiert. Darüberhinaus müssen wir den Normierungsfaktor

$$\sqrt{(n_\alpha - 1)! (n_{\alpha'} - 1)! (n_\beta + 1)! (n'_\beta + 1)!} \quad (3.128)$$

berücksichtigen, so dass der Faktor

$$\sqrt{n_\alpha n_{\alpha'} (n_\beta + 1) (n'_\beta + 1)} \quad (3.129)$$

nach gegenseitiger Aufhebung der Normierungsfaktoren auf beiden Seiten der Schrödinger-Gleichung entsteht.

ii) $\alpha = \alpha', \alpha \neq \beta, \alpha \neq \beta', \beta \neq \beta'$.

In diesem Fall ergibt sich der Faktor $n_\alpha (n_\alpha - 1)$ aus (3.125), da nun zwei Teilchen zum Niveau α aus den Niveaus β und β' hinzukommen. Mit Berücksichtigung der Normierungsfaktoren erhalten wir

$$\sqrt{(n_\alpha - 2)! (n_\beta + 1)! (n'_\beta + 1)!} . \quad (3.130)$$

Nach gegenseitiger Aufhebung der Normierungsfaktoren auf beiden Seiten der Schrödinger-Gleichung erhalten wir den folgenden Faktor

$$\sqrt{n_\alpha (n_\alpha - 1) (n_\beta + 1) (n'_\beta + 1)} \quad (3.131)$$

für solche Terme.

Nach Ermittlung aller Terme erhält die Schrödinger-Gleichung die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{n_1, \dots}(t) &= \sum_{\alpha} \langle \alpha | T | \alpha \rangle n_{\alpha} c_{n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots}(t) \\
 &+ \sum_{\alpha \neq \beta} \langle \alpha | T | \beta \rangle \sqrt{n_{\alpha} (n_{\beta} + 1)} \\
 &\quad \times c_{n_1, \dots, n_{\alpha}-1, \dots, n_{\beta}+1, \dots}(t) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \alpha' \neq \beta \neq \beta'} \langle \alpha \alpha' | V | \beta \beta' \rangle \\
 &\quad \times \sqrt{n_{\alpha} n_{\alpha'} (n_{\beta} + 1) (n_{\beta'} + 1)} \\
 &\quad \times c_{n_1, \dots, n_{\alpha}-1, \dots, n_{\beta}+1, \dots, n_{\alpha'}-1, \dots, n_{\beta'}+1, \dots}(t) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha = \alpha' \neq \beta \neq \beta'} \langle \alpha \alpha | V | \beta \beta' \rangle \\
 &\quad \times \sqrt{n_{\alpha} (n_{\alpha} - 1) (n_{\beta} + 1) (n_{\beta'} + 1)} \\
 &\quad \times c_{n_1, \dots, n_{\alpha}-2, \dots, n_{\beta}+1, \dots, n_{\beta'}+1, \dots}(t) \\
 &+ 13 \text{ weitere Terme .} \tag{3.132}
 \end{aligned}$$

Somit sehen wir, dass die Lösung des Vielteilchenproblems in erster Quantisierung wenig praktikabel erscheint.

3.3.2 Fermionen

Ein allgemeiner fermionischer Zustand kann, wie wir schon in (3.87) gesehen haben, als Überlagerung von Besetzungszuständen ausgedrückt werden:

$$A | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle = \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle . \tag{3.133}$$

Wie im bosonischen Fall multiplizieren wir die Schrödinger-Gleichung von links mit dem Zustand $\langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} |$ und berücksichtigen das Pauli-Ausschlußprinzip, das nur die Besetzungszahlen $n_i = 0, 1$ erlaubt. Damit erhalten wir für die Zeitableitung

$$i\hbar \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \frac{\partial}{\partial t} A | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle = \sqrt{\frac{1}{N!}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) . \tag{3.134}$$

Für die Behandlung der kinetischen Energie und des Wechselwirkungsterms müssen wir im Fall der Fermionen die Tatsache berücksichtigen, dass Phasenfaktoren bei der Permutationen entstehen. Um diese Faktoren zu bestimmen, geben wir eine Anordnung der Niveaus für $\langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} |$ vor, nämlich

$$\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N . \tag{3.135}$$

Mit der angenommenen Anordnung erhalten wir analog zum bosonischen Fall (3.114)

$$\begin{aligned} & \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \sum_{i=1}^N T_i A | \psi_1, \dots, \psi_N, t \rangle \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_j, \dots} c_{n_1, \dots, n_j, \dots}(t) \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \sum_{i=1}^N T_i | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle . \end{aligned} \quad (3.136)$$

Die Matrixelemente haben nun die folgende Gestalt

$$\begin{aligned} & \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | \sum_{i=1}^N T_i | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i=1}^N \sum_p (-1)^p \langle u_{\alpha_1}^{(1)}, \dots, u_{\alpha_N}^{(N)} | T_i P_p | u_{\beta_1}^{(1)}, \dots, u_{\beta_N}^{(N)} \rangle . \end{aligned} \quad (3.137)$$

Wir benutzen nun die Tatsache, dass die Niveaus wie oben diskutiert angeordnet sind, um die Phasenfaktoren in der Gl. (3.137) zu bestimmen. Dabei erinnern wir daran, dass der Operator für die kinetische Energie ein Ein-Teilchen-Operator ist, der den Zustand α_i mit dem Zustand β_i verbindet. Es gibt zwei Fälle, die berücksichtigt werden müssen.

i) $\beta_i < \alpha_i$.

In diesem Fall ist die Anzahl der Transpositionen durch die Anzahl der besetzten Zustände zwischen β_i und α_i gegeben, so dass

$$(-1)^p = (-1)^{n_{\beta_i+1} + n_{\beta_i+2} + \dots + n_{\alpha_i-1}} . \quad (3.138)$$

ii) $\beta_i > \alpha_i$.

Hier müssen wir die Anzahl der zwischen α_i und β_i besetzten Zustände zählen:

$$(-1)^p = (-1)^{n_{\alpha_i+1} + n_{\alpha_i+2} + \dots + n_{\beta_i-1}} . \quad (3.139)$$

Die restlichen Schritte für die Behandlung der kinetischen Energie verlaufen wie im Fall der Bosonen, so dass wir mit Hilfe von (3.137) und unter Berücksichtigung der Phasenfaktoren wie oben diskutiert schließlich

$$\begin{aligned} (3.136) &= \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_{\alpha, \beta} (-1)^{n_{\alpha+1} + n_{\alpha+2} + \dots + n_{\beta-1}} \\ &\quad \times \langle \alpha | T | \beta \rangle c_{n_1, \dots, n_{\alpha-1}, \dots, n_{\beta+1}, \dots}(t) \end{aligned} \quad (3.140)$$

erhalten, wobei die Phasenfaktoren so verstanden werden, dass sie die Anzahl der besetzten Zustände zwischen α und β wie in *i)* bzw. *ii)* beinhalten.

