

# QUANTENMECHANIK II

Prof. Günter Sigl  
II. Institut für Theoretische Physik der Universität Hamburg  
Luruper Chaussee 149  
D-22761 Hamburg  
Germany  
email: guenter.sigl@desy.de  
tel: 040-8998-2224

1. Februar 2011

## **Zusammenfassung**

Ziel dieser Vorlesung ist eine systematische Darstellung der wichtigsten fortgeschrittenen Anwendungen der Quantenmechanik. Neben zweiter Quantisierung und Vielteilchensystemen, die vor allem für die Festkörperphysik relevant sind, sollen die wichtigsten Aspekte der relativistischen Quantenmechanik entwickelt werden.

web-page zur Vorlesung:

<http://www.desy.de/~sigl/lehre/SS10/ThPhysik-II/ThPhysik-II.htm>

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Nichtrelativistische Vielteilchensysteme</b>	<b>3</b>
1.1 Zweite Quantisierung . . . . .	3
1.1.1 Zustände mehrerer identischer Teilchen . . . . .	3
1.1.2 Bosonen und Fermionen . . . . .	4
1.1.3 Feldoperatoren . . . . .	8
1.1.4 Feldgleichungen . . . . .	10
1.1.5 Impulsdarstellung . . . . .	10
1.1.6 Spinfreiheitsgrade . . . . .	11
1.2 Fermigase . . . . .	13
1.2.1 Freie Fermionen . . . . .	13
1.2.2 Wechselwirkende Fermionen . . . . .	15
1.3 Bosegase . . . . .	17
1.3.1 Freie Bosonen . . . . .	17
1.3.2 Wechselwirkende Bosonen . . . . .	20
1.4 Streuung und Korrelationsfunktionen . . . . .	25
1.5 Dynamische Suszeptibilität . . . . .	29
1.6 Das Fluktuations-Dissipations-Theorem . . . . .	33
<b>2 Relativistische Wellengleichungen</b>	<b>34</b>
2.1 Die Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	34
2.2 Die Dirac-Gleichung . . . . .	36
2.3 Pauli-Gleichung als nicht-relativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung . .	38
2.4 Lorentz-Transformationen und Kovarianz der Dirac-Gleichung . . . . .	40
2.5 Bahn-Drehimpuls und Spin . . . . .	43
2.6 Weitere Symmetrien . . . . .	45
2.7 Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld: Exakte Lösungen und Strahlungskorrekturen . . . . .	46

(noch unvollständig)

# 1 Nichtrelativistische Vielteilchensysteme

## 1.1 Zweite Quantisierung

### 1.1.1 Zustände mehrerer identischer Teilchen

In diesem Abschnitt wiederholen und vertiefen wir die in der Quantenmechanik I Vorlesung diskutierten Zustände die aus mehreren ununterscheidbaren Teilchen bestehen. Wir betrachten dazu zunächst den unitären *Permutationsoperator*

$$U(P)\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_{P1}, \dots, \mathbf{r}_{PN}), \quad (1)$$

der auf eine Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  wirkt, welche  $N$  identische Teilchen beschreibt. Jeder Operator  $A$ , der eine sinnvolle physikalische Observable beschreibt, muss mit dem Permutationsoperator vertauschen,

$$[U(P), A] = 0. \quad (2)$$

Dies gilt insbesondere für den Hamilton-Operator,  $A = H$ . Die Matrixelemente eines solchen Operators sind in den Zuständen  $\psi$  und  $U(P)\psi$  identisch,

$$\langle U(P)\psi | A | U(P)\psi \rangle = \langle \psi | U(P)^\dagger A U(P) | \psi \rangle = \langle \psi | U(P)^\dagger U(P) A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle,$$

womit  $\psi$  und  $U(P)\psi$  physikalisch ununterscheidbar sind. Da  $A$  und  $U(P)^\dagger A U(P)$  selbstadjungiert sind, gilt auch die Umkehrung: Wenn der Erwartungswert von  $A$  in allen permutierten Zuständen  $U(P)\psi$  gleich ist, folgt Gl. (2).

In der Natur sind nun die vollständig symmetrischen und vollständig anti-symmetrischen Zustände realisiert. Die symmetrischen Wellenfunktionen,

$$U(P)\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_{P1}, \dots, \mathbf{r}_{PN}) = \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (3)$$

entsprechen dabei den *Bosonen*, während die anti-symmetrischen Zustände,

$$U(P)\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_{P1}, \dots, \mathbf{r}_{PN}) = (-1)^{\text{sign}(P)}\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (4)$$

den *Fermionen* entsprechen. Wegen  $[U(P), H] = 0$  sind diese Symmetrie-Eigenschaften zeitlich invariant. Das *Spin-Statistik-Theorem* besagt dabei, daß Bosonen ganzzahligen Spin haben, während Fermionen halbzahligen Spin besitzen.

Wir betrachten insbesondere den Fall nicht-wechselwirkender Teilchen,

$$H(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i), \quad (5)$$

wobei die Einteilchen-Zustände  $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$  die Eigenzustände des Einteilchen-Hamiltonians sind,

$$h(\mathbf{r}, \mathbf{p})\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{n}}\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

welche durch eine Quantenzahl  $\mathbf{n}$  charakterisiert sind, die für einen drei-dimensionalen Ortsraum im allgemeinen aus drei Komponenten besteht. Diese Eigenzustände können als Orthonormal-Basis gewählt werden, d.h.

