

## 4 Zweite Quantisierung

In diesem Kapitel wollen wir einen Formalismus einführen, der es uns erlaubt die Vielteilchenzustände für Bosonen und Fermionen in einer rechnerisch bequemen Art darzustellen. Wir hatten bereits in Kapitel 2 die Zustände des Strahlungsfeldes als Viel-Photonenzustände in Form von Besetzungszuständen für die einzelnen Moden eingeführt. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erwiesen sich dabei als elegante Werkzeuge zur Manipulation dieser Zustände. Hier wollen wir diese Methode für andere Teilchen verallgemeinern. Man nennt diesen Formalismus etwas abwegig ‘Zweite Quantisierung’. Er hat jedoch nichts mit einer neuen Quantisierung zutun, sondern erlaubt lediglich eine bequeme Behandlung von Vielteilchensystemen, ohne die komplizierten und etwas unpraktischen Vielteilchen-Wellenfunktionen des vorhergehenden Kapitels verwenden zu müssen.

### 4.1 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Wir beginnen zunächst mit der Analyse für den Fall von Bosonen ohne Spin.

#### 4.1.1 Bosonen ohne Spin

Wir betrachten ein Verteilchensystem nicht-wechselwirkender Bosonen, deren Einteilchenzustände durch  $|\psi_\mu\rangle$  beschrieben werden, wobei die  $|\psi_\mu\rangle$  eine vollständige orthonormierte Basis des Einteilchenraums bilden. Ein Zustand mit  $n_\mu$  dieser Bosonen wird, wie im letzten Kapitel gezeigt, durch eine symmetrische Produktwellenfunktion (Produktzustand) beschrieben, den wir mit  $|n_\mu\rangle$  bezeichnen. Wir definieren nun die Operatoren  $a_\mu$  und  $a_\mu^\dagger$  mit den Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \text{Vernichtungsoperator:} \quad & a_\mu |n_\mu\rangle = \sqrt{n_\mu} |n_\mu - 1\rangle, \\ \text{Erzeugungsoperator:} \quad & a_\mu^\dagger |n_\mu\rangle = \sqrt{n_\mu + 1} |n_\mu + 1\rangle. \end{aligned} \quad (4.1.1)$$

Die adjungierten Operatoren erfüllen dann

$$\langle n_\mu | a_\mu^\dagger = \sqrt{n_\mu} \langle n_\mu - 1 | \quad \text{und} \quad \langle n_\mu | a_\mu = \sqrt{n_\mu + 1} \langle n_\mu + 1 |. \quad (4.1.2)$$

Mit diesen Operatoren ändern wir die Zahl der Bosonen in einem Zustand. Wir führen nun das ‘Vakuum’  $|0\rangle$  als den Zustand ohne Teilchen ein; dieser Zustand ist dadurch ausgezeichnet, dass

$$a_\mu |0\rangle = 0 \quad \text{bzw.} \quad \langle 0 | a_\mu^\dagger = 0. \quad (4.1.3)$$

Man zeigt leicht, dass diese Operatoren die Vertauschungsregeln

$$[a_\mu, a_\mu] = [a_\mu^\dagger, a_\mu^\dagger] = 0, \quad [a_\mu, a_\mu^\dagger] = 1 \quad (4.1.4)$$

erfüllen. Die ersten beiden Gleichungen sind offensichtlich; die dritte Gleichung folgt direkt aus

$$\begin{aligned} [a_\mu, a_\mu^\dagger] |n_\mu\rangle &= a_\mu a_\mu^\dagger |n_\mu\rangle - a_\mu^\dagger a_\mu |n_\mu\rangle \\ &= \sqrt{n_\mu + 1} a_\mu |n_\mu + 1\rangle - \sqrt{n_\mu} a_\mu^\dagger |n_\mu - 1\rangle = [(n + 1) - n] |n_\mu\rangle = |n_\mu\rangle. \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

Der Zustand  $|n_\mu\rangle$  lässt sich dann auch als

$$|n_\mu\rangle = \frac{(a_\mu^\dagger)^{n_\mu}}{\sqrt{n_\mu!}}|0\rangle \quad (4.1.6)$$

schreiben. Schliesslich definieren wir den Teilchenzahloperator durch

$$\hat{n}_\mu = a_\mu^\dagger a_\mu \quad \text{mit} \quad \hat{n}_\mu |n_\mu\rangle = n_\mu |n_\mu\rangle . \quad (4.1.7)$$

Wie im Fall des harmonischen Oszillators rechnet man leicht nach, dass

$$[\hat{n}_\mu, a_\mu] = -a_\mu , \quad [\hat{n}_\mu, a_\mu^\dagger] = a_\mu^\dagger . \quad (4.1.8)$$

Die Operatoren  $a_\mu$  und  $a_\mu^\dagger$  erniedrigen und erhöhen daher den Eigenwert des Teilchenzahloperators um eins.

Es ist relativ offensichtlich, wie dieser Formalismus auf Zustände mit anderen Anregungen erweitert werden kann: wir charakterisieren den Zustand einfach durch seine Besetzungszahlen. Der allgemeine Zustand ist von der Form  $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ ; er beschreibt den total symmetrischen Produktzustand in dem  $n_1$  der Bosonen im Zustand  $|\psi_1\rangle$  sind,  $n_2$  im Zustand  $|\psi_2\rangle$ , usw. Zum Beispiel entspricht dem Zustand  $|n_1, n_2\rangle$  die Produktwellenfunktion

$$\sum_{P \in \mathcal{S}_{n_1+n_2}} \psi_1(\mathbf{r}_{P(1)}) \cdots \psi_1(\mathbf{r}_{P(n_1)}) \psi_2(\mathbf{r}_{P(n_1+1)}) \cdots \psi_2(\mathbf{r}_{P(n_1+n_2)}) . \quad (4.1.9)$$

Die allgemeine Formulierung ist folglich

$$\begin{aligned} a_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \\ a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \\ \langle n_1, \dots, n_i, \dots | a_i^\dagger &= \sqrt{n_i} \langle n_1, \dots, n_i - 1, \dots | \\ \langle n_1, \dots, n_i, \dots | a_i &= \sqrt{n_i + 1} \langle n_1, \dots, n_i + 1, \dots | \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

mit den Vertauschungsregeln

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} , \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 . \quad (4.1.11)$$

Die Zustände können aus dem Vakuum erzeugt werden gemäss

$$|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \left[ \cdots \frac{(a_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \cdots \frac{(a_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \right] |0\rangle , \quad (4.1.12)$$

wobei das Vakuum  $|0\rangle$  der Zustand ist, in dem alle Besetzungszahlen verschwinden. Der so erzeugte Zustandsraum wird **Fockraum** genannt. Auf diesem Raum gibt es den allgemeinen Teilchenzahl-Operator

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i = \sum_i a_i^\dagger a_i \quad \text{mit} \quad \hat{N} |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \left( \sum_i n_i \right) |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle . \quad (4.1.13)$$

Seine Eigenwerte bestimmen die Gesamtzahl der vorhandenen Teilchen.

### 4.1.2 Fermionen mit Spin 1/2

Im fermionischen Fall kann wegen des Pauli-Prinzips jeder Zustand (inklusive Spin-Quantenzahl) nur durch ein Fermion besetzt werden. Die Besetzungszahlen  $n_\mu$ , die die Besetzung des Einteilchenzustands  $|\mu\rangle$  beschreiben, können daher nur die Werte  $n_\mu = 0, 1$  annehmen. Der Zustand, in dem kein Teilchen vorhanden ist, ist der Vakuumzustand; er wird wiederum durch  $|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle$  bezeichnet.

