• ZWEITE QUANTISIERUNG

* In Quantenmechanik I waren wir an der Physik eines Teilchens interessiert. Im allgemeinen ist man aber interessiert an der Physik mehrerer Teilchen. Die Beschreibung mehrerer Teilchen wird am besten mit Hilfe der 2. Quantisierung gemacht. Wir werden in dieser ~~Vorlesung~~ Vorlesung dieses Formalismus einführen.
* Wir sind besonders an dem Fall identischer Teilchen interessiert. Wir werden also erstmals über identische Teilchen diskutieren und im Rahmen dieser Diskussion werden wir die Idee von 2. Quantisierung einführen.

* IDENTISCHE TEILCHEN

* Identische Teilchen sind Teilchen, die unter gleichen Bedingungen durch keine Messung voneinander unterschieden werden können. Die Vertauschung von identischen Teilchen hat also keine beobachtbaren Konsequenzen.
* Die Idee von Teilchenvertauschung ist ziemlich wichtig, und daher werden wir sie ein bisschen näher untersuchen.
* Nehmen wir ein N-Teilchen-System. Die Wellenfunktion des Systems ist also der Form: ($|i_\alpha\rangle$ sind Einteilchen Zustände)

$$\psi = \psi(i_1, i_2, \dots, i_N)$$

wobei i_α die Freiheitsgrade (Quantenzahlen) des α^{ten}-Teilchens darstellt.
Der Transpositionsoperator $P_{\alpha\beta}$ vertauscht die Quantenzahlen der Teilchen α und β:

$$P_{\alpha\beta}\,\psi(i_1, \dots i_\alpha, \dots, i_\beta, \dots i_N) = \psi(i_1 \dots i_\beta, \dots, i_\alpha, \dots i_N)$$

* Alle Permutationen P der N-Teilchen (und es gibt $N!$ davon) können als Produkt von Transpositionen dargestellt werden.

③

* Da die Vertauschung identischer Teilchen keine beobachtbaren Konsequenzen hat, müssen alle physikalische Observablen $\hat{O}$

$$\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \langle P\psi|\hat{O}|P\psi\rangle \quad \text{(für alle Permutationen } P\text{)}$$

erfüllen (wo wir nun die Dirac'sche Braket-Schreibweise benutzt haben).

Da oben $\left.\begin{array}{l} |P\psi\rangle \equiv P|\psi\rangle \\ \langle P\psi| \equiv \langle\psi|P^+ \end{array}\right\}$ also $\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \langle\psi|P^+\hat{O}P|\psi\rangle$

und zwar für alle beliebige $|\psi\rangle$. Daher $\hat{O} = P^+\hat{O}P$, und damit $P\hat{O} = PP^+\hat{O}P$

Aber, es ist klar, dass $P_{\alpha\beta}\cdot P_{\alpha\beta} = \mathbb{1}$ für alle Transpositionen,

und damit $PP^+ = \mathbb{1}$

(Bemerkung: $PP^+ = (P_{\alpha\beta}P_{\gamma\delta}\cdots \underbrace{P_{\eta\lambda})\cdot(P_{\eta\lambda}}_{\mathbb{1}}\cdots P_{\gamma\delta}P_{\alpha\beta}) = \mathbb{1}$)

* Dann $P\hat{O} = \hat{O}P \longrightarrow \boxed{[P,\hat{O}] = \mathbb{1}}$

* Das bedeutet, dass alle physikalische Observablen symmetrisch sein müssen. Das betrifft auch den Hamilton-Operator, d.h. $[\hat{P},\hat{H}] = \mathbb{1}$, und damit ist die Symmetrie der Zustände eine Bewegungskonstante.

* Da $P_{\alpha\beta}P_{\alpha\beta} = \mathbb{1}$, d.h. dass $P_{\alpha\beta}|\psi\rangle = e^{i\lambda}|\psi\rangle$ wobei λ eine Phase ist. Es erweist sich experimentell, dass es in der Natur zwei Sorten von Teilchen gibt

  * Bosonen: $\lambda = 0 \rightarrow P_{\alpha\beta}|\psi\rangle = |\psi\rangle \rightarrow$ vollkommen symmetrische Zustände
(mit ganzzahligen Spin)
  * Fermionen: $\lambda = \pi \rightarrow P_{\alpha\beta}|\psi\rangle = -|\psi\rangle \rightarrow$ vollkommen antisymmetrische Zustände
(mit halbzahligen Spin)

(Bemerkung: im Prinzip λ kann auch andere Werte annehmen. Teilchen die $\lambda \neq 0,\pi$ aufweisen werden Anyonen genannt, und die spielen eine wichtige Rolle in mehreren Problemen, u.a. in der sogen. Fraktionale Quanten-Hall-Effekt.)

* Ihr kennt sicher schon vieles über Bosonen und Fermionen aus der Quantenstatistischephysik. ④

* Für die Konstruktion von vollkommen (anti-)symmetrische Zuständen führen wir nun die Idee von <u>(anti-) Symmetrisierungsoperator</u>:

$$S_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (\pm 1)^{|P|} P$$ (Summe über alle Permutationen der N Teilchen)

(<u>Bemerkung</u>: $(-1)^{|P|} = 1\ (-1)$ wenn die Permutation gerade (ungerade) ist. Eine Permutation ist gerade (ungerade), wenn die als Produkt einer geraden (ungeraden) Zahl von Transpositionen gebaut wird.)

* Die symmetrisierten und antisymmetrisierten Basis-Zustände sind dann durch:

$$S_\pm |i_1, \dots, i_N\rangle$$

definiert.

· Zum Beispiel, für 2 Teilchen ($N=2$):

$$S_+ |i_1, i_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|i_1, i_2\rangle + |i_2, i_1\rangle \right)$$

$$S_- |i_1, i_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|i_1, i_2\rangle - |i_2, i_1\rangle \right)$$

* Falls in $|i_1, \dots, i_N\rangle$ Einteilchenzustände mehrfach auftretten, ist $S_+ |i_1, \dots, i_N\rangle$ nicht auf 1 normiert, und wir müssen uns die richtigen <u>Normierung</u> untersuchen. Nehmen wir an, der 1. Zustand tritt n_1 mal auf, der zweite n_2, usw. Diese sog. <u>Besetzungszahlen</u> werden später eine sehr wichtige Rolle spielen.