$$\langle \mathbf{n}' | \mathbf{n} \rangle = \int \psi_{\mathbf{n}'}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n}}, \quad (7)$$

wobei wir im ersten Ausdruck die *Dirac-Schreibweise* verwendet haben. Sind die Teilchen unterscheidbar, so ist der Hilbertraum  $\mathcal{H}_N$  der  $N$ -Teilchenzustände gleich dem Tensorprodukt des Einteilchen-Hilbertraums  $\mathcal{H}_1$ ,

$$\mathcal{H}_N = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_1.$$

Die Energie-Eigenzustände in diesem Hilbertraum sind gegeben durch die Produktzustände

$$\begin{aligned} \psi_{\underline{n}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \prod_{i=1}^N \psi_{\mathbf{n}_i}(\mathbf{r}_i) \\ H(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) \psi_{\underline{n}}(\mathbf{r}_i) &= E_{\underline{n}} \psi_{\underline{n}}(\mathbf{r}_i) \quad \text{mit} \quad E_{\underline{n}} = \sum_{i=1}^N \epsilon_{\mathbf{n}_i} = \sum_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}(\underline{n}) \epsilon_{\mathbf{n}}, \end{aligned} \quad (8)$$

wobei wir die  $N$ -Teilchen Quantenzahl

$$\underline{n} = (\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_N) \quad (9)$$

und die *Besetzungszahlen*

$$N_{\mathbf{n}}(\underline{n}) = \# \{i \in \{1, \dots, N\}, \mathbf{n}_i = \mathbf{n}\} \quad (10)$$

der Ein-Teilchenzustände  $\psi_{\mathbf{n}}$  eingeführt haben, deren Summe natürlich gleich der Anzahl der Teilchen ist,

$$\sum_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}(\underline{n}) = N.$$

### 1.1.2 Bosonen und Fermionen

Die bosonischen und fermionischen  $N$ -Teilchenzustände erhält man nun durch Symmetrisierung bzw. Anti-Symmetrisierung der Produktzustände Gl. (8). Dies geschieht durch Anwendung der Projektoren

$$P_+ \equiv \frac{1}{N!} \sum_p U(P) \quad (11)$$

$$P_- \equiv \frac{1}{N!} \sum_p \text{sign}(P) U(P), \quad (12)$$

Der aus der Projektion Gl. (11) resultierende auf Eins normierte bosonische Zustand ist damit

$$\begin{aligned} |\{N_{\mathbf{n}}\}^+ \rangle &= \psi_{\{N_{\mathbf{n}}\}}^+(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{(N! \prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}!)^{1/2}} \sum_P \psi_{\mathbf{n}_{P1}}(\mathbf{r}_1) \cdots \psi_{\mathbf{n}_{PN}}(\mathbf{r}_N) = \\ &= \left( \frac{\prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}!}{N!} \right)^{1/2} \sum'_P \psi_{\mathbf{n}_{P1}}(\mathbf{r}_1) \cdots \psi_{\mathbf{n}_{PN}}(\mathbf{r}_N), \end{aligned} \quad (13)$$

wobei sich die Summe  $\sum'_P$  im letzten Ausdruck über alle Permutationen erstreckt, die zu den  $N! / (\prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}!)$  orthonormalen Termen führen, was auch den Normierungsfaktor begründet. Der aus der Projektion Gl. (12) resultierende auf Eins normierte fermionische Zustand ist

$$\begin{aligned} |\{N_{\mathbf{n}}\}^- \rangle &= \psi_{\{N_{\mathbf{n}}\}}^-(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \sum_P \text{sign}(P) \psi_{\mathbf{n}_{P1}}(\mathbf{r}_1) \cdots \psi_{\mathbf{n}_{PN}}(\mathbf{r}_N) = \\ &= \frac{1}{(N!)^{1/2}} \det \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_{\mathbf{n}_1}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{r}_1) & \cdots & \psi_{\mathbf{n}_N}(\mathbf{r}_N) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (14)$$

was auch als *Slater-Determinante* bekannt ist. Aufgrund der Anti-Symmetrie können fermionische Zustände natürlich höchstens einfach besetzt sein,  $N_{\mathbf{n}} = 0, 1$ . Ferner sind die Zustände Gl. (13) und (14) für verschiedene Besetzungszahlen orthogonal so daß gilt,

$${}^+ \langle \{N_{\mathbf{n}}\}' | \{N_{\mathbf{n}}\} \rangle^+ = {}^- \langle \{N_{\mathbf{n}}\}' | \{N_{\mathbf{n}}\} \rangle^- = \prod_{\mathbf{n}} \delta_{N_{\mathbf{n}}', N_{\mathbf{n}}} . \quad (15)$$

Der von diesen bosonischen bzw. fermionischen Zuständen aufgespannte Hilbertraum ist damit die Summe über alle symmetrisierten bzw. anti-symmetrisierten  $N$ -Teilchen Hilberträume,

$$\mathcal{H}^{\pm} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} (P_{\pm} \mathcal{H}_N) ,$$

mit zugehörigen Zuständen  $|\psi\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} |\psi_N\rangle$ , wobei die Komponenten  $|\psi_N\rangle$  die oben diskutierten  $N$ -Teilchen Zustände sind. Das zugehörige Skalarprodukt ist

$$\langle \psi' | \psi \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \langle \psi'_N | \psi_N \rangle .$$