Wie im bosonischen Fall ist es nützlich Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zu definieren, die die entsprechende Teilchenzahl um eins erhöhen bzw. erniedrigen. Wie zuvor werden diese Operatoren mit  $a_\mu^\dagger$  und  $a_\mu$  bezeichnet. Im fermionischen Fall sind sie durch die Relationen

$$a_\mu|1\rangle = |0\rangle, \quad a_\mu|0\rangle = 0, \quad a_\mu^\dagger|1\rangle = 0, \quad a_\mu^\dagger|0\rangle = |1\rangle \quad (4.1.14)$$

charakterisiert. Man rechnet leicht nach, dass diese Operatoren die folgenden **Antikommutationsrelationen** erfüllen

$$\{a_\mu, a_\mu\} = \{a_\mu^\dagger, a_\mu^\dagger\} = 0, \quad \text{und} \quad \{a_\mu, a_\mu^\dagger\} = 1. \quad (4.1.15)$$

Hierbei ist

$$\{A, B\} = AB + BA \quad (4.1.16)$$

der Antikommutator. Die ersten beiden Relationen in (4.1.15) bedeuten lediglich, dass

$$a_\mu a_\mu = a_\mu^\dagger a_\mu^\dagger = 0, \quad (4.1.17)$$

was natürlich direkt aus (4.1.14) (bzw. dem Pauli-Prinzip) folgt. Die letzte Identität von (4.1.15) folgt aus

$$\begin{aligned} \{a_\mu, a_\mu^\dagger\}|0\rangle &= a_\mu a_\mu^\dagger|0\rangle = |0\rangle \\ \{a_\mu, a_\mu^\dagger\}|1\rangle &= a_\mu^\dagger a_\mu|1\rangle = |1\rangle. \end{aligned} \quad (4.1.18)$$

Der Teilchenzahloperator ist wiederum durch

$$\hat{n}_\mu = a_\mu^\dagger a_\mu \quad (4.1.19)$$

definiert.

Das Problem wird jedoch ein wenig subtiler, wenn wir mehr als einen Einteilchenzustand betrachten. Zur Illustration analysieren wir zunächst den Fall zweier fermionischer Zustände 1 und 2. Dann gilt

$$\begin{aligned} a_2^\dagger|0, 0\rangle &= |0, 1\rangle & a_2^\dagger|1, 0\rangle &= |1, 1\rangle & a_2^\dagger|0, 1\rangle &= 0 & a_2^\dagger|1, 1\rangle &= 0 \\ a_2|0, 0\rangle &= 0 & a_2|1, 0\rangle &= 0 & a_2|0, 1\rangle &= |0, 0\rangle & a_2|1, 1\rangle &= |1, 0\rangle \\ a_1^\dagger|0, 0\rangle &= |1, 0\rangle & a_1^\dagger|1, 0\rangle &= 0 & a_1^\dagger|0, 1\rangle &= -|1, 1\rangle & a_1^\dagger|1, 1\rangle &= 0 \\ a_1|0, 0\rangle &= 0 & a_1|1, 0\rangle &= |0, 0\rangle & a_1|0, 1\rangle &= 0 & a_1|1, 1\rangle &= -|0, 1\rangle. \end{aligned} \quad (4.1.20)$$

Die dabei auftretenden Vorzeichen sind eine Folge der Antisymmetrie der fermionischen Wellenfunktionen. Wir definieren

$$|n_1, n_2\rangle = (a_2^\dagger)^{n_2} (a_1^\dagger)^{n_1} |0\rangle, \quad (4.1.21)$$

wobei  $n_1, n_2 \in \{0, 1\}$ . Die Reihenfolge der Operatoren ist in dieser Gleichung wichtig, denn die Operatoren erfüllen die folgenden Antikommutationsrelationen

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \quad \text{und} \quad \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}. \quad (4.1.22)$$

Man rechnet leicht nach, dass damit die Relationen (4.1.20) richtig reproduziert werden. Insbesondere gilt zum Beispiel  $a_1^\dagger a_2^\dagger = -a_2^\dagger a_1^\dagger$ , was für das Vorzeichen in der dritten Zeile von (4.1.20) verantwortlich ist. (Dieses Vorzeichen ist natürlich gerade eine Folge davon, dass die fermionischen Wellenfunktion  $\Psi_F$  total antisymmetrisch in den Variablen  $1, \dots, N$  ist — siehe (3.3.7).)

Es ist nun relativ offensichtlich, wie dieser Formalismus auf beliebig viele Zustände erweitert werden kann. Dazu definieren wir

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \dots (a_i^\dagger)^{n_i} \dots (a_2^\dagger)^{n_2} (a_1^\dagger)^{n_1} |0\rangle \quad \text{mit} \quad a_i |0\rangle = 0, \quad (4.1.23)$$

wobei die Operatoren die obigen Antivertauschungsregeln (4.1.22) erfüllen. Der gesamte Teilchenzahloperator ist nun gegeben durch  $N = \sum_j \hat{n}_j = \sum_j a_j^\dagger a_j$ .

Im folgenden benützen wir die Konvention, dass der Spinindex explizit aufgeführt wird (und nicht in dem Zustandsindex  $\mu$  implizit enthalten ist, der lediglich den räumlichen Anteil des Zustandes charakterisiert). Wir definieren also die Operatoren  $a_{is}^\dagger$  bzw.  $a_{is}$  die ein Boson oder Fermion mit Spin  $s$  im räumlichen Einteilchenzustand  $|\psi_i\rangle$  erzeugen bzw. vernichten. Die relevanten Vertauschungsregeln sind dann einfach

$$[a_{is_1}, a_{js_2}]_\pm = [a_{is_1}^\dagger, a_{js_2}^\dagger]_\pm = 0, \quad \text{und} \quad [a_{is_1}, a_{js_2}^\dagger]_\pm = \delta_{ij} \delta_{s_1 s_2}. \quad (4.1.24)$$

Hierbei definiert

$$[A, B]_\pm = AB \pm BA \quad (4.1.25)$$

in uniformer Weise Kommutatoren (–) und Antikommutatoren (+). In (4.1.24) gilt der ‘+’ Index für Fermionen, und der ‘–’ Index für Bosonen.

## 4.2 Feldoperatoren

Wir bezeichnen die Wellenfunktion, die zu dem Einteilchenzustand  $\psi_i$  gehört durch  $\psi_i(\mathbf{x})$ . Nach Annahme definieren die Wellenfunktionen  $\psi_i(\mathbf{x})$  eine vollständige Orthonormalbasis des entsprechenden  $L^2$ -Raumes. Daher gilt insbesondere, dass

$$\int d^3 \mathbf{x} \psi_i^*(\mathbf{x}) \psi_j(\mathbf{x}) = \delta_{ij}. \quad (4.2.1)$$

Sein nun  $f(\mathbf{x})$  ein beliebiges Element des relevanten  $L^2$ -Raumes. Wegen der Vollständigkeit der  $\psi_i(\mathbf{x})$  können wir  $f(\mathbf{x})$  nach den  $\psi_i(\mathbf{x})$  entwickeln, d.h. es gilt

$$f(\mathbf{x}) = \sum_i c_i \psi_i(\mathbf{x}) , \quad (4.2.2)$$

wobei, wegen der Orthonormalität (4.2.1),  $c_i$  durch

$$c_i = \int d^3\mathbf{y} \psi_i^*(\mathbf{y}) f(\mathbf{y}) \quad (4.2.3)$$

gegeben ist. Es gilt daher

$$f(\mathbf{x}) = \int d^3\mathbf{y} f(\mathbf{y}) \sum_i \psi_i^*(\mathbf{y}) \psi_i(\mathbf{x}) . \quad (4.2.4)$$

Da diese Relation für beliebiges  $f(\mathbf{x})$  gilt, folgt daraus, dass

$$\sum_i \psi_i^*(\mathbf{y}) \psi_i(\mathbf{x}) = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) . \quad (4.2.5)$$

Nach diesen Vorbemerkungen können wir nun die Feldoperatoren definieren. Unter den Feldoperatoren versteht man die *operator-wertigen Funktionen*, die durch

$$\Psi_s(\mathbf{x}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}) a_{is} , \quad \Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{x}) a_{is}^\dagger \quad (4.2.6)$$

definiert sind. Die physikalische Interpretation von  $\Psi_s^\dagger(\mathbf{x})$  ist, dass es das Teilchen im Spinzustand  $s$  (dessen Einteilchenzustände durch  $\psi_i$  beschrieben werden) am Ort  $\mathbf{x}$  erzeugt. Entsprechend vernichtet  $\Psi_s(\mathbf{x})$  ein Teilchen im Spinzustand  $s$  am Ort  $\mathbf{x}$ . Die Feldoperatoren erfüllen die Vertauschungsregeln

$$[\Psi_{s_1}(\mathbf{x}), \Psi_{s_2}(\mathbf{y})]_\pm = [\Psi_{s_1}^\dagger(\mathbf{x}), \Psi_{s_2}^\dagger(\mathbf{y})]_\pm = 0 . \quad (4.2.7)$$

Diese Vertauschungsregeln folgen direkt aus jenen der zugehörigen  $a_\mu$  und  $a_\mu^\dagger$  Operatoren; die  $\psi_\mu(\mathbf{x})$  sind ja Funktionen und vertauschen untereinander.