Da $S_+ |i_1, \dots i_N\rangle$ $N!$ Terme enthält und dabei $\frac{N!}{n_1! n_2! \dots}$ verschiedene Terme, kommt jeder dieser Terme mit der Vielfachheit $n_1! n_2! \dots$ vor.

$$\langle i_1,\dots i_N|S_+^\dagger S_+|i_1\dots i_N\rangle = \frac{1}{N!}\left(\sum_{P'} P'\langle i_1\dots i_N|\right)\left(\sum_P P|i_1,\dots i_N\rangle\right)$$

$$= \langle i_1\dots i_N|\left[\sum_P P|i_1\dots i_N\rangle\right] = \sum_P \underbrace{\langle i_1|i_{P(1)}\rangle}_{\downarrow} \langle i_2|i_{P(2)}\rangle\dots\langle i_N|i_{P(N)}\rangle$$

$\delta_{i_1,i_{P(1)}}$ wegen Orthonormalität der Einteilchenfunktionen

$= n_1!\,n_2!\dots$

* Daher ist die richtige Normierung für Bosonen:

$$|n_1,n_2,\dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!\,n_2!\dots}}\,S_+|i_1,\dots,i_N\rangle$$

* Wir werden nun Bosonen und Fermionen ~~ge~~getrennt untersuchen. Wir werden dabei die Ideen um 2. Quantisierung untersuchen.

---

* BOSONEN

* Wie wir daoben gesehen haben, ist der Zustand durch Angabe der Besetzungszahlen der Einteilchenzustände vollkommen charakterisiert. Natürlich muß die Summe aller Besetzungszahlen n_i gleich der Gesamt-Teilchenzahl sein

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$$

Abgesehen davon können die n_i beliebige Werten $0,1,2,\dots$ annehmen. Die Zustände $|n_1 n_2,\dots\rangle$ bilden ein vollständiges System von vollkommen symmetrischen N-Teilchen Zustände

* Die $|n_1 n_2 n_3\dots\rangle$ Zustände sind orthonormal:

$$\langle n_1 n_2\dots|n_1' n_2'\dots\rangle = \delta_{n_1 n_1'}\,\delta_{n_2 n_2'}\dots$$

und vollständig:

$$\sum_{n_1,n_2\dots} |n_1,n_2\dots\rangle\langle n_1,n_2\dots| = \mathbb{1}$$

* Dieser erweiterte Raum ist die direkte Summe aus dem Raum ohne Teilchen (Vakuumzustand $\equiv |0\rangle$), dem Raum mit einem Teilchen ($|1\rangle$), dem Raum mit zwei Teilchen ($|2\rangle$), usw. Er heißt FOCK-RAUM

* Und nun aufpassen, weil hier die Idee von 2. Quantisierung auftaucht. Wir definieren nun Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die vom Zustandsraum von N Teilchen in den Zustandsraum von $N \pm 1$ Teilchen führen. (wir folgen hier dieselbe Ideen wie für z.B. einen harmonischen Oszillator in QM-I):

$$\boxed{\begin{aligned} a_i^+ |\ldots n_i \ldots\rangle &= \sqrt{n_i+1}\; |\ldots, n_i+1, \ldots\rangle \\ a_i |\ldots, n_i \ldots\rangle &= \sqrt{n_i}\; |\ldots, n_i-1, \ldots\rangle \end{aligned}}$$

Erzeugung eines Teilchens in der Mode i

Vernichtung eines Teilchens in der Mode i

* Diese Operatoren erfüllen die sogen. Bose-Vertauschungsrelationen

$$\boxed{\begin{aligned} [a_i, a_j] &= 0 \\ [a_i^+, a_j^+] &= 0 \\ [a_i, a_j^+] &= \delta_{ij} \end{aligned}}$$

Diese Relationen sind ganz einfach zu beweisen, z.B:

$$a_i a_j^+ |\ldots, n_i, \ldots, n_j \ldots\rangle \underset{i \neq j}{=} \sqrt{n_i}\sqrt{n_j+1}\; |\ldots n_i-1, \ldots, n_j+1\rangle = a_j^+ a_i |\ldots n_i, \ldots, n_j \ldots\rangle$$

$$(a_i a_i^+ - a_i^+ a_i) |\ldots n_i \ldots\rangle = \left[\sqrt{(n_i+1)(n_i+1)} - \sqrt{n_i n_i}\right] |\ldots n_i \ldots\rangle = 1\, |n_i\rangle$$

und ähnlich für die andere Relationen.

* Aus der Definition ist es ganz einfach zu sehen, daß:

$$|n_1, n_2 \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \ldots}} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \ldots |0\rangle$$

* Ganz klar, $a_i^+ a_i |\ldots n_i \ldots\rangle = n_i |\ldots n_i \ldots\rangle$, und damit können wir den Teilchenzahloperator für den Zustand i einführen

$$\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$$

Und genauso können wir den Operator der Gesamt-Teilchenzahl einführen: $\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i$

* Wir wollen nun allgemeine Operatoren als Funktion der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren darstellen.