Man kann auf diesem auch als *Fock-Raum* bekannten Hilbertraum Vernichtungsoperatoren  $a(\psi)$  und die adjungierten Erzeugungsoperatoren  $a^\dagger(\psi)$ , die jeweils ein Teilchen mit der Einteilchenwellenfunktion  $\psi(\mathbf{r})$  erzeugt bzw. vernichtet, wie folgt definieren:

$$[a(\psi)\psi_{N+1}](\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv (N+1)^{1/2} \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi_{N+1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (16)$$

$$[a^\dagger(\psi)\psi_{N-1}](\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{i=1}^N (\pm 1)^{i-1} \psi(\mathbf{r}_i) \psi_{N-1}(\mathbf{r}_1, \dots, \hat{\mathbf{r}}_i, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (17)$$

wobei  $\psi_N \in \mathcal{H}_N$  jeweils eine  $N$ -Teilchenwellenfunktion mit  $N \geq 0$  sei,  $\pm$  wieder auf Bosonen bzw. Fermionen zutrifft, und der Hut über  $\mathbf{r}_i$  in der zweiten Gleichung bedeutet, daß diese Variable ausgelassen wird. Wir wollen nun den Kommutator  $[a(\psi), a^\dagger(\psi')]$  berechnen, indem wir seine Wirkung auf eine beliebige  $N$ -Teilchen Wellenfunktion  $\psi_N$ ,  $N \geq 0$ , untersuchen:

$$\begin{aligned}
[a(\psi)a^\dagger(\psi')\psi_N](\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= (N+1)^{1/2} \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) [a^\dagger(\psi')\psi_N](\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d^3\mathbf{r} \\
&= \langle \psi | \psi' \rangle \pm \sum_{i=1}^N (\pm 1)^{i-1} \psi'(\mathbf{r}_i) \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \hat{\mathbf{r}}_i, \dots, \mathbf{r}_N) d^3\mathbf{r}, \\
[a^\dagger(\psi')a(\psi)\psi_N](\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{i=1}^N (\pm 1)^{i-1} \psi'(\mathbf{r}_i) [a(\psi)\psi_N](\mathbf{r}_1, \dots, \hat{\mathbf{r}}_i, \dots, \mathbf{r}_N) = \\
&= \sum_{i=1}^N (\pm 1)^{i-1} \psi'(\mathbf{r}_i) \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \hat{\mathbf{r}}_i, \dots, \mathbf{r}_N) d^3\mathbf{r}.
\end{aligned}$$

Daraus und aus Gl. (16) und Gl. (17) folgt sofort

$$\begin{aligned}
[a(\psi), a^\dagger(\psi')]_{\pm} &= \langle \psi | \psi' \rangle \\
[a(\psi), a(\psi')]_{\pm} &= 0,
\end{aligned} \tag{18}$$

wobei  $[A, B]_{\pm} = AB \pm BA$  der Kommutator bzw. Anti-Kommutator für Bosonen bzw. Fermionen ist. Wir wenden diese Relationen insbesondere auf eine vollständige Basis  $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$  von Einteilchen-Zuständen an und erhalten mit  $a_{\mathbf{n}} \equiv a(\psi_{\mathbf{n}})$ ,  $a_{\mathbf{n}}^\dagger \equiv a^\dagger(\psi_{\mathbf{n}})$  aus Gl. (18)

$$\begin{aligned}
[a_{\mathbf{n}}, a_{\mathbf{n}'}^\dagger]_{\pm} &= \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \\
[a_{\mathbf{n}}, a_{\mathbf{n}'}]_{\pm} &= [a_{\mathbf{n}}^\dagger, a_{\mathbf{n}'}^\dagger]_{\pm} = 0.
\end{aligned} \tag{19}$$

Daraus folgt

$$a_{\mathbf{n}'} a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{n}} = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} a_{\mathbf{n}} \pm a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{n}'} a_{\mathbf{n}} = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} a_{\mathbf{n}} + a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}'}$$

und damit

$$[a_{\mathbf{n}'}, a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{n}}] = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} a_{\mathbf{n}}, \tag{20}$$

für den Kommutator  $[A, B] = [A, B]_- = AB - BA$ , so daß wir

$$N_{\mathbf{n}} = a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{n}} \tag{21}$$

als *Anzahloperator* für den Zustand  $\mathbf{n}$  identifizieren können. Es wird aus dem Zusammenhang immer klar sein ob es sich bei  $N_{\mathbf{n}}$  um den Operator oder seinen Eigenwert, die Besetzungszahl, handelt weshalb unsere Notation dies nicht unterscheidet. Der Gesamtanzahloperator ist damit natürlich

$$N = \sum_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}. \tag{22}$$

Wählt man für  $\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$  die Basis der Einteilchen-Energie-Eigenzustände, dann kann man damit den Hamiltonoperator schreiben als

$$H = \sum_{\mathbf{n}} \epsilon_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}, \quad (23)$$

woraus auch die Kommutationsrelationen

$$[a_{\mathbf{n}}, N] = a_{\mathbf{n}} \quad (24)$$

$$[a_{\mathbf{n}}, H] = \epsilon_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}} \quad (25)$$

folgen.

Werden in der Definition Gl. (16) für den Vernichter  $a_{\mathbf{n}}$  für die Wellenfunktion  $\psi_{N+1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  nun die bosonischen oder fermionischen Zustände Gl. (13) bzw. Gl. (14) eingesetzt, so zerfällt die Summe über  $(N+1)!$  Permutationen in  $N_{\mathbf{n}}$  identische Terme, in denen das erste Argument von  $\psi_{N+1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  dem Zustand  $\psi_{\mathbf{n}}$  entspricht und die Summe über die  $N!$  Permutationen der verbleibenden Koordinaten  $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$  übrigbleibt. Vergleich der Normierungsfaktoren ergibt damit für Bosonen

$$a_{\mathbf{n}} |\dots, N_{\mathbf{n}}, \dots\rangle^+ = N_{\mathbf{n}}^{1/2} |\dots, N_{\mathbf{n}} - 1, \dots\rangle^+. \quad (26)$$

In Analogie zum harmonischen Oszillator erhält man aus den Kommutationsrelationen Gl. (19) für Bosonen

$$a_{\mathbf{n}}^\dagger |\dots, N_{\mathbf{n}}, \dots\rangle^+ = (N_{\mathbf{n}} + 1)^{1/2} |\dots, N_{\mathbf{n}} + 1, \dots\rangle^+. \quad (27)$$

