

**Skript zur Vorlesung Quantenmechanik II**

Gehalten von Jens Eisert im Sommersemester 2009 an der Universität Potsdam

Version des Skriptes: 1.8

---



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Kurze Auffrischung der Grundlagen der Quantenmechanik</b>	<b>9</b>
2.1	Zustände und Observablen . . . . .	9
2.1.1	Reine Zustände . . . . .	9
2.1.2	Gemischte Zustände . . . . .	13
2.1.3	Messpostulat . . . . .	16
2.2	Zusammengesetzte Quantensysteme . . . . .	17
2.3	Zeitentwicklung im Schrödingerbild und Heisenbergbild . . . . .	18
2.4	Heisenbergsches Unschärfeprinzip . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Identische Teilchen und zweite Quantisierung</b>	<b>23</b>
3.1	Identische Teilchen . . . . .	23
3.2	Nichtwechselwirkende identische Teilchen . . . . .	28
3.3	Einschub: Das freie Bosonen- und Fermionengas . . . . .	29
3.4	Zweite Quantisierung . . . . .	30
3.4.1	Zweite Quantisierung für Bosonen . . . . .	30
3.4.2	Zweite Quantisierung für Fermionen . . . . .	33
3.4.3	Bosonische Feldoperatoren . . . . .	35
3.4.4	Fermionische Feldoperatoren . . . . .	37
3.4.5	Hamiltonoperatoren in zweiter Quantisierung . . . . .	37
<b>4</b>	<b>Fermigase</b>	<b>41</b>
4.1	Vorbemerkungen . . . . .	41
4.2	Grundzustand des idealen Fermigases . . . . .	42
4.3	Fermionische Korrelationsfunktionen . . . . .	44
4.4	Fermionische Paarverteilungsfunktionen . . . . .	45
4.5	Systeme mit Coulombwechselwirkung . . . . .	47
4.5.1	Störungstheorie . . . . .	50
4.5.2	Änderung der Elektronenniveaus aufgrund der Coulombwechselwirkung . . . . .	53

<b>5</b>	<b>Bosonische Systeme</b>	<b>57</b>
5.1	Paarverteilungsfunktion für freie Bosonen . . . . .	57
5.1.1	Photonenkorrelationen . . . . .	59
5.2	Schwach wechselwirkende verdünnte Bosonengase . . . . .	59
5.2.1	Quantenfluide und Bose-Einstein-Kondensation . . . . .	59
5.2.2	Bogoliubov-Theorie des schwach wechselwirkenden Bosegases	60
<b>6</b>	<b>Superfluide und Supraleiter</b>	<b>65</b>
6.1	Superfluidität . . . . .	71
6.2	Supraleiter . . . . .	75
6.2.1	Phänomenologie . . . . .	80
6.2.2	BCS-Theorie . . . . .	82
<b>7</b>	<b>Stark korrelierte Systeme</b>	<b>85</b>
7.1	Gittermodelle und Spinketten . . . . .	85
7.2	Matrixproduktzustände . . . . .	89
7.3	Dichtematrix-Renormierung . . . . .	92
7.4	Quanten-Monte-Carlo . . . . .	95
<b>8</b>	<b>Greensfunktionen und Feynman-Diagramme</b>	<b>103</b>
8.1	Greensfunktionen . . . . .	103
8.2	Feynman-Diagramme . . . . .	103
<b>9</b>	<b>Streutheorie</b>	<b>113</b>
9.1	Elementare Streutheorie . . . . .	125
9.2	Møller-Operatoren . . . . .	125
<b>10</b>	<b>Bellsche Ungleichungen</b>	<b>127</b>
10.1	CHSH-Ungleichung . . . . .	127
10.2	Quantenmechanik und der absolute Zufall . . . . .	127
<b>11</b>	<b>Ausblick</b>	<b>133</b>
<b>12</b>	<b>Index</b>	<b>135</b>
<b>13</b>	<b>Notizen</b>	<b>139</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Wir werden uns in diesem Kurs mit der Quantenmechanik beschäftigen, einer der bestbewährtesten Theorien der Physik. Eigenschaften von Festkörpern, wie von Atomen und Molekülen sind unverstehbar, ohne die Quantentheorie heranzuziehen. Die Quantentheorie stellt auch den radikalsten Bruch dar mit der Physik des 19. Jahrhunderts: Dass es eine intrinsisch statistische Theorie ist, die keinerlei zugrundeliegende klassische Wahrscheinlichkeitsinterpretation erlaubt, ist nur eines der Strukturmerkmale der Quantentheorie, das völlig verschieden ist von dem, was man aus der klassischen Physik kennt.

Aufbauend auf dem Kurs über elementare Quantenmechanik im letzten Semester wollen wir hier einige Fragestellungen vertiefen. Insbesondere wollen wir recht viel Zeit mit der Situation verbringen, in denen viele Teilchen miteinander wechselwirken: In offensichtlicher Weise ist genau dies die Situation, die man in realen Materialien oder anderen Festkörperanwendungen vorfindet. Obwohl solche eher fortgeschrittenen Anwendungen im Vordergrund stehen, werden wir dennoch kurz die Grundlagen der Quantenmechanik wiederholen: Dies, um das Bekannte aufzufrischen, um eine gemeinsame Sprache zu finden, und um das Gelernte in einer vielleicht etwas anderen Art zu betrachten. Diese Darstellung wird knapp sein, annehmend, dass diese elementaren Dinge eben schon im wesentlichen bekannt sind.

**Anleitung zur Verwendung dieses Skriptes:** Dieses Skript wird alle nennenswerten Aussagen des Kurses zusammenfassen. Wichtige Ergebnisse oder Definitionen sind in Kästen wie diesem hier hervorgehoben.

Der Skript wird sich auch im Verlaufe des Kurses noch etwas dynamisch verändern: Es heisst also nicht, dass zu späteren Zeiten frühere Kapitel noch ganz so aussehen, wie am Anfang. Der Kurs lehnt sich nicht direkt an ein Buch an, aber verschiedene Darstellungen sind einigen Büchern entlehnt. Stellenweise ist die Darstellung schamlos geklaut, und die Originalautoren haben das jeweilige Urheberrecht auf die Idee der Darstellung. Dieser Skript ist aber kein Entwurf für ein entstehendes Buch, sondern

streng nur zur internen Verwendung mit dieser Vorlesung gedacht, und didaktischer Nutzen hatte in der Gestaltung des Skriptes Priorität vor Originalität. Dies betrifft vor allem die schönen Bücher [1, 2, 3, 4, 5]. Der Ton dieser Darstellungen ist oft reichlich verschieden voneinander: Während etwa [5] viel pragmatischer und rechenbezogen ist, legt [4] mehr Gewicht auf Subtilitäten und Feinheiten, auch mathematischer Art. Es lohnt also, in mehr als in ein Buch zu sehen, und auch, wenn man denkt, einen Sachverhalt verstanden zu haben, kann eine andere Darstellung einen Leser und eine Leserin wieder im positiven Sinne verwirren.

# Literaturverzeichnis

- [1] A.L. Fetter und J.D. Valecka, *Quantum theory of many-particle systems* (McGraw-Hill, 1971).
  - [2] E.K.U. Gross und E. Runge, *Vielteilchentheorie* (Teubner, 1986).
  - [3] W. Nolting, *Grundkurs theoretische Physik 7* (Springer, 2007).
  - [4] A. Galindo und P. Pascual, *Quantum mechanics II* (Springer, 1989).
  - [5] F. Schwabl, *Fortgeschrittene Quantenmechanik* (Springer, 2005).
- 
- [6] E.P. Wigner, Trans. Farad. Soc. **34**, 678 (1938).
  - [7] M.H. Anderson, J.R. Enscher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
  - [8] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollett, and R.G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
  - [9] K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 2969 (1995).





## Kapitel 2

# Kurze Auffrischung der Grundlagen der Quantenmechanik

### 2.1 Zustände und Observablen

Jede physikalische Theorie soll Aussagen darüber machen, was man für Meßausgänge erwarten muß, wenn man ein bestimmtes System betrachtet, in einem definierten Experiment. Diese Vorhersagen sind in der Quantenmechanik statistischer Natur: In aller Regel wird die Theorie nur vorhersagen, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein gewisser Meßausgang erhalten wird, nicht aber welchen man konkret vorfinden wird. Umgekehrt kann man in einem Experiment die Vorhersagen nur verifizieren, indem man viele Experimente durchführt, und aus den relativen Häufigkeiten Erwartungswerte schätzt. Die Theorie sagt also nur etwas aus über Erwartungswerte. Dies ist kein Kunstfehler der Theorie: Wir werden – sofern die Zeit erlaubt – später feststellen, dass diese “absolute Zufälligkeit” ein Strukturmerkmal ist, das fest in der Quantentheorie verankert ist. Ja, sogar eines, das dann bleiben wird, wenn die Quantenmechanik einmal durch eine neue, genauere Theorie ersetzt werden sollte.

Wir müssen uns also fragen, wie wir *Zustände* beschreiben, wie *Observable*, also die Größen, die wir messen können, und wie sich Erwartungswerte ergeben. Außerdem sollten wir uns überlegen, wie sich Systeme in der Zeit entwickeln.

#### 2.1.1 Reine Zustände

Wir betrachten zunächst nichtzusammengesetzte Systeme, also solche, die nur aus einem “Teil” bestehen. Quantensysteme sind mit einem *Hilbertraum* assoziiert.<sup>1</sup> Der einfachste Hilbertraum ist einfach der eines einzelnen Spins der durch  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  oder  $|\uparrow\rangle$

---

<sup>1</sup>Ein komplexer Hilbertraum ist ein unitärer Vektorraum, der bezüglich der durch das Skalarprodukt definierten Norm vollständig ist.

und  $|\downarrow\rangle$  aufgespannt wird: Der Spin zeigt nach oben oder unten.

**Zustandsvektoren:** Reine Quantenzustände sind beschrieben durch normierte Zustandsvektoren  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  aus einem komplexen Hilbertraum.

Dies kann etwa eine Superposition sein

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (2.1)$$

mit komplexen  $\alpha, \beta$ , die normiert sind wie

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (2.2)$$

Dies zeigt, dass Spins in der Quantenmechanik nicht nur nach oben oder unten zeigen können: Sondern sie können auch in jeder komplexen Superposition von “oben” und “unten” sein. Der Hilbertraum ist hier also einfach  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ .

Wie üblich ist  $\langle\psi|\phi\rangle$  das *Skalarprodukt* zwischen zwei solchen Zustandsvektoren. Normierung heißt

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (2.3)$$

Der Vektor  $\langle\psi| \in \mathcal{H}^*$  ist ein Dualvektor. In Anlehnung als das Wort “Bracket” für Klammer werden Zustandsvektoren auch “kets” gekannt, und Dualvektoren “bra”s, in einer Manifestation von einem etwas kauzigen Art von Humor. Matricelemente von Operatoren haben die Form  $\langle\psi|A|\phi\rangle$ . Allgemeiner kann man eine Basis

$$\mathcal{B} = \{|0\rangle, \dots, |d-1\rangle\} \quad (2.4)$$

wählen für ein Quantensystem mit  $d$  Niveaus. Dann ist jeder Zustandsvektor schreibbar als

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{d-1} c_j |j\rangle. \quad (2.5)$$

Die komplexen Zahlen  $c_0, \dots, c_{d-1}$  heißen dann Koeffizienten. Diese Basis ist normiert und vollständig, was heißt, dass

$$\langle j|k\rangle = \delta_{j,k}, \quad (2.6)$$

$$\sum_{j=0}^{d-1} |j\rangle\langle j| = \mathbb{1}. \quad (2.7)$$

Der Hilbertraum eines *Teilchens im Ortsraum* ist der  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ : Reine Zustände von Teilchen ohne Spin im Ortsraum werden durch *Wellenfunktionen* beschrieben. Solche Zustandsvektoren  $|\psi\rangle$  gehören also zu komplexen Wellenfunktionen  $\psi$ , die normiert sind wie

$$\int dx \psi^*(x) \psi(x) = 1. \quad (2.8)$$

Das Skalarprodukt ist

$$\int dx \phi^*(x) \psi(x) = \langle \phi | \psi \rangle \quad (2.9)$$

für zwei Wellenfunktionen. Ein Großteil der elementaren Quantenmechanik beschäftigte sich mit der Dynamik solcher Wellenfunktionen, wie etwa die Streuung an einem Kastenpotential. Wie wir wissen, ist

$$p(x) = |\psi(x)|^2 \quad (2.10)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte, ein Teilchen an einem Ort vorzufinden bei einer Ortsmessung. Hier bezeichnet  $x$  noch die Ortsvariable in einer Dimension, aber wir kommen sogleich zu mehreren Dimensionen. Im Unendlichdimensionalen – also wie im Fall eines Teilchens im Ortsraum – reicht es, einen separablen Hilbertraum zu haben. Für den obigen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  sind etwa die *Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators*

$$\mathcal{B} = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots\} \quad (2.11)$$

eine Basis.

Größen, die observiert werden können, sind treffenderweise mit *Observablen* assoziiert: Dies sind hermitesche Operatoren  $A$ , wobei hermitisch heißt, dass

$$A = A^\dagger. \quad (2.12)$$

Deren Eigenwerte<sup>2</sup> sind mögliche Meßwerte. Dass die Observable hermitisch ist, hat schon einmal den Vorteil, dass dessen Eigenwerte – und damit Meßgrößen – dann immer reell sind.

**Observable:** Observable sind hermitesche Operatoren auf einem Hilbertraum. Erwartungswerte von solchen Observablen für Systeme in reinen Zuständen ergeben sich zu

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle. \quad (2.13)$$

Wie erwähnt liefert dies eine Vorhersage über relative Häufigkeiten in Experimenten. Observable sind auch immer diagonalisierbar: Letzterer Satz im folgenden Kasten bezieht sich darauf, dass unitäre Operatoren gerade die sind, die eine orthonormale Basis auf eine neue abbilden.

<sup>2</sup>Oder genauer Spektralwerte, um auch den Fall eines kontinuierlichen Spektrums einzubeziehen. Wir werden hier aber eine recht pragmatische Haltung einnehmen und mathematische Feinheiten oft unter den Tisch kehren oder nur kurz kommentieren.

**Diagonalisierbarkeit:** Jeder hermitesche Operator ist diagonalisierbar, also gibt es einen unitären Operator  $U$  (der also  $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$  erfüllt) und eine Diagonalmatrix  $D$ , so dass

$$A = UDU^\dagger. \quad (2.14)$$

In einer passenden Basis “sieht also jede Observable diagonal aus”.

Allgemeine Operatoren in Hilberträumen können natürlich auch in der Basis dargestellt werden, als

$$A = \sum_{j,k=0}^{d-1} \langle j|A|k\rangle |j\rangle\langle k|. \quad (2.15)$$

Deren Spur ist einfach

$$\text{tr}[A] = \sum_{j=0}^{d-1} \langle j|A|j\rangle. \quad (2.16)$$

Sie hängt nicht von der gewählten Basis ab, eine Tatsache, von der man sich schnell überzeugt.<sup>3</sup>

Wir werden im folgenden zwischen den Operatoren selbst und den Matrizen, die sie repräsentieren, nicht unterscheiden, wie dies in der Literatur auch üblich ist. Operatoren, die gerade in der Physik des Spins eine zentrale Rolle spielen, sind die *Paulioperatoren*. Sie sind definiert als

$$X = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.17)$$

$$Y = -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0| = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.18)$$

$$Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Der Einheitsoperator,

$$\mathbb{1} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.20)$$

wird oft auch als Paulimatrix bezeichnet. Es ist nun also einfach, Erwartungswerte zu berechnen. Der Erwartungswert von  $Z$  in  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  ist also einfach

$$\langle \psi|Z|\psi\rangle = |\alpha|^2 - |\beta|^2. \quad (2.21)$$

Stern-Gerlach-artige Experimente lassen sich so einfach beschreiben.

<sup>3</sup>Dies gilt für endlichdimensionale Matrizen. Unendlichdimensionale Observablen müssen keine wohldefinierte Spur haben. Solche, die doch eine aufweisen, heißen Spurklasseoperatoren, und die Spur lässt sich in naheliegender Weise über Netze von endlichdimensionalen Spuren definieren.

### 2.1.2 Gemischte Zustände

Nun reichen reine Zustände aber nicht aus, um alle möglichen Zustände zu beschreiben. Die Notwendigkeit eines solchen Konzeptes ist evident: Nehmen wir an, wir haben einen Stern-Gerlach-Experiment gemacht, haben einen Meßausgang bekommen, sagen wir Spin nach oben. In einem anderen identischen Experiment zeigt der Spin nach unten. Wenn wir diese beiden Strahlen nun wieder zusammenbringen, dann werden wir also eine Mischung erhalten von Anteilen, in denen der Spin nach oben zeigt, und solchen, bei denen er nach unten zeigt. Wenn wir eine Gleichverteilung annehmen, ist der Zustand hinterher sinnvoll beschrieben durch den Zustandsvektor

$$|\psi\rangle = (|0\rangle + |1\rangle) / \sqrt{2} \quad (2.22)$$

Sicher nicht! Denn dieser wird in einem weiteren Experiment, bei dem wir den Stern-Gerlach-Apparat drehen, die falschen Vorhersagen liefern. Wir brauchen also eine Möglichkeit, klassische Wahrscheinlichkeitsverteilungen in das Zustandskonzept der Quantenmechanik einzubauen. Dies wird in der Quantenmechanik durch die *gemischten Zustände* oder *Dichteoperatoren* inkorporiert.

Der Dichteoperator, der die obige Situation sinnvoll beschreibt, ist gegeben durch

$$\rho = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|. \quad (2.23)$$

Die Zahlen  $1/2$  bilden eine klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung, und resultieren von der Präparation, bei der mit gleicher Wahrscheinlichkeit der Spin nach oben und nach unten präpariert wird. Es besteht hier aber eine kleine Subtilität:

$$\rho = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| \quad (2.24)$$

$$= \frac{1}{2}|-\rangle\langle -| + \frac{1}{2}|+\rangle\langle +| \quad (2.25)$$

wobei nun

$$|-\rangle = (|0\rangle + |1\rangle) / \sqrt{2}, \quad (2.26)$$

$$|+\rangle = (|0\rangle - |1\rangle) / \sqrt{2}. \quad (2.27)$$

Dies ist aber – wie man sofort sieht – der gleiche Dichteoperator!

In anderen Worten, ob wir  $|0\rangle$  oder  $|1\rangle$  mit der gleichen Wahrscheinlichkeit präparieren oder  $|-\rangle$  or  $|+\rangle$ : Wir werden den gleichen Dichteoperator und damit den gleichen Zustand erhalten. Es wird auch kein Experiment geben, das im Nachhinein diese beiden Zustände voneinander unterscheiden kann. Die Lehre ist also: Der Dichteoperator liefert alle Wahrscheinlichkeitsverteilungen aller möglicher Messungen an einem System, also alles, was über einen Zustand zu sagen ist. Wenn wir einen gemischten Quantenzustand haben, gibt es kein Experiment, das herausfinden könnte, “welche reinen Zustände wir gemischt haben”. Sprechweisen, die dies dennoch versuchen, werden oft abwertend mit dem Ausdruck “preferred ensemble fallacy” bezeichnet. Nur der Dichteoperator hat physikalische Relevanz, und es gibt viele verschiedene

## 14 KAPITEL 2. KURZE AUFRISCHUNG DER GRUNDLAGEN DER QUANTENMECHANIK

Arten, den identischen Zustand zu präparieren. So auch in dem obigen Stern-Gerlach-Gedankenexperiment.

Die obige Situation kann verallgemeinert werden zu

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|, \quad (2.28)$$

wobei  $|\psi_j\rangle \in \mathcal{H}$  und wobei  $\{p_j\}$  eine Wahrscheinlichkeitsverteilung bildet, also

$$0 \leq p_j \leq 1, \quad (2.29)$$

$$\sum_j p_j = 1. \quad (2.30)$$

Man sagt oft, dass dieser Zustand dann durch das *Ensemble*  $(\{p_j\}, \{|\psi_j\rangle\})$  beschrieben ist, definiert durch die Wahrscheinlichkeiten  $\{p_j\}$  und reinen Ensemblezustandsvektoren  $\{|\psi_j\rangle\}$ . Dies ist aber lediglich eine Sprechweise, lediglich  $\rho$  selbst hat physikalische Relevanz.