* Wir betrachten zunächst Einteilchen-Operatoren, d.h. Operatoren, die sich als Summe von Operatoren der Einteilchen-Hilberträume ergeben. Sie haben also die generische Form:

$$T = t_1 + t_2 + \dots + t_N \equiv \sum_\alpha t_\alpha$$

Das ist der Fall der kinetischen Energie $\left(t_\alpha = \frac{p_\alpha^2}{2m}\right)$ oder die Potentialenergie $(t_\alpha = V(\vec{x}_\alpha))$

Die Operatoren t können in der Basis $\{|i\rangle\}$ in der Form

$$t = \sum_{i,j} t_{ij} |i\rangle\langle j|$$

geschrieben werden, wobei $t_{ij} = \langle i|t|j\rangle$. Damit, haben wir daß:

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

Nehmen wir ein Paar i,j von Zuständen heraus:

$$\left[\sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha\right] |n_1, n_2, \dots n_i, \dots, n_j \dots\rangle$$

$$= \left[\sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha\right] S_+ |i_1, \dots i_N\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} =$$

S_+ kommutiert mit allen symmetrischen Operatoren

$$= S_+ \sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha |i_1, \dots i_N\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} =$$

Falls der Zustand j n_j-fach besetzt ist, ergeben sich n_j Terme, in denen $|j\rangle$ durch $|i\rangle$ ersetzt wird. S_+ führt also zu n_j Zustände $|\dots n_i+1 \dots n_j-1 \dots\rangle$ wobei die Änderung der Normierung zu beachten ist!

$$= n_j \underbrace{\frac{\sqrt{n_i+1}}{\sqrt{n_j}}} |\ldots, n_i+1, \ldots n_j-1 \ldots\rangle =$$

↳ das kommt aus der Änderung der Normierung

$$= \sqrt{n_j}\,\sqrt{n_i+1}\,|\ldots n_i+1,\ldots, n_j-1,\ldots\rangle = a_i^{+} a_j\, |\ldots n_i \ldots n_j \ldots\rangle$$

* Wenn $i=j$, gibt es keine Änderung der Normierung und man kriegt $n_i|\ldots n_i\ldots\rangle = a_i^{+} a_i |\ldots n_i \ldots\rangle$

* Daher: $\sum_\alpha |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha = a_i^{+} a_j$

und damit

$$\boxed{T = \sum_{i,j} t_{ij}\, a_i^{+} a_j} \qquad t_{ij} = \langle i|t|j\rangle$$

* Suchen wir nun Zweiteilchen-Operatoren. Die beschreiben Wechselwirkungen zwischen je zwei Teilchen (z.B. Coulomb-Wechselwirkung), und die sind im allgemeinen der Form

$$F = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} f_{\alpha\beta}$$

(z.B. für die Coulomb-Wechselwirkung $f_{\alpha\beta} = e^2/|x_\alpha - x_\beta|$)

Wir werden nun vier vollständige Summe wie $\sum_i |i\rangle_\alpha \langle i|_\alpha$ einführen

$$F = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\ \sum_{i,j,k,m} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \underbrace{\langle i_\alpha, j_\beta| f |k_\alpha, m_\beta\rangle}_{f_{ijkm}} \langle k|_\alpha \langle m|_\beta$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,m} f_{ijkm}\left[\sum_{\alpha\neq\beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle k|_\alpha \langle m|_\beta\right]$$

$$\hookrightarrow \sum_{\alpha,\beta} \underbrace{\Big[|i\rangle_\alpha \langle k|_\alpha\Big]\Big[|j\rangle_\beta \langle m|_\beta\Big]}_{\text{Produkt von 2 Einteilchen Operatoren}} - \sum_{\alpha=\beta} \underbrace{{}_\alpha\langle k|j\rangle_\alpha}_{\delta_{kj}}\ \underbrace{|i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha}_{\hookrightarrow\ \text{Einteilchen Operator}} \ =$$

aus unseren Kenntnis von Einteilchen Operatoren

(8)

$$= a_i^+ a_k a_j^+ a_m - \delta_{kj}\, a_i^+ a_m = a_i^+ (a_k a_j^+ - \delta_{kj}) a_m$$
$$= a_i^+ a_j^+ a_k a_m$$

Dann $\boxed{F = \frac{1}{2} \sum_{ijkm} \langle ij | f | km \rangle a_i^+ a_j^+ a_m a_k}$

die Ordnung ist hier unwichtig aber für Fermionen nicht, wie wir nun sehen werden!

---

* FERMIONEN

* Quellen wir nun was passiert für Fermionen.
Für Fermionen müssen wir die antisymmetrische Form $S_- |i_1 \dots i_N\rangle$ anwenden. Diese vollkommen antisymmetrisierte Form kann auch in der Form:

$$S_- |i_1 \dots i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |i_1\rangle_1 & |i_1\rangle_2 & \dots & |i_1\rangle_N \\ |i_2\rangle_1 & |i_2\rangle_2 & \dots & |i_2\rangle_N \\ \vdots & & & \\ |i_N\rangle_1 & |i_N\rangle_2 & \dots & |i_N\rangle_N \end{vmatrix}$$

Slater-Determinante

dargestellt werden.

* Aus der Antisymmetrie, wenn in der Funktion gleiche Einteilchen-Zustände vorkommen, ergibt sich Null. Das ist natürlich das Pauli-Prinzip: Zwei identische Fermionen dürfen sich nicht im gleichen Zustand befinden.

(* Bemerkung: deswegen gibt es kein Problem mit der Normierung um Fermionen (im Gegenteil zu Bosonen (S.⑤)), weil alle Besetzungen sind $n_i = 0$ oder 1).

* Wir charakterisieren die Zustände wieder durch Angabe der Besetzungszahlen $|n_1, n_2, n_3 \dots\rangle$, die auch eine orthonormale und komplette Basis des Fock-Raumes bauen

$\hookrightarrow$ nun $\sum_{n_1=0}^{1} \sum_{n_2=0}^{1} \dots |n_1, n_2 \dots\rangle \langle n_1, n_2 \dots| = \mathbb{1}$

* Wir wollen nun wieder Erzeugungsoperatoren einführen (a_i^+). Aber die können nicht wie die Bosonen sein, da $a_i^+ a_i^+$ muss Null ergeben (Keine Doppelbesetzung!). Ausserdem wegen der fermionischen Austauscheigenschaften muß die Reihenfolge der Anwendung der Erzeugungsoperatoren eine wichtige Rolle spielen!