Die analogen Relationen für Fermionen lauten

$$a_{\mathbf{n}} |\dots, N_{\mathbf{n}}, \dots\rangle^- = N_{\mathbf{n}} (-1)^{l_{\mathbf{n}}} |\dots, N_{\mathbf{n}} - 1, \dots\rangle^- \quad (28)$$

$$a_{\mathbf{n}}^\dagger |\dots, N_{\mathbf{n}}, \dots\rangle^- = (1 - N_{\mathbf{n}}) (-1)^{l_{\mathbf{n}}} |\dots, N_{\mathbf{n}} + 1, \dots\rangle^-$$

wobei der Vorzeichenfaktor von der Anzahl  $l_{\mathbf{n}}$  der Anti-Kommutationen abhängt, die notwendig sind um  $a_{\mathbf{n}}$  an die Position  $\mathbf{n}$  zu bringen. Aus diesen Relationen folgt auch

$$|\{N_{\mathbf{n}}\}\rangle^+ = \frac{1}{(\prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}!)^{1/2}} \prod_{\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}}^\dagger)^{N_{\mathbf{n}}} |0\rangle, \quad |\{N_{\mathbf{n}}\}\rangle^- = \prod_{\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}}^\dagger)^{N_{\mathbf{n}}} |0\rangle, \quad (29)$$

wobei in dem Ausdruck für Fermionen natürlich nur die Zustände mit  $N_{\mathbf{n}} = 1$  auftreten und zudem auf die Reihenfolge der Erzeuger zu achten ist. Außerdem sieht man aus den Definitionen Gl. (13) bzw. Gl. (14) daß

$$\sum_{i=1}^N |\mathbf{m}\rangle_i \langle \mathbf{n}|_i = a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{n}}, \quad (30)$$

wobei  $i$  über alle Teilchen läuft. Allgemeine *Einteilchen-Operatoren* haben damit die Form

$$T = \sum_i t(\mathbf{r}_i) = \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} \langle \mathbf{m}|t|\mathbf{n}\rangle a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{n}}, \quad (31)$$

wobei der Operator  $t = t(\mathbf{r}_i)$  zum Beispiel in der Ortsdarstellung von der Ortskoordinate eines Teilchens abhängt und  $\langle \mathbf{m} | t | \mathbf{n} \rangle$  das Matrixelement im Einteilchen-Hilbertraum  $\mathcal{H}_1$  ist. Iteration von Gl. (30) ergibt

$$\begin{aligned} \sum_{i \neq j} |\mathbf{m}\rangle_i \langle \mathbf{n}\rangle_j \langle \mathbf{k} | \langle \mathbf{l} | j &= \sum_{i \neq j} |\mathbf{m}\rangle_i \langle \mathbf{k} | \langle \mathbf{n}\rangle_j \langle \mathbf{l} | j = \\ &= \sum_{i,j} |\mathbf{m}\rangle_i \langle \mathbf{k} | \langle \mathbf{n}\rangle_j \langle \mathbf{l} | j - \langle \mathbf{k} | \langle \mathbf{n}\rangle \sum_i |\mathbf{m}\rangle_i \langle \mathbf{l} | i = \\ &= a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{l}} - a_{\mathbf{m}}^\dagger [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{n}}^\dagger]_{\mp} a_{\mathbf{l}} = \pm a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{l}} = a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{k}}, \end{aligned}$$

wobei  $\mp$  für Bosonen bzw. Fermionen zutrifft. Man beachte daß die Reihenfolge der Vernichter  $a_{\mathbf{l}}$  und  $a_{\mathbf{k}}$  gegenüber der Reihenfolge von  $\langle \mathbf{k} |$  und  $\langle \mathbf{l} |$  vertauscht ist. Während dies für Bosonen wegen der Vertauschbarkeit von Vernichtern unerheblich ist, invertiert dies für Fermionen wegen der Anti-Kommutation deren Vernichter das Vorzeichen. Für einen allgemeinen *Zweiteilchen-Operator* folgt daraus nun

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} f^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}, \mathbf{k}, \mathbf{l}} |\mathbf{m}\rangle_i \langle \mathbf{n}\rangle_j \langle \mathbf{m}, \mathbf{n} | f^{(2)} | \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle \langle \mathbf{k} | \langle \mathbf{l} | j = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}, \mathbf{k}, \mathbf{l}} \langle \mathbf{m}, \mathbf{n} | f^{(2)} | \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (32)$$

wobei das Matrixelement

$$\langle \mathbf{m}, \mathbf{n} | f^{(2)} | \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle = \int d^3 \mathbf{r}_1 \int d^3 \mathbf{r}_2 \psi_{\mathbf{m}}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{r}_2) f^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1) \psi_{\mathbf{l}}(\mathbf{r}_2). \quad (33)$$

Hierbei hängt zum Beispiel in der Ortsdarstellung  $f = f(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$  symmetrisch von den Ortskoordinaten zweier Teilchen ab und der Faktor  $\frac{1}{2}$  in Gl. (32) stellt sicher daß jede Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen nur einmal auftritt. So hat zum Beispiel der Vielteilchen-Hamilton-Operator die allgemeine Gestalt

$$H = \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} (\langle \mathbf{n} | t | \mathbf{m} \rangle + \langle \mathbf{n} | V | \mathbf{m} \rangle) a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{m}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}, \mathbf{k}, \mathbf{l}} \langle \mathbf{m}, \mathbf{n} | V^{(2)} | \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle a_{\mathbf{m}}^\dagger a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{k}}, \quad (34)$$

wobei  $t$  und  $V$  die Einteilchen-Operatoren für kinetische Energie bzw. potentielle Energie und  $V^{(2)}$  die Zweiteilchen-Wechselwirkungsenergie sind.