Wir verzichten hier auf eine explizite Behandlung der Wechselwirkungsterme, da die obige Diskussion zeigt, dass eine zum bosonischen Fall ähnliche Struktur entsteht, bei der auch Phasenfaktoren, welche aus der antisymmetrischen Natur der fermionischen Wellenfunktionen herrühren, mitgenommen werden müssen. Dies bedeutet, dass die Schrödinger-Gleichung auch in diesem Fall zu einem komplizierten System von gekoppelten Differentialgleichungen führt. Insgesamt erscheint die Behandlung in der ersten Quantisierung eines quantenmechanischen Vielteilchensystems extrem kompliziert.

3.4 Zweite Quantisierung

Wie wir später sehen werden, erlaubt die *zweite Quantisierung* eine konsistente Formulierung der relativistischen Quantenmechanik in der Form einer Quantenfeldtheorie. Wir führen sie in diesem Abschnitt als eine Formulierung ein, welche eine effiziente Behandlung von quantenmechanischen Vielteilchensystemen auf der Basis von den in den bisherigen Abschnitten eingeführten Besetzungszuständen erlaubt. Wir behandeln zuerst Bosonen und später diskutieren wir Fermionen.

3.4.1 Bosonen in zweiter Quantisierung

Besetzungszustände wurden schon in der Quantenmechanik I in Verbindung mit dem harmonischen Oszillator diskutiert. Dort hat man Operatoren b, b^\dagger , welche die folgenden Kommutatorbeziehungen erfüllen:

$$[b, b^\dagger] = 1. \quad (3.141)$$

Darüberhinaus können wir einen Besetzungszahloperator $\hat{n} = b^\dagger b$ mit Eigenzuständen $|n\rangle$ definieren. Sie genügen der folgenden Eigenwertgleichung

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad n \geq 0. \quad (3.142)$$

Es ist einfach zu zeigen, dass als Folge der obigen Kommutatorbeziehungen die folgenden Gleichungen gelten:

$$\begin{aligned} \hat{n} b |n\rangle &= (n-1) b |n\rangle, \\ \hat{n} b^\dagger |n\rangle &= (n+1) b^\dagger |n\rangle. \end{aligned} \quad (3.143)$$

D.h. $b |n\rangle$ bzw. $b^\dagger |n\rangle$ sind Eigenzustände des Besetzungszahloperators mit einem Quantum weniger bzw. mehr. Dementsprechend werden sie Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren genannt. Mit der Annahme, dass der Zustand $|n\rangle$ normiert ist, ist es einfach zu sehen, dass folgendes gilt:

$$\begin{aligned} b |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ b^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned} \quad (3.144)$$

Wir verallgemeinern im Folgenden die für den harmonischen Oszillator geltenden Beziehungen zu einer im Prinzip unendlichen Anzahl von Moden $i = 1, \dots, \infty$, so dass die Besetzungszustände $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$, die wir in den vorigen Abschnitten eingeführt haben, Eigenzustände von Besetzungszahloperatoren $\hat{n}_i = b_i^\dagger b_i$ sind, wobei die Kommutatorbeziehungen wie folgt verallgemeinert werden:

$$\begin{aligned} [b_i, b_j^\dagger] &= \delta_{ij}, \\ [b_i, b_j] &= [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (3.145)$$

Die Wirkung des Besetzungszahloperators auf die Besetzungszustände wird durch eine einfache Verallgemeinerung gegeben, wobei die Besetzungszustände als Tensorprodukt von Eigenzuständen unendlich vieler harmonischer Oszillatoren betrachtet werden:

$$\hat{n}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (3.146)$$

Mit Hilfe der Kommutatorbeziehungen (3.145) erhalten wir die Wirkung der Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren auf die Besetzungszustände:

$$\begin{aligned} b_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle, \\ b_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (3.147)$$

Der Raum aller Besetzungszustände wird *Fock-Raum* genannt. Er ist ein Vektorraum wie der Hilbertraum aber er beinhaltet alle möglichen Anzahlen von Teilchen. Die Anwendung von Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren auf Besetzungszustände führt von einem zu einem anderen Zustand im Fock-Raum.

Nun betrachten wir die Schrödinger-Gleichung, die wir im Abs. 3.3 diskutiert haben und übersetzen sie in die zweite Quantisierung. Wir hatten dort einen allgemeinen Zustand

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} c_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (3.148)$$

Wenn wir zurück auf Gl. (3.132) gehen, sehen wir einen Satz von gekoppelten Differentialgleichungen für die Koeffizienten $c_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t)$ der obigen Linearkombination. Da die Zustände $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ eine Basis in \mathcal{H}_S bilden, können wir die Evolution des Zustandes $|\psi(t)\rangle$ durch Multiplikation beider Seiten in (3.132) mit $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ und durch Summation über die Indizes n_1, \dots, n_i, \dots zurückgewinnen.

1. Zeitableitung.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t) &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} c_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (3.149)$$

2. Kinetische Terme.

i) Diagonalanteile.

$$\begin{aligned} & \sum_i \langle i | T | i \rangle n_i c_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t) \\ & \rightarrow \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} \sum_i \langle i | T | i \rangle n_i c_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t) \\ & \qquad \qquad \qquad \times | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (3.150)$$

Da

$$n_i | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle = b_i^\dagger b_i | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle \quad (3.151)$$

gilt, erhalten wir

$$\begin{aligned} (3.150) &= \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} \sum_i \langle i | T | i \rangle b_i^\dagger b_i c_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t) | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle \\ &= \sum_i b_i^\dagger \langle i | T | i \rangle b_i | \psi(t) \rangle. \end{aligned} \quad (3.152)$$

ii) Nichtdiagonalanteile

$$\begin{aligned} & \sum_{i \neq j} \langle i | T | j \rangle \sqrt{n_i (n_j + 1)} c_{n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots}(t) \\ & \rightarrow \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} \sum_{i \neq j} \langle i | T | j \rangle \sqrt{n_i (n_j + 1)} \\ & \qquad \qquad \qquad \times c_{n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots}(t) | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (3.153)$$