Wir definieren die Erzeugungsoperatoren $\{a_i^+\}$ durch:

$$S_- |i_1, i_2 \dots i_N\rangle = a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ \dots a_{i_N}^+ |0\rangle$$

Da $S_- |i_2, i_1 \dots i_N\rangle = a_{i_2}^+ a_{i_1}^+ \dots a_{i_N}^+ |0\rangle$

$$= - S_- |i_1, i_2 \dots i_N\rangle$$

Antikommutator $\{a_i^+, a_j^+\} = a_i^+ a_j^+ + a_j^+ a_i^+$

Dann $a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ + a_{i_2}^+ a_{i_1}^+ = 0 \longrightarrow \boxed{\{a_i^+, a_j^+\} = 0}$

(und damit $a_i^{+2} = 0$)

* Wenn man die Zustände durch Besetzungszahlen charakterisiert, muß man sich auf eine bestimmte (willkürlich wählbare, aber dann beizubehalten, ~~vorsicht~~!) Anordnung der Zustände festlegen:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots |0\rangle \quad ; \; n_i = 0, 1$$

Dann:

$$\boxed{a_i^+ |n_1, n_2, \dots\rangle = (1-n_i) \underbrace{(-1)^{\sum_{j<i} n_j}} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle}$$

wenn $n_i = 0$
dann wird $n_i \Rightarrow 1$
aber wenn $n_i = 1$
dann Null

das kommt aus der Antikommutatoren $a_i^+ a_j^+ = - a_j^+ a_i^+$

* Es sollte klar sein, dass mit Fermionen zu arbeiten, einige Schwierigkeiten bereitet, eigentlich viel mehr als mit Bosonen.

* Die adjungierte Relation lautet:

$$\langle \dots n_i \dots | a_i^\dagger = (1-n_i)(-1)^{\sum_{j<i} n_i} \langle \dots n_i+1 \dots |$$

Dann

$$\langle n_i \dots | a_i | \dots n_i' \dots \rangle = (1-n_i)(-1)^{\sum_{j<i} n_i}\, \delta_{n_i+1,\, n_i'}$$

Dann:

$$a_i | \dots n_i' \dots \rangle = \sum_{n_i} |n_i\rangle \langle n_i | a_i | n_i' \rangle = \sum_{n_i} |n_i\rangle (1-n_i)(-1)^{\sum_{j<i} n_i}\, \delta_{n_i+1,\, n_i'}$$

$$= (2-n_i')(-1)^{\sum_{j<i} n_j} | \dots n_i'-1 \rangle\, n_i'$$

→ dan kommt hier weil $n_i'-1 \geq 0$

→ Wenn $n_i'=0$ dann $\delta_{n_i+1,n_i'}$ ergibt sicher Null

(Bemerkung: $(2-n)n = n$ für $n=0,1$)

Dann

$$\boxed{a_i|\dots n_i \dots\rangle = n_i (-1)^{\sum_{j<i} n_j} |\dots n_i - 1\rangle}$$

$$(1-n_i)(n_i+1) = 1-n_i^2 \overset{n_i=0,1}{=} 1-n_i$$

* Dann:

$$a_i a_i^+ |\dots n_i \dots\rangle = (1-n_i)\cancelto{1}{(-1)^{2\sum_{j<i} n_j}}(n_i+1)|\dots n_i \dots\rangle = (1-n_i)|\dots n_i\dots\rangle$$

$$a_i^+ a_i |\dots n_i \dots\rangle = n_i \cancelto{1}{(-1)^{2\sum_{j<i} n_j}}(1-n_i+1)|\dots n_i\dots\rangle = n_i|\dots n_i\dots\rangle$$

(und damit $\hat{n}_i = a_i^+ a_i$ hat hier auch die Bedeutung des Besetzungszahloperators für den Zustand $|i\rangle$)

Dann $(a_i a_i^+ + a_i^+ a_i)|n_i\dots\rangle = |\dots n_i \dots\rangle \longrightarrow \{a_i, a_i^+\} = 1$

* Wenn $i\neq j \Rightarrow \{a_i, a_j^+\} = 0$ weil:

$$a_i a_j^+ |\dots n_i \dots n_j \dots\rangle = (1-n_j)(-1)^{\sum_{k<j} n_k}\, n_i (-1)^{\sum_{k'<i} n_{k'}} |\dots n_i-1, \dots, n_j+1 \dots\rangle$$

$$a_j^+ a_i |\dots n_i \dots n_j\dots\rangle = n_i(-1)^{\sum_{k'<i} n_{k'}}(1-n_j)(-1)^{\sum_{k<j}(n_k-\delta_{ki})}|\dots n_i-1, \dots n_j+1\dots\rangle$$

$$= -a_i a_j^+ |n_i \dots n_j\dots\rangle$$

Dann $a_i a_j^+ + a_j^+ a_i = \{a_i, a_j^+\} = 0$

* Dann $\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij}$
* Damit haben wir die <u>Antikommutatorregeln für Fermionen:</u>

$$\boxed{\begin{aligned} \{a_i, a_j\} = \{a_i^+, a_j^+\} = 0 \\ \{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij} \end{aligned}}$$

* Man kann auch für Fermionen die Operatoren durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken. Die sehen genauso aus wie für Bosonen:

$$T = \sum_{i,j} t_{ij}\, a_i^+ a_j \leftarrow \text{Einteilchen-Operatoren}$$

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,m} \langle ij | f | k,m \rangle\, a_i^+ a_j^+ a_m a_k \leftarrow \text{2-Teilchen-Operatoren}$$

Nun ist die genaue Ordnung ganz wichtig!

* Besonders wichtig ist <u>die Form des Hamilton-Operators</u> eines Vielteilchensystems mit kinetischer Energie t, potentieller Energie U und einer Zweiteilchenwechselwirkung f:

$$\boxed{H = \sum_{i,j} (t_{ij} + U_{ij})\, a_i^+ a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkm} \langle ij | f | k,m \rangle\, a_i^+ a_j^+ a_m a_k}$$

Diese Form gilt für Bosonen und für Fermionen, aber für Bosonen (Fermionen) erfüllen die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die (Anti-)Kommutatorregeln.