Die Zustandsvektoren müssen nicht orthogonal sein! Die Wahrscheinlichkeit  $p_j$  für ein  $j$  kann interpretiert werden als das Gewicht von  $|\psi_j\rangle$  im Ensemble. Aber, um dies zur absurden Redundanz zu wiederholen :, im Nachhinein kann man die  $\{p_j\}$  nicht mehr ermitteln, wenn die Zustandvektoren nicht gerade orthogonal sind. Die Ausnahme ist natürlich gegeben durch die reinen Zustände selbst, die eindeutig einem Ensemble entsprechen:

**Dichteoperator:** Ein *Dichteoperator* oder *Zustand*  $\rho$  eines Quantensystems mit Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist ein Operator, der

- positiv ist,

$$\rho \geq 0 \quad (2.31)$$

(dies impliziert bereits  $\rho = \rho^\dagger$ , dass also alle Eigenwerte reell sind), und

- normiert,

$$\text{tr}(\rho) = 1. \quad (2.32)$$

Jeder solche Operator entspricht einem legitimen physikalischen Zustand. Jeder Dichteoperator kann auch dargestellt werden durch ein passendes Ensemble  $(\{p_j\}, \{|\psi_j\rangle\})$  als

$$\rho = \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|. \quad (2.33)$$

*Reine Zustände* können geschrieben werden als

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (2.34)$$

mit einem passenden Vektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ .

Diese Eigenschaften sind natürlich und direkt diktiert durch die statistische Interpretation der Quantenmechanik. Nachzuweisen, dass Ensembles diese Bedingungen immer erfüllen, ist nicht schwierig. In der Quantenmechanik braucht man immer Dichtematrizen, um zwei Dinge zu inkorporieren: (i) Klassische Wahrscheinlichkeitsverteilungen oder Ignoranz über eine experimentelle Situation oder (ii) partielle Spuren, um also Teile von Quantensystemen zu beschreiben. Wir werden Dichteoperatoren in diesem Kurs vor allem bei thermischen Zuständen verwenden und kennenlernen.

Reine Zustände sind übrigens genau die, die

$$\rho = \rho^2 \quad (2.35)$$

erfüllen, was gleichzeitig ein Test ist, um herauszufinden, ob ein Zustand rein ist.<sup>4</sup>

**Reine Quantenzustände:** Ein Zustand (also Dichteoperator) eines Quantensystems ist rein, genau dann wenn

$$\text{tr}[\rho^2] = 1 \quad (2.36)$$

Im allgemeinen gilt  $\text{tr}(\rho^2) < 1$ .

Für ein einzelnen Spin, wie dem Spin eines Elektrons, ist eine Dichtematrix also eine  $2 \times 2$ -Matrix:

$$\rho = \begin{bmatrix} a & b \\ b^* & 1-a \end{bmatrix}, \quad (2.37)$$

so dass  $a \in [0, 1]$  und  $\rho \geq 0$ , meint

$$a(1-a) - |b|^2 \geq 0, \quad (2.38)$$

und dann  $\det(\rho) \geq 0$  und  $\text{tr}(\rho) \geq 0$ , was gleichbedeutend für Positivität ist für  $2 \times 2$ -Matrizen. Die Dichtematrix zu  $|0\rangle$  ist

$$\rho = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.39)$$

die von  $|1\rangle$

$$\rho = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.40)$$

Natürlich ist

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (2.41)$$

Um Wahrscheinlichkeitsverteilungen einzubauen: Wenn wir  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  mit jeweiliger Wahrscheinlichkeit  $1/2$  präparieren, dann ist

$$\rho = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \quad (2.42)$$

<sup>4</sup>Die Menge der Dichtematrizen bilden eine konvexe Menge, mit den reinen Zuständen als Extrempunkten.

## 16 KAPITEL 2. KURZE AUFRISCHUNG DER GRUNDLAGEN DER QUANTENMECHANIK

Die Dichtematrix von  $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$  ist

$$\rho = |+\rangle\langle +| = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad (2.43)$$

und von  $|-\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$

$$\rho = |-\rangle\langle -| = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \quad (2.44)$$

Wie erhält man nun Erwartungswerte? Nun, aus der Definition von Erwartungswerten für reine Zustände erhält man für Gemische

$$\rho = \sum_{j=0}^{d-1} p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \quad (2.45)$$

den Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{j=0}^{d-1} p_j \langle\psi_j|A|\psi_j\rangle \\ &= \sum_{j=0}^{d-1} p_j \text{tr}[|\psi_j\rangle\langle\psi_j|A] = \text{tr}[\rho A]. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Dies ist einen eigenen Kasten wert:

**Erwartungswerte von Observablen:** Der Erwartungswert einer Observable  $A$  im Zustand  $\rho$  ergibt sich zu

$$\langle A \rangle = \text{tr}[\rho A]. \quad (2.47)$$

### 2.1.3 Messpostulat

Wie lautet der Zustand unmittelbar nach einer Messung? Das Messpostulat der Quantenmechanik gibt an, wie die Wahrscheinlichkeit lautet, einen bestimmten Meßausgang zu erhalten, und welchen Zustand wir nach der Messung dem System zuschreiben müssen:



**Meßpostulat für reine Zustände:** Sei  $A$  eine Observable mit Spektralzerlegung

$$A = \sum_k \lambda_k P_k, \quad (2.48)$$

wobei

$$P_k = \sum_{\text{EV } \lambda_k} |\psi_k\rangle\langle\psi_k|. \quad (2.49)$$

Also sind  $P_k = P_k^2$  die Projektoren auf den Eigenraum zum Eigenwert  $\lambda_k$ . Dann sind die möglichen Meßwerte  $\lambda_j$ , die Wahrscheinlichkeit, einen solchen zu messen, wenn das System im reinen Zustand mit Vektor  $|\psi\rangle$  ist, ist

$$p_k = \langle\psi|P_k|\psi\rangle = \langle\psi_k|P_k^2|\psi_k\rangle = \|P_k|\psi_k\rangle\|^2. \quad (2.50)$$

Der Zustandsvektor unmittelbar nach der Messung ist

$$|\psi'_k\rangle = \frac{P_k|\psi\rangle}{\sqrt{p_k}}. \quad (2.51)$$

Für gemischte Zustände ist dies ganz analog:

**Meßpostulat für gemischte Zustände:** Sei nun das System vor der Messung in dem Zustand  $\rho$ . Dann lautet die Wahrscheinlichkeit, den Ausgang  $\lambda_k$  zu erhalten,

$$p_k = \text{tr}[\rho P_k], \quad (2.52)$$

und der Zustand direkt nach der Messung ist

$$\rho'_k = \frac{P_k \rho P_k}{\text{tr}[P_k \rho P_k]} = \frac{P_k \rho P_k}{\text{tr}[\rho P_k]}. \quad (2.53)$$

## 2.2 Zusammengesetzte Quantensysteme

Wenn wir zwei Quantensysteme als eines auffassen, wie beschreiben wir das neue zusammengesetzte Quantensystem? Das Produkt, das dem “zusammenfassen” entspricht, ist das *Tensorprodukt*. Der neue Hilbertraum eines Systems  $A$  mit Hilbertraum  $\mathcal{H}_A$  und eines Systems  $B$  mit  $\mathcal{H}_B$  ist

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (2.54)$$

Wenn  $\{|0\rangle_A, \dots, |d_A - 1\rangle_A\}$  eine Basis von  $\mathcal{H}_A$  ist und  $\{|0\rangle_B, \dots, |d_B - 1\rangle_B\}$  eine Basis für  $\mathcal{H}_B$  (und analog im Unendlichdimensionalen), dann ist

$$\{|j\rangle_A \otimes |k\rangle_B : j = 0, \dots, d_A - 1, k = 0, \dots, d_B - 1\} \quad (2.55)$$

eine Basis des zusammengesetzten Hilbertraums. Ein allgemeiner Zustandsvektor läßt sich dann also schreiben als

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{d_A-1} \sum_{k=0}^{d_B-1} c_{j,k} |j\rangle_A \otimes |k\rangle_B. \quad (2.56)$$

Oft schreibt man hierfür auch einfach

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{d_A-1} \sum_{k=0}^{d_B-1} c_{j,k} |j\rangle_A |k\rangle_B = \sum_{j=0}^{d_A-1} \sum_{k=0}^{d_B-1} c_{j,k} |j, k\rangle. \quad (2.57)$$

Ebenso lassen sich natürlich höhere Tensorprodukte definieren. Für unsere Zwecke ist wichtig, dass die drei Raumdimensionen einem Tensorprodukt

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \quad (2.58)$$

entsprechen. Ein Teilchen mit einem Spin ist das Tensorprodukt des Ortsanteils und dem Spinanteil, etwa der dritten Komponente eines Spins. Wir werden bald Zustandsvektoren von Zuständen von Teilchen mit Spin kennenlernen: Diese Zustände mit Wellenfunktion  $\psi(x, \sigma)$  für einen Ort  $x \in \mathbb{R}^3$  sind aus

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2, \quad (2.59)$$

wobei der letzte Term  $\mathbb{C}^2$  gerade der Spinkomponente entspricht.

## 2.3 Zeitentwicklung im Schrödingerbild und Heisenbergbild

Wenn wir einen Zustand zu einer bestimmten Zeit kennen, und dem Hamiltonoperator des Systems bewußt sind, wie lautet dann der Zustand zu einer späteren Zeit? Die Antwort hierauf liefert natürlich die *Schrödingergleichung*. In ihrer differenziellen Form lautet sie für ein zeitunabhängiges Problem wie folgt:

**Schrödingergleichung:** Die Zeitentwicklung eines abgeschlossenen Quantensystems wird beschrieben durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle, \quad (2.60)$$

wobei  $H$  der *Hamiltonoperator* ist.

Mit Hilfe des unitären *Zeitentwicklungsoperators*

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (2.61)$$

können wir die Zeitentwicklung auch wie folgt schreiben.  $H$  ist so der Generator der Zeitentwicklungsgruppe. Als unitärer Operator erfüllt er  $U(t)U^\dagger(t) = U^\dagger(t)U(t) = \mathbb{1}$ . Offensichtlich ist  $U(0) = \mathbb{1}$ .

**Zeitentwicklung:** Die Zeitentwicklung eines abgeschlossenen Quantensystems von einer Zeit  $t_1$  zu einer Zeit  $t_2 > t_1$  wird beschrieben durch eine unitäre Transformation von Zustandsvektoren

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2 - t_1)|\psi(t_1)\rangle. \quad (2.62)$$

Dichteoperatoren entwickeln sich wie

$$\rho(t_2) = U(t_2 - t_1)\rho(t_1)U^\dagger(t_2 - t_1). \quad (2.63)$$

Diese Zeitentwicklung wird auch Zeitentwicklung im *Schrödingerbild* bezeichnet, in dem die Observablen konstant sind und Zustände sich entwickeln. Ebenso verbreitet ist die Beschreibung einer Zeitentwicklung im Observablenraum: Dies wird als *Heisenbergbild* bezeichnet, in einer historischen Anlehnung.

**Entwicklung von Observablen im Heisenbergbild:** Im Heisenbergbild entwickeln sich Observablen  $A$  in der Zeit von  $t_1$  zu  $t_2 > t_1$  wie

$$A(t_2 - t_1) = U^\dagger(t_2 - t_1)AU(t_2 - t_1). \quad (2.64)$$

Natürlich sind die Vorhersagen in beiden Bildern identisch:

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \text{tr}[A\rho(t)] = \text{tr}[A(U(t)\rho U^\dagger(t))] = \text{tr}[(U^\dagger(t)AU(t))\rho] \\ &= \text{tr}[A(t)\rho]. \end{aligned} \quad (2.65)$$

mit  $t_2 = t$  und  $t_1 = 0$  zur Vereinfachung der Notation.

## 2.4 Heisenbergsches Unschärfeprinzip

Eine Folge der Tatsache, dass zwei Observable  $A$  und  $B$  nicht notwendigerweise kommutieren, hat das Heisenbergsche Unschärfeprinzip zur Folge. Wir betrachten die mittlere quadratische Abweichung vom Erwartungswert einer Observablen bezüglich eines

20 KAPITEL 2. KURZE AUFRISCHUNG DER GRUNDLAGEN DER QUANTENMECHANIK

reinen Zustands mit Zustandsvektor  $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2.\end{aligned}\tag{2.66}$$

Was heißt dies nun für zwei Observable  $A$  und  $B$ ? Wir betrachten

$$M = A - \langle A \rangle, \quad N = B - \langle B \rangle,\tag{2.67}$$

also die gleichen Observablen, von denen wir die ersten Momente abgezogen haben. Wir finden

$$\langle NM \rangle = \langle NM \rangle = z,\tag{2.68}$$

$$\langle MN \rangle = \langle (NM)^\dagger \rangle = \langle NM \rangle^* = z^*.\tag{2.69}$$

Also ist

$$\langle [N, M] \rangle = \langle NM - MN \rangle = z - z^*.\tag{2.70}$$

Unter Betragsbildung erhalten wir also

$$\begin{aligned}|\langle [N, M] \rangle|^2 &= |\langle \psi | [N, M] | \psi \rangle|^2 \\ &\leq 4 |\langle \psi | NM | \psi \rangle|^2.\end{aligned}\tag{2.71}$$

Für den Kommutator gilt natürlich

$$[A, B] = [N, M].\tag{2.72}$$

Die Cauchy-Schwarz-Ungleichung liefert also

$$\begin{aligned}|\langle \psi | NM | \psi \rangle|^2 &= |(\langle \psi | N)(M | \psi \rangle)|^2 \\ &\leq \|N | \psi \rangle\|^2 \|M | \psi \rangle\|^2 \\ &= \langle \psi | N^2 | \psi \rangle \langle \psi | M^2 | \psi \rangle.\end{aligned}\tag{2.73}$$

Unter Substitution zu den ursprünglichen Variablen erhalten wir so die Unschärferelation:

**Heisenbergsche Unschärferelation:** Für zwei beliebige Observable  $A$  und  $B$  gilt

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|}{2}\tag{2.74}$$

für jeden Zustandsvektor  $|\psi\rangle$ , den man präparieren kann.

Zwei Observablen  $A$  und  $B$ , die nicht kommutieren, nennt man auch *inkompatibel*. Die genaue Lesart dieser Unschärferelation ist eine Schranke an zweite Momente von Observablen. Oft wird sie verwechselt mit Einschränkungen an

- gleichzeitige approximative Messungen zweier Observable oder
- die Störung der Messung einer Observable hinsichtlich der Messung einer anderen.

Diese beiden letzten Punkte sind nicht identisch mit der eigentlichen Unschärfe – denn wir haben ja eine Einschränkung an Erwartungswerte und mögliche Präparationen von Zuständen, wir würden also für viele Systeme in  $|\psi\rangle$  die Observable  $A$  messen und in vielen anderen in  $|\psi\rangle$  die Observable  $B$ . Dennoch sind die Phänomene natürlich verwandt. Übrigens hilft es natürlich nicht, gemischte Zustände zu präparieren, um die Unschärferelation zu umgehen, wie sofort aus der Tatsache folgt, dass die Zustände eine konvexe Menge bilden.

22 KAPITEL 2. KURZE AUFRISCHUNG DER GRUNDLAGEN DER QUANTENMECHANIK

## Kapitel 3

# Identische Teilchen und zweite Quantisierung

Wir werden und nun – und in der Tat für eine längere Weile – mit Systemen mit vielen Konstituenten beschäftigen. Offensichtlich ist dies die Situation, die wir in jedem Material und jedem Quantengas vorfinden. Auch lassen sich Atome und Moleküle als Quanten-Vielteilchensysteme beschreiben. Jeder Kurs über Quantenmechanik wird und sollte also eine gründliche Beschreibung solcher Vielteilchensysteme umfassen. Wir machen hier den Anfang und diskutieren die Situation identischer Teilchen in der Quantenmechanik, aufbauend auf dem, was aus dem ersten Kurs bekannt ist.

Wir werden auch das Konzept der “zweiten Quantisierung” kennenlernen. Hier handelt es sich nicht um eine neue oder andere Quantentheorie: Aber eben um einen formalen Rahmen, der die Sprechweise über Quanten-Vielteilchensysteme bei weitem einfacher macht. Die etwas lästige Symmetrisierung oder Antisymmetrisierung ist gewissermaßen schon in die Beschreibung eingebaut. Die Statistik der Teilchen ist dann manifestiert durch die Vertauschungsrelationen der elementaren Operatoren. Die Wechselwirkungsprozesse zwischen Teilchen werden dann als Erzeugung und Vernichtung von Teilchen ausgedrückt.

### 3.1 Identische Teilchen

Wir betrachten ein physikalisches System aus  $N$  identischen Teilchen. “Identisch” meint, dass es keinerlei Observable gibt, die zwischen ihnen unterscheiden könnte. In einer solchen Situation müssen natürlich auch der Hamiltonoperator und jede andere Observable symmetrisch in den Koordinaten sein (also den Orten und gegebenenfalls Spinbeiträgen). Mit anderen Worten, wenn  $A$  eine beliebige Observable ist und  $P$  eine beliebige Permutation aus  $S_N$  – also der Permutationsgruppe von  $N$  Elementen – dann sagen wir, dass die Teilchen *identisch* sind, falls

$$[A, P] = 0 \tag{3.1}$$

für alle  $P \in S_N$ . Hier benutzen wir das gleiche Symbol für die Permutation selbst und die Darstellung im Hilbertraum. Dies ist eine ganz natürliche Forderung oder Definition: Denn wenn wir durch bloßes Vertauschen von Teilchen einen observierbaren Effekt erzielen könnten, wäre eben dadurch ja eine Unterscheidung möglich. Diesen Operator im Hilbertraum wollen wir uns nun etwas genauer ansehen.

Seien  $\xi_j$  the Koordinaten des  $j$ -ten Teilchens, von insgesamt  $N$  Teilchen. Ein Zustandsvektor eines solchen Teilchens sei aus dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Dies sind insbesondere der Ort des Teilchens, also  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ . Oder, im Falle eines Teilchens mit Spin, der Ort und die dritte Komponente des Spins, mit Hilbertraum

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2. \quad (3.2)$$

Eine Wellenfunktion ist also dann einfach eine Funktion mit Funktionswerten

$$\psi(\xi) = \psi(x, \sigma), \quad (3.3)$$

mit  $x \in \mathbb{R}^3$  und  $\sigma = \{0, 1\}$ . Wie sieht der gesamte Hilbertraum von  $N$  Teilchen aus? Nun, wie wir wissen, ist dieser gegeben durch

$$\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H} = \mathcal{H}^{\otimes N}, \quad (3.4)$$

wobei die letztere Notation üblich ist. Wir werden nun betrachten, wie sich die Wellenfunktion verändert, wenn wir Teilchen austauschen.

Wenn  $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N)$  die Wellenfunktion ist des Systems, dann ist dieser Permutations- oder *Austauschoperator* gegeben durch

$$(P\psi)(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi(\xi_{P(1)}, \dots, \xi_{P(N)}). \quad (3.5)$$

Es ist klar, dass diese Vorschrift wirklich eine Darstellung der Permutationsgruppe ist, und für zwei Permutationen  $P_1, P_2$  gilt

$$((P_2P_1)\psi)(\xi_1, \dots, \xi_N) = (P_2(P_1\psi))(\xi_1, \dots, \xi_N). \quad (3.6)$$

Wenn die Funktion  $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N)$  eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ist,

$$(H\psi)(\xi_1, \dots, \xi_N) = E\psi(\xi_1, \dots, \xi_N), \quad (3.7)$$

dann ist auch die Wellenfunktion  $(P\psi)(\xi_1, \dots, \xi_N)$  eine Lösung mit der selben Energie  $E$ , wenn

$$[H, P] = 0. \quad (3.8)$$

Dies folgt unmittelbar aus der Definition. Da es für  $N$  Teilchen  $N!$  verschiedene Permutationen gibt, erhalten wir auf diese Art  $N!$  verschiedene Wellenfunktionen. Nicht alle werden linear unabhängig sein, aber in aller Regel erhalten wir so mehrere linear unabhängige Lösungen der gleichen Energie. Das heisst, die Energiewerte von Hamiltonoperatoren von identischen Teilchen werden hochgradig entartet sein. Diese Entartung wird auch *Austauschentartung* genannt.