Da wir über alle möglichen Werte der Besetzungszahlen n_i summieren, können wir sie wie folgt umbenennen

$$n_i - 1 = n'_i, \quad n_j + 1 = n'_j, \quad n_k = n'_k, \quad \text{for } k \neq i, k \neq j. \quad (3.154)$$

Es soll bemerkt werden, dass die neuen Variablen die Bedingung $\sum_i n_i = N$ auch erfüllen. Mit den obigen Änderungen erhalten wir

$$\begin{aligned} (3.153) &= \sum_{n'_1, \dots, n'_i, \dots} \sum_{i \neq j} \langle i | T | j \rangle \sqrt{(n'_i + 1) n'_j} c_{n'_1, \dots, n'_i, \dots, n'_j, \dots}(t) \\ & \qquad \qquad \qquad \times | n'_1, \dots, n'_i + 1, \dots, n'_j - 1, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (3.155)$$

Die ursprünglichen Besetzungszahlen erfüllten die Bedingung $n_i \geq 0$. Wir können auch die neuen Variablen auf den selben Bereich beschränken, da, falls $n_i = 0$ ist, $n'_i = -1$ resultiert aber $\sqrt{(n'_i + 1) n'_j} = 0$. Genauso können

wir $n'_j = 0$ zulassen, obwohl dies $n_j = -1$ impliziert, da $\sqrt{(n'_i + 1)n'_j} = 0$ ist. Schließlich brauchen wir nur zu bemerken, dass

$$\begin{aligned} \sqrt{(n'_i + 1)n'_j} | n'_1, \dots, n'_i + 1, \dots, n'_j - 1, \dots \rangle \\ = b_i^\dagger b_j | n'_1, \dots, n'_i, \dots \rangle \end{aligned} \quad (3.156)$$

gilt, so dass

$$(3.155) = \sum_{i \neq j} b_i^\dagger \langle i | T | j \rangle b_j | \psi(t) \rangle . \quad (3.157)$$

Die Ergebnisse (3.152) und (3.157) führen zu einem einfachen Ausdruck für den Operator der kinetischen Energie:

$$\sum_{i=1}^N T_i \rightarrow \sum_{i,j} b_i^\dagger \langle i | T | j \rangle b_j , \quad (3.158)$$

wobei es nicht mehr nötig ist, zwischen verschiedenen Fällen zu unterscheiden.

3. Wechselwirkungsterme.

Im Prinzip müssen wir hier die schon erwähnten 15 Fälle diskutieren. Obwohl, wir gesehen haben, dass die zweite Quantisierung im Fall der kinetischen Energie verschiedene Fälle in ein und demselben Ausdruck vereinigt, betrachten wir die schon vorhin diskutierten Fälle, um zu sehen, ob sie auch durch einen Ausdruck vereinigt werden.

i) Matrixelemente mit vier verschiedenen Zuständen.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i \neq j \neq k \neq \ell} \langle ij | V | k\ell \rangle \sqrt{n_i n_j (n_k + 1) (n_\ell + 1)} \\ \times c_{n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_k + 1, \dots, n_j - 1, \dots, n_\ell + 1, \dots}(t) \\ \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} \sum_{i \neq j \neq k \neq \ell} \langle ij | V | k\ell \rangle \\ \times \sqrt{n_i n_j (n_k + 1) (n_\ell + 1)} \\ \times c_{n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_k + 1, \dots, n_j - 1, \dots, n_\ell + 1, \dots}(t) \\ \times | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle . \end{aligned} \quad (3.159)$$

Wie im Fall der kinetischen Energie benennen wir die Variablen um:

$$\begin{aligned} n_i - 1 &= n'_i, & n_j - 1 &= n'_j, & n_k + 1 &= n'_k, & n_\ell + 1 &= n'_\ell \\ n_m &= n'_m, & \text{für } m &\neq i, j, k, \ell . \end{aligned} \quad (3.160)$$

Durch Wiederholung der Schritte in 2.ii) erhalten wir

$$(3.159) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j \neq k \neq \ell} b_i^\dagger b_j^\dagger \langle ij | V | k\ell \rangle b_k b_\ell . \quad (3.161)$$

ii) Matrixelemente mit zwei gleichen Zuständen.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i=j \neq k \neq \ell} \langle ii | V | k\ell \rangle & \sqrt{n_i(n_i-1)(n_k+1)(n_\ell+1)} \\ & \times c_{n_1, \dots, n_i-2, \dots, n_k+1, \dots, n_\ell+1, \dots}(t) \\ & \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} \sum_{i=j \neq k \neq \ell} \langle ii | V | k\ell \rangle \\ & \times \sqrt{n_i(n_i-1)(n_k+1)(n_\ell+1)} \\ & \times c_{n_1, \dots, n_i-2, \dots, n_k+1, \dots, n_\ell+1, \dots}(t) \\ & \times |n_1, \dots, n_i, \dots \rangle . \end{aligned} \quad (3.162)$$

Hier benennen wir die Variablen wie folgt um:

$$\begin{aligned} n_i - 2 & = n'_i , \quad n_k + 1 = n'_k , \quad n_\ell + 1 = n'_\ell \\ n_m & = n'_m , \quad \text{for } m \neq i, k, \ell . \end{aligned} \quad (3.163)$$

Daraus resultiert

$$(3.162) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq k \neq \ell} b_i^\dagger b_i^\dagger \langle ii | V | k\ell \rangle b_k b_\ell . \quad (3.164)$$

Somit sehen wir, dass es nicht notwendig ist, alle verschiedenen Fälle getrennt zu behandeln, da die Algebra der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren dies automatisch erledigt. Schließlich erhalten wir für den Wechselwirkungsterm

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V_{ij} \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,\ell} b_i^\dagger b_j^\dagger \langle ij | V | k\ell \rangle b_k b_\ell . \quad (3.165)$$

Nach der Diskussion der verschiedenen Beiträge zur Schrödinger-Gleichung können wir ihre Form in der zweiten Quantisierung zusammenfassen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi(t) \rangle = H | \psi(t) \rangle , \quad (3.166)$$

wobei der Hamilton-Operator in der zweiten Quantisierung

$$H = \sum_{i,j} b_i^\dagger \langle i | T | j \rangle b_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,\ell} b_i^\dagger b_j^\dagger \langle ij | V | k\ell \rangle b_k b_\ell . \quad (3.167)$$

ist.