Die einzige interessante Vertauschungsregel betrifft daher jene von  $\Psi_{s_1}(\mathbf{x})$  mit  $\Psi_{s_2}^\dagger(\mathbf{y})$ , für die wir berechnen

$$\begin{aligned} [\Psi_{s_1}(\mathbf{x}), \Psi_{s_2}^\dagger(\mathbf{y})]_\pm &= \sum_{ij} \psi_i(\mathbf{x}) \psi_j^*(\mathbf{y}) [a_{is_1}, a_{js_2}^\dagger]_\pm \\ &= \delta_{s_1 s_2} \sum_{ij} \psi_i(\mathbf{x}) \psi_j^*(\mathbf{y}) \delta_{ij} \\ &= \delta_{s_1 s_2} \sum_i \psi_i(\mathbf{x}) \psi_i^*(\mathbf{y}) = \delta_{s_1 s_2} \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) , \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

wobei wir in der letzten Zeile (4.2.5) angewendet haben.

In dieser Sprache ist es nun einfach, Vielteilchenzustände zu behandeln. In der Ortsraumbasis werden diese durch sukzessive Wirkung der Feldoperatoren erzeugt. Zum Beispiel beschreibt

$$|\mathbf{x}_1, s_1; \dots; \mathbf{x}_n, s_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \Psi_{s_n}^\dagger(\mathbf{x}_n) \cdots \Psi_{s_1}^\dagger(\mathbf{x}_1) |0\rangle \quad (4.2.9)$$

den  $n$ -Teilchenzustand, wo die  $n$  Teilchen durch  $(\mathbf{x}_i, s_i)$  parametrisiert sind. Wegen der Vertauschungsrelationen der Feldoperatoren gilt sofort, dass

$$|\mathbf{x}_1, s_1; \mathbf{x}_2, s_2; \dots; \mathbf{x}_n, s_n\rangle = \pm |\mathbf{x}_2, s_2; \mathbf{x}_1, s_1; \dots; \mathbf{x}_n, s_n\rangle . \quad (4.2.10)$$

Auf einen  $n$ -Teilchenzustand angewendet erzeugt der Feldoperator  $\Psi_s^\dagger$  einen  $(n+1)$ -Teilchenzustand

$$\Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) |\mathbf{x}_1, s_1; \dots; \mathbf{x}_n, s_n\rangle = \sqrt{n+1} |\mathbf{x}_1, s_1; \dots; \mathbf{x}_n, s_n; \mathbf{x}, s\rangle . \quad (4.2.11)$$

Entsprechend ist die Wirkung eines Vernichtungsoperators gemäss der obigen Vertauschungsregeln

$$\begin{aligned} \Psi_s(\mathbf{x}) |\mathbf{x}_1, s_1; \dots; \mathbf{x}_n, s_n\rangle &= \Psi_s(\mathbf{x}) \frac{1}{\sqrt{n!}} \Psi_{s_n}^\dagger(\mathbf{x}_n) \cdots \Psi_{s_1}^\dagger(\mathbf{x}_1) |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \delta_{ss_n} \pm \Psi_{s_n}^\dagger(\mathbf{x}_n) \Psi_s(\mathbf{x}) \right] \Psi_{s_{n-1}}^\dagger(\mathbf{x}_{n-1}) \cdots \Psi_{s_1}^\dagger(\mathbf{x}_1) |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} \left[ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \delta_{ss_n} |\mathbf{x}_1, s_1; \dots; \mathbf{x}_{n-1}, s_{n-1}\rangle \right. \\ &\quad \left. \pm \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{n-1}) \delta_{ss_{n-1}} |\mathbf{x}_1, s_1; \dots; \mathbf{x}_{n-2}, s_{n-2}; \mathbf{x}_n, s_n\rangle + \dots \right. \\ &\quad \left. \dots + (\pm 1)^{n-1} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \delta_{ss_1} |\mathbf{x}_2, s_2; \dots; \mathbf{x}_n, s_n\rangle \right] , \end{aligned} \quad (4.2.12)$$

wobei für Bosonen ‘+’ und für Fermionen ‘-’ auftritt.

Das Skalarprodukt zweier Vielteilchenzuständen (wir lassen im folgenden die Spinindizes weg) berechnet sich zu

$$\langle \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_m | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \rangle = \frac{\delta_{nm}}{n!} \sum_{P \in S_n} (\pm)^{|P|} \delta(\mathbf{x}_{P(1)} - \mathbf{y}_1) \cdots \delta(\mathbf{x}_{P(n)} - \mathbf{y}_m) . \quad (4.2.13)$$

Falls  $\phi$  eine Wellenfunktion im  $n$ -Teilchenraum beschreibt, dann ist der zugehörige Zustand

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \int d^3\mathbf{x}_1 \cdots d^3\mathbf{x}_n \phi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\rangle \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{P \in S_n} (\pm)^{|P|} \int d^3\mathbf{x}_1 \cdots d^3\mathbf{x}_n \phi(\mathbf{x}_{P(1)}, \dots, \mathbf{x}_{P(n)}) |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\rangle , \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

wobei für Bosonen ‘+’, und für Fermionen ‘-’ gilt. Hier haben wir die Symmetrie der Mehrteilchenzustände (4.2.10) benützt; zu dem resultierenden Zustand trägt also automatisch nur der richtig symmetrisierte Teil der Wellenfunktion  $\phi$  bei. Formal können wir diesen symmetrisierten Anteil daher als

$$\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n | \phi \rangle = \frac{1}{n!} \sum_{P \in S_n} (\pm)^{|P|} \phi(\mathbf{x}_{P(1)}, \dots, \mathbf{x}_{P(n)}) \quad (4.2.15)$$

schreiben.

### 4.2.1 Fockraum

Für jedes quantenmechanische System mit fixierter Teilchenzahl definieren wir den Hilbertraum  $\mathcal{H}_n$ , der einen vollständigen Vektorraum aller Zustände mit  $n$ -Bosonen oder  $n$ -Fermionen darstellt. Die Feldoperatoren verbinden Hilberträume mit verschiedener Teilchenzahlen.

$$\Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) : \mathcal{H}_n \rightarrow \mathcal{H}_{n+1} \quad \text{und} \quad \Psi_s(\mathbf{x}) : \mathcal{H}_n \rightarrow \mathcal{H}_{n-1} . \quad (4.2.16)$$

Entsprechend benötigen wir einen erweiterten Raum, den man *Fockraum* nennt:

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n . \quad (4.2.17)$$

Der Raum  $\mathcal{H}_0$  besteht nur aus dem Vakuum,  $|0\rangle$  mit  $\langle 0|0\rangle = 1$ . Ein beliebiger Vektor der Fockraums kann Komponenten in verschiedenen  $\mathcal{H}_n$  besitzen; üblicherweise nimmt man jedoch an, dass nur endlich viele Vektoren  $\psi_n \in \mathcal{H}_n$  nicht-trivial sind. Ein typischer Vektor ist also von der Form

$$|\Psi\rangle = \{|\psi_0\rangle_0, |\psi_1\rangle_1, |\psi_2\rangle_2, |\psi_3\rangle_3, \dots, |\psi_n\rangle_n, 0, \dots\} \quad (4.2.18)$$

wobei  $|\psi_j\rangle_j \in \mathcal{H}_j$ . Die Norm solcher Vektoren ist

$$\langle \Psi' | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi'_n | \psi_n \rangle_n \quad (4.2.19)$$

mit dem jeweiligen Skalarprodukt für jeden Hilbertraum  $\mathcal{H}_n$ . Wegen der obigen Annahme ist diese Summe immer endlich und konvergiert daher.

## 4.3 Observablen in der 2. Quantisierung

Wir können auch Observable, die durch selbst-adjungierte Operatoren beschrieben werden, durch die Feldoperatoren ausdrücken. Als erstes Beispiel betrachten wir den Teilchenzahldichteoperator.