Für eine beliebige Observable  $A$  erhalten wir

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle P\psi | A | P\psi \rangle. \quad (3.9)$$



Wenn  $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N; t_0)$  die Wellenfunktion zu einer Zeit  $t_0$  ist und  $U(t, t_0)$  der Zeitentwicklungsoperator ist, der für alle Permutationen  $P$

$$[U(t, t_0), P] = 0 \quad (3.10)$$

erfüllt, weil in offensichtlicher Weise generiert durch den Hamiltonoperator,  $U(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)H}$  mit  $\hbar = 1$ , dann ist auch

$$(PU(t, t_0)\psi)(\xi_1, \dots, \xi_N; t_0) = (U(t, t_0)P\psi)(\xi_1, \dots, \xi_N; t_0). \quad (3.11)$$

Das heisst, die permutierte zeitentwickelte Wellenfunktion ist gleich der zeitentwickelten permutierten Wellenfunktion. Das heisst nichts anderes als dass zwei Wellenfunktionen, die sich nur durch eine Permutation unterscheiden, auch zu späteren Zeiten durch keine auch noch so geschickt gewählte Observable unterscheiden lassen.

Es ist hilfreich, sich die Situation für eine kleine Anzahl von Teilchen zu vergegenwärtigen. Zwei Teilchen sind in dieser Hinsicht noch etwas zu langweilig: Es gibt nur vollständig symmetrische und antisymmetrische Funktionen, oder genauer zerfällt der Hilbertraum in eine direkte Summe dieser Anteile. Also werden wir uns – wenig überraschend – den Fall  $N = 3$  etwas genauer ansehen. Um die Notation zu vereinfachen, schreiben wir für die Koordinaten  $\xi_j$  einfach  $j$  (dennoch sollte klar sein, dass es sich hier nicht um eine Zahl, sondern einen Koordinatenbeitrag handelt). Wir haben die Wellenfunktionen  $\psi(i, j, k)$ , wobei  $i \neq j \neq l$  die Werte 1, 2, 3 annehmen kann. Aus diesen Wellenfunktionen kann man die folgenden Funktionen konstruieren

$$\begin{aligned} \psi_S(1, 2, 3) &= \frac{1}{6^{1/2}}(\psi(1, 2, 3) + \psi(1, 3, 2) + \psi(2, 3, 1) + \psi(2, 1, 3) \\ &+ \psi(3, 1, 2) + \psi(3, 2, 1)), \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \psi_A(1, 2, 3) &= \frac{1}{6^{1/2}}(\psi(1, 2, 3) - \psi(1, 3, 2) + \psi(2, 3, 1) - \psi(2, 1, 3) \\ &+ \psi(3, 1, 2) - \psi(3, 2, 1)), \end{aligned} \quad (3.13)$$

sowie

$$\begin{aligned} \psi_{M_1}(1, 2, 3) &= \frac{1}{23^{1/2}}(2\psi(1, 2, 3) - \psi(1, 3, 2) + 2\psi(2, 1, 3) - \psi(2, 3, 1) \\ &- \psi(3, 1, 2) - \psi(3, 2, 1)), \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\psi_{M_2}(1, 2, 3) = \frac{1}{2}(\psi(1, 3, 2) - \psi(2, 3, 1) + \psi(3, 1, 2) - \psi(3, 2, 1)), \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \psi_{M'_1}(1, 2, 3) &= \frac{1}{23^{1/2}}(2\psi(1, 2, 3) - \psi(1, 3, 2) - 2\psi(2, 1, 3) - \psi(2, 3, 1) \\ &- \psi(3, 1, 2) + \psi(3, 2, 1)), \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\psi_{M'_2}(1, 2, 3) = \frac{1}{2}(\psi(1, 3, 2) + \psi(2, 3, 1) - \psi(3, 1, 2) - \psi(3, 2, 1)). \quad (3.17)$$

Der Aufspann dieser neuen sechs Wellenfunktionen ist identisch mit dem Aufspann der ursprünglichen Funktionen. Wenn  $\psi(1, 2, 3)$  schon vollständig symmetrisch war, dann würde nur  $\psi_S(1, 2, 3)$  verschieden von Null sein. Die Vorfaktoren sind lediglich als Normierungskonstanten gewählt. Es ist nicht schwierig zu verifizieren, dass

$$(P\psi_S)(1, 2, 3) = \psi_S(1, 2, 3) \quad (3.18)$$

und

$$(P\psi_A)(1, 2, 3) = \pm\psi_A(1, 2, 3), \quad (3.19)$$

je nachdem die Permutation  $P$  gerade oder ungerade ist. Also sind – wie der Index schon verrät – die Funktionen  $\psi_S$  und  $\psi_A$  jeweils vollständig symmetrisch und antisymmetrisch. Es sind auch die beiden zweidimensionalen Räume, die durch Eqs. (3.14,3.15) und Eqs. (3.16,3.17) aufgespannt werden, invariant unter jeder Permutation  $P \in S_3$ .

Dies heisst, dass der Hilbertraum der drei Teilchen in eine direkte Summe zerfällt von vier Unterräumen,

$$\mathcal{H}_3 = \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_A \oplus \mathcal{H}_M \oplus \mathcal{H}_{M'}. \quad (3.20)$$

Dies entspricht einer Klassifizierung von Wellenfunktionen gemäß vollständiger Symmetrie in  $\mathcal{H}_S$ , Antisymmetrie in  $\mathcal{H}_A$  und gemischter Symmetrie in  $\mathcal{H}_M \oplus \mathcal{H}_{M'}$ . Zudem sind die beiden Repräsentationen äquivalent, die  $\mathcal{H}_M$  und  $\mathcal{H}_{M'}$  entsprechen. In dieser Sprache sehen wir auch, warum der Fall  $N = 2$  “langweilig” ist: Hier ist einfach

$$\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_A. \quad (3.21)$$

Im allgemeinen Fall von  $N$  Teilchen ist klar aus elementaren gruppentheoretischen Überlegungen, dass der Hilbertraum in Unterräume

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_A \oplus \mathcal{H}_{S_1} \oplus \mathcal{H}_{S_2} \oplus \dots \quad (3.22)$$

zerfällt, die jeweils invariant sind unter jeder Permutation  $P \in S_N$ .

Nun können aber im allgemeinen lediglich die vollständig symmetrischen oder antisymmetrischen Wellenfunktionen realisiert werden. Ein Argument geht wie folgt: Sei  $\{A_1, \dots, A_k\}$  ein vollständiger Satz von kompatiblen Observablen und  $\{a_1, \dots, a_k\}$  die jeweiligen Eigenwerte von  $A_1, \dots, A_k$ , dann ist der Zustandsvektor  $|a_1, \dots, a_k\rangle$  bis auf eine Phase eindeutig. Aber wenn  $|a_1, \dots, a_k\rangle \in \mathcal{H}_{S_i}$ , dann kann man eine Permutation  $P$  finden, so dass

$$P|a_1, \dots, a_k\rangle \neq e^{i\alpha}|a_1, \dots, a_k\rangle \quad (3.23)$$

für alle  $\alpha \in \mathbb{R}$ , und trotzdem ist  $P|a_1, \dots, a_k\rangle$  ein Eigenzustand von  $A_1, \dots, A_k$ , mit Eigenwerten  $a_1, \dots, a_k$ , was zu einem Widerspruch führt (denn die entsprechenden Unterräume sind nicht eindimensional). Dies führt zu einem Prinzip, das so wichtig ist, dass es sehr wohl einen Kasten wert ist:

**Symmetrieprinzip:** Ein Zustandsvektor eines reinen Quantenzustands eines Systems von identischen Teilchen ist entweder vollständig symmetrisch oder antisymmetrisch unter dem Austausch beliebiger zweier Teilchen.

Es gilt auch aus Überlegungen relativistischer Quantenfeldtheorie – auf die wir nicht weiter eingehen werden – das folgende Spin-Statistik-Theorem:

**Spin-Statistik-Theorem:** Die reinen Zustände eines Systems identischer Teilchen ist vollständig symmetrisch, wenn ihr Spin ganzzahlig ist (Bosonen) und vollständig antisymmetrisch, sofern ihr Spin halbzahlig ist (Fermionen).

Der Name rührt etymologisch von der Bosonenstatistik und Fermionenstatistik her, auf die wir gleich eingehen werden.

Es gibt besondere Situationen von Systemen mit nichttrivialer Topologie, die auch andere, *fraktionierte Statistiken* erlauben. Eine solche Situation tritt etwa auf, wenn geladene Quasiteilchen mit Ladung  $q$  sich in strikt zwei Dimensionen bewegen können, in einem Feld mit magnetischem Fluss  $\Phi$ . In diesem Fall führt der Austausch zweier solcher Teilchen zu einem Phasenfaktor  $e^{i\phi}$ , wobei  $\phi = q\Phi/(\hbar c)$ . Lediglich für  $\phi = 0$  und  $\phi = \pi$  wird man auf die übliche Statistik geführt.

Natürliche Beispiele für Fermionen sind die üblichen Verdächtigen: Elektronen, Nukleonen,  ${}^3\text{He}$ , alles Teilchen mit Spin  $1/2$ . Bekannte Beispiele für Bosonen sind Photonen aus der Strahlungstheorie, Phononen als quantisierte Anregungen von Gitterschwingungen, und  ${}^4\text{He}$ , alles Teilchen mit Spin 0 oder 1. Wie wir auch wissen, ist das fermionische *Ausschlußprinzip* auf die Antisymmetrie von Wellenfunktionen zurückzuführen.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>An dieser Stelle haben wir allen Grund, etwas verwirrt zu sein: Das Universum besteht aus unzähligen Teilchen, insbesondere einer großen Anzahl von Elektronen. Wenn es nötig wäre, im Lichte der vorigen Überlegungen alle einzubeziehen und stets eine vollständig antisymmetrische Wellenfunktion zu betrachten, könnten wir keine Physik mehr machen: Die Physik betrachtet Systeme, und wenn wir stets nur über das Universum als ganzes reden könnten, wäre es unmöglich, sinnhaft Experimente im Kleinen zu beschreiben. Glücklicherweise ist dieses Dilemma überwindbar, und man kann zu einer herausragend guten Näherung eine solche radikale Beschreibung des Ganzen vermeiden. Nehmen wir an, wir betrachten lediglich zwei Elektronen die hinreichend weit entfernt voneinander sind, dass wir den Überlapp deren Ortsanteil und deren gegenseitige Wechselwirkung vernachlässigen können. Wenn  $\psi_1$  und  $\psi_2$  deren beide normierten Wellenfunktionen sind, dann sind die approximativ normierten und antisymmetrischen Wellenfunktionen gegeben durch

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)). \quad (3.24)$$

Wir können nun etwa nach der Teilchenzahldichte fragen in einem Punkt  $\xi = (x, \sigma)$ , also in einem Ort, zu einer bestimmten Spinkomponente. Diese Dichte ist gegeben durch

$$\rho(\xi) = \int d\xi_2 |\psi(\xi, \xi_2)|^2 + \int d\xi_1 |\psi(\xi_1, \xi)|^2, \quad (3.25)$$

wobei das Integral als übliches Integral im Ortsraum und als Summe über die Spinfreiheitsgrade zu lesen ist. Dies ergibt also

$$\rho(\xi) = |\psi_1(\xi)|^2 + |\psi_2(\xi)|^2 - 2\text{re} \left( \psi_1^*(\xi)\psi_2(\xi) \int d\xi_1 \psi_2^*(\xi_1)\psi_1(\xi_1) \right). \quad (3.26)$$

Da  $\psi_1$  und  $\psi_2$  stark lokalisiert sind in im wesentlichen disjunkten Regionen  $R_1$  und  $R_2$  ist der letzte Term vernachlässigbar, und wenn  $\xi \in R_1$  ist, gilt im wesentlichen

$$\rho(\xi) \approx |\psi_1(\xi)|^2. \quad (3.27)$$

Dieses Ergebnis hätten wir auch erhalten, hätten wir von vorneherein das andere Elektron ignoriert. Natürlich gilt ein analoges Argument auch für viele und nicht nur für zwei Teilchen: Die Symmetrisierung und Antisymmetrisierung muss also nur für die Teilchen angewendet werden, die für ein physikalisches Problem auch von Belang sind. Wir müssen nicht all jene Teilchen einbeziehen, die einer nichtwechselwirkenden

### 3.2 Nichtwechselwirkende identische Teilchen

Wir betrachten nun wieder ein System aus  $N$  identischen Teilchen, wollen uns aber nun nicht der Struktur des Zustandsraums zuwenden, sondern dem Hamiltonoperator. Dieser Hamiltonoperator hat – sofern die Teilchen nicht miteinander wechselwirken – die einfache Form

$$H_0 = \sum_{j=1}^N h_j = \sum_{j=1}^N \left( \frac{1}{2M} p_j^2 + V_j \right). \quad (3.28)$$

Hier sind alle  $h_j$  gleich, wirken aber eben jeweils auf das  $j$ -te Teilchen. Zur Vereinfachung der Notation nehmen wir an, dass das Spektrum von allen  $h_j$  diskret ist, um den mathematischen Überbau zu vermeiden, der bei kontinuierlichen Spektralwerten nötig ist. Seien  $\psi_1, \psi_2, \dots$  die normierten Einteilchenwellenfunktionen (also “Orbitale”) von  $h_j$  mit Eigenwerten  $E_1, E_2, \dots$ , also gelte

$$h_j \psi_j(\xi_j) = E_j \psi_j(\xi_j). \quad (3.29)$$

Die Wellenfunktion

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi_1(\xi_1) \dots \psi_N(\xi_N) \quad (3.30)$$

ist dann eine Eigenfunktion von  $H_0$  mit Eigenwert

$$E = E_1 + \dots + E_N. \quad (3.31)$$

Im Lichte der obigen Betrachtungen können Wellenfunktionen nur vollständig symmetrisch oder antisymmetrisch sein, je nachdem, ob es sich um Bosonen oder Fermionen handelt.

**Wellenfunktionen von Fermionen:** Die Wellenfunktionen von fermionischen Systemen sind Linearkombinationen von Funktionen von der Form

$$\psi_A(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \sum_{P \in S_N} (-1)^{\pi(P)} \psi_1(\xi_{P(1)}) \dots \psi_N(\xi_{P(N)}). \quad (3.32)$$

Dieser Ausdruck kann auch als Determinante geschrieben werden, als *Slater-Determinante* einer  $N \times N$ -matrix,

$$\psi_A(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \dots & \psi_1(\xi_N) \\ \psi_2(\xi_1) & \dots & \psi_2(\xi_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(\xi_1) & \dots & \psi_N(\xi_N) \end{vmatrix}. \quad (3.33)$$

Umgebung angehören. Im klassischen Limes sind Teilchen auch stark lokalisiert im Raum und jeglicher Einfluß, der aus Symmetrie herrührt, wird vernachlässigbar in diesem Limes. Insofern können wir uns beruhigt zurücklehnen und dem weiteren Argument folgen.

Der Austausch von zwei Koordinaten ist äquivalent zu dem Austausch zweier Spalten, was zu einem Vorzeichenwechsel in der Determinante führt, was die geforderte Antisymmetrie nach sich zieht. Der Austausch zweier Orbitale entspricht dem Austausch zweier Spalten, der wiederum zu einem Vorzeichenwechsel führt. Ebenso hätten wir im obigen Ausdruck also auch die Orbitale anstatt der Koordinaten permutieren können. Für Bosonen erhalten wir einen ganz ähnlichen Ausdruck. In der Summe (3.34) sind nun aber nicht alle Terme notwendigerweise verschieden; genauer jeder taucht  $N_1!N_2!\dots$  Male auf.

**Wellenfunktionen von Bosonen:** Die Wellenfunktionen von bosonischen Systemen sind Linearkombinationen von Funktionen von der Form

$$\psi_S(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{(N!N_1!N_2\dots)^{1/2}} \sum_{P \in S_N} \psi_1(\xi_{P(1)}) \dots \psi_N(\xi_{P(N)}), \quad (3.34)$$

wobei  $N_1, N_2, \dots$  the Anzahl der Teilchen ist in den Orbitalen  $1, 2, \dots$ , mit  $N_1 + N_2 + \dots = N$ .

Nun sollte klar sein, dass sowohl für Fermionen und Bosonen es lediglich nötig ist, für diese Basiszustände die *Besetzungszahlen*  $(N_1, N_2, \dots)$  anzugeben, wobei

$$N_1 + N_2 + \dots = N. \quad (3.35)$$

Für Fermionen sind diese Besetzungszahlen 0 oder 1, während für Bosonen diese Besetzungszahlen jede nichtnegative ganze Zahl annehmen können. Die Gesamtenergie eines solchen Basiszustands ist also gerade gegeben durch

$$E = N_1 E_1 + N_2 E_2 + \dots \quad (3.36)$$

### 3.3 Einschub: Das freie Bosonen- und Fermionengas

Ein System von  $N$  identischen Teilchen, bei denen gegenseitige Wechselwirkungen keine Rolle spielen, wird ideales Gas genannt. Wir wollen hier kurz auf diese Situation eingehen – annehmend, dass in der Vorlesung über statistische Physik dieser Gegenstand noch genauer untersucht wird. Für Fermionen wissen wir, dass alle Besetzungszahlen  $N_j$  nur die Werte 0 und 1 annehmen können. Wir nehmen hier an, dass die Begriffe des kanonischen und großkanonischen Ensembles in groben Zügen klar sind: Es handelt sich hier einfach um Gleichgewichtszustände unter bestimmten Randbedingungen.

Im thermodynamischen Gleichgewichtszustand lautet die mittlere Besetzungszahl des Orbitals  $j$  dann für Fermionen

$$\bar{N}_j = \frac{1}{\exp(-(\mu - E_j)/(k_B T)) + 1}, \quad (3.37)$$

was gerade die Verteilungsfunktion der *Fermi-Dirac-Statistik* ist. Hier ist  $k_B$  die *Boltzmann-Konstante*. Das chemische Potential  $\mu$ , eine reelle Zahl, ist bestimmt als Funktion von der Temperatur  $T$  und der Gesamtteilchenzahl  $N$  durch die Gleichung

$$N = \sum_j (\exp(-(\mu - E_j)/(k_B T)) + 1)^{-1}. \quad (3.38)$$

Formal spielt  $\mu$  hier die Rolle eines Lagrange-Multiplikators.

Für Bosonen erhalten wir einen ganz ähnlichen Ausdruck, nur dass die Besetzungszahlen natürlich nicht nur die Werte 0 und 1 annehmen können. Man findet, dass man lediglich einen Gleichgewichtszustand erhält, wenn  $\exp((\mu - E_j)/(k_B T)) < 1$  ist für alle Energien  $E_j$ . Daher kann das zugehörige chemische Potential nicht positiv sein. Man findet für die Besetzungszahlen im thermischen Gleichgewicht

$$\bar{N}_j = \frac{1}{\exp((E_j - \mu)/(k_B T)) - 1}. \quad (3.39)$$

Dies ist die Verteilungsfunktion für das ideale bosonische Quantengas, das der *Bose-Einstein-Statistik* gehorcht. Das chemische Potential ist wiederum bestimmt durch

$$N = \sum_j (\exp((E_j - \mu)/(k_B T)) - 1)^{-1}. \quad (3.40)$$

Hieraus lassen sich in einfacher Weise auch statistische Eigenschaften wie das Plancksche Strahlungsgesetz herleiten; wir werden später kurz darauf zurückkommen, ohne allzusehr Themen der statistischen Physik vorwegzunehmen.