Die Statistik der Teilchen ist nun in den Kommutatorbeziehungen der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren beinhaltet. Um dies explizit zu sehen, betrachten wir das Vakuum, d.h. den Zustand, der von den Vernichtungsoperatoren vernichtet wird. Dies ist eine Verallgemeinerung des Grundzustandes $|0\rangle$ des harmonischen Oszillators:

$$b|0\rangle = 0 \quad \longrightarrow \quad b_i|0\rangle = 0. \quad (3.168)$$

Ein Teilchen im Zustand i erhält man durch die Anwendung des Erzeugungsoperators auf das Vakuum:

$$b_i^\dagger|0\rangle = |i\rangle. \quad (3.169)$$

Wegen der Kommutatorbeziehungen der bosonischen Erzeugungsoperatoren erhalten wir

$$b_i^\dagger b_j^\dagger = b_j^\dagger b_i^\dagger \quad \Rightarrow \quad b_i^\dagger b_j^\dagger|0\rangle = b_j^\dagger b_i^\dagger|0\rangle \quad \Rightarrow \quad |ij\rangle = |ji\rangle, \quad (3.170)$$

so dass eine Transposition zum selben Zustand führt.

3.4.2 Fermionen in zweiter Quantisierung

Im Fall der Fermionen führen wir Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren f_i^\dagger, f_i ein, so dass der Besetzungszahloperator durch $\hat{n}_i = f_i^\dagger f_i$ gegeben ist, mit der Eigenschaft

$$\hat{n}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (3.171)$$

Im Fall der Bosonen haben wir gesehen, dass die Kommutatorbeziehungen dafür sorgen, dass die Eigenschaften, welche sich aus dem Symmetrisierungspostulat ergeben, respektiert werden. Deswegen konzentrieren wir uns zunächst auf die Kommutatorbeziehungen der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren. Sie sollen zu Zuständen führen, die total antisymmetrisch sind. Dies kann man schon im Fall einer Transposition sehen. Wir nehmen an, dass wie im Fall der Bosonen ein Vakuum existiert, so dass

$$f_i|0\rangle = 0. \quad (3.172)$$

Ausgehend vom Vakuum können wir ein Teilchen mit einem Erzeugungsoperator erzeugen

$$f_i^\dagger|0\rangle = |i\rangle. \quad (3.173)$$

Wir können genauso ein zweites Teilchen erzeugen und verlangen, dass der dazugehörige Zustand antisymmetrisch bezüglich einer Transposition ist.

$$\begin{aligned} f_i^\dagger f_j^\dagger|0\rangle &= |ij\rangle \\ \Leftrightarrow f_j^\dagger f_i^\dagger|0\rangle &= |ji\rangle = -|ij\rangle = -f_i^\dagger f_j^\dagger|0\rangle \\ \Rightarrow f_i^\dagger f_j^\dagger + f_j^\dagger f_i^\dagger &\equiv \{f_i^\dagger, f_j^\dagger\} = 0. \end{aligned} \quad (3.174)$$

Wir sehen, dass Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren für Fermionen antikommutieren müssen. Diese Eigenschaft, die aus der Symmetrieeigenschaften bezüglich Permutationen resultiert, führt auch zum Pauli-Ausschlußprinzip. Um dies zu sehen, brauchen wir nur $i = j$ zu setzen. In diesem Fall erhalten wir

$$f_i^\dagger f_i^\dagger + f_i^\dagger f_i^\dagger = 2f_i^\dagger f_i^\dagger = 0 . \quad (3.175)$$

Damit sehen wir, dass zwei Fermionen nicht im selben Zustand erzeugt werden können.

Wenn wir die hermitesch konjugierte Form der Gl. (3.174) nehmen, ergibt sich

$$\begin{aligned} \left\{ f_i^\dagger, f_j^\dagger \right\}^\dagger &= \left(f_i^\dagger f_j^\dagger + f_j^\dagger f_i^\dagger \right)^\dagger \\ &= f_j f_i + f_i f_j = \left\{ f_i, f_j \right\} = 0 . \end{aligned} \quad (3.176)$$

Schließlich diskutieren wir die Kommutatorbeziehungen zwischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Da der Besetzungszahloperator die Anzahl der Teilchen in einem gegebenen Zustand zählt, muß folgendes gelten:

$$\begin{aligned} \hat{n}_i | 0 \rangle &= f_i^\dagger f_i | 0 \rangle = 0 , \\ \hat{n}_i | i \rangle &= f_i^\dagger f_i | i \rangle = | i \rangle . \end{aligned} \quad (3.177)$$

Auf der anderen Seite haben wir aus (3.173)

$$\begin{aligned} f_i | i \rangle &= f_i f_i^\dagger | 0 \rangle = | 0 \rangle , \\ f_i f_i^\dagger | i \rangle &= f_i f_i^\dagger f_i^\dagger | 0 \rangle = 0 . \end{aligned} \quad (3.178)$$

Aus den Beziehungen oben erhalten wir

$$\begin{aligned} \left(f_i f_i^\dagger + f_i^\dagger f_i \right) | 0 \rangle &= | 0 \rangle , \\ \left(f_i f_i^\dagger + f_i^\dagger f_i \right) | i \rangle &= | i \rangle , \end{aligned} \quad (3.179)$$

so dass

$$f_i f_j^\dagger + f_j^\dagger f_i = \left\{ f_i, f_j^\dagger \right\} = \delta_{ij} . \quad (3.180)$$

Wir haben dann die Antikommutatorbeziehungen, welche die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen erfüllen:

$$\left\{ f_i, f_j^\dagger \right\} = \delta_{ij} , \quad \left\{ f_i^\dagger, f_j^\dagger \right\} = \left\{ f_i, f_j \right\} = 0 . \quad (3.181)$$