### 1.1.3 Feldoperatoren

Wir betrachten nun eine Basistransformation

$$|\nu\rangle = \sum_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{n} | \nu \rangle |\mathbf{n}\rangle. \quad (35)$$

Für die Erzeuger  $a_{\nu}^\dagger$  der Zustände  $|\nu\rangle$  gilt daher

$$a_{\nu}^\dagger = \sum_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{n} | \nu \rangle a_{\mathbf{n}}^\dagger, \quad (36)$$

und durch hermitesche Konjugation

$$a_{\nu} = \sum_{\mathbf{n}} \langle \nu | \mathbf{n} \rangle a_{\mathbf{n}}. \quad (37)$$

Für die Ortseigenfunktionen  $|\mathbf{r}\rangle$  ist

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{n} \rangle = \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) \quad (38)$$

und die resultierenden Vernichter und Erzeuger

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) a_{\mathbf{n}}, \quad \psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{\mathbf{n}} \psi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{r}) a_{\mathbf{n}}^{\dagger} \quad (39)$$

werden als *Feldoperatoren* bezeichnet.  $\psi(\mathbf{r})$  und  $\psi^{\dagger}(\mathbf{r})$  vernichten bzw. erzeugen also jeweils ein Teilchen am Ort  $\mathbf{r}$ . Aufgrund der (Anti-)Kommutatoren Gl. (19) und der Vollständigkeit der Einteilchen-Ortseigenfunktionen folgen sofort die Relationen

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{r}), \psi^{\dagger}(\mathbf{r}')]_{\pm} &= \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ [\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')]_{\pm} &= [\psi^{\dagger}(\mathbf{r}), a^{\dagger}(\mathbf{r}')]_{\pm} = 0. \end{aligned} \quad (40)$$

Wenn die Teilchen keine erhaltenen Quantenzahlen tragen, z.B. wenn sie elektrisch neutral sind, sind die Felder selbst-adjungiert, d.h.  $\psi^{\dagger}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$ .

Den Hamilton-Operator Gl. (34) für Teilchen der Masse  $m$  kann man nun wie folgt durch die Feldoperatoren ausdrücken:

$$\begin{aligned} H &= \int d^3\mathbf{r} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla \psi^{\dagger}(\mathbf{r})] \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_2) V^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1), \end{aligned} \quad (41)$$

wobei die Integrale von den Matrixelementen herrühren und im Ausdruck für die kinetischen Energie partiell integriert wurde.

Die Matrixelemente des Einteilchen-Dichteoperators  $n(\mathbf{r})$  sind gegeben durch  $\langle \mathbf{m} | n(\mathbf{r}) | \mathbf{n} \rangle = \psi_{\mathbf{m}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$  womit die Vorschrift Gl. (31) für den entsprechenden Vielteilchen-Dichteoperator

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} \psi_{\mathbf{m}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) a_{\mathbf{m}}^{\dagger} a_{\mathbf{n}} = \psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (42)$$

Der Operator für die Gesamtteilchenzahl ist damit auch gegeben durch

$$N = \int d^3\mathbf{r} \psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (43)$$

Meist gelangt man von der Einteilchen-Quantenmechanik also zur korrekten Vielteilchen-Beschreibung von Fermionen und Bosonen einfach, indem man für die Einteilchen-Wellenfunktion die Feldoperatoren substituiert, wobei man allerdings auf die Reihenfolge der Operatoren achten muss. Diese Beschreibung ist deshalb auch als *zweite Quantisierung* bekannt. Beispielsweise ergibt sich der *Stromdichte-Operator* zu

$$j(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) - [\nabla \psi^{\dagger}(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r})]. \quad (44)$$

### 1.1.4 Feldgleichungen

Mit Hilfe der Kommutationsrelationen Gl. (40) überzeugt man sich nun leicht daß die Feldoperatoren in der Heisenberg-Darstellung

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{iHt/\hbar}\psi(\mathbf{r}, 0)e^{-iHt/\hbar} \quad (45)$$

die Bewegungsgleichungen

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}, t) + \int d^3\mathbf{r}'\psi^\dagger(\mathbf{r}', t)V^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}', t)\psi(\mathbf{r}, t) \quad (46)$$

erfüllen. Dabei kann man die allgemein gültige Relation

$$[AB, C]_{\pm} = A[B, C]_{\pm} \mp [A, C]_{\pm}B \quad (47)$$

verwenden, indem man das obere Vorzeichen für Fermionen und das untere für Bosonen einsetzt.

### 1.1.5 Impulsdarstellung

Die orthonormierten Impuls-Eigenfunktionen für Teilchen in einer rechteckigen Box mit Seitenlängen  $L_x, L_y, L_z$  lauten

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{V^{1/2}}, \quad (48)$$

mit dem Volumen  $V = L_x L_y L_z$  und den quantisierten Wellenzahlen

$$\mathbf{k} = 2\pi \left( \frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right) \quad (49)$$

welche für  $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$  periodische Randbedingungen erfüllen:

$$\int d^3\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (50)$$

Wir werden die Impulszustände mit den Wellenzahlen  $\mathbf{k}$  charakterisieren wobei der Impuls  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ . Mit der Wahl von *natürlichen Einheiten*,  $\hbar = c_0 = 1$ , wird dazwischen oft nicht mehr unterschieden. Substituiert man nun die Impuls-Eigenfunktionen für die Basis  $|\mathbf{n}\rangle$  in Gl. 39), so erhält man zum Beispiel für die Feldoperatoren

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{V^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}, \quad \psi^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{V^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (51)$$

wobei  $a_{\mathbf{k}}$  und  $a_{\mathbf{k}}^\dagger$  nun die Vernichter bzw. Erzeuger der Impulszustände  $\mathbf{k}$  sind.