## 3.4 Zweite Quantisierung

Wir haben gerade gesehen, dass ein System von  $N$  identischen Teilchen durch die Besetzungszahlen  $(N_1, N_2, \dots)$  vollständig beschrieben ist. Jede dieser Konfigurationen entspricht einem Basiszustand. Die Besetzungszahlen wiederum entsprechen genau einem Einteilchenzustand  $|1\rangle, |2\rangle, \dots$ . Wir können daher die Basiszustände in der folgenden einfachen Weise schreiben:

$$|N_1, N_2, \dots\rangle. \quad (3.41)$$

Hier wird also einfach angegeben, wie oft jedes Orbital oder wie oft jede Mode besetzt ist. In diesem Kontext ist es hilfreich, Systeme mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zu schreiben. Weil dieses Konzept – in Grundlagen schon aus der elementaren Quantenmechanik vertraut – so wichtig und zentral ist, werden wir ihm einiges an Aufmerksamkeit schenken.

### 3.4.1 Zweite Quantisierung für Bosonen

Etwas pedantisch führen wird erst den *Fockraum* ein: Dies ist die direkte Summe von Hilberträumen, die jeweils einer festen Teilchenzahl entsprechen, also

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_{(N)}, \quad (3.42)$$

wobei  $\mathcal{H}_{(N)}$ ,  $N \geq 1$ , der Hilbertraum von physikalisch realisierbaren reinen Zuständen  $N$  identischer bosonischer Teilchen ist.  $\mathcal{H}_{(0)} = \mathbb{C}$  ist der eindimensionale Unterraum der durch einen Einheitsvektor  $|\phi\rangle$  aufgespannt wird, dem *Vakuumzustand*. Achtung: In der Literatur ist es üblich, sowohl diesen Raum als Fockraum zu bezeichnen, als auch den Raum, der durch die Vektoren aufgespannt wird, der durch Besetzungszahlen bestimmt ist. Wir wollen uns hiermit nicht länger aufhalten und verwenden nun einfach immer wie oben einfach Vektoren von Besetzungszahlen, wissend, dass diese Vektoren eigentlich aus der direkten Summe von Hilberträumen zu festen Gesamtteilchenzahlen entstammen. Dieser Definition widmen wir wegen ihrer Wichtigkeit einen eigenen Kasten:

**Besetzungsbasis für Bosonen:** Die Vektoren

$$\mathcal{B} = \{|N_1, N_2, \dots\rangle : N_j \in \mathbb{N}_0, j = 1, 2, \dots\} \quad (3.43)$$

bilden eine Basis des Hilbertraums  $\mathcal{H}$  von ununterscheidbaren Bosonen.

Diese Basis ist orthonormal und vollständig, also

$$\langle N'_1, N'_2, \dots | N_1, N_2, \dots \rangle = \delta_{N'_1, N_1} \delta_{N'_2, N_2} \dots, \quad (3.44)$$

$$\sum_{N_1, N_2, \dots} |N_1, N_2, \dots\rangle \langle N_1, N_2, \dots| = \mathbb{1}. \quad (3.45)$$

Nun definieren wir den Vernichtungsoperator, der für einen harmonischen Oszillator bereits aus der elementaren Quantenmechanik bekannt ist.

**Vernichtungsoperatoren für Bosonen:** Ein *Vernichtungsoperator* für Mode  $j$  ist ein Operator in  $\mathcal{H}$ , für den

$$b_j |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle = \sqrt{N_j} |N_1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle \quad (3.46)$$

gilt.

Der – eher unschöne Name eines Vernichtungsoperators ist naheliegend, er lässt ein Teilchen im Zustand mit Index  $j$  verschwinden. Wir wissen sofort, dass

$$b_j |0, 0, \dots\rangle = b_j |\phi\rangle = 0 \quad (3.47)$$

gilt. Nota bene ist  $|\phi\rangle$  nicht der Nullvektor des Vektorraums. Ebenso erhalten wir einfach durch Konjugation den folgenden Ausdruck, der nur deswegen einen eigenen Kasten bekommt, weil wir diesen Zusammenhang noch so häufig verwenden werden.

**Erzeugungsoperator für Bosonen:** Ein *Erzeugungsoperator* für Mode  $j$  ist ein Operator in  $\mathcal{H}$ , für den

$$b_j^\dagger |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle = \sqrt{N_j + 1} |N_1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle \quad (3.48)$$

gilt.

In einer Inflation von Kästen betrachten wir gesondert noch einmal den folgenden wichtigen Operator, der die Teilchenanzahl in einem bestimmten Orbital oder in einer Mode angibt:

**Anzahloperator für Bosonen:** Der Operator  $n_j = b_j^\dagger b_j$  mit Wirkung

$$n_j^\dagger |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle = N_j |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle \quad (3.49)$$

heißt *Anzahloperator*.

Manchmal werden an dieser Stelle die jeweiligen Operatoren mit Hüten  $\hat{\phantom{x}}$  versehen, von denen wir hier jedoch absehen wollen, um die Notation nicht unnötig aufwändig zu machen. Es sollte hier jedoch klar sein, dass  $n_j$  ein Operator in  $\mathcal{H}$  ist und  $N_j$  einfach eine natürliche Zahl oder Null. Die *Gesamtzahl* der Teilchen korrespondiert mit dem Operator

$$\sum_{j=1}^N n_j. \quad (3.50)$$

Selbstverständlich besteht das Spektrum dieses Operators aus den nichtnegativen ganzen Zahlen. Es folgt direkt aus obiger Definition, dass die bosonischen Operatoren bestimmte Kommutationsrelationen erfüllen:

**Kommutationsrelationen:** Für die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gelten die folgenden Kommutationsrelationen:

$$[b_j, b_k^\dagger] = \delta_{j,k}, \quad (3.51)$$

$$[b_j, b_k] = [b_j^\dagger, b_k^\dagger] = 0. \quad (3.52)$$

Wie gewohnt ist für Paare von Operatoren der Kommutator definiert als  $[A, B] = AB - BA$ . Es ist nicht unüblich, auch die Orts- und Impulsoperatoren

$$x_j = (b_j + b_j)/\sqrt{2}, \quad p_j = i(b_j - b_j)/\sqrt{2} \quad (3.53)$$



zu definieren. Wir finden auch sofort

$$|N_1, N_2, \dots\rangle = (N_1! N_2! \dots)^{-1/2} (b_1^\dagger)^{N_1} (b_2^\dagger)^{N_2} \dots |\emptyset\rangle. \quad (3.54)$$

Die Reihenfolge von Definition und Folge sind in den Lehrbüchern uneinheitlich. Es sollte klar sein, dass die bosonischen Kommutationsrelationen – also die Regeln, die die bosonische Algebra bestimmen – bereits im wesentlichen die obigen Regeln und das Spektrum des Anzahloperators definiert und bis auf eine irrelevante Phase die Besetzungszahleigenzustände definiert. Wir hätten also ebenso die bosonischen Kommutationsrelationen fordern können und wären so auf die Besetzungszahlbasis geführt worden.<sup>2</sup>

### 3.4.2 Zweite Quantisierung für Fermionen

Zunächst definieren wir wie oben für Bosonen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Die sind für Fermionen wie folgt definiert:

<sup>2</sup>Wir gehen erst ein wenig mathematisch unbekümmert vor, aber in einer Weise, die plausibel ist und die auch von einem ganz rigorosen Argument untermauert werden kann: Wir werden das Argument für ein Orbital oder eine Mode vorführen, für die dann ein weiterer Index nicht nötig ist. Wir betrachten einen Operator, für den  $[b, b^\dagger] = 1$  gilt.  $b^\dagger b$  ist nun ein hermitescher und positiver Operator, also sein Spektrum besteht aus nichtnegativen reellen Zahlen. Nun betrachte

$$[b^\dagger b, b] = -b. \quad (3.55)$$

Es ist nun aus Eq. (3.55) klar, dass  $b$  angewandt auf einen Eigenvektor von  $b^\dagger b$  mit Eigenwert  $N$  einen Eigenzustand liefert, mit Eigenwert um 1 reduziert:

$$\begin{aligned} b^\dagger b(b|N\rangle) &= b(b^\dagger b|N\rangle) + [b^\dagger b, b]|N\rangle \\ &= (N-1)(b|N\rangle). \end{aligned} \quad (3.56)$$

Wiederholte Anwendung dieser Regel muss einen Nulleigenwert liefern, denn sonst hätten wir einen Widerspruch zur Tatsache, dass  $b^\dagger b$  ein positiver Operator ist. Also ist 0 ein Eigenwert des Anzahloperators. In der gleichen Weise sehen wir, wegen der adjungierten Regel

$$[b^\dagger b, b^\dagger] = b^\dagger, \quad (3.57)$$

dass  $b^\dagger$  ein Erzeugungsoperator ist, der den Eigenwert des Anzahloperators um 1 erhöht. Somit sehen wir, dass das Spektrum von  $b^\dagger b$  genau die nichtnegativen ganzen Zahlen sind mit Eigenvektoren  $\{|N\rangle\}$ . Ebenso finden wir

$$b|N\rangle = N^{1/2}|N-1\rangle, \quad (3.58)$$

$$b^\dagger|N\rangle = (N+1)^{1/2}|N+1\rangle, \quad (3.59)$$

bis auf einen globalen Phasenfaktor bei der Wahl der Basiszustände, der ohne Beschränkung der Allgemeinheit gleich 1 gewählt werden kann, da etwa

$$\langle N|b^\dagger b|N\rangle = N. \quad (3.60)$$

Das gleiche Argument ist auch in einem Vielmodensystem anwendbar, indem man verwendet, dass Operatoren verschiedener Moden kommutieren.

Etwas präziser gesagt ist die zentrale Frage die, ob jede irreduzible Darstellung der Regeln (3.51) und (3.52) unitär äquivalent ist zur Fockdarstellung. Um diese Frage rigoros zu beantworten, sind einige Technikalitäten nötig, da die Operatoren  $b_j$  und  $b_j^\dagger$  unbeschränkt sind. Daher werden in der mathematischen Physik die Kommutationsrelationen nicht für  $b_j$  und  $b_j^\dagger$  selbst definiert, sondern für deren exponentierte Form, die sogenannten *Weyloperatoren* oder *Verschiebeoperatoren*. Auch in diesem rigorosen Rahmen findet man aber unter der zusätzlichen Forderung der Existenz des Vakuums eine bis auf eine Phase eindeutige Fockdarstellung.

**Vernichtung- und Erzeugungsoperatoren für Fermionen:** Ein *Vernichtungsoperator* für Mode  $j$  ist ein Operator, für den

$$f_j |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} N_k} N_j |N_1, \dots, 1 - N_j, \dots\rangle \quad (3.61)$$

gilt, wobei hier alle  $N_j \in \{0, 1\}$ . Somit gilt für den *Erzeugungsoperator*

$$f_j^\dagger |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} N_k} (1 - N_j) |N_1, \dots, 1 - N_j, \dots\rangle. \quad (3.62)$$

Wie vorher ist auch das Vakuum  $|\emptyset\rangle$  auch durch alle  $f_j$  auf Null abgebildet, und wieder ist der – nun fermionische – *Anzahloperator*

$$n_j = f_j^\dagger f_j, \quad (3.63)$$

der hier mit dem gleichen Symbol bezeichnet wird wie der entsprechende bosonische Operator. Dies sind die ganz vertrauten Regeln, die aus den Antikommutationsrelationen für Fermionen herrühren. Diese Antikommutationsrelationen lesen sich wie folgt. Antikommutatoren sind für Paare von Operatoren gegeben durch  $\{A, B\} = AB + BA$ .

**Antikommutationsrelationen:** Für die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gelten die folgenden Kommutationsrelationen:

$$\{f_j, f_k^\dagger\} = \delta_{j,k}, \quad (3.64)$$

$$\{f_j, f_k\} = \{f_j^\dagger, f_k^\dagger\} = 0. \quad (3.65)$$

Vertraut, Moment?! In Gleichung (3.61) ist die unschuldig aussehende Phase

$$(-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} N_k} \quad (3.66)$$

enthalten, die die Teilchenzahlen  $N_k$  für alle Moden “links” von Orbital  $j$  abhängt. Dieser Ausdruck mag auf zweierlei Art verwirren und überraschen:

- Erstens hängt dieser Ausdruck von der *Ordnung* ab. Diese Wahl der Ordnung ist aber uns überlassen: Die Vorhersagen unserer physikalische Beschreibung darf nicht davon abhängen, in welcher Weise wir die Moden ordnen.
- Die andere etwas rätselhafte Eigenschaft ist, dass man diese Phase ja eventuell auch beobachten könnte. Man könnte sich das Gedankenexperiment vorstellen,

in dem man zwei Fermionen sehr weit entfernt voneinander plaziert, über Kontinente hinweg, in einem passenden Zustand präpariert. Könnte man durch geschickte lokale Messungen deterministisch eine meßbare Phase auf der anderen Seite induzieren, könnten wir schneller als Licht, *superluminal*, kommunizieren, in klarem Widerspruch zur Relativitätstheorie. In der Tat kann man als interessante Übungsaufgabe naiv solche Observablen definieren.

Die Auflösung dieses scheinbaren Dilemmas liest man in erstaunlich wenigen Lehrbüchern zum Thema, obwohl es häufige Ursache von Verwirrung ist. Die Auflösung ist, dass nicht alle Observablen für Fermionische Operatoren erlaubt sind, sondern nur die, die auch die *Superauswahlregel* der *Parität der Fermionenanzahl* erhält, mit

$$P = i^N \prod_{j=1}^{2N} c_j \quad (3.67)$$

kommutiert, wobei die  $2N$  *Majorana-Fermionen* – den “Orts- und Impulskoordinaten von Fermionen” entsprechend – definiert sind als

$$c_{2j-1} = f_j^\dagger + f_j, \quad c_{2j} = (-i)(f_j^\dagger - f_j) \quad (3.68)$$

für  $j = 1, \dots, N$ . In anderen Worten: Der Hilbertraum zerfällt in eine weitere direkte Summe, aus solchen Termen, die eine gerade Anzahl von Fermionen enthalten und solchen, die einer ungeraden Anzahl entsprechen. Keine lokale physikalische Operation kann diese Terme mischen, und respektiert notwendigerweise die direkte Summe von Paritätssektoren. Wenn es diese Superauswahlregel nicht gäbe, könnten wir in der Tat die oben genannten Paradoxa generieren.<sup>3</sup>

Offensichtlich gilt für beliebige fermionische Operatoren  $(f_j^\dagger)^2 = 0$ , was eine Manifestation der Tatsache ist, dass keine zwei Fermionen im gleichen Zustand sein können. Wie zuvor auch finden wir auch

$$|N_1, \dots, N_j, \dots\rangle = (f_1^\dagger)^{N_1} \dots (f_j^\dagger)^{N_j} \dots |\emptyset\rangle \quad (3.69)$$

All die obigen Ausdrücke gelten in einer leicht veränderten Form nach wie vor: Wir können uns also eine Menge Schreibearbeit sparen, wenn wir Kommutationsrelationen nur durch Antikommutationsrelationen ersetzen.<sup>4</sup>

### 3.4.3 Bosonische Feldoperatoren

Wir kehren nun wieder für einen Moment zu bosonischen Systemen zurück. Die lokale Basis, die für die Einteilchenzustände gewählt wird, ist im Prinzip frei wählbar. Wenn

<sup>3</sup>Übrigens gibt es kein bosonisches Äquivalent einer Superauswahlregel wie die Parität der Fermionenanzahl, und in der Tat kann man Lichtmoden in Zuständen von einem (ungerade) und keinem (gerade) Photon präparieren. Lediglich die Masse führt noch zu einer *Massenauswahlregel*, also lassen sich Bosonen mit Masse nicht in Superpositionen verschiedener Masse präparieren.

<sup>4</sup>Übrigens ist die Fockdarstellung wieder eindeutig und durch die Antikommutationsregeln definiert, sofern wir nur die Existenz eines Vakuums fordern. Der einzige Aspekt in den letztere Forderung eingeht, ist, dass wir  $f_j$  und  $f_j^\dagger$  hätten austauschen können, dann aber  $|1, 1, \dots\rangle$  nicht mehr im Fockraum ist und keinem normierbaren Vektor entspricht. Auf weitere Feinheiten wollen wir nicht eingehen, sondern bemerken, dass wiederum die Fockdarstellung im wesentlichen eindeutig ist.

wir eine andere Basis wählen, können die neuen Erzeuger und Vernichter auch in den alten ausgedrückt werden, als lineare Transformationen

$$b_{g_j} = \sum_{k=1}^{\infty} \langle g_j | \psi_k \rangle b_k, \quad (3.70)$$

$$b_{g_j}^\dagger = \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k | g_j \rangle b_k^\dagger, \quad (3.71)$$

die bestimmt sind durch die Skalarprodukte zwischen den Einteilchenzuständen. Bestimmte mathematische Feinheiten unter den Tisch kehrend, kann man so auch im Ortsraum die folgenden Kommutationsrelationen definieren

$$[\Psi(\xi), \Psi^\dagger(\xi')] = \delta(\xi - \xi'), \quad (3.72)$$

wobei  $\xi$  nun für Bosonen den Ortskoordinaten entsprechen. Diesen sogenannten *Feldoperatoren* widmen wir auch einen eigenen Kasten. Es sollte klar sein, dass man auch Einteilchenphysik, z.B. des harmonischen Oszillators, in solchen Feldoperatoren formulieren kann.

**Feldoperatoren:** Die *bosonischen Feldoperatoren* sind definiert durch und erfüllen

$$\Psi(\xi) = \sum_j \psi_j(\xi) b_j, \quad \Psi^\dagger(\xi) = \sum_j \Psi_j^*(\xi) b_j^\dagger, \quad (3.73)$$

$$b_j = \int d\xi \psi_j^*(\xi) \Psi(\xi), \quad b_j^\dagger = \int d\xi \psi_j(\xi) \Psi^\dagger(\xi), \quad (3.74)$$

$$[\Psi(\xi), \Psi(\xi')] = [\Psi^\dagger(\xi), \Psi^\dagger(\xi')] = 0, \quad (3.75)$$

$$[\Psi(\xi), \Psi^\dagger(\xi')] = \delta(\xi - \xi'). \quad (3.76)$$

Ein allgemeiner symmetrisierter Zustandsvektor  $|\psi_N\rangle$  von  $N$  Teilchen kann also geschrieben werden als

$$|\psi_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d\xi_1 \dots d\xi_N \psi_S(\xi_1, \dots, \xi_N) \Psi^\dagger(\xi_N) \dots \Psi^\dagger(\xi_1) |\emptyset\rangle. \quad (3.77)$$

wobei die Normierung des Zustandsvektors folgt aus der Normierung des symmetrisierten Wellenfunktion. Wir beginnen also beim Vakuum, das wir sukzessive auffüllen, erst mit einem Teilchen bei  $\xi_1$  mit Hilfe von  $\Psi^\dagger(\xi_1)$ , dann mit einem Teilchen bei  $\xi_2$

mit Hilfe von  $\Psi^\dagger(\xi_2)$  und so weiter. Die Wellenfunktion  $\psi_S$  gibt dann gerade die Amplitude des jeweiligen Terms an. Da die Wellenfunktion symmetrisiert ist, gilt natürlich

$$\psi_S(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi_S(\xi_N, \dots, \xi_1) \quad (3.78)$$

und ein analoger Ausdruck für jede andere Permutation der Koordinaten, da diese Ausdrücke unter Symmetrisierung identische Ausdrücke liefern.