Nachdem wir die Antikommutatorbeziehungen erhalten haben, können wir zurück zur Schrödinger-Gleichung für Fermionen gehen. Dabei betrachten wir einen allgemeinen Zustand wie im Fall der Bosonen

$$| \psi(t) \rangle = \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} c_{n_1, \dots, n_i, \dots}(t) | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle \quad (3.182)$$

mit dem Unterschied zu den bosonischen Zuständen, dass die Besetzungszahlen nur die Werte $n_i = 0, 1$ haben können. Wie beschränken unsere Diskussion auf den kinetischen Term, um zu sehen, wie der Übergang zur zweiten Quantisierung stattfindet. Gleichung (3.140) zeigt, dass die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren in der Lage sein müssen, die dort auftretende Phasenfaktoren zu berücksichtigen. Um dies zu sehen, betrachten wir den Besetzungszustand ausgedrückt durch Erzeugungsoperatoren:

$$|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \left(f_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(f_i^\dagger\right)^{n_i} \cdots |0\rangle, \quad (3.183)$$

wobei die Nebenbedingung $\sum_i n_i = N$ erfüllt werden muß. Wie wir schon im Abs. 3.3 diskutiert haben, ist es im Fall der Fermionen wichtig, eine bestimmte Ordnung der Zustände beizubehalten. Dies kann durch die Festlegung einer bestimmten Ordnung der Erzeugungsoperatoren in (3.183) erreicht werden. Nun wenden wir einen Vernichtungsoperator auf diesen Zustand an

$$\begin{aligned} f_j |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= f_j \left(f_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(f_i^\dagger\right)^{n_i} \cdots |0\rangle \\ &= (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}} \\ &\quad \times \left(f_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(f_{j-1}^\dagger\right)^{n_{j-1}} f_j \left(f_j^\dagger\right)^{n_j} \cdots |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.184)$$

Wir unterscheiden hier zwei Fälle:

- i) $n_j = 0$. In diesem Fall ist das Ergebnis Null, da $f_j |0\rangle = 0$ ist.
- ii) $n_j = 1$. In diesem Fall erhalten wir

$$f_j f_j^\dagger = 1 - f_j^\dagger f_j, \quad (3.185)$$

wobei der zweite Term wegfällt, weil dort der Vernichtungsoperator auf das Vakuum wirkt.

Zurück zu (3.184) erhalten wir

$$\begin{aligned} (3.184) &= (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}} \left(f_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(f_{j-1}^\dagger\right)^{n_{j-1}} \left(f_{j+1}^\dagger\right)^{n_{j+1}} \cdots |0\rangle \\ &= (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}} |n_1, \dots, n_{j-1}, n_j - 1, n_{j+1}, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (3.186)$$

Dasselbe geschieht, wenn wir den Erzeugungsoperator auf den Zustand anwenden, wobei sich in diesem Fall Null ergibt, falls $n_j = 1$ ist.

$$\begin{aligned} f_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{i-1}} \\ &\quad \times |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i + 1, n_{i+1}, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (3.187)$$

Mit (3.186) und (3.187) zusammen erhalten wir

$$\begin{aligned} f_i^\dagger f_j |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle &= (-1)^{n_{i+1}+n_{i+2}+\dots+n_{j-1}} \\ &\quad \times |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (3.188)$$

Mit diesem Ergebnis können wir den kinetischen Term (3.140) wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} \sum_{i, j} \langle i | T | j \rangle (-1)^{n_{i+1} + n_{i+2} + \dots + n_{j-1}} \\
 & \quad \times c_{n_1, \dots, n_{i-1}, \dots, n_{j+1}, \dots}(t) | n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle \\
 & = \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} \sum_{i, j} \langle i | T | j \rangle (-1)^{n_{i+1} + n_{i+2} + \dots + n_{j-1}} \\
 & \quad \times c_{n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots}(t) | n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots \rangle \\
 & = \sum_{i, j} f_i^\dagger \langle i | T | j \rangle f_j \underbrace{\sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} c_{n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots}(t) | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle}_{|\psi(t)\rangle}. \quad (3.189)
 \end{aligned}$$

In ähnlicher Weise kann der Wechselwirkungsterm in die zweite Quantisierung übersetzt werden. Das Endergebnis für die Schrödinger-Gleichung ist

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi(t) \rangle = H | \psi(t) \rangle, \quad (3.190)$$

wobei der Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung

$$H = \sum_{i, j} f_i^\dagger \langle i | T | j \rangle f_j + \frac{1}{2} \sum_{i, j, k, \ell} f_i^\dagger f_j^\dagger \langle ij | V | k\ell \rangle f_\ell f_k \quad (3.191)$$

ist. Hier ist die Ordnung der Operatoren wichtig, da sie miteinander nicht kommutieren. Wir sehen, dass der Hamilton-Operator dieselbe Form hat wie im Fall der Bosonen. Die Kommutator- bzw. Antikommutatorbeziehungen der Operatoren beinhalten die Information über die statistischen Eigenschaften der betrachteten Teilchen.

3.4.3 Feldoperatoren

Die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren b_i^\dagger bzw. b_i für Bosonen und f_i^\dagger bzw. f_i für Fermionen erzeugen und vernichten ein Teilchen in einem Zustand $| i \rangle$, der zu einer bestimmten Ein-Teilchen-Basis gehört. Im Folgenden diskutieren wir, wie eine Änderung der Basis durchgeführt werden kann. Da dieselben Schritte für Bosonen und Fermionen gültig sind, nennen wir die Operatoren c_i^\dagger bzw. c_i , ohne die Statistik der Teilchen festzulegen.

Wir führen zunächst eine Linearkombination von Operatoren wie folgt ein:

$$\begin{aligned}
 \hat{\psi}(\vec{x}) & \equiv \sum_i \psi_i(\vec{x}) c_i, \\
 \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) & \equiv \sum_i \psi_i^*(\vec{x}) c_i^\dagger, \quad (3.192)
 \end{aligned}$$

wobei die Koeffizienten der Entwicklung $\psi_i(\vec{x})$ Ein-Teilchen-Wellenfunktionen für die Quantenzahl i sind und die Summe über einen vollständigen Satz von Zuständen

zur Quantenzahl i läuft. Die in dieser Weise erhaltenen Operatoren werden *Feldoperatoren* genannt.

Mit der obigen Definitionen können wir die kinetische Energie wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} & \sum_{i,j} c_i^\dagger \langle i | T | j \rangle c_j \\ &= \int d\vec{x} d\vec{x}' \sum_{i,j} c_i^\dagger \langle i | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | T | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | j \rangle c_j \\ &= \int d\vec{x} \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \right) \hat{\psi}(\vec{x}) , \end{aligned} \tag{3.193}$$

wobei wir benutzt haben, dass

$$\langle \vec{x} | T | \vec{x}' \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_{\vec{x}}^2 \right) \tag{3.194}$$

gilt. Wir sehen, dass die kinetische Energie durch die Einführung der Feldoperatoren dieselbe Form wie in der ersten Quantisierung hat. Jedoch anstatt Wellenfunktionen haben wir hier Operatoren, die auf Zustände im Fock-Raum wirken. Dementsprechend benutzt man den Namen zweite Quantisierung. Dies kann man wie folgt kurz darstellen.

$$H_{\text{klassisch}} \xrightarrow{q,p \rightarrow \hat{q}, \hat{p}} H_{1. \text{ Quantisierung}} \xrightarrow{\psi \rightarrow \hat{\psi}} H_{2. \text{ Quantisierung}} . \tag{3.195}$$