### 4.3.1 Teilchenzahldichte

Der Teilchendichteoperator im  $n$ -Teilchenraum des Fockraums ist definiert durch

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}_i) . \quad (4.3.1)$$

Um zu verstehen, wie dieser Operator wirkt, betrachten wir zwei Zustände  $|\phi\rangle$  und  $|\chi\rangle$  im  $n$ -Teilchenraum von der Form (4.2.14). Der Erwartungswert des Teilchendichteoperator  $\hat{\rho}(\mathbf{x})$  ist dann

$$\begin{aligned} \langle \chi | \hat{\rho}(\mathbf{x}) | \phi \rangle &= \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_n \langle \chi | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \rangle \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n | \sum_{i=1}^n \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}_i) | \phi \rangle \\ &= \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_n \sum_{i=1}^n \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \langle \chi | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \rangle \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n | \phi \rangle \\ &= n \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_{n-1} \langle \chi | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x} | \phi \rangle , \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

wobei wir in der ersten Zeile eine Partition der Identität eingesetzt haben. In der letzte Zeile haben wir benützt, dass wir die Teilchen-Koordinaten für jeden Summanden so umbenennen können, dass die Variable  $\mathbf{x}_i$  in der  $\delta$ -Funktion gerade  $\mathbf{x}_n$  ist. Das gibt daher  $n$  identische Terme, da sich die allfälligen fermionischen Vorzeichen gerade wegheben.

Wir behaupten nun, dass in der Sprache der Feldoperatoren der Operator  $\hat{\rho}(\mathbf{x})$  gerade durch

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}) = \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) \quad (4.3.3)$$

gegeben ist. [Wir unterdrücken hier die Spinindizes.] Um dies zu beweisen, berechnen wir einfach wiederum nach Einsetzen einer Partition der Identität (beachte, dass der Zustand  $\Psi(\mathbf{x})|\phi \in \mathcal{H}_{n-1}$ )

$$\begin{aligned} \langle \chi | \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) | \phi \rangle &= \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_{n-1} \langle \chi | \Psi^\dagger(\mathbf{x}) | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1} \rangle \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1} | \Psi(\mathbf{x}) | \phi \rangle \\ &= n \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_{n-1} \langle \chi | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x} | \phi \rangle , \end{aligned}$$

wobei wir (4.2.11) benützt haben (sowie die entsprechende adjungierte Relation).

Der *Gesamtzahl-Operator* ist dann

$$\hat{N} = \int d^3\mathbf{x} \hat{\rho}(\mathbf{x}) = \int d^3\mathbf{x} \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) . \quad (4.3.4)$$

Wenn wir die Definition der Feldoperatoren einsetzen wird das

$$\begin{aligned} \hat{N} &= \sum_{ij} \int d^3\mathbf{x} \psi_i^*(\mathbf{x}) a_i^\dagger \psi_j(\mathbf{x}) a_j \\ &= \sum_{ij} a_i^\dagger a_j \underbrace{\int d^3\mathbf{x} \psi_i^*(\mathbf{x}) \psi_j(\mathbf{x})}_{\delta_{ij}} = \sum_i a_i^\dagger a_i , \end{aligned} \quad (4.3.5)$$



was mit der früheren Definition (siehe den Paragraph nach (4.1.23)) übereinstimmt.

### 4.3.2 Weitere Operatoren

Ein weiterer wichtiger Operator ist der Operator der **kinetischen Energie**, der in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die natürliche Form

$$\hat{T} = \sum_{ij} \int d^3\mathbf{x} a_i^\dagger \psi_i^*(\mathbf{x}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_j(\mathbf{x}) a_j \quad (4.3.6)$$

hat. Nach partieller Integration (wir nehmen an, dass die Randterme im Unendlichen nicht beitragen) lässt sich das als

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{ij} \int d^3\mathbf{x} a_i^\dagger \nabla \psi_i^*(\mathbf{x}) \nabla \psi_j(\mathbf{x}) a_j \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3\mathbf{x} \nabla \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \Psi(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4.3.7)$$

schreiben. Formal sieht dieser Ausdruck aus wie der Erwartungswert der kinetischen Energie einer Einteilchenwellenfunktion  $\Psi \mapsto \psi_i$ . Diese Analogie ist aber nur formaler Natur, da  $\psi_i$  eine komplexwertige Funktion ist,  $\Psi$  hingegen aber eine operatorwertige Funktion definiert. Die formale Korrespondenz ist jedoch der Grund dafür, warum man diese Beschreibung ‘2. Quantisierung’ nennt: man kann formal die richtige Beschreibung der Observablen erhalten, indem man die Einteilchenwellenfunktionen durch Feldoperatoren ersetzt!

Die potentielle Energie  $\hat{H}_{\text{pot}}$  ist in gleicher Weise

$$\hat{H}_{\text{pot}} = \int d^3\mathbf{x} U(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) = \int d^3\mathbf{x} U(\mathbf{x}) \hat{\rho}(\mathbf{x}) . \quad (4.3.8)$$

Entsprechend können auch die anderen Einteilchen-Operatoren in zweiter Quantisierung dargestellt werden. Zum Beispiel ist die Teilchenstromdichte

$$\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \Psi(\mathbf{x}) - \nabla \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) \right) \quad (4.3.9)$$

oder die Spindichte, z.B. für Spin 1/2 Fermionen

$$\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{2} \sum_{ss'} \Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) \vec{\sigma}_{ss'} \Psi_{s'}(\mathbf{x}), \quad (4.3.10)$$

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

Für das folgende ist es auch wichtig, Mehrteilchen-Operatoren zu definieren, zum Beispiel den Operator, der die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen beschreibt. Falls diese Wechselwirkung durch ein Potential beschrieben ist, gilt

$$\hat{H}_{\text{ww}} = \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{y} \Psi_{s_1}^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_{s_2}^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Psi_{s_2}(\mathbf{y}) \Psi_{s_1}(\mathbf{x}), \quad (4.3.11)$$

wobei der Faktor 1/2 das Problem der Doppelzählung korrigiert. Dieser Operator vernichtet zuerst und erzeugt dann wieder zwei Teilchen an den Stellen  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$ ; der Wechselwirkungsterm  $V(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  trägt dann nur bei, falls bei  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  tatsächlich Teilchen sitzen.

### 4.3.3 Feldgleichungen

Die Feldoperatoren können natürlich auch in der Heisenberg-Darstellung diskutiert werden. Dann haben sie eine explizite Zeitabhängigkeit vermöge der Transformationsgleichung

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \Psi(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (4.3.12)$$

wobei  $\Psi(\mathbf{x})$  der (bis anhin betrachtete) Feldoperator in Schrödingerbild ist. Die Zeitentwicklung wird dann durch die für das Heisenberg-Bild übliche Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = -[\hat{H}, \Psi(\mathbf{x}, t)] = -e^{i\hat{H}t/\hbar} [\hat{H}, \Psi(\mathbf{x})] e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (4.3.13)$$

beschrieben.

Wir berechnen zunächst den Kommutator mit dem kinetischen Energieoperator  $\hat{T}$  (im folgenden unterdrücken wir die Spinindizes, auf die der Hamiltonoperator nach Annahme nicht wirkt)

$$\begin{aligned} [\hat{T}, \Psi(\mathbf{x})] &= \int d^3\mathbf{y} \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla\Psi^\dagger(\mathbf{y})\nabla\Psi(\mathbf{y}), \Psi(\mathbf{x})] \\ &= \int d^3\mathbf{y} \frac{\hbar^2}{2m} \left( -(\nabla_{\mathbf{y}}\delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})) \cdot (\nabla\Psi(\mathbf{y})) \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\Psi(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (4.3.14)$$

Der Kommutator mit dem Zweiteilchen-Wechselwirkungsterm ist andererseits

$$\begin{aligned} [\hat{H}_{\text{ww}}, \Psi(\mathbf{x})] &= \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{y}_1 \int d^3\mathbf{y}_2 [\Psi^\dagger(\mathbf{y}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{y}_2) V(\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2) \Psi(\mathbf{y}_2) \Psi(\mathbf{y}_1), \Psi(\mathbf{x})] \\ &= \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{y}_1 \int d^3\mathbf{y}_2 [\Psi^\dagger(\mathbf{y}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{y}_2), \Psi(\mathbf{x})] V(\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2) \Psi(\mathbf{y}_2) \Psi(\mathbf{y}_1) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{y}_1 \int d^3\mathbf{y}_2 [\pm\delta^{(3)}(\mathbf{y}_2 - \mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{y}_1) - \delta^{(3)}(\mathbf{y}_1 - \mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{y}_2)] \\ &\quad \times V(\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2) \Psi(\mathbf{y}_2) \Psi(\mathbf{y}_1) \\ &= - \int d^3\mathbf{y} \Psi^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Psi(\mathbf{y}) \Psi(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

wobei wir benützt haben, dass  $V(\mathbf{x}) = V(-\mathbf{x})$ , was insbesondere aus der Rotationssymmetrie des Potentials folgt. Formal kann man das dann als Bewegungsgleichung schreiben

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\Psi(\mathbf{x}, t) + \int d^3\mathbf{y} \Psi^\dagger(\mathbf{y}, t) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Psi(\mathbf{y}, t) \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (4.3.16)$$

Es ist im allgemeinen nicht einfach, diese Gleichung zu lösen. Es gibt jedoch einige Näherungsmethoden, die wir zum Teil im nächsten Kapitel betrachten werden, oder die zum Repertoire der Quantenfeldtheorie gehören und über diese Vorlesung hinausgehen.