Nun kommen wir zu einem interessanten Ausdruck: Es gilt

$$(\Psi(\xi)\psi_N)(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}) = \sqrt{N}\psi_S(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}, \xi). \quad (3.79)$$

Wie ist dieser Ausdruck zu verstehen? Nun,  $\Psi(\xi)|\psi_N\rangle$  ist ein Zustandsvektor eines Systems mit  $N - 1$  Teilchen: Seine Ortsdarstellung hat daher  $N - 1$  Koordinaten,  $\xi_1, \dots, \xi_{N-1}$ . Da  $\Psi(\xi)$  aber das Argument  $\xi$  hat, hängt die linke Seite von  $\xi_1, \dots, \xi_{N-1}$  ab, und  $\xi$ . Wie dieser Ausdruck zu berechnen ist, zeigt also die rechte Seite.

### 3.4.4 Fermionische Feldoperatoren

Es lohnt allerdings, kurz die Kommutationsrelationen fermionischer Feldoperatoren explizit anzugeben, wenn die Koordinaten  $\xi = (x, \sigma)$  sind, als Orts- und dritte Spin-Komponente.

**Fermionische Feldoperatoren:** Die *fermionischen Feldoperatoren* erfüllen die Kommutationsrelationen

$$[\Psi(x, \sigma), \Psi^\dagger(x', \sigma')] = \delta(x - x')\delta_{\sigma, \sigma'}. \quad (3.80)$$

Ausgerüstet mit diesen Grundlagen werden wir uns nun ersten Anwendungen widmen: Dieses mal werden wir uns erst Fermionen ansehen, dann bosonische Systeme.

### 3.4.5 Hamiltonoperatoren in zweiter Quantisierung

Mit dieser Vorbereitung können wir nun zur Beschreibung von wechselwirkenden bosonischen Systemen kommen, die aus  $N$  identischen Bosonen bestehen. Der Hamiltonoperator kann dann geschrieben werden als

$$H^{(N)} = H_0^{(N)} + H_1^{(N)}, \quad (3.81)$$

$$H_0^{(N)} = \sum_{j=1}^N F_j, \quad (3.82)$$

$$H_1^{(N)} = \sum_{k>j=1}^N V_{j,k}. \quad (3.83)$$

Hier ist  $F$  eine Einteilchenobservable, und  $V$  eine Zweiteilchenobservable.  $F_j$  wirkt nur auf den Raum des Teilchens  $j$  wobei  $V_{j,k}$  die Teilchen  $j$  und  $k$  miteinander verbindet. Wir werden nun sehen, dass dieser Hamiltonian die Einschränkung auf den vollständig antisymmetrischen Unterraum ist des  $N$ -Teilchen-Hilbertraums ist des Hamiltonians

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1 \\ &= \sum_{j,k} \langle i|F|j \rangle b_j^\dagger b_k \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} (\langle j,i|V|k,l \rangle + \langle i,j|V|k,l \rangle) b_j^\dagger b_i^\dagger b_l b_k, \end{aligned} \quad (3.84)$$

wobei

$$|k,l \rangle = b_k^\dagger b_l^\dagger |\emptyset \rangle, \quad \langle i,j | = \langle \emptyset | b_i b_j. \quad (3.85)$$

$V$  ist lokal im Ort, in der Weise, dass

$$\langle \xi'_1, \xi'_2 | V | \xi_1, \xi_2 \rangle = V(\xi_1, \xi_2) \delta(\xi'_1 - \xi_1) \delta(\xi'_2 - \xi_2); \quad (3.86)$$

dies ist eine natürliche Eigenschaft für eine Punktwechselwirkung. Nun ist diese Wechselwirkung auch symmetrisch,  $V(\xi_1, \xi_2) = V(\xi_2, \xi_1)$ . Dies heisst also

$$\begin{aligned} (\langle j,i|V|k,l \rangle + \langle i,j|V|k,l \rangle) &= \int d\xi_1 d\xi_2 \psi_j^*(\xi_1) \xi_i^*(\xi_2) V(\xi_1, \xi_2) \psi_k(\xi_1) \psi_l(\xi_2) \\ &\quad + \int d\xi_1 d\xi_2 \psi_j^*(\xi_2) \psi_i^*(\xi_1) V(\xi_1, \xi_2) \psi_k(\xi_1) \psi_l(\xi_2). \end{aligned} \quad (3.87)$$

Um zu zeigen, dass die beiden Formulierungen des Hamiltonoperators den gleichen Ausdruck liefern, betrachten wir zunächst den nichtwechselwirkenden Teil  $H_0$ . Hier finden wir für zwei vollständig symmetrische Zustandsvektoren  $|\psi_N \rangle$  und  $|\psi'_N \rangle$

$$\langle \psi'_N | H_0 | \psi_N \rangle = \sum_{j,k} \langle j|F|k \rangle \langle b_j \psi'_N | b_j \psi_N \rangle. \quad (3.88)$$

In der üblichen Formulierung für Feldoperatoren finden wir aber auch

$$b_j = \int d\xi \psi_j^*(\xi) \Psi(\xi), \quad (3.89)$$

also

$$\begin{aligned} \langle \psi'_N | H_0 | \psi_N \rangle &= N \sum_{j,k} \int d\xi d\xi' d\xi_1 \dots d\xi_{N-1} \psi_k^*(\xi) \langle j|F|k \rangle \\ &= \psi_j(\xi') (\psi'_N)^*(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}, \xi') \psi_N(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}, \xi). \end{aligned} \quad (3.90)$$

Da nun

$$\sum_{j,k} \psi_k^*(\xi) \langle j|F|k \rangle \psi_j(\xi') = \langle \xi' | F | \xi \rangle \quad (3.91)$$

und die Wellenfunktionen  $\psi_N$  und  $\psi'_N$  in ihren Argumenten symmetrisch sind, erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}\langle \psi'_N | H_0 | \psi_N \rangle &= \sum_{j=1}^N \int d\xi_1 \dots d\xi_j \dots d\xi_N d\xi'_j (\psi'_N)^*(\xi_1, \dots, \xi'_j, \dots, \xi_N) \langle \xi'_j | F | \xi_j \rangle \\ &= \psi_N(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) \\ &= \langle \psi'_N | H_0^{(N)} | \psi_N \rangle.\end{aligned}\quad (3.92)$$

Dies ist, was wir zeigen wollten. Ein sehr ähnliches Argument führt für den Term, der die Wechselwirkung beschreibt, zu der Aussage, dass die Einschränkungen auf den symmetrischen Unterraum identisch sind. Es sollte klar sein, dass die Art der Hamiltonoperatoren  $F$  und  $V$  hier keine Rolle spielt.

Typischerweise wählt man die Energieeigenfunktionen  $\psi_j$  des Einteilchenhamiltonoperators  $F$  mit Energiewerten  $E_j$  als Wellenfunktionen, und erhält so die allgemeine Form eines Hamiltonoperators eines Systems von identischen bosonischen Teilchen mit Zweiteilchenwechselwirkung. Dieser Ausdruck ist so wichtig, dass er einen eigenen Kasten erhält:

**Allgemeiner Hamiltonoperator von bosonischen identischen Teilchen in zweiter Quantisierung:** Der allgemeine Hamiltonoperator mit Zweiteilchenwechselwirkung nimmt die Form

$$\begin{aligned}H &= H_0 + H_1 \\ &= \sum_j E_j b_j^\dagger b_j + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} \langle i, j | V | k, l \rangle b_j^\dagger b_i^\dagger b_l b_k.\end{aligned}\quad (3.93)$$

an.

Man nennt diesen Hamiltonoperator auch einen *Hamiltonoperator in "zweiter Quantisierung"*. Die Feldoperatoren  $\Psi$  und  $\Psi^\dagger$  sieht man dann auch als "zweite Quantisierungen" einer Wellenfunktion an. Dies heisst nicht, dass wir hier eine neue Quantenmechanik formuliert haben, oder eine Theorie, die über die "erste Quantisierung" der Quantenmechanik, wie wir sie kennen, hinausgeht. Es handelt sich aber hier um einen sehr bequemen und hilfreichen Formalismus in der Beschreibung von Vielteilchensystemen.

Falls wir bosonische identische Teilchen in einem externen Potential beschreiben wollen  $V_1$ , die via ein Zweiteilchenpotential wechselwirken, können wir den Hamiltonoperator schreiben als

$$\begin{aligned}H &= \int d\xi \Psi^\dagger(\xi) \left( -\frac{\hbar^2 \Delta}{2M} + V_1(\xi) \right) \Psi(\xi) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\xi d\xi' \Psi^\dagger(\xi') \Psi^\dagger(\xi) V_2(\xi, \xi') \Psi(\xi) \Psi(\xi').\end{aligned}\quad (3.94)$$

Der erste Term sieht aus wie ein Einteilchenoperator, obwohl es sich hier um einen Ausdruck für einen Feldoperator handelt. Der Faktor  $1/2$  rührt her von der Ununterscheidbarkeit der Konfigurationen  $\xi, \xi'$  und  $\xi', \xi$ . Der Gesamtteilchenoperator liest sich in Feldoperatoren übrigens als

$$\int d\xi \Psi^\dagger(\xi) \Psi(\xi). \quad (3.95)$$

Dieser Operator sieht also so aus wie eine Teilchenzahldichte eines Einteilchenproblems: Hier ist aber  $\Psi$  ein Operator und keine komplexwertige Funktion. Die formale Analogie zur "ersten Quantisierung" wird auch deutlich, wenn man die Zeitentwicklung von Feldoperatoren im Heisenbergbild betrachtet: Wir finden, dass

$$\Psi(\xi, t) = e^{iHt/\hbar} \Psi(\xi, 0) e^{-iHt/\hbar} \quad (3.96)$$

für den Hamiltonoperator (3.94) die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\xi, t) &= \left( -\frac{\hbar^2 \Delta}{2M} + V_1(\xi) \right) \Psi(\xi, t) \\ &+ \int d\xi' \Psi^\dagger(\xi', t) V_2(\xi, \xi') \Psi(\xi', t) \Psi(\xi, t). \end{aligned} \quad (3.97)$$

Dies ist die Struktur einer nichtlinearen Schrödingergleichung. Dies ist schnell gezeigt: Man beginnt mit der Heisenbergbewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\xi, t) = -[H, \Psi(\xi, t)] = -e^{iHt/\hbar} [H, \Psi(\xi, 0)] e^{-iHt/\hbar}, \quad (3.98)$$

und nutzt  $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$  aus. Details werden in einer Übungsaufgabe behandelt. Auch hier sehen wir also eine formale Ähnlichkeit zu der Situation eines einzelnen Teilchens.



# Kapitel 4

## Fermigase

Fermigase spielen in der Physik eine zentrale Rolle. Das prominenteste Beispiel ist das von Elektronengases im Festkörper, aber auch Sternmodelle in der Astrophysik können als Fermigase beschrieben werden. Mit einer kleinen Variation können wir so auch Atome beschreiben. In der folgenden Formulierung stellen wir uns ein Gas aus Elektronen vor, aber es sollte klar sein, dass solche Überlegungen in recht allgemeinen Kontexten angewendet werden können.

### 4.1 Vorbemerkungen

Wir werden erst wieder ein ideales Fermionengas betrachten und uns erste Eigenschaften ansehen, über die wir im Formalismus der zweiten Quantisierung schon etwas interessantes sagen können. Dann werden wir in einem Modell für ein Elektronengas ein fermionisches Vielteilchensystem mit Coulombwechselwirkung betrachten. Dies wird auch vorbereitend sein für über unsere Überlegungen zur Supraleitung.

Um ein ideales Fermionengas zu beschreiben in einem Container mit *periodischen Randbedingungen*, sind die folgenden Einzelteilchenzustände am besten geeignet,

$$\psi_{p,\sigma}(x, \sigma') = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ipr/\hbar} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (4.1)$$

wobei  $\sigma, \sigma'$  für die dritte Komponente eines Spins stehen und

$$p = \frac{2\pi\hbar}{L} n, \quad (4.2)$$

wobei  $n \in \mathbb{R}^3$  ein Vektor von ganzen Zahlen ist. Diese Quantisierungsvorschrift ergibt sich unmittelbar aus den Randbedingungen. Das Volumen des Containers ist  $V = L^3$  bei einer Kantenlänge von  $L$ . Produkte wie  $pr$  sind als Standardskalarprodukte zu lesen. Diese Eigenfunktionen sind orthonormal als

$$\int dx \psi_{p,\sigma}^*(x, \sigma') \psi_{p',\sigma''}(x, \sigma''') = \delta_{r,r'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\sigma',\sigma''} \delta_{\sigma'',\sigma''}. \quad (4.3)$$

Hier und im folgenden sind die Koordinaten  $\xi = (x, \sigma)$  explizit in Ortsanteil und Spinkomponente aufgeteilt. Der Feldoperator ist nun

$$\Psi(x, \sigma) = \sum_p \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ipr/\hbar} f_{p,\sigma}, \quad (4.4)$$

wobei  $f_{p,\sigma}$  der fermionische Vernichtungsoperator ist für Impuls  $p$  und Spinkomponente  $\sigma$ . Die Antikommutationsrelationen zwischen den fermionischen Feldoperatoren lauten hier

$$[\Psi(x, \sigma), \Psi^\dagger(x', \sigma')] = \delta_{\sigma,\sigma'} \frac{1}{V} \sum_p e^{ip(x-x')/\hbar}. \quad (4.5)$$

Nun ist aber

$$\frac{1}{V} \sum_p e^{ip(x-x')/\hbar} = \sum_n \delta(x - x' + nL), \quad (4.6)$$

und da wir nur daran interessiert sind, was in der Kiste passiert, aber nicht in ihren ‘‘Replikas’’, finden wir die Standardkommutationsrelationen von fermionischen Feldoperatoren, wie in Gleichung (3.80) formuliert.

Es lohnt, kurz innezuhalten und andere Größen im Impulsraum zu betrachten. Der Anzahldichteoperator

$$\sum_\sigma \Psi^\dagger(x, \sigma) \Psi(x, \sigma) \quad (4.7)$$

wird unter einer Fouriertransformation zu

$$\sum_\sigma \int dx \Psi^\dagger(x, \sigma) \Psi(x, \sigma) e^{-iqr} \quad (4.8)$$

und – Gleichung (4.4) verwendend – wird dies

$$\sum_\sigma \int dx \frac{1}{V} \sum_p \sum_k e^{-ipr} f_{p,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma} e^{-iqr}, \quad (4.9)$$

was unter Orthonormalität zu

$$\sum_\sigma \sum_p f_{p,\sigma}^\dagger f_{p+q} \quad (4.10)$$

wird. Dies ist der fouriertransformierte Anzahldichteoperator, verschieden vom Anzahldichteoperator in der Impulsdarstellung, gegeben durch

$$\sum_\sigma \sum_p f_{p,\sigma}^\dagger f_{p,\sigma}. \quad (4.11)$$

## 4.2 Grundzustand des idealen Fermigases

Nun, wir betrachten nun also den Hamiltonoperator von  $N$  nichtwechselwirkenden Fermionen in einer Kiste im Impulsraum. Dieser ist gegeben durch

$$H = \sum_k \sum_\sigma \frac{(\hbar k)^2}{2M} f_{k,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma}. \quad (4.12)$$

Es handelt sich also lediglich um Terme der kinetischen Energie, ohne Wechselwirkungen oder externe Potentiale. Der *Grundzustand* eines solchen idealen Fermigases ist nun der folgende:

**Grundzustand des idealen Fermigases:** Der Zustandsvektor des Grundzustands des nichtwechselwirkenden Fermigases lautet

$$|\psi_N\rangle = \prod_{p, |p| < k_F} \prod_{\sigma} f_{p,\sigma}^\dagger |\emptyset\rangle. \quad (4.13)$$

Dies ist also der Zustand, bei dem alle Zustände mit Wellenzahl bis zur Fermikante aufgefüllt sind. Der Erwartungswert des Teilchenzahloperators im Impulsraum ist gegeben durch

$$n_{p,\sigma} = \langle \psi_N | f_{p,\sigma}^\dagger f_{p,\sigma} | \psi_N \rangle = \begin{cases} 1 & |p| \leq k_F, \\ 0 & |p| > k_F \end{cases}. \quad (4.14)$$

Wo der genaue Wert der *Fermikante* liegt, müssen wir noch aus der Teilchenzahl bestimmen. Dies ist aber einfach: Für  $|p| > k_F$  ergibt sich

$$f_{p,\sigma} |\psi_N\rangle = \prod_{p', |p'| < k_F} \prod_{\sigma'} f_{p',\sigma'}^\dagger f_{p,\sigma} |\emptyset\rangle = 0. \quad (4.15)$$

Die Gesamtteilchenzahl ergibt sich also so zu

$$\begin{aligned} N = \sum_{p,\sigma} n_{p,\sigma} &= 2 \sum_{|p| \leq k_F} 1 \\ &= 2V \int_0^{k_F} \frac{dp}{(2\pi)^3} = \frac{V k_F^3}{3\pi^2}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

also finden wir<sup>1</sup>

$$k_F^3 = \frac{3\pi^2 N}{V} = 3\pi^2 N/V. \quad (4.19)$$

Dies ist also der gesuchte Ausdruck für die Fermikante im Wellenzahlraum. Die *Fermienergie* ist dann gegeben durch

$$\varepsilon_F = \frac{(\hbar k_F)^2}{2M}, \quad (4.20)$$

<sup>1</sup>Hier wurde verwendet, dass

$$\sum_k f(k) = \sum_k \frac{\Delta}{(2\pi/L)^3} f(k) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int dk f(k), \quad (4.17)$$

wobei hier

$$\Delta = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3. \quad (4.18)$$

einfach als die zugehörige Energie.

Wie lautet nun die Teilchenzahldichte? Wir finden

$$\begin{aligned}
 \sum_{\sigma} \langle \psi_N | \Psi^{\dagger}(x, \sigma) \Psi(x, \sigma) | \psi_N \rangle &= \sum_{\sigma} \sum_{p, p'} \frac{e^{-ipr} e^{ip'r}}{V} \langle \psi_N | f_{p, \sigma}^{\dagger} f_{p', \sigma} | \psi_N \rangle \\
 &= \sum_{\sigma} \sum_{p, p'} \frac{e^{-i(p-p')r}}{V} \delta_{p-p'} \langle \psi_N | f_{p, \sigma}^{\dagger} f_{p', \sigma} | \psi_N \rangle \\
 &= \frac{N}{V}.
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Wenig überraschend ist die Dichte also homogen (es ist ja auch kein Punkt ausgezeichnet), und gerade die mittlere Teilchenzahldichte im Container mit Volumen  $V$ .

Die elementare Anregung eines solchen Grundzustands besteht darin, ein Teilchen aus dem Fermiball zu entnehmen und ausserhalb der Sphäre zu plazieren. Ein solcher *angeregter Zustandsvektor* entspricht

$$|\phi\rangle = f_{k_1, \sigma_2}^{\dagger} f_{k_1, \sigma_1} | \psi_N \rangle. \tag{4.22}$$

Ein Teilchen mit Spin  $\sigma_1$  und Wellenzahl  $k_1$  wird also ersetzt durch eines mit Spin  $\sigma_2$  und Wellenzahl  $k_2$ . Das Fehlen eines Elektrons hat den Effekt eines positiv geladenen *Loches*, das im Fermiball seinerseits wie ein fermionisches Quasiteilchen behandelt werden kann. In der Tat können wir

$$a_{k, \sigma} = f_{-k, -\sigma}^{\dagger}, \quad a_{k, \sigma}^{\dagger} = f_{-k, -\sigma}, \tag{4.23}$$

definieren und finden, dass so diese neuen Lochoperatoren auch die Antikommutationsrelationen erfüllen.

### 4.3 Fermionische Korrelationsfunktionen

**Korrelationsfunktion:** Die *Korrelationsfunktionen* des Feldoperators im Grundzustand

$$G_{\sigma}(x - x') = \langle \psi_N | \Psi^{\dagger}(x, \sigma) \Psi(x', \sigma) | \psi_N \rangle \tag{4.24}$$

geben die Wahrscheinlichkeitsamplitude an, dass die Vernichtung eines Teilchens bei  $r'$  und die Erzeugung von einem Teilchen bei  $r$  wiederum den Anfangszustand liefert.