Für den Wechselwirkungsterm haben wir

$$\begin{aligned} & \sum_{i,j,k,\ell} c_i^\dagger c_j^\dagger \langle ij | V | k\ell \rangle c_\ell c_k \\ &= \int d\vec{x} d\vec{x}' d\vec{x}'' d\vec{x}''' \sum_{i,j,k,\ell} c_i^\dagger c_j^\dagger \langle i | \vec{x} \rangle \langle j | \vec{x}' \rangle \\ & \quad \times \langle \vec{x}\vec{x}' | V | \vec{x}''\vec{x}''' \rangle \langle \vec{x}'' | k \rangle \langle \vec{x}''' | \ell \rangle c_\ell c_k . \end{aligned} \tag{3.196}$$

Da V ein Zwei-Teilchen-Potential ist, kann es nur von zwei Koordinaten abhängen. Wir nehmen

$$\langle \vec{x}\vec{x}' | V | \vec{x}''\vec{x}''',''' \rangle = \langle \vec{x}\vec{x}' | V | \vec{x}\vec{x}' \rangle \delta(\vec{x}''' - \vec{x}') \delta(\vec{x}'' - \vec{x}) . \tag{3.197}$$

Mit dieser Wahl erhalten wir

$$(3.196) = \int d\vec{x} d\vec{x}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}') \hat{\psi}(\vec{x}') \hat{\psi}(\vec{x}) . \tag{3.198}$$

Die gewählte Ordnung der Indizes sorgt dafür, dass H hermitesch ist. Schließlich haben wir für den gesamten Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H &= \int d\vec{x} \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \right) \hat{\psi}(\vec{x}) \\ & \quad + \frac{1}{2} \int d\vec{x} d\vec{x}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}') \hat{\psi}(\vec{x}') \hat{\psi}(\vec{x}) . \end{aligned} \tag{3.199}$$

Die Kommutator- bzw. Antikommutatorbeziehungen der Feldoperatoren werden durch die entsprechenden Beziehungen der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren bestimmt.

$$\begin{aligned} \left[\hat{\psi}(\vec{x}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}') \right]_{\mp} &= \sum_{i,j} \psi_i(\vec{x}) \psi_j^*(\vec{x}) \underbrace{\left[c_i, c_j^\dagger \right]_{\mp}}_{=\delta_{ij}} \\ &= \sum_i \psi_i(\vec{x}) \psi_i^*(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}') , \end{aligned} \quad (3.200)$$

wobei das obere (untere) Vorzeichen bei den eckigen Klammern zu Bosonen (Fermionen) gehört. Um das Endergebnis zu erhalten, haben wir die Tatsache benutzt, dass die Wellenfunktionen $\{\psi_i(\vec{x})\}$ einen vollständigen Satz bilden.

Wir können mit anderen Operatoren wie mit dem Hamilton-Operator verfahren. Für Ein-Teilchen-Operatoren in erster Quantisierung

$$J = \sum_{i=1}^N J_i \quad (3.201)$$

erhalten wir mit Hilfe derselben Schritte wie bei der Behandlung der kinetischen Energie seine Form in zweiter Quantisierung.

$$\begin{aligned} \hat{J} &= \sum_{i,j} \langle i | J | j \rangle c_i^\dagger c_j \\ &= \int d\vec{x} d\vec{x}' \sum_i \psi_i^*(\vec{x}) c_i^\dagger \langle \vec{x} | J | \vec{x}' \rangle \sum_j \psi_j(\vec{x}') c_j \\ &= \int d\vec{x} \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) J(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) , \end{aligned} \quad (3.202)$$

wobei wir verwendet haben, dass

$$\langle \vec{x} | J | \vec{x}' \rangle = J(\vec{x}) \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (3.203)$$

gilt. Als Beispiel betrachten wir den *Dichteoperator*, der in erster Quantisierung durch

$$n(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \quad (3.204)$$

gegeben ist. Mit der obigen Vorschrift erhalten wir

$$\begin{aligned} \hat{n}(\vec{x}) &= \int d\tilde{\vec{x}} d\tilde{\vec{x}}' \sum_i \psi_i^*(\tilde{\vec{x}}) c_i^\dagger \\ &\quad \times \langle \tilde{\vec{x}} | \delta(\tilde{\vec{x}} - \vec{x}) | \tilde{\vec{x}}' \rangle \sum_j \psi_j(\tilde{\vec{x}}') c_j, \end{aligned} \quad (3.205)$$

wobei wir wissen, dass

$$\langle \tilde{x} | \delta(\tilde{x} - \vec{x}) | \tilde{x}' \rangle = \delta(\tilde{x} - \vec{x}) \delta(\tilde{x} - \tilde{x}') \quad (3.206)$$

ist, so dass

$$\hat{n}(\vec{x}) = \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) . \quad (3.207)$$

Der *Teilchenzahloperator* kann aus dem Dichteoperator erhalten werden:

$$\hat{N} = \int d\tilde{x} \hat{n}(\vec{x}) = \int d\tilde{x} \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) . \quad (3.208)$$

Man kann leicht zeigen, dass \hat{N} mit dem Hamilton-Operator (3.199) kommutiert.

3.5 Quantenfeldtheorie

Nachdem wir gesehen haben, wie Vielteilchensysteme im Rahmen der zweiten Quantisierung behandelt werden können, betrachten wir erneut die relativistische Quantenmechanik.

Anstelle von Wellenfunktionen, die Teilchen beschreiben sollen, wollen wir eine Beschreibung einführen, welche die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen erlaubt. Dabei brauchen wir einen Fock-Raum für die Zustände der Teilchen und Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren. Aus diesen Operatoren können wir Feldoperatoren bilden, die in allen Punkten im Raum wirken können. Die Quantenzahlen der Ein-Teilchen-Zustände im Fock-Raum werden aus den Quantenzahlen in erster Quantisierung gewonnen. Weiterhin werden die Feldoperatoren als Linearkombination der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt, wobei die Amplituden durch die Wellenfunktionen in erster Quantisierung gegeben werden. Daraus resultiert eine Quantenfeldtheorie, welche die Probleme mit Zuständen negativer Energien löst.

Wir betrachten zunächst den Fall von skalaren Feldern, welche die Klein-Gordon-Gleichung erfüllen, und danach Dirac-Felder.