#### 4.3.4 Freie Felder

Im folgenden werden wir uns hauptsächlich mit dem Fall beschäftigen, bei dem die Wellenfunktionen  $\psi_i(\mathbf{x})$  ebene Wellen sind, die durch  $\mathbf{k} \leftrightarrow i$  parametrisiert werden

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} . \quad (4.3.17)$$

Wir haben hierbei angenommen, dass das System in einen Kasten mit Kantenlänge  $L$  eingeschlossen ist, so dass das Volumen  $V$  gerade  $V = L^3$  ist. Weiterhin verlangen wir periodische Randbedingungen, was dazu führt, dass die erlaubten Wellenzahlvektoren zu

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z} \quad (4.3.18)$$

eingeschränkt sind. In diesem Fall sind die Feldoperatoren explizit durch

$$\Psi_s(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} a_{\mathbf{k}s} \quad \Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} a_{\mathbf{k}s}^\dagger \quad (4.3.19)$$

gegeben, wobei  $a_{\mathbf{k}s}^\dagger$  und  $a_{\mathbf{k}s}$  der Erzeugungs- beziehungsweise Vernichtungsoperator für ein Teilchen im Zustand mit Wellenvektor  $\mathbf{k}$  und Spinindex  $s$  ist.

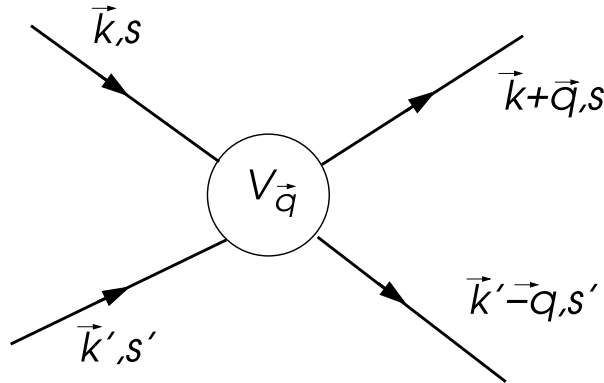


Abbildung 8: Graphische Darstellung der Zwei-Teilchen Wechselwirkung.

In diesem Fall vereinfachen sich manche der obigen Formeln. Zum Beispiel ist der Operator der kinetischen Energie nun einfach

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}s} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} . \quad (4.3.20)$$

Die obigen Zweiteilchenwechselwirkung wird

$$\hat{H}_{\text{ww}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q}} \sum_{s_1 s_2} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} s_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} s_2}^\dagger V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}_2 s_2} a_{\mathbf{k}_1 s_1} , \quad (4.3.21)$$

wobei

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} . \quad (4.3.22)$$

Hierbei haben wir benützt, dass

$$\int_V d^3\mathbf{x} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1+\mathbf{q}-\mathbf{k}'_1)} = \frac{1}{V} \delta_{\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \quad (4.3.23)$$

ist und entsprechend für das  $\mathbf{y}$ -Integral.

Die Formulierung mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren kann auch bildlich verstanden werden, nämlich als die Vernichtung zweier Teilchen mit Wellenvektoren  $\mathbf{k}_1$  und  $\mathbf{k}_2$  und die Erzeugung neuer Teilchen  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$  und  $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}$ , wobei ein Impulsübertrag von  $\mathbf{q}$  stattgefunden hat.

## 5 Korrelationsfunktionen und Anwendungen

In diesem Kapitel wollen wir den Formalismus der zweiten Quantisierung auf eine Reihe von einfachen Problemen anwenden. Zunächst betrachten wir ein Gas nicht-wechselwirkender Spin- $\frac{1}{2}$  Fermionen.

### 5.1 Korrelationsfunktionen für Fermionen

Wir betrachten ein Gas von  $N$  freien Fermionen mit spin  $S = 1/2$ . Der Grundzustand ist gegeben durch die Besetzung der niedrigsten Einteilchenenergiezustände mit je zwei Fermionen ( $\uparrow$  und  $\downarrow$ ). Die Einteilchenenergien sind durch  $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$  gegeben. Daraus folgt für den Grundzustand:

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| \leq k_F, s} a_{\mathbf{k}s}^\dagger |0\rangle, \quad (5.1.1)$$

wobei die vorgegebene gesamte Teilchenzahl gleich

$$N = \sum_{\mathbf{k}, s} \langle \Phi_0 | \underbrace{\hat{n}_{\mathbf{k}s}}_{a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}} | \Phi_0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}s} \quad (5.1.2)$$

ist, mit

$$n_{\mathbf{k}s} = \begin{cases} 1 & |\mathbf{k}| \leq k_F \\ 0 & |\mathbf{k}| > k_F \end{cases}. \quad (5.1.3)$$

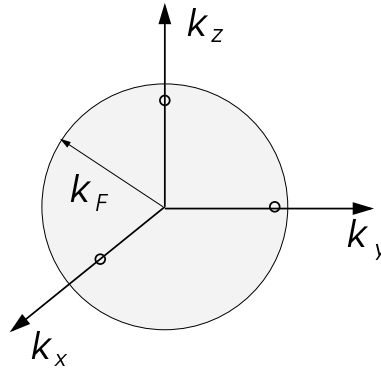


Abbildung 9: Die Fermi-Kugel.

Dies definiert die Fermi-Wellenzahl  $k_F$ , denn

$$N = \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}s} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3\mathbf{k} \, 1 = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad \Rightarrow k_F = [3\pi^2 n]^{1/3}, \quad (5.1.4)$$

wobei  $n$  die mittlere Teilchendichte ist,  $n = N/V$ . Die Dichte der Fermionen ist konstant

im Raum,

$$\begin{aligned}
\langle \Phi_0 | \hat{\rho}(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle &= \sum_s \langle \Phi_0 | \Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_s(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle \\
&= \frac{1}{V} \sum_s \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{x}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)} \langle \Phi_0 | a_{\mathbf{k}_2 s}^\dagger a_{\mathbf{k}_1 s} | \Phi_0 \rangle \\
&= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} s} \langle \Phi_0 | a_{\mathbf{k} s}^\dagger a_{\mathbf{k} s} | \Phi_0 \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k} s} = n . \quad (5.1.5)
\end{aligned}$$

Die einfachste Anregung eines entarteten Elektronengases erhält man, indem man ein Elektron aus der Fermi-Kugel herausnimmt und in einen Zustand ausserhalb der Fermi-Kugel bringt. Man sagt dann auch, dass man ein Teilchen-Loch-Paar erzeugt, denn der zugehörige Zustand ist

$$|\Phi\rangle = a_{\mathbf{k}_1 s_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 s_2} |\Phi_0\rangle , \quad (5.1.6)$$

wobei  $|\mathbf{k}_2| \leq k_F$  und  $|\mathbf{k}_1| > k_F$ . Das im Zustand  $|\mathbf{k}_1, s_1\rangle$  fehlende Elektron wirkt sich wie ein positiv geladenes Teilchen (Loch) aus.