Ebenso kann sie angesehen werden als Übergangsamplitude von (dem unnormierten Zustandsvektor)<sup>2</sup>  $\Psi(x', \sigma) | \psi_N \rangle$  – in dem ein Teilchen bei  $r'$  weggelassen wurde –

<sup>2</sup>Wir werden gleich finden, dass

$$\langle \psi_N | \Psi^{\dagger}(x, \sigma) \Psi(x, \sigma) | \psi_N \rangle = \frac{N}{2V}. \tag{4.25}$$

in den (ebenso unnormierten) Zustandsvektor  $\Psi(x, \sigma)|\psi_N\rangle$  (bei dem eines bei  $r$  fehlt). Wir betrachten nun solche Korrelationsfunktionsfunktionen wieder für unser Fermionengas:

$$\begin{aligned}
G_\sigma(x - x') &= \langle \psi_N | \sum_{p, p'} \frac{1}{V} e^{-ipr + ip'r'} f_{p, \sigma}^\dagger f_{p', \sigma} | \psi_N \rangle \\
&= \sum_p e^{-ip(x-x')} \langle \psi_N | f_{p, \sigma}^\dagger f_{p, \sigma} | \psi_N \rangle \\
&= \int \frac{dp}{(2\pi)^3} e^{-ip(x-x')} \Theta(k_F - p) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} dp p^2 \int_{-1}^1 d\eta e^{ip|r-r'|\eta}, \tag{4.26}
\end{aligned}$$

wobei wir Polarkoordinaten verwendet haben. Letztere Integration über  $\eta$  liefert

$$\frac{e^{ipd} - e^{-ipr}}{ipd} \tag{4.27}$$

mit

$$d = |r - r'|. \tag{4.28}$$

Also finden wir

$$\begin{aligned}
G_\sigma(x - x') &= \frac{1}{2\pi^2 d} \int_0^{k_F} dp p \sin(pd) \\
&= \frac{1}{2\pi^2 d^3} (\sin(k_F d) - k_F d \cos(k_F d)) \\
&= \frac{3N}{2V} \frac{\sin(k_F d) - k_F d \cos(k_F d)}{(k_F d)^3}. \tag{4.29}
\end{aligned}$$

Das heisst, die Korrelationsfunktion oszilliert mit einer charakteristischen Periode von  $1/k_F$  (die ohnehin einzige Skala im Impulsraum), unter einer Einhüllenden, die zu Null abklingt. Wir finden im Ursprung

$$G_\sigma(0) = \frac{N}{2V}; \tag{4.30}$$

für große Abstände vom Ursprung konvergiert die Funktion zu Null. Die Nullstellen in  $d$  sind durch die Lösungen von  $\tan(x) = x$  gegeben.

## 4.4 Fermionische Paarverteilungsfunktionen

Aufgrund des Pauliprinzips sind selbst nichtwechselwirkende Fermionen mit dem gleichen Spin miteinander in einer gewissen Weise korreliert<sup>3</sup>. Das Pauliprinzip verbietet zwei solche Fermionen die gleiche Ortswellenfunktion einzunehmen. Daher haben sie

<sup>3</sup>Wenngleich auch nicht verschränkt, wie man in der Quanten-Informationstheorie sagen würde.

die Tendenz, einander abzustößen und die Wahrscheinlichkeit, dass sie nahe beieinander gefunden werden können ist recht klein. Die Coulombwechselwirkung, die dann ja auch abstossend ist, verstärkt diesen Effekt noch. Vorläufig werden wir aber nur nichtwechselwirkende Fermionen betrachten und erst später den Einfluß zusätzlicher Coulombabstoßung untersuchen.

Es gibt mehrere Möglichkeiten, diese Korrelationen sinnvoll zu charakterisieren. Eine dieser Möglichkeiten besteht in der Paarverteilungsfunktion. Nehmen wir an, wir entfernen ein Teilchen bei  $r$  von  $|\psi_N\rangle$ , um den  $N - 1$ -Teilchenzustandsvektor

$$|\phi(x, \sigma)\rangle = \Psi(x, \sigma)|\psi_N\rangle \quad (4.31)$$

zu erhalten. Die Dichteverteilung dieses Zustands ist

$$\begin{aligned} \langle \phi(x, \sigma) | \Psi^\dagger(x', \sigma) \Psi(x', \sigma) | \phi(x, \sigma) \rangle &= \langle \psi_N | \Psi^\dagger(x, \sigma) \Psi^\dagger(x', \sigma') \Psi(x', \sigma') \Psi(x, \sigma) | \psi_N \rangle \\ &= \left( \frac{N}{2} \right)^2 g_{\sigma, \sigma'}(x - x'). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Dieser Ausdruck definiert auch die *Paarverteilungsfunktion*. Es ist oft hilfreich, die Paarverteilungsfunktion im Fourierraum zu betrachten. Hier finden wir

$$\begin{aligned} \left( \frac{N}{2} \right)^2 g_{\sigma, \sigma'}(x - x') &= \frac{1}{V^2} \sum_{k, k'} \sum_{q, q'} e^{-i(k-k')r - i(q-q')r'} \\ &\times \langle \psi_N | f_{k, \sigma}^\dagger f_{q, \sigma'}^\dagger f_{q', \sigma} f_{k', \sigma} | \psi_N \rangle. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Wir betrachten nun zwei Fälle gesondert:

- In einem Fall ist  $\sigma \neq \sigma'$ , die Spinkomponente also unterschiedlich. Dann muss  $k = k'$  und  $q = q'$  sein, um einen Anteil zu erhalten. Wir finden

$$\left( \frac{N}{2V} \right)^2 g_{\sigma, \sigma'}(x - x') = \frac{1}{V^2} \frac{N}{2} \frac{N}{2}, \quad (4.34)$$

also gilt einfach

$$g_{\sigma, \sigma'}(x - x') = 1, \quad (4.35)$$

völlig unabhängig vom Abstand. Dies ist eine Konsequenz der Tatsache, dass Teilchen, die einen unterschiedlichen Spin haben, vom Pauliprinzip nicht betroffen sind, und da sie nicht wechselwirken, einander überhaupt nicht zur Kenntnis nehmen.

- Dies ist aber anders im Fall, in dem  $\sigma = \sigma'$ . Dann haben wir nämlich zwei Möglichkeiten: Entweder gilt  $k = k', q = q'$  oder  $k = q', q = k'$ . Wir finden nun

$$\begin{aligned} \langle \psi_N | f_{k, \sigma}^\dagger f_{q, \sigma}^\dagger f_{q', \sigma} f_{k', \sigma} | \psi_N \rangle &= \delta_{k, k'} \delta_{q, q'} \langle \psi_N | f_{k, \sigma}^\dagger f_{q, \sigma}^\dagger f_{q, \sigma} f_{k, \sigma} | \psi_N \rangle \\ &+ \delta_{k, q'} \delta_{q, k'} \langle \psi_N | f_{k, \sigma}^\dagger f_{q, \sigma}^\dagger f_{k, \sigma} f_{q, \sigma} | \psi_N \rangle. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Da  $(f_{k,\sigma})^2 = 0$ , muss auch  $k \neq q$  gelten, und so erhalten wir

$$\left(\frac{N}{2}\right)^2 g_{\sigma,\sigma}(x-x') = \frac{1}{V^2} - (G_\sigma(x-x'))^2. \quad (4.37)$$

Mit Hilfe der oben berechneten Korrelationsfunktion finden wir also mit  $d = k_F|r-r'|$  den Ausdruck

$$g_{\sigma,\sigma}(x-x') = 1 - \frac{1}{d^6} (\sin(d) - d \cos(d))^2. \quad (4.38)$$

Dies heisst, dass die Wahrscheinlichkeit, zwei Fermionen mit dem selben Spin nahe beieinander zu finden, in Abständen kleiner als  $1/k_F$ , ist klein. Die Unterdrückung von  $g_{\sigma,\sigma}(x-x')$  auf diesen Abständen wird auch als *Austauschloch* oder *Korrelationsloch* bezeichnet. Dieser Effekt rührt lediglich von den fermionischen Antikommutationsrelationen her und ist kein Effekt von echter Wechselwirkung, auch wenn der resultierende Effekt nicht unähnlich ist. In der Tat spielt ein solcher Effekt in Festkörpern, aber auch in der Sternbildung eine zentrale Rolle.

## 4.5 Systeme mit Coulombwechselwirkung

Wir betrachten nun fermionische wechselwirkende Systeme. Der Hamiltonoperator eines Systems von Fermionen, die mit *Coulombwechselwirkung* miteinander in Kontakt stehen, lautet in zweiter Quantisierung wie folgt:

**Hamiltonoperator von Elektronen mit Coulombwechselwirkung:**

$$H = \sum_{k,\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} f_{k,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma} + \frac{e^2}{2V} \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma',q \neq 0} \frac{4\pi}{q^2} f_{k+q,\sigma}^\dagger f_{k'-q,\sigma}^\dagger f_{k',\sigma'} f_{k,\sigma}. \quad (4.39)$$

Der erste Term ist der gewohnte kinetische Term, der zweite bezeichnet die Wechselwirkung. Wir haben hier den Anteil von  $q = 0$  weggelassen, warum? Er würde sicher divergieren. Wir müssen ihn aber auch nicht in die Beschreibung einbeziehen, wenn wir ein Argument wie folgt heranziehen: Dieser Anteil wird nämlich gerade von der Wechselwirkung mit einem positiv geladenen Hintergrund von etwa Ionen im Festkörper kompensiert, und durch die Wechselwirkung der Ionen untereinander. Wir werden nun also diesen Hamiltonoperator aus dem mikroskopischen Modell herleiten. Der Hamiltonoperator ist

$$H = H_{\text{El}} + H_{\text{Ion}} + H_I \quad (4.40)$$

der Elektronen, des positiven Hintergrunds und der Wechselwirkung. Wir werden merken, dass wegen des langreichweitigen Charakters der Coulombwechselwirkung die

Terme einzeln divergieren im Limes großer Systeme: Die Summe ist aber wohldefiniert. Um mit den Divergenzen in einfacherer Weise termweise umzugehen, ist es hilfreich, einen cutoff  $\mu > 0$  zu definieren, der uns nicht weiter beunruhigen sollte; später werden wir den Limes kleines cutoffs betrachten. So können wir in einfacher Weise die Terme einzeln diskutieren. Der Hamiltonoperator der Wechselwirkung mit dem Hintergrund der positiv geladenen Ionen ist

$$H_{\text{Ion}} = \frac{1}{2} e^2 \int dx dx' \frac{n(x)n(x')}{|x-x'|} e^{-\mu|x-x'|}. \quad (4.41)$$

Hier ist einfach  $n(x) = N/V$  eine konstante Dichte.  $\mu > 0$  ist ein cutoff, der uns nicht weiter beunruhigen sollte; später werden wir den Limes kleines cutoffs betrachten. Es ist also

$$H_{\text{Ion}} = \frac{1}{2} e^2 \left( \frac{N}{V} \right)^2 V 4\pi \int_0^\infty ds s e^{-\mu s}. \quad (4.42)$$

Die Wechselwirkung der Elektronen mit dem positiv geladenen Hintergrund ergibt sich zu

$$H_I = e^2 \sum_{j=1}^N \frac{N}{V} \int dx \frac{e^{-\mu(x-x_j)}}{|x-x_j|}. \quad (4.43)$$

Schließlich ist der eigentliche Hamiltonoperator der Elektronen

$$H_{\text{El}} = \sum_{j=1}^N \frac{P_j^2}{2M} + \frac{e^2}{2} \sum_{j,k=1, j \neq k}^N \frac{e^{-\mu|x_j-x_k|}}{|x_j-x_k|}. \quad (4.44)$$

Der thermodynamische Limes ist der Limes von  $N \rightarrow \infty$  und  $V \rightarrow \infty$ , wobei  $N/V$  konstant gehalten wird. Wir beginnen mit dem Term der Ionen,

$$H_{\text{Ion}} = \frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \quad (4.45)$$

Im Limes  $\mu \rightarrow 0$  divergiert dieser Term, was ja nur manifestiert, dass im thermodynamischen Limes wegen der Langreichweitigkeit jedes Ion mit jedem anderen wechselwirken kann. Die Wechselwirkung zwischen Ionen und Elektronen wird

$$H_I = e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}, \quad (4.46)$$

unter Ausnutzung von Translationsinvarianz. Der gesamte Hamiltonoperator ist also einfach

$$H = -\frac{e^2}{2} N^2 V^{-1} 4\pi \mu^{-2} + H_{\text{El}}, \quad (4.47)$$

und wir können uns dem eigentlichen elektronischen Anteil zuwenden. Wir werden nun den elektronischen Term in zweiter Quantisierung schreiben. Die kinetische Energie ist wie gewohnt

$$T = \sum_{k,\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} f_{k,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma}. \quad (4.48)$$



Den Wechselwirkungshamiltonian in zweiter Quantisierung zu bestimmen, ist etwas aufwändiger. Die Koordinaten sind  $\xi = (p, \sigma)$ , mit Einzelteilchenwellenfunktionen wie oben

$$\psi_{p,\sigma}(x, \sigma') = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ipx/\hbar} \delta_{\sigma,\sigma'}. \quad (4.49)$$

$$\begin{aligned} \langle \dots | V | \dots \rangle &= \frac{e^2}{V^2} \int dx_1 dx_2 e^{-ik_1 x_1} \delta_{\sigma_1, \sigma_3} e^{-ik_2 x_2} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \frac{e^{-\mu|x_1-x_2|}}{|x_1-x_2|} \\ &\times e^{ik_3 x_1} e^{ik_4 x_2}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Mit  $x = x_2$  und  $y = x_1 - x_2$  erhalten wir so

$$\begin{aligned} \langle \dots | V | \dots \rangle &= \frac{e^2}{V^2} \int dx e^{-i(k_1+k_2-k_3-k_4)x} \int dy e^{i(k_3-k_1)y} \frac{e^{-\mu y}}{y} \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \\ &= \frac{e^2}{V} \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \frac{4\pi}{(k_1-k_3)^2 + \mu^2}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Die Kronecker-Deltas resultieren von der Orthogonalität der Spinwellenfunktionen. Also lautet der gesamte Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \frac{e^2 N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2} + \sum_{k,\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} f_{k,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma} \\ &+ \frac{e^2}{2V} \sum_{k_1, \sigma_1} \sum_{k_2, \sigma_2} \sum_{k_3, \sigma_3} \sum_{k_4, \sigma_4} \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \\ &\times \frac{4\pi}{(k_1-k_3)^2 + \mu^2} f_{k_1, \sigma_1}^\dagger f_{k_2, \sigma_2}^\dagger f_{k_4, \sigma_4} f_{k_3, \sigma_3}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Wir werden nun sehen, wie wir  $\mu$  aus dem Hamiltonoperator loswerden können, indem wir die Neutralität verwenden. Wir werden erst die Variablen ändern:

$$k_1 = k + q, \quad (4.53)$$

$$k_2 = p - q, \quad (4.54)$$

$$k_3 = k, \quad (4.55)$$

$$k_4 = p. \quad (4.56)$$

Nun ist immer  $k_1 + k_2 = k_3 + k_4$ , und  $\hbar(k_1 - k_3) = \hbar q$  ist der Impuls der bei der Zweiteilchenwechselwirkung übertragen wird. In diesen Koordinaten lautet der letzte Term von Gleichung (4.52)

$$\frac{e^2}{2V} \sum_{k,p,q} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} f_{k+q, \sigma_1}^\dagger f_{p-q, \sigma_2}^\dagger f_{p, \sigma_2} f_{k, \sigma_1}, \quad (4.57)$$

wobei wir die Kroneckerdeltas ausgenutzt haben. Es ergibt Sinn, diesen Ausdruck aufzuteilen, in Beiträge mit  $q \neq 0$  und den zu  $q = 0$ , also

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{2V} \sum'_{k,p,q} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} f_{k+q, \sigma_1}^\dagger f_{p-q, \sigma_2}^\dagger f_{p, \sigma_2} f_{k, \sigma_1} \\ & + \sum_{k,p} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} f_{k, \sigma_1}^\dagger f_{p, \sigma_2}^\dagger f_{p, \sigma_2} f_{k, \sigma_1} \end{aligned} \quad (4.58)$$

Hier meint die Summe  $\sum'$ , dass der Term  $q = 0$  weggelassen wurde. Der zweite Term, also der zu  $q = 0$  gehörend, wird zu

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{k,p, \sigma_1, \sigma_2} f_{k, \sigma_1}^\dagger f_{p, \sigma_2}^\dagger f_{p, \sigma_2} f_{k, \sigma_1} \\ & = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{k,p, \sigma_1, \sigma_2} \left( f_{k, \sigma_1}^\dagger f_{k, \sigma_1} (f_{p, \sigma_2}^\dagger f_{p, \sigma_2} - \delta_{k,p} \delta_{\sigma_1, \sigma_2}) \right) \\ & = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{k,p, \sigma_1, \sigma_2} n_{k, \sigma_1} (n_{p, \sigma_2} - \delta_{k,p} \delta_{\sigma_1, \sigma_2}) \\ & = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} (N^2 - N), \end{aligned} \quad (4.59)$$

wobei wir verwendet haben, dass wir genau  $N$  Teilchen haben. Dies wird also gerade eine Zahl, deren führende Terme, linear in  $N^2$ , sich gerade aufheben. Der Term

$$-\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} N \quad (4.60)$$

gibt einen Energieanteil pro Teilchen der im thermodynamischen Limes vieler Teilchen verschwindet. Das heisst, wenn wir die Limes in der Reihenfolge  $N, V \rightarrow \infty$  durchführen, und dann  $\mu \rightarrow 0$ , dass wir gerade obigen Hamiltonoperator zur Beschreibung von Elektronen mit Coulombwechselwirkung erhalten.

### 4.5.1 Störungstheorie

Dieses Problem ist, einfach wie es ist, nicht analytisch lösbar. Dies sollte keine zu große Überraschung sein: Die Zahl der Systeme in der Quantenmechanik, für die man eine explizite analytische Lösung angeben kann, ist ziemlich klein, und betrifft oft nichtwechselwirkende Systeme, oder solche mit sehr hoher Symmetrie. Wir werden aber nun in erster Ordnung in der Störungstheorie die Energiedichte berechnen. Wir beginnen mit dem Grundzustandsvektor des freien Fermigases,

$$|\psi_N\rangle = \prod_{p \leq k_K} \prod_{\sigma} f_{p, \sigma}^\dagger |\emptyset\rangle = \left( \prod_{p=0}^{k_F} f_{p, \uparrow}^\dagger \right) \left( \prod_{p=0}^{k_F} f_{p, \downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle \quad (4.61)$$

Wir betrachten den kinetischen Term als den führenden Term und die Wechselwirkung als kleine Störung, die wir in Störungstheorie betrachten. Der kinetische Energieterm ist schon diagonal, und so finden wir einfach

$$\begin{aligned}
E^{(0)} &= \langle \psi_N | \sum_{k,\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} f_{k,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma} | \psi_N \rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,\sigma} \theta(k_F - k) \\
&= \frac{\hbar^2}{2M} 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int dk k^2 \theta(k_F - k) \\
&= \frac{\hbar^2}{M} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{1}{5} k_F^5 \\
&= \frac{3\hbar^2 k_F^2}{10M} N \\
&= \frac{3}{5} \varepsilon_F N \\
&= \frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{r_s^2} \frac{3}{5} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} N, \tag{4.62}
\end{aligned}$$

also ergibt sich die nullte Ordnung zu der Energie, die nur den kinetischen Term berücksichtigt

$$E^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0} \frac{2.21}{r_s^2} N. \tag{4.63}$$

Hier haben wir verwendet, dass

$$\frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{3}{4\pi r_0^3} = \frac{3}{4\pi a_0^3 r_s^3} \tag{4.64}$$

gilt.  $r_0$  ist hier der *Radius einer Kugel mit einem Volumen*, die dem Volumen pro Teilchen entspricht. Diese Art der Argumentation ist nicht unüblich: Man beschreibt das System, als würden die Teilchen jeweils eine Kugel einnehmen. Die Größe

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{Me^2} \tag{4.65}$$

ist der *Bohr-Radius*, und  $r_s = a_0/r_0$ .