3.5.1 Skalare Felder

Hier betrachten wir ein reelles klassisches Feld $\varphi(x)$, wobei x ein Punkt in der Raum-Zeit ist. Die Lagrangedichte wird wie folgt angenommen:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} [\partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi - m^2 \varphi^2] . \quad (3.209)$$

Die klassische Bewegungsgleichung ist

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \varphi)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = (\square + m^2) \varphi = 0 . \quad (3.210)$$

Dies bedeutet, daß die Klein-Gordon-Gl. nicht als relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gl. angesehen wird, sondern als eine klassische Feldgleichung. Diese Felder sollen nun quantisiert werden.

Hier wird die sog. kanonische Quantisierung durchgeführt. D.h. wir bilden zunächst die Hamiltonfunktion aus der Lagrangedichte. Dabei identifizieren wir den zum Feld φ kanonisch konjugierten Impuls. Die Poissonklammern der klassischen Theorie werden durch Kommutatoren ersetzt. Schließlich führen wir die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren ein. Der kanonische Impuls ist durch die Ableitung der Lagrangedichte nach der zeitlichen Ableitung des Feldes φ gegeben:

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \varphi)} = \partial^0 \varphi . \tag{3.211}$$

Damit kann man die Hamiltonfunktion bilden:

$$\begin{aligned} H &= \int d^3x \left[\pi \partial_0 \varphi - \mathcal{L} \right] \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x \left[\pi^2 + \left(\vec{\nabla} \varphi \right)^2 + m^2 \varphi^2 \right] . \end{aligned} \tag{3.212}$$

Die Hamiltonfunktion wird zum Hamiltonoperator, indem die Felder durch Feldoperatoren ersetzt werden, welche kanonische Kommutatorbeziehungen (definiert zu gleichen Zeiten) erfüllen:

$$[\varphi(t, \vec{x}), \pi(t, \vec{x}')] = i \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') . \tag{3.213}$$

Da einerseits der Hamiltonoperator harmonische Oszillatoren darstellt und andererseits \vec{k} eine gute Quantenzahl ist (homogener Raum), schlagen wir die folgende Form für die Feldoperatoren ($t = 0$) vor:

$$\varphi(\vec{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left[a(k) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + a^\dagger(k) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right] , \tag{3.214}$$

$$\pi(\vec{x}) = -i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} \left[a(k) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - a^\dagger(k) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right] , \tag{3.215}$$

wobei $\omega_k \equiv \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$ ist und die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren folgende Kommutatorbeziehungen erfüllen:

$$\begin{aligned} [a(k), a^\dagger(k')] &= (2\pi)^3 \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') , \\ [a(k), a(k')] &= [a^\dagger(k), a^\dagger(k')] = 0 . \end{aligned} \tag{3.216}$$

Durch Einsetzen von (3.214) und (3.215) in (3.212) können wir den Hamiltonoperator durch die Operatoren $a(k), a^\dagger(k)$ ausdrücken.

$$H = \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \omega_k [a^\dagger(k) a(k) + a(k) a^\dagger(k)] . \quad (3.217)$$

Das Vakuum ist durch den Zustand gegeben, welcher Folgendes erfüllt:

$$a(k) | 0 \rangle = 0 , \quad \langle 0 | 0 \rangle = 1 . \quad (3.218)$$

Wenn wir den Erwartungswert der Energie im Grundzustand berechnen, erhalten wir

$$\langle 0 | H | 0 \rangle = \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \omega_k \langle 0 | a(k) a^\dagger(k) | 0 \rangle , \quad (3.219)$$

wobei

$$\langle 0 | a(k) a^\dagger(k) | 0 \rangle = \underbrace{\langle 0 | a^\dagger(k) a(k) | 0 \rangle}_{=0} + \langle 0 | \underbrace{[a(k), a^\dagger(k)]}_{=\delta(0)!} | 0 \rangle . \quad (3.220)$$

D.h. dieser Erwartungswert divergiert. Dies ist eine Konsequenz der Tatsache, daß wir mit einem unendlich großen System arbeiten. Wären wir vorsichtiger gewesen und hätten zunächst ein endliches System betrachtet, dann würden wir sehen, daß der Betrag der Grundzustandsenergie mit dem Volumen des Systems divergiert. Für eine detaillierte Diskussion siehe Itzykson-Zuber (“Quantum Field Theory”, McGraw-Hill, 1980) Abs. 3-1-1. Wir wollen nur die Anregungen über dem Grundzustand betrachten, indem wir den Hamiltonoperator wie folgt undefinieren,

$$\begin{aligned} H \longrightarrow H &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \omega_k [a^\dagger(k) a(k) + a(k) a^\dagger(k)] - \langle 0 | H | 0 \rangle \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \omega_k a^\dagger(k) a(k) . \end{aligned} \quad (3.221)$$

Dabei erscheinen die Operatoren in normalgeordneter Form.

Der Feldoperator (3.214) wurde bei $t = 0$ so definiert, daß die kanonischen Kommutatorbeziehungen (3.213) erfüllt werden. Zur Zeit $t = x^0$ erhält der Feldoperator die folgende Form in der Heisenberg-Darstellung:

$$\begin{aligned} \varphi(t, \vec{x}) &= e^{iHt} \varphi(0, \vec{x}) e^{-iHt} \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left[\underbrace{e^{iHt} a(k) e^{-iHt}}_{(1)} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \underbrace{e^{iHt} a^\dagger(k) e^{-iHt}}_{(2)} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right] \end{aligned} \quad (3.222)$$

Um die Ausdrücke (1) und (2) in Gl. (3.222) zu berechnen, werden wir Formel (2.95) anwenden. Dabei erhält man

$$\begin{aligned} e^{iHt} a(k) e^{-iHt} &= a(k) e^{-ik_0 x^0}, \\ e^{iHt} a^\dagger(k) e^{-iHt} &= a^\dagger(k) e^{ik_0 x^0}, \end{aligned} \quad (3.223)$$

wobei $k_0 = \omega_k$ ist. Schließlich haben wir

$$\varphi(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} [a(k) e^{-ik_\mu x^\mu} + a^\dagger(k) e^{ik_\mu x^\mu}] . \quad (3.224)$$

Dieser Feldoperator erfüllt die Klein-Gordon-Gleichung:

$$(\square + m^2) \varphi(t, \vec{x}) = (-k_\mu k^\mu + m^2) \varphi(t, \vec{x}) = 0 . \quad (3.225)$$

Der Ausdruck (3.224) erlaubt auch die Identifikation von positiven bzw. negativen Frequenzen. Sie entsprechen der Erzeugung bzw. Vernichtung von Teilchen mit der Energie ω_k und Impuls \vec{k} . Für eine ausführliche Diskussion der relativistischen Invarianz der oben erhaltenen Feldoperatoren siehe Itzykson-Zuber Abs. 3-1-2.