* Wir benutzen hier eine gewisse Basis $\{|i\rangle\}$ von Einteilchen-Zustände. Wir werden nun sehen was passiert wenn wir diese Basis ändern. Wir werden besonders interessiert an der Basis der Ortseigenzustände $|\vec{x}\rangle$.

* FELDOPERATOREN

* Nehmen wir zwei Basis-Systeme $\{|i\rangle\}$ und $\{|\lambda\rangle\}$ von Einteilchen Zustände. Wir sind an der Beziehung zwischen die entsprechenden Operatoren a_i und a_λ interessiert.

* Wir können die Zustände $|\lambda\rangle$ in der $\{|i\rangle\}$-Basis darstellen

$$|\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\lambda\rangle$$

Der Operator a_i^+ erzeugt ein Teilchen im Zustand $|i\rangle$.

Dann $\sum_i \langle i|\lambda\rangle a_i^+$ erzeugt ein Teilchen im Zustand $|\lambda\rangle$

Daher: $$a_\lambda^+ = \sum_i \langle i|\lambda\rangle a_i^+$$

und $$a_\lambda = \sum_i \langle\lambda|i\rangle a_i$$

* Die Ortszustände $|\vec{x}\rangle$ stellen einen wichtigen Spezialfall dar:

$\langle\vec{x}|i\rangle = \varphi_i(\vec{x}) \longrightarrow$ Einteilchenwellenfunktion in der Ortsdarstellung

Für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die den Ortseigenzuständen entsprechen, führen wir die sog. <u>Feldoperatoren</u> ein

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{\psi}(\vec{x}) &= \sum_i \varphi_i(\vec{x})\, a_i \\ \hat{\psi}^+(\vec{x}) &= \sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\, a_i^+\end{aligned}}$$

Die erzeugen (vernichten) ein Teilchen an der Stelle $\vec{x}$.

* Die Feldoperatoren erfüllen die <u>bosonische Kommutatorregeln</u> oder die <u>fermionische Antikommutatorregeln</u>

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

$$[\hat{\psi}(\vec{x}), \hat{\psi}^+(\vec{x}')]_\pm = \sum_{ij} \varphi_i(\vec{x})\, \varphi_j(\vec{x}')\, \underbrace{[a_i, a_j^+]_\pm}_{\delta_{ij}} \overset{\text{Normierung}}{=} \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')$$

wobei wir die Schreibweise $[\cdot\cdot]_+ = [\cdot\cdot]$, $[\cdots]_- = \{\cdots\}$ anwenden.

* Wir können nun Operatoren als Funktion der Feldoperatoren ausdrücken:

* Kinetische Energie

$$\sum_{ij} a_i^+ t_{ij} a_j = \sum_{ij} a_i^+ \underbrace{\left[\int d^3x\, \varphi_i^*(\vec{x}) \left(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m}\right) \varphi_j(\vec{x})\right]}_{t_{ij}} a_j$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x \left[\sum_i a_i^+ \varphi_i^*(\vec{x})\right](-\nabla^2)\left[\sum_j \varphi_j(\vec{x}) a_j\right]$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\int d^3x\, \hat{\psi}^+(\vec{x})\,\nabla^2\hat{\psi}(\vec{x}) =$$

partielle Integration

$$-\int d^3x\, \hat{\psi}^+(\vec{x})\nabla^2\hat{\psi}(\vec{x}) = \int d^3x\, \vec{\nabla}\hat{\psi}^+(\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\hat{\psi}(\vec{x}) - \underbrace{\cancel{\int d^3x\, \vec{\nabla}\cdot[\hat{\psi}^+(\vec{x})\vec{\nabla}\hat{\psi}(\vec{x})]}}_{\text{geht zu Null wenn } \psi(\vec{x}) \text{ in } \infty \text{ abfällt.}}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\, \vec{\nabla}\hat{\psi}^+(\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\hat{\psi}(\vec{x})$$

* Einteilchen-Potential:

$$\sum_{ij} a_i^+ U_{ij} a_j = \sum_{ij} a_i^+ \left[\int d^3x\, \varphi_i^*(\vec{x})\, U(\vec{x})\, \varphi_j(\vec{x})\right] a_j$$

$$= \int d^3x\, \hat{\psi}^+(\vec{x})\, U(\vec{x})\, \hat{\psi}(\vec{x})$$

* Zweiteilchenpotential:

$$\frac{1}{2}\sum_{ijkm} a_i^+ a_j^+ f_{ijkm}\, a_m a_k = \frac{1}{2}\sum_{ijkm} a_i^+ a_j^+ \left[\int d^3x \int d^3x'\, \varphi_i^*(\vec{x})\varphi_j^*(\vec{x}')\, V(\vec{x}-\vec{x}')\, \varphi_k(\vec{x})\varphi_m(\vec{x}')\right] a_m a_k$$

$$= \frac{1}{2}\int d^3x \int d^3x'\, \hat{\psi}^+(\vec{x})\hat{\psi}^+(\vec{x}')\, V(\vec{x}-\vec{x}')\, \hat{\psi}(\vec{x}')\hat{\psi}(\vec{x})$$

* Und dann, der Hamilton-Operator sieht so aus:

$$\boxed{\begin{aligned} H = \int d^3x \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\hat{\psi}^+(\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\hat{\psi}(\vec{x}) + U(\vec{x})\,\hat{\psi}^+(\vec{x})\,\hat{\psi}(\vec{x})\right\} \\ + \frac{1}{2}\int d^3x \int d^3x'\, \hat{\psi}^+(\vec{x})\hat{\psi}^+(\vec{x}')\, V(\vec{x}-\vec{x}')\,\hat{\psi}(\vec{x}')\hat{\psi}(\vec{x}) \end{aligned}}$$

* Auch wichtig ist der Operator der Teilchendichte:

$$n(\vec{x}) = \sum_\alpha \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}_\alpha)$$