Nun können wir uns dem Einfluß der Wechselwirkung widmen. In erster Ordnung in Störungstheorie ist die Änderung der Energie gerade der Erwartungswert des Störungsterm. So erhalten wir

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{2V} \sum'_{k,k',q,\sigma,\sigma'} \frac{4\pi}{q^2} \langle \psi_N | f_{k+q,\sigma}^\dagger f_{k'-q,\sigma'}^\dagger f_{k',\sigma'} f_{k,\sigma} | \psi_N \rangle. \tag{4.66}$$

Die Summe  $\sum'$  deutet wieder an, dass der Term  $q = 0$  weggelassen wurde. Der einzige Term, bei dem jeder Vernichter durch einen Erzeuger kompensiert wird – denn nur dann

erhalten wir einen nichtverschwindenden Term – ist linear in

$$\delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'+q} f_{k+q,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma'}^\dagger f_{k+q,\sigma'} f_{k,\sigma}. \quad (4.67)$$

So wird dieser Energiebeitrag also zu

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= -\frac{e^2}{2V} \sum'_{k,q,\sigma} \frac{4\pi}{q^2} n_{k+q,\sigma} n_{k,\sigma} \\ &= -\frac{e^2}{2V} \sum_{\sigma} \sum'_{k,q} \frac{4\pi}{q^2} \theta(k_F - |q+k|) \theta(k_F - k) \\ &= -\frac{3\pi e^2 V}{(2\pi)^6} \int dk \theta(k_F - k) \int dk' \frac{1}{|k-k'|} \theta(k_F - k'). \end{aligned} \quad (4.68)$$

Dies ist ein interessanter Ausdruck: Wir berechnen hier den Überlapp von zwei Fermikugeln mit relativem Abstand  $q$ . Nun ist

$$-\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3} \int dk' \frac{1}{|k-k'|} \theta(k_F - k) = -\frac{2e^2}{\pi} k_F F\left(\frac{k}{k_F}\right), \quad (4.69)$$

wobei die Funktion  $F: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$  definiert ist als

$$F(y) = \frac{1}{2} + \frac{1-y^2}{4y} \log \left| \frac{1+y}{1-y} \right|. \quad (4.70)$$

Dies meint, dass der Energiebeitrag zu

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= -\frac{e^2 k_F V}{\pi} \int_{k < k_F} \frac{dk}{(2\pi)^3} \left( 1 + \frac{k_F^2 - k^2}{2kk_F} \log \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right) \\ &= -N \frac{3}{4} \frac{e^2 k_F}{\pi} \\ &= -\frac{e^2}{2a_0 r_s} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{3N}{2\pi} \\ &= -\frac{e^2}{2a_0} \frac{0.916}{r_s} N \end{aligned} \quad (4.71)$$

wird. Die ersten beiden Terme in der Störungsreihe für die Energiedichte sind also

$$\frac{E}{V} = \frac{e^2}{2a_0} \left( \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + O(1) \right). \quad (4.72)$$

Hier ist der erste Term der der kinetischen Energie, der zweite der Austauschterm. Dies ist ein wichtiges Ergebnis, insofern es zeigt, dass der Beitrag der potentiellen Energie eine kleine Störung wird, wenn  $r_s \rightarrow 0$ , also im Limes hoher Dichte. Der führende Term in der Wechselwirkungsenergie eines Elektronengases hoher Dichte kann also in erster Ordnung in Störungstheorie sinnvoll beschrieben werden, obwohl das Wechselwirkungspotential weder schwach ist (weil die Teilchen nah sind), noch kurzreichweitig (sondern eigentlich unendlichreichweitig). So ist aber dennoch effektiv die Wechselwirkung wie eine kleine Störung zur *kinetischen Energie*. Dieser zweite Term, der

die *Austauschenergie* beschreibt, ist negativ. Der mikroskopische Hamiltonoperator hat beide Anteile, direkte Wechselwirkung und Austauschanteile. Der direkte Term entspricht dem  $q = 0$ -Term und hebt sich mit  $H_{\text{Ion}} + H_I$  gerade auf. Alles, was bleibt, ist gerade die negative Austauschenergie.

Diese Ausdrücke geben qualitativ schon die richtigen Energiedichten für Metalle, deren Elektronengas beschrieben wird. Vor allem stimmt das Verhalten aber qualitativ, indem die Energiedichte für einen bestimmten Wert von  $r_s$  ein Minimum annimmt, und man also ein gebundenes System erhält.<sup>4</sup>

Ein anderer Limes, auf den wir nur kurz eingehen wollen, ist der Limes  $r_s \rightarrow \infty$ . Dies ist ein Regime, das Wigner zuerst betrachtete [6]. Hier kann man zeigen, dass im Prinzip eine noch kleinere Energiedichte möglich ist, wenn die Elektronen in einem *Wignerkristall* kristallisieren. Man findet für große  $r_s$  dem Ausdruck

$$\frac{E}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left( -\frac{1.79}{r_s} + \frac{2.64}{r_s^{3/2}} + O(r_s^{5/2}) \right), \quad (4.74)$$

ein Ausdruck, der für  $r_s \gg 10$  eine gute Approximation liefert. Der Wignerkristall hat in der Tat eine kleinere Energie als das Fluid. Dann wird nämlich die kinetische Energie unwichtig gegenüber der elektrostatischen Energie von klassischen geladenen Teilchen. Ein solcher Wignerkristall ist bisher aber noch nicht experimentell nachgewiesen worden.

Schließlich, eine Randbemerkung: Diese Beschreibung in einer Störungstheorie wird oft auch mit der Überschrift "*Hartree-Fock-Beschreibung*" versehen. Der Hartree-Fock-Ansatz ist ein Variationsprinzip, bei dem die elementaren Variationsfunktionen gerade die freien Zustände sind von ungekoppelten Fermionen. Dies führt hier auf das gleiche Ergebnis wie die oben beschriebene Störungstheorie.

### 4.5.2 Änderung der Elektronenniveaus aufgrund der Coulombwechselwirkung

Wir werden uns nun dem Einfluß der Coulombwechselwirkung auf die Energielevels

$$\varepsilon_0(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2M} \quad (4.75)$$

der Elektronen betrachten. Der Hamiltonoperator des Elektronengases mit Wechselwirkung – zur Wiederholung – lautet

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k,\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} f_{k,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma} \\ &+ \frac{e^2}{2V} \sum_{p,k',q,\sigma,\sigma',q \neq 0} \frac{4\pi}{q^2} f_{p+q,\sigma}^\dagger f_{k'-q,\sigma}^\dagger f_{k',\sigma'} f_{p,\sigma}. \end{aligned} \quad (4.76)$$

<sup>4</sup>Der nächste Term divergiert aber logarithmisch: Wir erhalten

$$\frac{E}{N} = \frac{e^2}{a_0 r_s^2} (a + b r_s + c r_s^2 \log r_s + d r_s^2 + o(r_s^2)), \quad (4.73)$$

wobei  $a, b, c, d \in \mathbb{R}$  Konstanten sind. Die genaue Berechnung von  $c$  und  $d$  ist nicht einfach, aber in nichtnumerischer Weise mit elementaren Methoden möglich.

Wir werden uns nun fragen, wie der Einfluß der Wechselwirkung sein könnte. Wir wollen ihn approximativ betrachten, indem wir die Zeitabhängigkeit der fermionischen Operatoren betrachten. Dies mag ein etwas unorthodoxer Weg sein, führt aber schnell zu einem sinnvollen Ergebnis.

Wir betrachten die Entwicklung der fermionischen Operatoren im Heisenbergbild, also

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} f_{k,\sigma}(t) &= \frac{i}{\hbar} \left[ \sum_{k',\sigma'} \varepsilon_0(k') f_{k',\sigma'}^\dagger f_{k',\sigma'} f_{k,\sigma} \right] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k',\sigma'} \varepsilon_0(k') \{ f_{k',\sigma'}^\dagger, f_{k,\sigma} \} f_{k',\sigma'}^\dagger,\end{aligned}\quad (4.77)$$

was uns also unmittelbar auf

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{k,\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_0(k) f_{k,\sigma}(t).\quad (4.78)$$

führt. Wir definieren nun die zeitabhängige Korrelationsfunktion  $G_{k,\sigma}$  als

$$G_{k,\sigma}(t) = \langle \psi_N | f_{k,\sigma}(t) f_{k,\sigma}^\dagger | \psi_N \rangle.\quad (4.79)$$

Multiplikation mit  $f_{k,\sigma}^\dagger(t)$  liefert die Bewegungsgleichung für  $G_{k,\sigma}$  als

$$\frac{\partial}{\partial t} G_{k,\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_0(k) G_{k,\sigma}(t).\quad (4.80)$$

Dessen Lösung lautet

$$G_{k,\sigma}(t) = e^{-i\varepsilon_0(k)t/\hbar} (-n_{k,\sigma} + 1),\quad (4.81)$$

da

$$\langle \psi_N | f_{k,\sigma}(0) f_{k,\sigma}^\dagger(0) | \psi_N \rangle = -n_{k,\sigma} + 1.\quad (4.82)$$

Dies ist das Ergebnis ohne Berücksichtigung der Coulombwechselwirkung. Mit Wechselwirkung erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{k,\sigma}(t) = \frac{i}{\hbar} \left( \varepsilon_0(k) f_{k,\sigma} - \frac{1}{V} \sum_{p,q \neq 0, \sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} f_{p+q, \sigma'}^\dagger f_{k+q, \sigma} f_{p, \sigma'} \right).\quad (4.83)$$

Dies führt zu der Bewegungsgleichung für die Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} G_{k,\sigma}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \left( \varepsilon_0(k) G_{k,\sigma}(t) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{V} \sum_{p,q \neq 0, \sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \langle \psi_N | f_{p+q, \sigma'}^\dagger(t) f_{k+q, \sigma}(t) f_{p, \sigma'}(t) f_{k, \sigma}^\dagger(0) | \psi_N \rangle \right).\end{aligned}\quad (4.84)$$

Dummerweise steht auf der rechten Seite nun nicht nur die Korrelationsfunktion  $G_{k,\sigma}$ , sondern auch Terme, die Korrelatoren höherer Ordnung entsprechen. Wir machen nun

eine Annahme, daß höhere Korrelatoren approximativ als Produkte niedrigerer Korrelatoren schreibbar sind. Solche Trunkierungen unendlicher Hierarchien sind nicht selten in der Physik: Hier ist es im wesentlichen eine Gaußsche Annahme, dass höhere Momente faktorisieren wie als wären sie Gaußsche Gewichte. Dies ist für unsere Zwecke eine brauchbare Näherung – aber eben nicht exakt. Wir sollten hier aber nicht zu streng sein. Wir nehmen also an, dass

$$\begin{aligned}
& \langle \psi_N | f_{p+q,\sigma'}^\dagger(t) f_{k+q,\sigma}(t) f_{p,\sigma'} f_{k,\sigma}^\dagger(0) | \psi_N \rangle \\
& \approx \langle \psi_N | f_{p+q,\sigma'}^\dagger(t) f_{k+q,\sigma}(t) | \psi_N \rangle \langle \psi_N | f_{p,\sigma'} f_{k,\sigma}^\dagger(0) | \psi_N \rangle \\
& = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{p,k} \langle \psi_N | f_{p+q,\sigma'}^\dagger(t) f_{p+q,\sigma}(t) | \psi_N \rangle \langle \psi_N | f_{k,\sigma'} f_{k,\sigma}^\dagger(0) | \psi_N \rangle \quad (4.85)
\end{aligned}$$

Unter dieser Annahme – und wir werden nun  $\approx$ -Symbole weglassen und weiterhin Gleichheitszeichen verwenden, wissend, dass es sich hier um eine Approximation handelt, erhalten wir die geschlossene Gleichung

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} G_{k,\sigma}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \left( \varepsilon_0(k) G_{k,\sigma}(t) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{V} \sum_{q \neq 0} \frac{4\pi e^2}{q^2} n_{k+q,\sigma} \right) G_{k,\sigma}(t). \quad (4.86)
\end{aligned}$$

Wir können hieraus also den folgenden Ausdruck ablesen:

$$\varepsilon(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2M} - \frac{1}{V} \sum_{k'} \frac{4\pi e^2}{|k - k'|} n_{k',\sigma}. \quad (4.87)$$

Die Änderung in  $\varepsilon$  ist somit

$$\begin{aligned}
\Delta\varepsilon(k) &= - \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{|k - k'|} \theta(k_F - k') \\
&= -\frac{e^2}{\pi} \int_0^{k_F} ds s^2 \int_{-1}^1 dt \frac{1}{k^2 + s^2 - 2kst} \\
&= -\frac{e^2}{\pi k} \int_0^{k_F} ds s \log \left| \frac{k+s}{k-s} \right| \\
&= -\frac{2e^2 k_F}{\pi} F\left(\frac{k}{k_F}\right), \quad (4.88)
\end{aligned}$$

wobei die Funktion  $F$  genau die ist, die wir schon in Gleichung (4.70) kennenlernten. Die Energieniveaus sind also gegenüber dem freien Fermigas reduziert.





## Kapitel 5

# Bosonische Systeme

Wir wenden uns nun bosonischen Systemen zu. Zunächst betrachten wir einige mehr oder minder offensichtliche Unterschiede zum fermionischen Fall. Dann betrachten wir detailliert wichtige physikalische Implikationen bosonischer Vielteilchensysteme: Photonen, in der Theorie von quantisiertem Licht, und Bosonen in der Bose-Einstein-Kondensation. Für solche Bose-Einstein-Kondensate wollen wir einiges an quantitativer Theorie im Rahmen einer Bogoliubov-Beschreibung liefern.

### 5.1 Paarverteilungsfunktion für freie Bosonen

Wir betrachten ein System von  $N$ -nichtwechselwirkenden Bosonen im Zustand

$$|\psi_N\rangle = |N_{p_0}, N_{p_1}, \dots\rangle. \quad (5.1)$$

Die Teilchenzahldichte, abhängig vom Ort  $x$ , lautet also

$$\begin{aligned} \langle \psi_N | \Psi^\dagger(x) \Psi(x) | \psi_N \rangle &= \frac{1}{V} \sum_{k, k'} e^{-i(kx + k'x)} \langle \psi_N | b_k^\dagger b_k | \psi_N \rangle \\ &= \frac{N}{V}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Die Dichte ist also wieder unabhängig von dem Ort – nicht gerade überraschend in einem translationsinvarianten System. Wir können analog zum fermionischen Fall wieder eine *Paarverteilungsfunktion* einführen, die bosonische Paarverteilungsfunktion, nun ohne Spin. Sie ist definiert als

$$\begin{aligned} \frac{N^2}{V^2} g(x - x') &= \langle \psi_N | \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x') \Psi(x') \Psi(x) | \psi_N \rangle \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{k, k', q, q'} e^{-ikx - iq'x' + iq'x + ik'x} \langle \psi_N | b_k^\dagger b_q^\dagger b_q b_{k'} | \psi_N \rangle. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Der Erwartungswert auf der rechten Seite ist nur dann verschieden von Null, wenn  $k = k'$  und  $q = q'$ , oder wenn  $k = q'$  und  $q = k'$ . Der Fall  $k = q$ , der, im Gegensatz

zu Fermionen, für Bosonen möglich ist, muss getrennt betrachtet werden. Also ist nun

$$\begin{aligned}
\langle \psi_N | b_k^\dagger b_q^\dagger b_{q'} b_{k'} | \psi_N \rangle &= (1 - \delta_{k,q}) \\
&\times \left( \delta_{k,k'} \delta_{q,q'} \langle \psi_N | b_k^\dagger b_q^\dagger b_q b_k | \psi_N \rangle + \delta_{k,q} \delta_{q,k'} \langle \psi_N | b_k^\dagger b_q^\dagger b_k b_q | \psi_N \rangle \right) \\
&+ \delta_{k,q} \delta_{k,k'} \delta_{q,q'} \langle \psi_N | b_k^\dagger b_k^\dagger b_k b_k | \psi_N \rangle \\
&= (1 - \delta_{k,q}) \\
&\times (\delta_{k,k'} \delta_{q,q'} + \delta_{k,q'} \delta_{q,k'}) n_k n_q + \delta_{k,q} \delta_{k,k'} \delta_{q,q'} n_k (n_k - 1) \quad (5.4)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
&\langle \psi_N | \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x') \Psi(x') \Psi(x) | \psi_N \rangle \\
&= \frac{1}{V^2} \left( \sum_{k,q} (1 - \delta_{k,q}) (1 + e^{-i(k-q)(x-x')}) n_k n_q + \sum_k n_k (n_k - 1) \right) \\
&= \frac{1}{V^2} \left( \sum_{k,q} n_k n_q - \sum_k n_k^2 + \left| \sum_k e^{-ik(x-x')} n_k \right|^2 - \sum_k n_k^2 \right. \\
&+ \left. \sum_k n_k^2 - \sum_k n_k \right) \\
&= \frac{N^2}{V^2} + \frac{1}{V} \left| \sum_k e^{-ik(x-x')} n_k \right|^2 - \frac{1}{V^2} \sum_k n_k (n_k + 1). \quad (5.5)
\end{aligned}$$

Wiederum im Gegensatz zu Fermionen findet man nun einen positiven zweiten Term vor. Für den letzten Term findet man kein fermionisches Äquivalent, einfach weil man keine Doppelbesetzung im fermionischen Fall haben kann.

Wir betrachten nun wichtige Beispiele. Wenn alle Bosonen den gleichen Zustand  $p_0$  annehmen, dann wird Gleichung (5.5) zu

$$\frac{V^2}{N^2} g(x-x') = \frac{N(N-1)}{V^2}. \quad (5.6)$$

Nun ist die Paarverteilungsfunktion also auch konstant: Es gibt einfach keine Korrelationen in diesem Sinne. Die rechte Seite kann man dahingehend interpretieren, dass die Wahrscheinlichkeit, das erste Teilchen anzutreffen,  $N/V$  ist, und die des zweiten Teilchens dann  $(N-1)/V$ .

Wenn dagegen die Teilchen über mehrere Impulswerte verteilt sind, etwa nach einer Gaußverteilung

$$n_k = \frac{(2\pi)^3 N}{V(\sqrt{\pi}\Delta)^3} e^{-(k-k_0)^2/\Delta^2} \quad (5.7)$$

mit Normierung

$$\int \frac{dp}{(2\pi)^3} n_k = \frac{N}{V}. \quad (5.8)$$

Dann sind

$$\int \frac{dk}{(2\pi)^3} e^{-ik(x-x')} n_k = \frac{N}{V} e^{-\Delta^2(x-x')^2/4} e^{-ik_0(x-x')} \quad (5.9)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int \frac{dk}{(2\pi)^3} n_k^3 &= \frac{1}{V} \left( \frac{(2\pi)^3 N}{V(\sqrt{\pi}\Delta)^3} \right)^2 \int \frac{dk}{(2\pi)^3} e^{-2(k-k_0)^2/\Delta^2} \\ &\approx \frac{N^2}{V^3 \Delta^3}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Hält man nun die Dichte und die Breite  $\Delta$  der Verteilung fest, dann verschwindet im Limes großer Volumina  $V$  der dritte Term in Gleichung (5.5). Die Paarverteilungsfunktion wird dann

$$\frac{N^2}{V^2} g(x-x') = \frac{N^2}{V^2} \left( 1 + e^{-\Delta^2(x-x')/2} \right). \quad (5.11)$$

Die Wahrscheinlichkeit, zwei Bosonen nahe beieinander, in Abständen kleiner als  $\Delta^{-1}$ , ist erhöht. Wegen der Symmetrie der Wellenfunktion neigen Bosonen also dazu, “zusammenzukleben” (“to cluster”). Die Wahrscheinlichkeit, zwei Bosonen an exakt dem gleichen Ort zu finden ist exakt doppelt so gross wie bei großen Abständen.