### 5.1.1 Einteilchen Korrelationsfunktion

Wir untersuchen nun die Amplitude dafür, dass wir am Ort  $\mathbf{y}$  dem System ein Teilchen mit Spin  $s$  entnehmen und es bei  $\mathbf{x}$  wieder einfügen können. Dies wird durch die Korrelationsfunktion

$$G_s(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \langle \Phi_0 | \Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_s(\mathbf{y}) | \Phi_0 \rangle = \frac{n}{2} g_s(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (5.1.7)$$

beschrieben. Wir berechnen

$$\begin{aligned}
G_s(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x} + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{y}} \underbrace{\langle \Phi_0 | a_{\mathbf{k}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 s} | \Phi_0 \rangle}_{= n_{\mathbf{k}_1 s} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}} = \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} dk k^2 \int_{-1}^{+1} d \cos \theta e^{ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \cos \theta} \\
&= \frac{1}{2\pi^2 |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \int_0^{k_F} dk k \sin(k|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) = \frac{3n}{2} \frac{\sin x - x \cos x}{x^3} \Big|_{x=k_F |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} .
\end{aligned}$$

Man sieht leicht ein, dass

$$\lim_{\mathbf{r} \rightarrow 0} G_s(\mathbf{r}) = \frac{n}{2} , \quad \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} G_s(\mathbf{r}) = 0 . \quad (5.1.8)$$

Die Einteilchen-Korrelationsfunktion  $g_s(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  entspricht gerade dem Überlapp der beiden (normierten) Zustände

$$\sqrt{\frac{2}{n}} \Psi_s(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle \quad \text{und} \quad \sqrt{\frac{2}{n}} \Psi_s(\mathbf{y}) | \Phi_0 \rangle . \quad (5.1.9)$$

### 5.1.2 Paarkorrelationsfunktion

Die Paarkorrelationsfunktion definieren wir durch

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \langle \Phi_0 | \Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_{s'}^\dagger(\mathbf{y}) \Psi_{s'}(\mathbf{y}) \Psi_s(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle . \quad (5.1.10)$$

Dies ist die Wahrscheinlichkeit, dem System zwei Teilchen entnehmen zu können, eines am Ort  $\mathbf{x}$  mit Spin  $s$  und das andere bei  $\mathbf{y}$  mit Spin  $s'$

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{\mu} |\langle \Phi_{\mu}(N-2) | \Psi_{s'}(\mathbf{y}) \Psi_s(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle|^2 , \quad (5.1.11)$$

wobei die Summe über alle um 2 Teilchen reduzierten Zustände läuft. Diese Identität folgt direkt aus der Definition durch Einsetzen der Eins.

Im Impulsraum (Besetzungszahlraum) lässt sich die Korrelationsfunktion wiederum einfach ausrechnen

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}} e^{-i(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{y}} \langle \Phi_0 | a_{\mathbf{k}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{q}_1 s'}^\dagger a_{\mathbf{q}_2 s'} a_{\mathbf{k}_2 s} | \Phi_0 \rangle . \quad (5.1.12)$$

Beachte, dass der Erwartungswert auf der rechten Seite nur dann nicht verschwindet, wenn wir jedes Teilchen, das wir vernichten, auch wieder erzeugen. Betrachten wir zunächst den Fall  $s \neq s'$ , dann ergibt sich sofort, dass  $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$  und  $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2$ , und wir erhalten

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\mathbf{k} s} \hat{n}_{\mathbf{q} s'} | \Phi_0 \rangle = \left(\frac{n}{2}\right)^2 , \quad (5.1.13)$$

d.h.  $g_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 1$  ist unabhängig vom Abstand. Fermionen mit ungleichem Spin (unterscheidbar) sind völlig unkorreliert.

Anders ist die Situation für den Fall  $s = s'$ , denn dann findet man

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | a_{\mathbf{k}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{q}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{q}_2 s} a_{\mathbf{k}_2 s} | \Phi_0 \rangle &= \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} \langle \Phi_0 | a_{\mathbf{k}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{q}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{q}_2 s} a_{\mathbf{k}_2 s} | \Phi_0 \rangle \\ &\quad + \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{k}_2} \langle \Phi_0 | a_{\mathbf{k}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{q}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{q}_2 s} a_{\mathbf{k}_2 s} | \Phi_0 \rangle \\ &= \left( \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} - \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{k}_2} \right) \langle \Phi_0 | a_{\mathbf{k}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{k}_1 s} a_{\mathbf{q}_1 s}^\dagger a_{\mathbf{q}_1 s} | \Phi_0 \rangle \\ &= \left( \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} - \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{k}_2} \right) n_{\mathbf{k}_1 s} n_{\mathbf{q}_1 s} . \end{aligned} \quad (5.1.14)$$

Damit folgt

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (1 - e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})}) n_{\mathbf{k} s} n_{\mathbf{q} s} = \left(\frac{n}{2}\right)^2 [1 - g_s(\mathbf{x} - \mathbf{y})^2] , \quad (5.1.15)$$

und daher

$$g_{ss}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 1 - \frac{9(\sin x - x \cos x)^2}{x^6} \Big|_{x=k_F|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} . \quad (5.1.16)$$

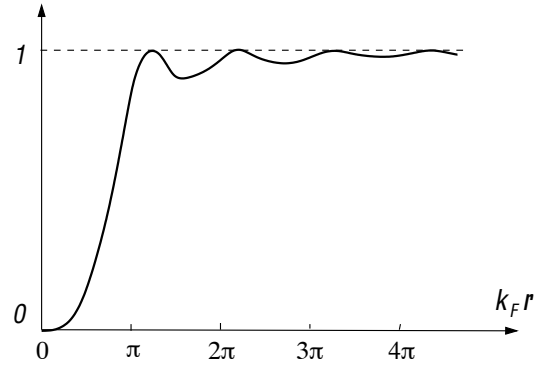


Abbildung 10: Die Funktion  $g_{ss}$ .

Es entsteht ein sogenanntes Austauschloch für Fermionen des gleichen Spins – eine Manifestation des Pauli-Prinzips. Die gesamte Wahrscheinlichkeit ein anderes Fermion im Abstand  $\mathbf{r}$  eines gegebenen Fermions zu finden, ist

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} [g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}) + g_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})] . \quad (5.1.17)$$

Die totale Dichtereduktion um ein Fermion ist daher

$$\begin{aligned} n \int d^3\mathbf{r} (g(\mathbf{r}) - 1) &= -\frac{n}{2} \int d^3\mathbf{r} \{g_s(\mathbf{r})\}^2 = -\frac{2}{n} \int d^3\mathbf{r} \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}s} n_{\mathbf{k}'s} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \\ &= -\frac{2}{nV} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}s} = -1 , \end{aligned} \quad (5.1.18)$$

d.h. das Austauschloch beinhaltet gerade ein einzelnes Fermion. Somit nimmt jedes Fermion im Raum ein gewisses Volumen (je nach Dichte  $n$ ) für sich in Anspruch. Der Radius, den ein Fermion einnimmt, ist definiert als

$$n = \frac{3}{4\pi d^3} \quad \Longrightarrow \quad r_s = \frac{d}{a_0} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{me^2}{\hbar^2 k_F} , \quad (5.1.19)$$

wobei  $r_s$  den dimensionslosen Radius, der in Einheiten des Bohr-Radius  $a_0$  gemessen wird, bezeichnet.

## 5.2 Grundzustandsenergie des Elektronengases

Wir führen nun eine einfache Abschätzung der Grundzustandsenergie eines geladenen Elektronengases durch. Jedes Elektron besitzt die Ladung  $-e$ . Um Divergenzen in der Energie zu vermeiden, führen wir eine uniforme, positive Ladungsdichte  $en$  als Hintergrund (ein ausgeschmiertes Ionengitter) ein, so dass das gesamte System ladungsneutral ist. Dieses System ist unter dem Namen ‘Jellium-Modell’ bekannt.



Die Näherung, die wir hier anwenden, wird **Hartree-Fock-Methode** genannt. Der Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{H}_{\text{ion}} + \hat{H}_{\text{ww}} \quad (5.2.1)$$

wobei  $\hat{T}$  die kinetische Energie beschreibt,  $\hat{H}_{\text{ion}}$  die durch das Ionengitter produzierte potentielle Energie — wir berücksichtigen nur das Coulomb Potential eines Ions, also  $V(\mathbf{r}) = e^2/|\mathbf{r}|$  — und  $\hat{H}_{\text{ww}}$  die Wechselwirkung beschreibt (siehe (4.3.21)). Die Näherung besteht nun darin, dass wir die Energie durch den Erwartungswert mit dem Grundzustand des freien Elektronengases  $|\Phi_0\rangle$  abschätzen, also

$$E_{\text{HF}} = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle . \quad (5.2.2)$$

Wir können also die drei Terme separat behandeln. Für die kinetische Energie finden wir

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}} &= \langle \Phi_0 | \hat{T} | \Phi_0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}s} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_{\mathbf{k}s} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{|\mathbf{k}| \leq k_F} d^3\mathbf{k} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \\ &= N \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = N \frac{3}{5} E_F = N \epsilon_{\text{kin}} , \end{aligned} \quad (5.2.3)$$

wobei  $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$  die Fermi-Energie bezeichnet.