Durch Auswerten der in Gl. (33) und (34) auftretenden Matrixelements erhält man daraus für den Hamilton-Operator leicht

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\hbar\mathbf{k})^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} V_{1-\mathbf{k}} a_{\mathbf{l}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l},\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{(2)} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{l}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{k}}, \quad (52)$$

wobei die Fouriertransformierten

$$V_{\mathbf{q}} \equiv \int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (53)$$

und unter der Annahme daß  $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  nur von der Differenz der Ortskoordinaten abhängen,

$$V_{\mathbf{q}}^{(2)} \equiv \int d^3\mathbf{r} V^{(2)}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (54)$$

Damit überträgt  $V_{\mathbf{q}}^{(2)}$  in einer Zwei-Teilchen Reaktion den Impuls  $\mathbf{q}$  von einem Teilchen auf das andere. Die Erzeuger  $a_{\mathbf{k}}^\dagger$  und Vernichter  $a_{\mathbf{k}}$  erfüllen die Standard-(Anti)Kommutationsrelationen Gl. (19).

Die Fouriertransformierte des Dichteoperator Gl. (42) läßt sich nun mit Hilfe von Gl. (50) schreiben als

$$n_{\mathbf{q}} = \int d^3\mathbf{r} n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (55)$$

### 1.1.6 Spinfreiheitsgrade

Im allgemeinen tragen die Feldoperatoren auch Spinfreiheitsgrade, die wir mit  $\sigma$  bezeichnen werden, so daß  $\psi_{\mathbf{n}\sigma}$  ein Skalar, ein Spinor oder ein Vektor sein kann. Die (Anti-)Kommutationsrelationen verallgemeinern sich damit zu

$$\begin{aligned} \left[ \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \right]_{\pm} &= \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} \\ \left[ \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \right]_{\pm} &= \left[ \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}), a_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \right]_{\pm} = 0. \end{aligned} \quad (56)$$

und

$$\begin{aligned} \left[ a_{\mathbf{n}\sigma}, a_{\mathbf{n}'\sigma'}^\dagger \right]_{\pm} &= \delta_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} \delta_{\sigma\sigma'} \\ \left[ a_{\mathbf{n}\sigma}, a_{\mathbf{n}'\sigma'} \right]_{\pm} &= \left[ a_{\mathbf{n}\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{n}'\sigma'}^\dagger \right]_{\pm} = 0. \end{aligned} \quad (57)$$

Für Spin-unabhängige Wechselwirkungen lautet der Hamilton-Operator Gl. (34) dann

$$H = \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}, \sigma} (\langle \mathbf{n}\sigma | t | \mathbf{m}\sigma \rangle + \langle \mathbf{n}\sigma | V | \mathbf{m}\sigma \rangle) a_{\mathbf{n}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{m}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}, \mathbf{k}, \mathbf{l}, \sigma_1, \sigma_2} \langle \mathbf{m}, \mathbf{n} | V^{(2)} | \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle a_{\mathbf{m}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{n}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{l}\sigma_2} a_{\mathbf{k}\sigma_1}, \quad (58)$$

oder in Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{r} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r})] \cdot \nabla \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) V^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (59)$$

Die Bewegungsgleichungen in Ortsdarstellung lauten

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) + \sum_{\sigma'} \int d^3\mathbf{r}' \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t) V^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}', t) \psi_\sigma(\mathbf{r}, t), \quad (60)$$

oder in Impulsdarstellung

$$i\hbar \dot{a}_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{(\hbar\mathbf{k})^2}{2m} a_{\mathbf{k}\sigma}(t) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'\sigma}(t) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{q}, \sigma'} V_{\mathbf{q}}^{(2)} a_{\mathbf{l}+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger(t) a_{\mathbf{l}\sigma'}(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(t). \quad (61)$$

Schließlich lauten die Operatoren für Teilchenzahldichte und Spindichte

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{S}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}), \quad (62)$$

wobei  $\boldsymbol{\sigma}$  die Pauli-Matrizen sind.

Man kann den Feldoperator-Formalismus auch für ein heuristisches Argument für das Spin-Statistik-Theorem verwenden: Sei  $R$  eine Drehung um  $180^\circ$  in der vier-dimensionalen Raum-Zeit um eine der räumlichen Achsen, wobei die Vierer-Koordinaten  $x = (t, \mathbf{r})$  in  $\tilde{x} = (-t, \tilde{\mathbf{r}})$  und der Spinor  $\psi$  in  $R\psi$  übergehen. In der Quantenmechanik charakterisiert die Energie  $E$  den Phasenfaktor  $e^{iEt}$ . Da die Energie immer positiv sein sollte muss sich bei Zeitumkehr-invarianten Prozessen das Vorzeichen der imaginären Einheit  $i$  bei Zeitumkehr umkehren. Die Zeitumkehr-Transformation entspricht daher einem *anti-unitären* Operator  $T$ . Da  $R$  eine Zeitumkehrung beinhaltet, führt daher auch  $R$  den Feldoperator  $\psi$  in Komponenten von  $\psi^\dagger$  über,  $R\psi = U\psi^\dagger$ , mit  $U$  einem unitären Operator. Man betrachte nun den Vakuum-Erwartungswert