### 5.1.1 Photonenkorrelationen

Photonen sind die prototypischen Beispiele nichtwechselwirkender Bosonen. Nicht nur ist die Bedingung weitestgehender Wechselwirkungsfreiheit gewährleistet: Man kann auch Lichtmoden mit quantenoptischen recht gut auch in aufwändigen Zuständen präparieren und auch deren Zustände gut manipulieren.

## 5.2 Schwach wechselwirkende verdünnte Bosonengase

### 5.2.1 Quantenfluide und Bose-Einstein-Kondensation

Quantenentartete Bosegase sind in der gegenwärtigen Forschung stark beachtete physikalische Systeme. Ein wichtiges bosonisches Fluid ist  $\text{He}^4$ , das Spin  $S = 0$  hat, das verglichen mit anderen Bosegasen (aus schwereren Atomen) wenig Wechselwirkung aufweist.  $\text{He}^4$  ist ein Fluid bis zu  $T = 0$ , und bei  $T = 2.18\text{K}$  geht es in einen superfluiden Zustand, mit dem wir uns später noch beschäftigen werden. Die Wechselwirkung von solchen Heliumatomen ist klein, aber nicht vernachlässigbar, und wird gut durch ein *Lennard-Jones-Potential* beschrieben,

$$V(r) = 4\varepsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right), \quad (5.12)$$

wobei  $\varepsilon = 1.411 \times 10^{-15}$  erg und  $\sigma = 2.556 \times 10^{-10}$  m. Es beschreibt eine starke Abstoßung bei sehr kleinen Abständen, und eine anziehende Komponente.

In jüngsten Jahren hat vor allem die *Bose-Einstein-Kondensation* viel Beachtung gefunden in experimentellen und theoretischen Arbeiten, beginnend mit dem gelungenen Nachweis von Bose-Einstein-Kondensation von etwa 2000  $^{87}\text{Rb}$ -Atomen [7], gefolgt von einem Experiment mit 100000 Atomen der Spezies  $^7\text{Li}$  [8] und mehreren Millionen  $^{23}\text{Na}$  Natriumatomen [9]. Heute ist das Feld der ultrakalten Quantengase eines der sich am schnellsten entwickelnden Gebieten der Physik, mit vielen Anwendungen. Wir werden uns später insbesondere auch der Idee widmen, stark korrelierte Gittersysteme zu simulieren mit Hilfe von kalten Bosonen in optischen Gittern. Im folgenden wollen wir uns aber erst der Situation ohne Gitter zuwenden, in Form der Bogoliubov-Theorie des schwach wechselwirkenden Bosegases.

### 5.2.2 Bogoliubov-Theorie des schwach wechselwirkenden Bosegases

Im Impulsraum können wir den Hamiltonoperator von wechselwirkenden Bosonen schreiben als

$$H = \sum_k \frac{k^2}{2M} b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2V} \sum_{k,p,q} V_q b_{k+q}^\dagger b_{p-q}^\dagger b_p b_k. \quad (5.13)$$

Im folgenden werden wir einige Approximationen durchführen, die im Falle von stark verdünnten, schwach wechselwirkenden Bosegasen sehr plausibel sind und ein gutes Modell darstellen. Zunächst einmal ist  $V_q$  die Fouriertransformierte der Wechselwirkung im Ortsraum

$$V_q = \int dx e^{-iqx} V(x). \quad (5.14)$$

Bei niedrigen Temperaturen findet Bose-Einstein-Kondensation in der niedrigsten Mode zu  $k = 0$  statt. In Analogie zum idealen Bose-Gas sollte man erwarten, dass auch in Anwesenheit von schwachen Wechselwirkungen diese Mode makroskopisch besetzt ist, also

$$N_0 = \langle \psi_N | a_0^\dagger a_0 | \psi_N \rangle \sim N, \quad (5.15)$$

wobei  $|\psi_N\rangle$  der Zustandsvektor des Grundzustands des obigen Hamiltonoperators ist. Es ist nicht der Zustand, der gar keine Bosonen enthält, wir werden sogleich weiter auf ihn eingehen. Die Anzahl der Teilchen, die nicht in der  $k = 0$ -Mode sind, außerhalb des Kondensats, ist also

$$N - N_0 \ll N_0 \sim N. \quad (5.16)$$

Also können wir jede Wechselwirkung von Teilchen außerhalb der  $k = 0$ -Mode getrost vernachlässigen und uns auf die Wechselwirkung von Teilchen innerhalb der  $k = 0$ -Mode und außerhalb von ihr konzentrieren. Unter diesen – in der Tat sehr schwachen – Annahmen haben wir schon etwas gewonnen und können den Hamiltonoperator in der

folgenden Form schreiben

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_k \frac{k^2}{2M} b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2V} V_0 b_0^\dagger b_0^\dagger b_0 b_0 + \frac{1}{V} \sum'_k (V_0 + V_k) b_0^\dagger b_0 b_k^\dagger b_k \\
 &+ \frac{1}{2V} \sum'_k V_k \left( b_k^\dagger b_{-k}^\dagger b_0 b_0 + b_0^\dagger b_0^\dagger b_k b_{-k} \right), \quad (5.17)
 \end{aligned}$$

in einer Form, in der wir Terme, die Polynome höheren als dritten Grades in  $b_k$  enthalten, vernachlässigt haben. Das Symbol  $\sum'_k$  heißt wieder, dass der Term  $k = 0$  in dieser Summe nicht enthalten ist. Natürlich gilt

$$b_0 |N_0, \dots\rangle = \sqrt{N_0} |N_0 - 1, \dots\rangle, \quad (5.18)$$

$$b_0^\dagger |N_0, \dots\rangle = \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1, \dots\rangle. \quad (5.19)$$

Nun sind die folgenden Approximationen plausibel:

- Da  $N_0$  eine so große Zahl ist,  $N_0 \sim 10^{23}$ , entsprechen beide Ausdrücke im wesentlichen der Multiplikation mit  $\sqrt{N_0}$ .
- Außerdem ist im Vergleich mit  $N_0$  der Effekt des Kommutators  $[b_0, b_0^\dagger] = 1$  vernachlässigbar, und es können also die Operatoren

$$b_0 = b_0^\dagger = \sqrt{N_0} \in \mathbb{R} \quad (5.20)$$

durch eine reelle Zahl ersetzt werden.

In dieser Approximation wird der Hamiltonoperator zu

$$\begin{aligned}
 H &= \sum'_k \frac{k^2}{2M} b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2V} N_0^2 V_0 \\
 &+ \frac{N_0}{V} \sum'_k \left( (V_0 + V_k) b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} V_k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) \right). \quad (5.21)
 \end{aligned}$$

Bisher kennen wir den genauen Wert von  $N_0$  nicht, abgesehen davon, dass wir bereits einige Annahmen über ihn gemacht haben. Er ist bestimmt durch die Dichte  $N/V$  und durch die Wechselwirkung. Wir können  $N_0$  ausdrücken durch die Zahl  $N$  und die Zahl von Teilchen in anderen Moden,

$$N = N_0 + \sum'_k b_k^\dagger b_k. \quad (5.22)$$

Das heißt, durch bloßes Ausmultiplizieren erhalten wir Ausdrücke wie

$$\begin{aligned}
 \frac{V_0}{2V} N_0^2 &= \frac{V_0}{2V} N^2 - \frac{N V_0}{V} \sum'_k b_k^\dagger b_k \\
 &+ \frac{V_0}{2V} \sum_{k,k'} b_k^\dagger b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}. \quad (5.23)
 \end{aligned}$$

So wird der Hamiltonoperator also zu

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_k' \frac{k^2}{2M} b_k^\dagger b_k + \frac{N}{V} \sum_k' V_k b_k^\dagger b_k \\
 &+ \frac{N^2}{2V} V_0 \\
 &+ \frac{N}{2V} \sum_k' V_k \left( b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k} \right) + H', \tag{5.24}
 \end{aligned}$$

wobei

- $H'$  nun wieder ein Hamiltonoperator ist, der Terme mit mehr als vier Erzeugern oder Vernichtern enthält. Solche Terme sind aber linear in  $(n')^2$ , wobei ja  $n' = (N - N_0)/V$  gerade die Dichte der Teilchen nicht im Kondensat ist.

Die Bogoliobov-Theorie besteht gerade in diesem Approximationsschema, das diese drei Näherungsschritte erlaubt. In der Situation, in der  $n' \ll N/V$  gilt, ist dies eine sehr gute Approximation. In der Tat ist für schwach wechselwirkende, verdünnte Bose-gase dies eine ganz hervorragende Näherung, wie wir gleich noch genauer sehen werden.

Da wir nun  $H'$  vernachlässigt haben, haben wir einen quadratischen Ausdruck in den bosonischen Operatoren im Hamiltonoperator. Solche Systeme heißen *“freie Systeme”* oder auch *“quasifreie Systeme”*, letzteres vor allem in der mathematischen Literatur. Solche Systeme, deren Hamiltonian ein Polynom zweiten Grades in bosonischen (oder auch fermionischen) Operatoren ist, ist exakt lösbar: In der Tat stellen solche Systeme viele der wenigen bekannten analytisch lösbaren Systeme. Etwas böse gesagt werden oft so lange Approximationsschritte durchgeführt, bis man auf ein freies System geführt ist, das man dann exakt lösen kann. Wir werden zunächst auf unser konkretes Modell eingehen, dann etwas allgemeiner die Situation ansehen. Wir wollen die folgende Transformation vornehmen:

$$b_k = u_k a_k + v_k a_{-k}^\dagger, \tag{5.25}$$

$$b_k^\dagger = u_k a_k^\dagger + v_k a_{-k}, \tag{5.26}$$

$u_k, v_k \in \mathbb{R}$  von einem Satz von bosonischen Operatoren  $\{b_k\}$  zu einem neuen  $\{a_k\}$ . Die neuen Operatoren sollen auch die bekannten bosonischen Operatoren erfüllen

$$[a_k, a_{k'}] = 0, \tag{5.27}$$

$$[a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0, \tag{5.28}$$

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}, \tag{5.29}$$

was natürlich nichts anderes ist als<sup>1</sup>

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad (5.32)$$

für alle  $k$ . Die inverse Transformation ist dann gerade durch

$$a_k = u_k b_k - v_k b_{-k}^\dagger \quad (5.33)$$

definiert, wie man leicht findet. Eine solche Transformation ist eine Instanz einer *symplektischen Transformation*, die wir uns später allgemein ansehen werden: Dies sind lineare Transformationen von einem Satz von bosonischen Operatoren, die die Kommutationsrelationen erfüllen, zu einem neuen Satz von bosonischen Operatoren. Mit Hilfe des Rechentricks

$$b_k^\dagger b_k = u_k^2 a_k^\dagger a_k + v_k^2 a_{-k} a_{-k}^\dagger + u_k v_k (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_{-k}), \quad (5.34)$$

$$b_k^\dagger b_{-k}^\dagger = u_k^2 a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + v_k^2 a_k a_{-k} + u_k v_k (a_k^\dagger a_k + a_{-k} a_{-k}^\dagger), \quad (5.35)$$

$$b_k b_{-k} = u_k^2 a_k a_{-k} + v_k^2 a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + u_k v_k (a_{-k}^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_k^\dagger), \quad (5.36)$$

ist der Hamiltonoperator in diesen Koordinaten also

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2V} N^2 V_0 \quad (5.37) \\ &+ \sum_k' \left( \frac{k^2}{2M} + \frac{N}{V} V_k \right) \left( u_k^2 a_k^\dagger a_k + v_k^2 a_k a_k^\dagger + u_k v_k (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_{-k}) \right) \\ &+ \frac{N}{2V} \sum_k' V_k \left( (u_k^2 + v_k^2) (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_{-k}) + 2u_k v_k (a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger) \right) \end{aligned}$$

Wir haben immer noch die Freiheit in der Wahl der Koordinaten, die nichtdiagonalen Terme verschwinden zu lassen. Dies meint, dass

$$\left( \frac{k^2}{2M} + \frac{N}{V} V_k \right) u_k v_k + \frac{N}{2V} V_k (u_k^2 + v_k^2) = 0. \quad (5.38)$$

Zusammen mit  $u_k^2 - v_k^2 = 1$  für alle  $k$  haben wir also ein System von Gleichungen in  $\{u_k\}$  und  $\{v_k\}$ , was uns erlaubt, die Koeffizienten  $\{u_k\}$  und  $\{v_k\}$  zu bestimmen. Es ist hilfreich, die folgenden Größen einzuführen,

$$\begin{aligned} \omega_k &= \left( \left( \frac{k^2}{2M} + \frac{N}{V} V_k \right)^2 - (NV_k/V)^2 \right)^{1/2} \\ &= \left( \left( \frac{k^2}{2M} \right)^2 + \frac{Nk^2 V_k}{VM} \right)^{1/2}. \quad (5.39) \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Der Beweis ist trivial:

$$[a_k, a_{k'}] = u_k v_{k'} \delta_{k, -k'} + v_k u_{k'} (-\delta_{k, -k'}) = 0, \quad (5.30)$$

und ebenso

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = u_k u_{k'} \delta_{k, k'} + v_k v_{k'} (-\delta_{k, k'}) = (u_k^2 - v_k^2) \delta_{k, k'}. \quad (5.31)$$

So ergeben sich die Koeffizienten  $\{u_k\}$  und  $\{v_k\}$  zu

$$u_k^2 = \frac{\omega_k + \left(\frac{k^2}{2M} + \frac{N}{V}V_k\right)}{2\omega_k}, \quad (5.40)$$

$$v_k^2 = \frac{-\omega_k + \left(\frac{k^2}{2M} + \frac{N}{V}V_k\right)}{2\omega_k}, \quad (5.41)$$

$$u_k v_k = -\frac{NV_k}{2V\omega_k}. \quad (5.42)$$

Dies liefert schließlich für den Hamiltonoperator den folgenden Ausdruck:

**Hamiltonoperator des schwach wechselwirkenden Bosegases in der Bogoliubov-Näherung:**

$$H = \frac{N^2}{2V}V_0 - \frac{1}{2} \sum'_k \left( \frac{k^2}{2M} + \frac{N}{V}V_k - \omega_k \right) + \sum'_k \omega_k a_k^\dagger a_k. \quad (5.43)$$



## **Kapitel 6**

# **Superfluide und Supraleiter**











## **6.1 Superfluidität**









## **6.2 Supraleiter**









**6.2.1 Phänomenologie**





**6.2.2 BCS-Theorie**





## **Kapitel 7**

# **Stark korrelierte Systeme**

### **7.1 Gittermodelle und Spinketten**









## **7.2 Matrixproduktzustände**





### **7.3 Dichtematrix-Renormierung**





## **7.4 Quanten-Monte-Carlo**

















## **Kapitel 8**

# **Greensfunktionen und Feynman-Diagramme**

### **8.1 Greensfunktionen**

### **8.2 Feynman-Diagramme**























## **Kapitel 9**

# **Streutheorie**

























## **9.1 Elementare Streutheorie**

## **9.2 Møller-Operatoren**



## **Kapitel 10**

# **Bellsche Ungleichungen**

### **10.1 CHSH-Ungleichung**

### **10.2 Quantenmechanik und der absolute Zufall**













# **Kapitel 11**

# **Ausblick**



## **Kapitel 12**

## **Index**

# Index

- Antikommutationsrelationen, 32
- Anzahloperator, 25, 31
- Atom, 58
- Atomkern, 58
- Ausschlußprinzip, 20
- Austauschentartung, 18
- Austauschloch, 41
- Austauschoperator, 17
  
- Besetzungszahlen, 22
- Bohr-Radius, 45
- Boltzmann-Konstante, 23
- Bose-Einstein-Statistik, 23
- Boson, 20, 22
- Bosonische Algebra, 26
- Bra, 7
  
- Coulombwechselwirkung, 41
  
- Diagonalisieren, 8
- Dichteoperator, 10, 11
- Dualvektor, 7
  
- Elektron, 20
- Erzeugungsoperator, 25, 31
  
- Feldoperator, 27
- Fermi-Dirac-Statistik, 23
- Fermienergie, 37
- Fermikante, 37
- Fermion, 20, 22
- Fockraum, 24
- Fraktionierte Statistik, 20
  
- Gemischte Zustände, 10
- Gesamteilchenzahloperator, 25
- Grundzustand, 37
  
- Hamiltonoperator, 14
- Hartree-Fock-Beschreibung, 47
- Heisenbergbild, 14
- Heisenbergsches Unschärfeprinzip, 15
- Hilbertraum, 6
  
- Identische Teilchen, 17
- Ionen, 42
  
- Ket, 7
- Kommutationsrelationen, 26
- Korrelationsfunktion, 38
  
- Lagrange-Multiplikator, 23
- Loch, 38
  
- Majorana-Fermionen, 32
- Matrizelement, 7
  
- Nukleon, 20
  
- Ordnung von Fermionen, 32
  
- Paarverteilungsfunktion, 40
- Parität der Fermionenanzahl, 32
- Paulioperatoren, 9
- Periodische Randbedingungen, 35
- Permutationsgruppe, 17
- Phonon, 20
- Photon, 20
  
- Relative Häufigkeiten, 8
  
- Schrödingerbild, 14
- Skalarprodukt, 7
- Slater-Determinante, 22
- Spin-Statistik-Theorem, 20
- Spur, 9



Stern-Gerlach-Programm, 9  
Superauswahlregel, 32  
Superluminale Kommunikation, 32  
Symmetrieprinzip, 20

Tensorprodukt, 13

Vakuumzustand, 24  
Vernichtungsoperator, 24, 31

Wellenfunktion, 7  
Weyloperatoren, 27

Zustand, 11  
Zweite Quantisierung, 30



# Kapitel 13

## Notizen

Um den Hamiltonoperator in seiner Form in zweiter Quantisierung schreiben zu können, brauchen wir die Matrixelemente der Operatoren, die er enthält. Die kinetische Energie ist bereits diagonal im Impulsraum, und ergibt sich zu

$$\delta_{p,p'} p^2 \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (13.1)$$

Das Matrixelement für das Einteilchenpotential wiederum ergibt sich

$$\int dx \psi_{p',\sigma'}^*(x) U(x) \psi_{p,\sigma}(x) = \frac{1}{V} U_{p'-p} \delta_{\sigma,\sigma'}. \quad (13.2)$$

Der Anzahldichteoperator wird nun

$$\sum_{\sigma} \Psi^{\dagger}(x, \sigma) \Psi(x, \sigma). \quad (13.3)$$

Der Hamiltonoperator 1.6.14A

Wir wollen unsere fermionischen Betrachtungen vorläufig abschließen, indem wir noch einmal kurz auf ein anderes wichtiges Fermiproblem sehen: Das der *Elektronen in Atomen*. Wir haben also ein System mit  $N$  Elektronen die einen *Kern* mit Ladung  $Z$  umkreisen. Der Kern ist als fest angenommen, uns interessiert hier nur die Dynamik der Elektronen. Die Koordinaten sind nun wieder  $\xi = (x, \sigma)$ , also der Ort und eine Spinkomponente. In zweitquantisierter Form finden wir den Hamiltonoperator von der Form

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{j,k} \langle i|T|j \rangle f_j^\dagger f_k + \sum_{j,k} \langle i|U|j \rangle a_j^\dagger a_k \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle (i,j)|V|(k,l) \rangle f_j^\dagger f_i^\dagger f_l f_k,
 \end{aligned} \tag{13.4}$$

wobei

$$T = \frac{p^2}{2M}, \tag{13.5}$$

$$U = -\frac{Ze^2}{r}, \quad r = |x|, \tag{13.6}$$

$$\tag{13.7}$$

und

$$V = \frac{e^2}{|x - x'|}, \tag{13.8}$$

Diese Terme beschreiben die kinetische Energie der Elektronen, das Potential, das die Elektronen durch den Kern spüren und die Coulombabstoßung zwischen den Elektronen. Der Zustandsvektor von  $N$  Elektronen ist

$$|\psi_N\rangle = f_1^\dagger \dots f_N^\dagger |\emptyset\rangle. \tag{13.9}$$

Die Indizes stehen hier wiederum für