Der Wechselwirkungsterm produziert

$$\begin{aligned} E_{\text{ww}} &= \langle \Phi_0 | \hat{H}_{\text{ww}} | \Phi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sum_{ss'} \langle \Phi_0 | \Psi_s^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_{s'}^\dagger(\mathbf{y}) \Psi_{s'}(\mathbf{y}) \Psi_s(\mathbf{x}) | \Phi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sum_{ss'} \frac{n^2}{4} g_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) . \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

Da

$$g_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = (1 - \delta_{ss'}) + \delta_{ss'} (1 - g_s(\mathbf{x} - \mathbf{y}))^2 = 1 - \delta_{ss'} g_s(\mathbf{x} - \mathbf{y})^2 \quad (5.2.5)$$

kann man den letzten Term aufteilen in den Hartree-Term und den Fock-Term

$$\sum_{ss'} \frac{n^2}{4} g_{ss'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \underbrace{\sum_{ss'} \frac{n^2}{4}}_{\text{Hartree}} - \underbrace{\sum_{ss'} \delta_{ss'} G_s(\mathbf{x} - \mathbf{y})^2}_{\text{Fock}} . \quad (5.2.6)$$

Der erste Term ist der direkte oder Hartree-Term

$$E_{\text{Hartree}} = \frac{V}{2} n^2 V_0 = N \frac{n V_0}{2} \quad \text{mit} \quad V_0 = \int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) , \quad (5.2.7)$$

und der zweite ist der Austausch- oder Fock-Term:

$$\begin{aligned} E_{\text{Fock}} &= -\frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} \sum_s G_s(\mathbf{x} - \mathbf{y})^2 V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ &= -N \frac{9n}{4} \int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \left[ \frac{\sin k_F |\mathbf{r}| - k_F |\mathbf{r}| \cos k_F |\mathbf{r}|}{(k_F |\mathbf{r}|)^3} \right]^2 = N \epsilon_{\text{ex}} . \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

Dieser zweite Term ergibt eine Korrektur für die Wechselwirkungsenergie, die dadurch zustande kommt, dass die Fermionen vermeiden sich gegenseitig zu nahe zu kommen. Dadurch wird die Coulomb-Energie *erniedrigt*. Für das Coulomb-Potential  $V(\mathbf{r}) = e^2/|\mathbf{r}|$ , ergibt sich die Austauschwechselwirkung zu

$$\epsilon_{\text{ex}} = -\frac{9\pi n e^2}{k_F^2} \int_0^\infty dx \frac{(\sin x - x \cos x)^2}{x^5} = -\frac{3e^2}{4\pi} k_F. \quad (5.2.9)$$

Die Energie pro Elektron ist also

$$\frac{E}{N} = \epsilon_{\text{kin}} + \frac{nV_0}{2} + \epsilon_{\text{ex}}. \quad (5.2.10)$$

Für das (langreichweitige) Coulomb-Potential divergiert  $V_0$ . Um diese unphysikalische Divergenz zu beheben berücksichtigen wir nun zusätzlich die Wechselwirkung der Elektronen mit dem uniformen positiven Hintergrund und erhalten den zusätzlichen Beitrag

$$E_{\text{ion}} = -n \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \langle \Phi_0 | \hat{\rho} | \Phi_0 \rangle = -NnV_0. \quad (5.2.11)$$

Ausserdem hat der Ionen-Hintergrund noch eine elektrostatische Selbstenergie

$$E'_{\text{ion}} = \frac{n^2}{2} \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = N \frac{nV_0}{2}, \quad (5.2.12)$$

womit sich der direkte Term mit den Hintergrundsbeiträgen gerade weghebt. Insbesondere entfernt dies daher gerade die Divergenz proportional zu  $V_0$ .

Wir können auch den Fermi Wellenvektor durch den Atomradius ausdrücken; dazu beobachten wir, dass gemäss (5.1.4)

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{3}{4\pi r_0^3} = \frac{3}{4\pi a_0^3 r_s^3}, \quad r_s = \frac{r_0}{a_0} \quad (5.2.13)$$

wobei  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$  der Bohr'sche Radius ist. Hierbei ist  $r_0$  der Radius einer Kugel, deren Volumen gleich dem Volumen pro Teilchen ist;  $r_0$  ist also ein Mass für die Grösse des Atoms. Die resultierende Energie pro Elektron ist dann

$$\frac{E}{N} = \epsilon_{\text{kin}} + \epsilon_{\text{ex}} = \left[ \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right] Ry \quad (5.2.14)$$

wobei wir den Radius  $r_s$  in Einheiten von Rydberg ( $Ry = e^2/2a_0$ ) ausgedrückt haben. Unsere Näherung ist vernünftig für  $r_s$  von der Grössenordnung 1. Die minimale Energie ergibt sich für  $r_s = 4.83$ , ein Wert der sich gut mit Alkali-Metallen wie Na mit  $r_s = 3.96$  oder K mit  $r_s = 4.86$  vergleichen lässt. Korrelationseffekte, wie etwa die Abschirmung des Coulomb-Potentials durch Elektronen-Umverteilung (Korrekturen zu  $|\Phi_0\rangle$ ) ergeben weitere Terme

$$\frac{E}{Ry} = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + \underbrace{0.062 \ln r_s - 0.096}_{\text{Korrelationskorrektur}} + \dots \quad (5.2.15)$$

Die Berechnung dieser Korrekturen geht jedoch über die Zielsetzung dieser Vorlesung hinaus.

### 5.2.1 Wigner-Kristall

Im Jahre 1934 hat Eugene Wigner den Vorschlag gemacht, dass für sehr kleine Elektrodichten  $r_s \rightarrow \infty$  die Elektronen ein Gitter (**Wigner-Kristall**) bilden würden. Dies kommt dadurch zustande, dass die kinetische Energie schneller abnimmt als die Coulomb-Energie, wenn  $r_s$  gross wird. Wenn schliesslich die Coulomb-Energie dominiert, strebt das Elektronengas eine statische regelmässige Ladungsverteilung an. Es ist allerdings sehr viel komplizierter die Energie dieses kristallinen Zustandes abzuschätzen.

Der Wigner-Kristall ist bisher in dreidimensionalen Systemen nicht beobachtet worden. In zweidimensionalen Systemen findet jedoch die Kristallisation der Elektronen statt. Ein Beispiel sind Elektronen auf einer Helium-Oberfläche, wo sie ein Dreiecksgitter bilden (C.C. Grimes & G. Adams 1979) mit  $r_s \sim 10^4$ .

## 5.3 Korrelationsfunktionen für Bosonen

Das Verhalten von Bosonen ist deutlich anders. Betrachten wir einen Zustand von  $N$  freien Bosonen ohne Spin. In der Besetzungszahlbasis ist ein Zustand von der Form

$$|\Phi\rangle = |n_{\mathbf{k}_0}, n_{\mathbf{k}_1}, \dots\rangle = \dots (a_{\mathbf{k}_1}^\dagger)^{n_{\mathbf{k}_1}} (a_{\mathbf{k}_0}^\dagger)^{n_{\mathbf{k}_0}} |0\rangle, \quad (5.3.1)$$

wobei  $n_{\mathbf{k}_j} = 0, 1, 2, \dots$  die Besetzungszahl bezeichnet. Der Erwartungswert der Teilchendichte ist dann

$$\langle \Phi | \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) | \Phi \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}} \underbrace{\langle \Phi | a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2} | \Phi \rangle}_{n_{\mathbf{k}_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = n, \quad (5.3.2)$$

und ist daher von  $\mathbf{x}$  unabhängig.