Dann
$$\hat{n}(\vec{x}) = \sum_{ij} a_i^+ a_j \int d^3y \; \varphi_i^*(\vec{y})\,\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})\,\varphi_j(\vec{y})$$
$$= \sum_{ij} a_i^+ a_j \, \varphi_i^*(\vec{x})\,\varphi_j(\vec{x}) = \hat{\psi}^+(\vec{x})\,\hat{\psi}(\vec{x})$$

und daher wird der Gesamtteilchenzahloperator:

$$\hat{N} = \int d^3x \; \hat{n}(\vec{x}) = \int d^3x \; \hat{\psi}^+(\vec{x})\,\hat{\psi}(\vec{x})$$

* Der Teilchendichteoperator $\hat{n}(\vec{x}) = \hat{\psi}^+(\vec{x})\,\hat{\psi}(\vec{x})$ sieht formal so aus wie die Wahrscheinlichkeitsdichte im Zustand $\psi(\vec{x})$ $(n(\vec{x}) = |\psi(\vec{x})|^2 = \psi^*(\vec{x})\,\psi(\vec{x}))$. Diese formale Korrespondenz hat zu den Namen 2. Quantisierung geführt, da man die Operatoren im Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erhalten kann wenn man $\psi(\vec{x}) \longrightarrow \hat{\psi}(\vec{x})$ ersetzt. Das sieht man ganz klar aus der Definition der kinetische und potentielle Energie.

* Wir können nun den Hamilton-Operator von S. 14 anwenden, um die Zeitentwicklung von $\hat{\psi}(\vec{x},t)$ zu studieren. Wir benutzen hier die Heisenberg-Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\vec{x},t) = [\hat{\psi}(\vec{x},t), \hat{H}]$$

(Bemerkung: Wir werden hier die folgende Eigenschaft anwenden:

$$[AB, C]_- = ABC - CAB = A[B,C]_- + [A,C]_- B \quad \text{Wir benutzen das für Bosonen}$$
$$= A[B,C]_+ - [A,C]_+ B \quad \text{Wir benutzen das für Fermionen})$$

Gucken wir erstmals die kinetische Energie

$$H_K = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\, \vec\nabla\hat\psi^\dagger(\vec x)\cdot\vec\nabla\hat\psi(\vec x)$$

dann

$$[\hat\psi(\vec x_0), H_K] = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\,\left[\hat\psi(\vec x_0), \vec\nabla\hat\psi^\dagger(\vec x)\cdot\vec\nabla\hat\psi(\vec x)\right] =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x \left\{ \vec\nabla\hat\psi^\dagger(\vec x)\cdot \underbrace{[\vec\nabla\hat\psi(\vec x),\psi(\vec x_0)]_\pm}_{\vec\nabla(\cancel{[\hat\psi(\vec x),\hat\psi(\vec x_0)]_\pm}) = 0} \mp \underbrace{[\vec\nabla\hat\psi^\dagger(\vec x),\hat\psi(\vec x_0)]_\pm}_{\vec\nabla([\hat\psi^\dagger(\vec x),\hat\psi(\vec x_0)]_\pm) \atop \pm\delta^{(3)}(\vec x-\vec x_0)} \vec\nabla\hat\psi(\vec x)\right\}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\;\vec\nabla[\delta^{(3)}(\vec x-\vec x')]\cdot\vec\nabla\psi(\vec x) =$$

$\int dx \frac{d}{dx}(\delta(x-x_0)) f(x) = -f'(x_0)$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec x_0)$$

Für die potentielle Energie ist einfacher: $H_U = \int d^3x\,\hat\psi^\dagger(\vec x)U(\vec x)\hat\psi(\vec x)$

$$[\hat\psi(\vec x_0), H_U] = \int d^3x\,[\hat\psi(\vec x_0),\hat\psi^\dagger(\vec x)\psi(\vec x)]\,U(\vec x)$$

$$= -\int d^3x\left\{\hat\psi^\dagger(\vec x)\underbrace{\cancel{[\hat\psi(\vec x),\hat\psi(\vec x_0)]_\pm}}_{0}\mp\underbrace{[\hat\psi^\dagger(\vec x),\hat\psi(\vec x_0)]}_{\mp\delta^{(3)}(\vec x-\vec x_0)}\hat\psi(\vec x)\right\}U(\vec x)$$

$$= +\int d^3x\;U(\vec x)\,\delta^{(3)}(\vec x-\vec x_0)\,\hat\psi(\vec x) = U(\vec x_0)\,\hat\psi(\vec x_0)$$

Für die Wechselwirkung: $H_{WW} = \frac{1}{2}\int d^3x\int d^3x'\,\hat\psi^\dagger(\vec x)\hat\psi^\dagger(\vec x')V(\vec x-\vec x')\hat\psi(\vec x')\hat\psi(\vec x)$

$$[\hat\psi(\vec x_0), H_{WW}] = -\frac12\int d^3x\int d^3x'\, V(\vec x-\vec x')\left[\hat\psi^\dagger(\vec x)\hat\psi^\dagger(\vec x')\hat\psi(\vec x')\hat\psi(\vec x),\hat\psi(\vec x_0)\right]$$

$$= -\frac12\int d^3x\int d^3x'\, V(\vec x-\vec x')\left[\hat\psi^\dagger(\vec x)\hat\psi^\dagger(\vec x'),\hat\psi(\vec x_0)\right]\hat\psi(\vec x')\hat\psi(\vec x)$$

$$= -\frac12\int d^3x\int d^3x'\, V(\vec x-\vec x')\left\{\hat\psi^\dagger(\vec x)[\hat\psi^\dagger(\vec x'),\hat\psi(\vec x_0)]_\mp \pm [\hat\psi^\dagger(\vec x),\hat\psi(\vec x_0)]_\mp\hat\psi^\dagger(\vec x')\right\}\hat\psi(\vec x')\hat\psi(\vec x)$$