$$\langle 0 | (R\psi)(x) \psi(\tilde{x}) | 0 \rangle, \quad (63)$$

in welchem etwaige Lorentz-Indizes kontrahiert sind so daß es sich um einen Skalar handelt. Ferner ist aufgrund des oben gesagten Gl. (63) bei  $x = 0$  positiv definit, da dann  $\tilde{x} = x$  und  $U = \mathbf{1}$ . Wenn der Vakuum-Zustand  $|0\rangle$  Lorentz-invariant ist, sollte Gl. (63) unter einer weiteren Drehung  $R$  invariant sein. Andererseits geht Gl. (63) unter  $R$  über in

$$\langle 0 | (R^2\psi)(\tilde{x}) (R\psi)(x) | 0 \rangle = \pm \langle 0 | \psi(\tilde{x}) (R\psi)(x) | 0 \rangle, \quad (64)$$

wobei im zweiten Schritt  $\pm$  auf ganz- bzw. halbzahligen Spin zutrifft da wir von der Quantenmechanik des Spins wissen daß ein Spinor  $\psi$  unter einer vollen  $360^\circ$  Drehung in  $\pm\psi$  übergeht,  $R^2 = pm\mathbf{1}$ . Durch geeignete Wahl des Koordinaten-Ursprungs kann man  $t \rightarrow t + t'$ ,  $-t \rightarrow t - t'$ ,  $\tilde{\mathbf{r}} \rightarrow \mathbf{r}'$  substituieren und erhält daraus für  $t' \rightarrow 0$  nun sofort

$$\langle 0 | (R\psi)(t, \mathbf{r}) \psi(t, \mathbf{r}') | 0 \rangle = \pm \langle 0 | \psi(t, \mathbf{r}') (R\psi)(t, \mathbf{r}) | 0 \rangle, \quad (65)$$

was Kommutation bzw. Anti-Kommutation der gleichzeitigen Feldoperatoren entspricht.

## 1.2 Fermigase

### 1.2.1 Freie Fermionen

Bei verschwindender Temperatur,  $T = 0$ , sind im Grundzustand von  $N$  freien Fermionen alle Zustände bis zum sogenannten *Fermi-Impuls*  $k_F$  besetzt,

$$|\psi_0\rangle \equiv \prod_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| < k_F} \prod_{\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} |0\rangle, \quad (66)$$

mit den Besetzungszahlen

$$N_{\mathbf{k}\sigma} = \Theta(k_F - |\mathbf{k}|). \quad (67)$$

Damit ist

$$N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} N_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| < k_F} 2 = 2V \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \Theta(k_F - |\mathbf{k}|) = \frac{Vk_F^3}{3\pi^2},$$

wobei wir benutzt haben daß das Volumen eines Impuls-Eigenzustands im Impulsraum gleich  $(2\pi)^3/V$  ist so daß  $\sum_{\mathbf{k}} = V \int d^3\mathbf{k}/(2\pi)^3$  und der Faktor 2 von den zwei Spin-zuständen eines Spin-1/2 Fermions herrührt. Daraus folgt

$$k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} = 3\pi^2 n. \quad (68)$$

Mit Hilfe von Gl. (51) sieht man leicht daß  $n$  auch der orts-unabhängige Erwartungswert des Teilchenzahldichte-Operators Gl. (62) ist.

Die einfachste Anregung des Grundzustands  $|\psi_0\rangle$  ist ein *Teilchen-Loch-Paar*,

$$|\mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2\rangle_p = a_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_1\sigma_1} |\psi_0\rangle. \quad (69)$$

Man kann Vernichter und Erzeuger eines *Lochs* mit Impuls  $\mathbf{k}$  und Spin  $\sigma$  definieren als

$$b_{\mathbf{k}\sigma} \equiv a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, \quad b_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \equiv a_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (70)$$

welche denselben Anti-Kommutationsrelationen wie die  $a_{\mathbf{k}\sigma}$  und  $a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$  genügen.

Die *Einteilchen-Korrelationsfunktion*  $G_{\sigma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  ist proportional zur Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür daß die Vernichtung eines Teilchens bei  $\mathbf{r}_2$  und die Erzeugung bei  $\mathbf{r}_1$  wieder den Ausgangszustand  $|\psi\rangle$  ergibt,

$$G_{\sigma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \langle \psi | \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}_2) | \psi \rangle. \quad (71)$$

In einem Zustand der Form  $|\psi\rangle \equiv |\{N_{\mathbf{n}}\}\rangle^{-}$  hängt dies aufgrund der Translations- und Rotations-Invarianz nur von  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  ab und es gilt aufgrund von Gl. (51)

$$G_{\sigma}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} N_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (72)$$

Im Grundzustand,  $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$ , wird daraus

$$G_{\sigma}^0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \Theta(k_F - k) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^{k_F} dk k \sin kr,$$

wobei Kugelkoordinaten für die Integration verwendet wurden. Ausführen des letzten Integrals und Herausziehen des dimensionsbehafteten Parameters ergibt

$$G_\sigma^0(r) = \frac{3n}{2} \frac{\sin k_F r - k_F r \cos k_F r}{(k_F r)^3}. \quad (73)$$

Es gilt  $G_\sigma^0(0) = n/2$  weshalb die Wahrscheinlichkeitsamplitude daß Vernichtung eines Teilchens bei  $\mathbf{r}'$  und die Erzeugung bei  $\mathbf{r}$  wieder den Grundzustand ergibt durch  $(2/n)G_\sigma^0(r)$  gegeben ist. Ferner fällt  $G_\sigma^0(r)$  für  $r \rightarrow \infty$  oszillierend wie  $1/r^2$  ab.