Um den Unterschied zu fermionischen Systemen zu verstehen, ist es instruktiv, die Paarkorrelationsfunktion zu bestimmen. Diese ist wie zuvor durch

$$\begin{aligned} n^2 g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= \langle \Phi | \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \Psi^\dagger(\mathbf{y}) \Psi(\mathbf{y}) \Psi(\mathbf{x}) | \Phi \rangle \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x} - i(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{y}} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{q}_1}^\dagger a_{\mathbf{q}_2} a_{\mathbf{k}_2} | \Phi \rangle \end{aligned}$$

definiert. Bei der Berechnung des Erwartungswertes müssen wir wiederum darauf achten, dass Teilchen, die vernichtet werden, auch wieder erzeugt werden müssen. Damit kommen nur folgende Kombinationen von Wellenvektoren in Frage:  $(\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2)$  und  $(\mathbf{k}_1 = \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1 = \mathbf{k}_2)$ , was nicht ausschliesst, dass alle Wellenvektoren gleich sind. Daher finden wir

$$\begin{aligned} &\langle \Phi | a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{q}_1}^\dagger a_{\mathbf{q}_2} a_{\mathbf{k}_2} | \Phi \rangle \\ &= (1 - \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_1}) [\delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} + \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{k}_2}] \underbrace{\langle \Phi | a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{q}_1}^\dagger a_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{k}_1} | \Phi \rangle}_{= n_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{q}_1}} \\ &\quad + \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} \underbrace{\langle \Phi | a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_1} | \Phi \rangle}_{= n_{\mathbf{k}_1} (n_{\mathbf{k}_1} - 1)}, \end{aligned}$$

woraus folgt, dass

$$\begin{aligned}
n^2 g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= \frac{1}{V^2} \left[ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (1 - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}) (1 + e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})}) n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} - 1) \right] \\
&= \frac{1}{V^2} \left[ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^2 - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} + \left| \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})} n_{\mathbf{k}} \right|^2 \right] \\
&= n^2 + \left| \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})} n_{\mathbf{k}} \right|^2 - \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} + 1) .
\end{aligned} \tag{5.3.3}$$

Nun betrachten wir zwei Fälle:

**Fall (I):** Alle Bosonen belegen den gleichen Zustand mit  $\mathbf{k}_0$ , d.h.  $n_{\mathbf{k}} = N\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_0}$ . Dann finden wir sofort

$$n^2 g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 2n^2 - \frac{1}{V^2} N(N+1) = \frac{N(N-1)}{V^2} , \tag{5.3.4}$$

d.h. es liegt keine Korrelation vor. Die Wahrscheinlichkeit das erste Teilchen bei  $\mathbf{x}$  zu finden ist  $N/V$ , so dass die Wahrscheinlichkeit für das zweite Teilchen noch  $(N-1)/V$  beträgt.

**Fall (II):** Die Bosonen-Verteilung wird durch eine Gaus'sche Verteilung beschrieben

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{(2\pi)^3 n}{(b\sqrt{\pi})^3} e^{-(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2/b^2} . \tag{5.3.5}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}
n^2 g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) &= n^2 + \left| \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})} n_{\mathbf{k}} \right|^2 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{V}\right) \\
&= n^2 \left( 1 + e^{-b^2(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2/2} \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{V}\right) .
\end{aligned} \tag{5.3.6}$$

wobei wir benützt haben, dass

$$\begin{aligned}
\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})} n_{\mathbf{k}} &= \frac{(2\pi)^3 n}{(b\sqrt{\pi})^3} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})} e^{-(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2/b^2} \\
&= n e^{-b^2(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2/4} e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})} .
\end{aligned} \tag{5.3.7}$$

Wir sehen, dass die Wahrscheinlichkeit zwei Bosonen am selben Ort zu finden zweimal so gross ist als die beiden sehr weit voneinander anzutreffen. Damit ist klar, dass im Gegensatz zu Fermionen Bosonen die Tendenz haben, sich zusammenzuballen.

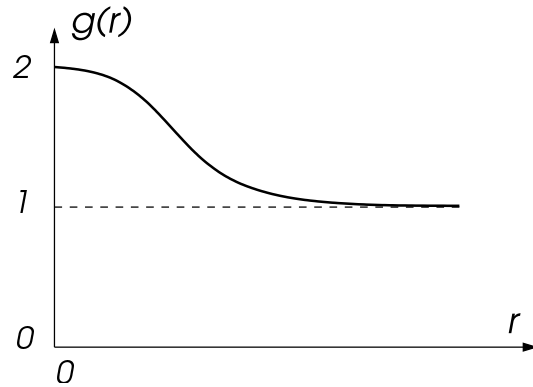


Abbildung 11: Die bosonische Paar-Korrelationsfunktion  $g$ .

### 5.3.1 Hanbury-Brown und Twiss-Experiment

Photonen sind Bosonen, so dass man das Konzept der Paarkorrelation mit ihnen testen kann. Betrachte eine Anlage der folgenden Form:

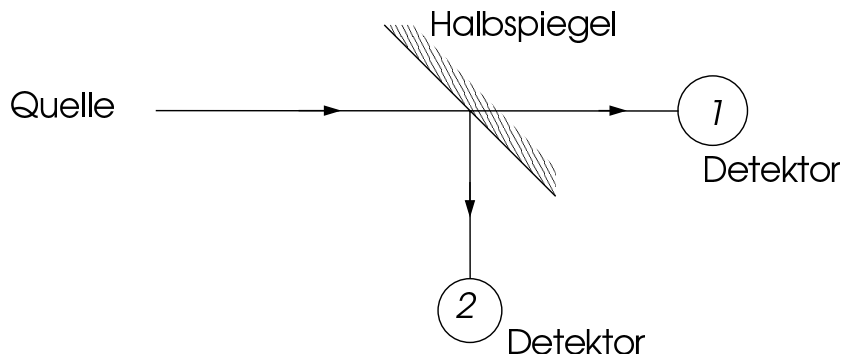


Abbildung 12: Hanbury-Brown und Twiss-Experiment.

wo ein Lichtstrahl aus einer inkohärenten Quelle an einem halbreflektierenden Spiegel in zwei Strahlen aufgespalten wird, die dann in zwei verschiedenen Detektoren 1 und 2 nachgewiesen werden. Man betrachtet nun die zeitliche Korrelation der detektierten Photonen in den beiden Detektoren

$$\overline{I_1(t)I_2(t + \tau)} = g(c\tau) , \quad (5.3.8)$$

wobei über die Zeit  $t$  gemittelt wird und  $c\tau$  die räumliche Distanz der Photonen vor dem Spiegel angibt ( $c$ : Lichtgeschwindigkeit). Das Resultat dieser Messung kann innerhalb der klassischen Elektrodynamik diskutiert werden. Betrachten wir zwei Moden gleicher Polarisation, die aus der Quelle kommen:  $\alpha e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  und  $\beta e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$ . An den beiden Detektoren wird eine Superposition der beiden beobachtet, deren Intensität gegeben ist durch

$$\begin{aligned} \bar{I}_j &= |\alpha e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} + \beta e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j}|^2 = |\alpha|^2 + |\beta|^2 + \underbrace{2\text{Re}\{\alpha\beta^* e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_j}\}}_{= 0 \text{ für inkohärente Strahlung}} , \quad (5.3.9) \end{aligned}$$

wobei  $j = 1, 2$  mit  $\mathbf{r}_j$  der Position des jeweiligen Detektors. Die Korrelation der beiden Signale ist jedoch

$$\begin{aligned}\overline{I_1 I_2} &= |\alpha|^4 + |\beta|^4 + |\alpha\beta|^2 \left( 1 + e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)} + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} e^{-i\mathbf{k}'(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)} + 1 \right) \\ &= \bar{I}_1 \bar{I}_2 + 2|\alpha\beta|^2 \cos[(\mathbf{k} - \mathbf{k}')(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] ,\end{aligned}\tag{5.3.10}$$

woraus klar wird, dass die Korrelation maximal wird, wenn  $r_1 = r_2$  ( $c\tau = |r_1 - r_2|$ , d.h. wenn die Distanz der Photonen, die im Zeitabstand  $\tau$  aus der Quelle emittiert werden, gerade gleich  $c\tau$  ist). Wenn wir wiederum annehmen, dass die Verteilungsfunktion der Wellenvektoren Gauss'sche Form hat, dann ergibt sich die gleiche Korrelationsfunktion wie in (5.3.6). Damit wird gezeigt, dass die Photonen tatsächlich bosonisches Verhalten zeigen. Andererseits wird auch klar, dass diese bosonischen Eigenschaften im klassischen Superpositionsverhalten der elektromagnetischen Strahlung enthalten sind.