$$= -\frac12\int d^3x\int d^3x'\, V(\vec x-\vec x')\left\{\mp\hat\psi^\dagger(\vec x)\,\delta^{(3)}(\vec x'-\vec x_0) - \delta^{(3)}(\vec x-\vec x_0)\,\hat\psi^\dagger(\vec x')\right\}\hat\psi(\vec x')\hat\psi(\vec x)$$

$$\overset{B}{\underset{F}{=}} \pm\frac12\int d^3x\, V(\vec x-\vec x_0)\,\hat\psi^\dagger(\vec x)\hat\psi(\vec x_0)\hat\psi(\vec x) + \frac12\int d^3x'\, V(\vec x_0-\vec x')\,\hat\psi^\dagger(\vec x')\hat\psi(\vec x')\hat\psi(\vec x_0)$$

$$= \frac12\int d^3x\, V(\vec x-\vec x_0)\,\hat\psi^\dagger(\vec x)\hat\psi(\vec x)\hat\psi(\vec x_0) + \frac12\int d^3x'\, V(\vec x_0-\vec x')\,\hat\psi^\dagger(\vec x')\hat\psi(\vec x')\hat\psi(\vec x_0)$$

* Wir benutzen die Symmetrie $V(\bar{x}-\bar{x}_0) = V(\bar{x}_0-\bar{x})$:

$$[\hat{\psi}(\bar{x}_0), H_{WW}] = \int d^3x\, V(\bar{x}-\bar{x}_0)\, \hat{\psi}^+(\vec{x})\hat{\psi}(\vec{x})\, \hat{\psi}(\vec{x}_0)$$

* Also:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\bar{x},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\bar{x})\right]\hat{\psi}(\bar{x},t) + \int d^3x'\, V(\bar{x}-\bar{x}')\,\hat{n}(\vec{x}',t)\,\hat{\psi}(\bar{x},t)}$$

* Das ist also die <u>Bewegungsgleichung für den Feldoperator $\hat{\psi}(\bar{x},t)$</u>
* Natürlich, für $\hat{\psi}^+(\bar{x},t)$ haben wir:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}^+(\bar{x},t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{x})\right]\hat{\psi}^+(\bar{x},t) + \int d^3x'\, V(\bar{x}-\bar{x}')\,\hat{\psi}^+(\vec{x},t)\,\hat{n}(\bar{x}',t)$$

* Aus der Gleichungen von $\hat{\psi}(\bar{x},t)$ und $\hat{\psi}^+(\bar{x},t)$ können wir die Bewegungsgleichung für den Dichte-Operator herleiten:

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{n}(\bar{x},t) = \hat{\psi}^+(\bar{x},t)\frac{\partial\hat{\psi}(\bar{x},t)}{\partial t} + \frac{\partial\hat{\psi}^+(\bar{x},t)}{\partial t}\hat{\psi}(\bar{x},t)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right)\left[\hat{\psi}^+(\bar{x},t)\nabla^2\hat{\psi}(\bar{x},t) - \left(\nabla^2\hat{\psi}^+(\bar{x},t)\right)\hat{\psi}(\bar{x},t)\right]$$

$$= -\vec{\nabla}\left[\frac{\hbar}{2im}\left(\hat{\psi}^+(\bar{x},t)\cdot\vec{\nabla}\hat{\psi}(\bar{x},t) - (\vec{\nabla}\hat{\psi}^+(\bar{x},t))\,\hat{\psi}(\bar{x},t)\right)\right]$$

* Ich erinnere euch an der Definition von Stromdichte in QM-I:

$$j(\bar{x},t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*(\bar{x},t)\vec{\nabla}\psi(\bar{x},t) - (\vec{\nabla}\psi^*(\bar{x},t))\,\psi(\bar{x},t)\right)$$

Dann in dem Sinn von der 2. Quantisierung, können wir den <u>Stromdichte-Operator</u> einführen:

$$\hat{j}(\bar{x},t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\hat{\psi}^+\vec{\nabla}\hat{\psi} - (\vec{\nabla}\hat{\psi}^+)\hat{\psi}\right)$$

und damit $\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\hat{n}(\bar{x},t) = -\nabla\hat{j}(\bar{x},t)}$ → <u>Kontinuitätsgleichung</u>

* IMPULSRAUM

* Mehrmals, besonders in translationsinvarianten Systemen, ist die Impulsdarstellung besonders nützlich.

* Wir benutzen nun die Impulseigenfunktionen:

$$\varphi_{\bar{k}}(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\bar{k}\cdot\bar{x}}$$ (wobei V das Quantisierungsvolumen ist)

(Bemerkung: Diese Funktionen bauen eine orthonormale Basis, d.h. $\int d^3x \, \varphi_{\bar{k}}^*(\bar{x}) \varphi_{\bar{k}'}(\bar{x}) = \delta_{\bar{k}\bar{k}'}$)

Bemerkung(II): In dem Quantisierungsvolumen $V = L_x L_y L_z$, die $\bar{k}$-Werte sind diskrett: $\bar{k} = 2\pi\left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z}\right)$ $n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; deswegen haben wir Kronecker-Delta und nicht Dirac-Delta, und deswegen haben wir später Summen anstatt Integralen)

* Wir definieren $a_{\bar{k}}, a_{\bar{k}}^\dagger \Rightarrow$ die Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren für Teilchen mit Impuls $\bar{k}$ (die erfüllen die bosonische bzw. fermionische Vertauschungsrelationen.)
Dann wir wissen schon, wie man die verschiedene Operatoren als Funktion von $a_{\bar{k}}$ und $a_{\bar{k}}^\dagger$ darstellen können:

· Kinetische Energie:

$$H_K = \sum_{\bar{k},\bar{k}'} a_{\bar{k}}^\dagger \left[\int d^3x \, \varphi_{\bar{k}}^*(\bar{x}) \left(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m}\right) \varphi_{\bar{k}'}(\bar{x})\right] a_{\bar{k}'}$$

$$= \sum_{\bar{k},\bar{k}'} a_{\bar{k}}^\dagger \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \underbrace{\left[\int \frac{d^3x}{V} e^{-i(\bar{k}-\bar{k}')\bar{x}}\right]}_{\delta_{\bar{k},\bar{k}'}} a_{\bar{k}'} = \sum_{\bar{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}}$$