Skalare Felder haben keine internen Freiheitsgrade. Sie entsprechen spinlosen Teilchen (z.B. Pionen). Aus der hier skizzierten Behandlung ist auch klar, daß sie der Bose-Einstein-Statistik unterliegen. Für Teilchen mit ganzzahligem Spin sollen Felder mit internen Freiheitsgraden angewandt werden, z.B. Vektorfelder im Fall der Photonen ($S = 1$).

3.5.2 Dirac-Felder

Wie wir oben gesehen haben, führt die kanonische Quantisierung zu Teilchen, welche der Bose-Einstein-Statistik unterliegen. Im Fall von Elektronen (oder andere $S = 1/2$ Teilchen) sollen die Teilchen der Fermi-Dirac-Statistik gehorchen. Dies bedeutet aber, daß in diesem Fall die kanonische Quantisierung nicht anwendbar ist.

Bei der Behandlung von skalaren Feldern haben wir gesehen, daß die Felder als Linearkombination von Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren ausgedrückt werden können. Die Amplituden in dieser Entwicklung sind die Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung in erster Quantisierung. Wir verfahren im Folgenden analog zum Fall der skalaren Felder, wobei wir einerseits die Fermi-Dirac-Statistik und andererseits die Lösungen der Dirac-Gleichung in erster Quantisierung berücksichtigen wollen. Wir definieren Feldoperatoren $\psi(x)$ und $\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x)\gamma^0$ als Linearkombinationen von Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren im Fock-Raum, wobei aufgrund der Translationsinvarianz der Dirac-Gleichung Impulse \vec{k} die Zustände kennzeichnen. Da im Fall der Dirac-Gleichung zwei Klassen von Lösungen (mit positiven bzw. negativen Energien) möglich sind, führen wir entsprechende Operatoren ein:

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{m}{k_0}} [b_\alpha(k) u^{(\alpha)}(k) e^{-ik_\mu x^\mu} + d_\alpha^\dagger(k) v^{(\alpha)}(k) e^{ik_\mu x^\mu}] . \quad (3.226)$$

Die Spinoren $u^{(\alpha)}(k)$ bzw. $v^{(\alpha)}(k)$ mit $\alpha = 1, 2$ wurden in (2.173) eingeführt. Sie gehören zu den Lösungen mit positiven bzw. negativen Energien. Weiterhin gilt $k_0 = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$.

Die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren erfüllen die folgenden Antikommutatorbeziehungen:

$$\begin{aligned} \{b_\alpha(k), b_\beta^\dagger(k')\} &= (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{\alpha\beta}, \\ \{d_\alpha(k), d_\beta^\dagger(k')\} &= (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (3.227)$$

Alle anderen Antikommutatoren verschwinden. Diese Antikommutatorbeziehungen führen zu antikommutierenden Feldern:

$$\{\psi_\alpha(t, \vec{x}), \psi_\beta^\dagger(t, \vec{x}')\} = \delta_{\alpha\beta} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (3.228)$$

Dafür wurden die Beziehungen (2.175) benutzt. Wie im Fall der skalaren Felder ist es nun möglich, die Erzeugung von Teilchen bzw. Antiteilchen mit den Lösungen für positive bzw. negative Energien in Verbindung zu setzen. Aus (3.226) ist ersichtlich, daß $\psi(x)$ Teilchen vernichtet und Antiteilchen erzeugt. Das Vakuum ist so definiert, daß

$$b_\alpha(k) | 0 \rangle = 0, \quad d_\alpha(k) | 0 \rangle = 0. \quad (3.229)$$

Schließlich betrachten wir die Energie des Systems. Da der kanonische Weg in diesem Fall nicht anwendbar ist, suchen wir nach einem Operator, der Translationen in der Raum-Zeit verursacht. Dies wurde schon im Abs. 2.2.1 in Verbindung mit den Galilei-Transformationen diskutiert. Wir verallgemeinern (2.86) wie folgt:

$$\psi(x^\mu + a^\mu) = e^{iP_\nu a^\nu} \psi(x^\mu) e^{-iP_\nu a^\nu}. \quad (3.230)$$

Für eine infinitesimale Translation kann man die Änderung des Operators durch einen Kommutator ausdrücken:

$$\partial_\mu \psi(x) = i [P_\mu, \psi(x)]. \quad (3.231)$$

Durch Einsetzen von (3.226) in die obige Gleichung erhält man Bedingungen für den Operator P_μ :

$$\begin{aligned} [P_\mu, b_\alpha(k)] &= -k_\mu b_\alpha(k), \\ [P_\mu, d_\alpha^\dagger(k)] &= k_\mu d_\alpha^\dagger(k). \end{aligned} \quad (3.232)$$

Solche Kommutatorbeziehungen werden durch den folgenden Operator erfüllt:

$$P_\mu = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_\mu \sum_\alpha [b_\alpha^\dagger(k) b_\alpha(k) - d_\alpha(k) d_\alpha^\dagger(k)]. \quad (3.233)$$

Die Komponente $\mu = 0$ gibt die gesamte Energie des Systems. Wie im Fall der skalaren Felder werden wir auch hier den Vakuumerwartungswert der Energie, d.h. $\langle 0 | P_0 | 0 \rangle$ abziehen. Dies führt zu

$$P_0 = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_0 \sum_{\alpha} [b_{\alpha}^{\dagger}(k)b_{\alpha}(k) + d_{\alpha}^{\dagger}(k)d_{\alpha}(k)] . \quad (3.234)$$

Somit ist die Energie des Systems in einem gegebenen Quantenzustand durch eine Summe positiver Terme gegeben und das Problem der negativen Energien ist gelöst. Dabei spielt die Statistik der Teilchen eine zentrale Rolle. Hätten wir bosonische Kommutatorbeziehungen für die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren angenommen, dann hätte das System keinen Grundzustand (die Erzeugung von Antiteilchen würde zu immer tieferen Energien führen). Dasselbe passiert mit skalaren Feldern, falls fermionische Antikommutatorbeziehungen für die Operatoren angenommen werden. Ganz allgemein läßt sich zeigen, dass Teilchen mit ganzzahligen Spin Bosonen sind, während Teilchen mit halbzahligem Spin Fermionen sind (siehe Itzykson-Zuber Abs. 3-3-3).