· Potentielle Energie:

$$H_U = \sum_{\bar{k},\bar{k}'} a_{\bar{k}}^\dagger \left[\int d^3x \, \varphi_{\bar{k}}^*(\bar{x}) \, U(\bar{x}) \, \varphi_{\bar{k}'}(\bar{x})\right] a_{\bar{k}'}$$

$$= \sum_{\bar{k},\bar{k}'} a_{\bar{k}}^\dagger \underbrace{\left[\int \frac{d^3x}{V} U(\bar{x}) e^{-i(\bar{k}-\bar{k}')\bar{x}}\right]}_{\frac{1}{V} U_{\bar{q}=\bar{k}-\bar{k}'}} a_{\bar{k}'}$$

$\leftarrow$ Fourier-Transformation des Potentials

* Wechselwirkungsenergie

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{k}'',\vec{k}'''} a^+_{\vec{k}} a^+_{\vec{k}'} \underbrace{\left[\int d^3x \int d^3x' \, \varphi^*_{\vec{k}}(\vec{x}) \varphi^*_{\vec{k}'}(\vec{x}') V(\vec{x}-\vec{x}') \varphi_{\vec{k}'''}(\vec{x}') \varphi_{\vec{k}''}(\vec{x})\right]}_{\int \frac{d^3x}{V} \int \frac{d^3x'}{V} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}'')\cdot\vec{x}} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k}''')\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}-\vec{x}')} a_{\vec{k}'''} a_{\vec{k}''}$$

$$V(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{k}'',\vec{k}'''} a^+_{\vec{k}} a^+_{\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{V} V_{\vec{q}} \left[\underbrace{\int \frac{d^3x}{V} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}''-\vec{q})\cdot\vec{x}}}_{\delta_{\vec{k}-\vec{k}''-\vec{q},0}} \underbrace{\int e^{-i(\vec{k}'-\vec{k}'''+\vec{q})\cdot\vec{x}'} \frac{d^3x'}{V}}_{\delta_{\vec{k}'-\vec{k}'''+\vec{q},0}}\right] a_{\vec{k}''} a_{\vec{k}'''}$$

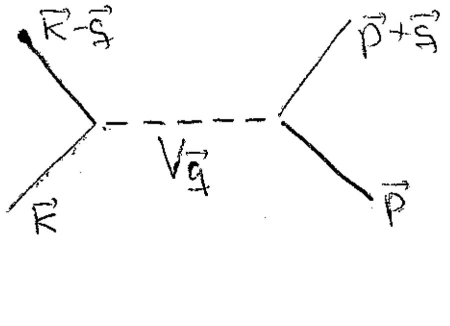
$$= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q},\vec{k}'',\vec{k}'''} a^+_{\vec{k}''+\vec{q}} a^+_{\vec{k}'''-\vec{q}} V_{\vec{q}} a_{\vec{k}'''} a_{\vec{k}''}$$

* Dann, der Hamilton-Operator im Impulsraum sieht so aus:

$$\boxed{H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} U_{\vec{k}-\vec{k}'} a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}'} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q},\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{q}} a^+_{\vec{k}+\vec{q}} a^+_{\vec{k}'-\vec{q}} a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}}$$

* Der Wechselwirkungsterm erlaubt eine anschauliche Interpretation.

Ein Teilchen mit Impuls $\vec{k}$ und eines mit Impuls $\vec{k}'$ werden vernichtet, und dafür zwei Teilchen mit den Impulsen $\vec{k}+\vec{q}$ und $\vec{k}'-\vec{q}$ werden erzeugt.



* Solche Diagrammen (Feynmann-Diagrammen) sind für die Analyse von Viel-Teilchensysteme sehr nützlich!

* SPIN

* Bislang wurde der Spin nicht explizit ausgeführt. Bei explizitér Angabe des Spins hat man die Ersetzungen

$$\hat{\psi}(\vec{x}) \longrightarrow \hat{\psi}_\sigma(\vec{x})$$

$$a_{\vec{p}} \longrightarrow a_{\vec{p},\sigma}$$

durchzuführen, und zusätzlich eine Summation über die z-Komponente des Spins (σ) auszuführen. z.B

$$\hat{n}(\vec{x}) = \sum_\sigma \hat{\psi}^+_\sigma(\vec{x})\hat{\psi}_\sigma(\vec{x})$$

und der Hamilton Operator wird:

$$H = \sum_\sigma \int d^3x \left\{ \frac{\hbar^2}{2M} \vec{\nabla}\hat{\psi}^+_\sigma(\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\hat{\psi}_\sigma(\vec{x}) + U(\vec{x})\hat{\psi}^+_\sigma(\vec{x})\hat{\psi}_\sigma(\vec{x}) \right\}$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'} \int d^3x \int d^3x'\, \hat{\psi}_\sigma(\vec{x})\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{x}')\, V_{\sigma\sigma'}(\vec{x}-\vec{x}')\,\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x}')\hat{\psi}_\sigma(\vec{x})$$

die Wechselwirkung könnte im Prinzip spin-abhängig sein

* Wir können den Spindichteoperator einführen:

$$\hat{\vec{S}}(\vec{x}) = \sum_{\alpha=1}^{N} \delta(\vec{x}-\vec{x}_\alpha)\hat{\vec{S}}_\alpha$$

Für spin-1/2 Teilchen (z.B. Elektronen)

$$\hat{\vec{S}}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{2}\sum_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}^+_\sigma(\vec{x})\,\hat{\vec{\sigma}}_{\sigma\sigma'}\,\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x})$$

wobei $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ Pauli-Matrizen

* Die Vertauschungsrelationen sind:

$$[\hat{\psi}_\sigma(\vec{x}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x}')]_\pm = [\hat{\psi}^+_\sigma(\vec{x}), \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\vec{x}')]_\pm = 0$$

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