Wir definieren die positiv definite *Paarverteilungsfunktion* als

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(\frac{2}{n}\right)^2 \langle \psi | \psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) \psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) | \psi \rangle. \quad (74)$$

Man kann dies als Erwartungswert des Dichteoperators  $n_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2)$  im Ein-Lochzustand

$$|\mathbf{r}_1 \sigma_1\rangle \equiv \psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) |\psi_0\rangle$$

interpretieren. Da dies nur dann positiv ist wenn sich am Ort  $\mathbf{r}_1$  mit Sicherheit ein Teilchen befindet, ist dies auch gleich der Wahrscheinlichkeit, zwei Teilchen mit Spin  $\sigma_1$  und  $\sigma_2$  an den Orten  $\mathbf{r}_1$  bzw.  $\mathbf{r}_2$  zu finden. Einsetzen von Gl. (51) ergibt

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{4}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_1} e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_2} \langle \psi | a_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{q}'\sigma_2} a_{\mathbf{k}'\sigma_1} | \psi \rangle.$$

In einem Zustand der Form  $|\psi\rangle \equiv |\{N_{\mathbf{n}}\}\rangle^-$  tragen für  $\sigma_1 \neq \sigma_2$  nur Terme mit  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$  und  $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$  bei, was aufgrund der Anti-Kommutation der Erzeuger und Vernichter auf  $\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} N_{\mathbf{k}\sigma_1} N_{\mathbf{q}\sigma_2} / V^2 = (n/2)^2$  führt. Für  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$  tragen Terme mit  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$  oder  $\mathbf{k} = \mathbf{q}'$ ,  $\mathbf{q} = \mathbf{k}'$  bei,

$$\begin{aligned} \langle \psi | a_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{q}'\sigma_2} a_{\mathbf{k}'\sigma_1} | \psi \rangle &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \langle \psi | a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{q}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} | \psi \rangle + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} \langle \psi | a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{q}\sigma} | \psi \rangle = \\ &= (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} ) \langle \psi | a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{q}\sigma} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (75)$$

Man beachte daß dieser Ausdruck für  $\mathbf{k} = \mathbf{q}$  verschwindet, da in diesem Falle zwei Vernichter zum gleichen Zustand auftreten. Man kann diese beiden Fälle gleicher und ungleicher Spins nun auch zu

$$\langle \psi | a_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{q}'\sigma_2} a_{\mathbf{k}'\sigma_1} | \psi \rangle = (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} ) N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{q}} \quad (76)$$

zusammenfassen. Damit hängt  $g_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  wieder nur vom Abstand  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  ab und mit Gl. (72) folgt

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{4}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} [1 - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}] N_{\mathbf{k}\sigma} N_{\mathbf{q}\sigma} = 1 - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \left[ \frac{2G_\sigma(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{n} \right]^2. \quad (77)$$

Im Grundzustand,  $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$ , ergibt Einsetzen von Gl. (73) schließlich

$$g_{\sigma_1 \sigma_2}^0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = 1 - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{9}{(k_F r)^6} (\sin k_F r - k_F r \cos k_F r)^2. \quad (78)$$

Es ist  $g_{\sigma\sigma}^0(0) = 0$ , konsistent mit dem Paulischen Ausschließungsprinzip. Ferner ist  $\lim_{r \rightarrow \infty} g_{\sigma_1 \sigma_2}^0(r) = 1$ , da die Teilchen bei großen Abständen unkorreliert sind.

### 1.2.2 Wechselwirkende Fermionen

Für das Coulomb-Potential  $V^{(2)}(r) = V_C(r) = e^2/r$  zwischen zwei Elektronen ist  $V_{\mathbf{q}}^{(2)} = 4\pi e^2/q^2$ , weshalb Gln. (52), (58) in

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{(\hbar k)^2}{2m} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}, \mathbf{q}, \sigma_1, \sigma_2, q > 0} \frac{4\pi}{q^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{l}\sigma_2} a_{\mathbf{k}\sigma_1} \quad (79)$$

übergeht. Dabei divergiert zunächst der Beitrag von  $\mathbf{q} = 0$ . Regularisierung des Coulomb-potentials zu einem Potential endlicher Reichweite,  $V_{C,\mu}(r) = (e^2/r)e^{-\mu r}$  ergibt für den  $\mathbf{q} = 0$  Beitrag

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}, \sigma_1, \sigma_2} a_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{l}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{l}\sigma_2} a_{\mathbf{k}\sigma_1} &= \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}, \sigma_1, \sigma_2} \left[ a_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma_1} \left( a_{\mathbf{l}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{l}\sigma_2} - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \delta_{\sigma_1\sigma_2} \right) \right] = \\ &= \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}, \sigma_1, \sigma_2} [N_{\mathbf{k}\sigma_1} (N_{\mathbf{l}\sigma_2} - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \delta_{\sigma_1\sigma_2})] = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} (N^2 - N). \end{aligned}$$

Dabei verschwindet der zweite Term im thermodynamischen Limes,  $N \rightarrow \infty$ , und man sieht leicht daß sich in einem homogenen, elektrisch neutralen Gas von Elektronen und Ionen der erste Term gegen analog regularisierte Terme der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Ionen und zwischen den Ionen untereinander kompensiert.

Bei Vernachlässigung der Coulomb-Wechselwirkung besteht der Hamiltonian Gl. (79) nur aus kinetischer Energie mit dem Eigenwert der inneren Energie  $U_0$  im Grundzustand  $|\psi_0\rangle$ ,

$$\begin{aligned} U_0 &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} k^2 \Theta(k_F - |\mathbf{k}|) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{10\pi^2} k_F^5 = \frac{3\hbar^2 k_F^2}{10m} N = \frac{3}{5} \epsilon_F N = \\ &= \frac{e^2}{2a} \frac{1}{r_s^2} \frac{3}{5} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} N \simeq \frac{e^2}{2a} \frac{2.21}{r_s^2} N. \end{aligned} \quad (80)$$

Hier ist  $\epsilon_F = k_F^2/(2m)$  die *Fermi-Energie*,  $a = \hbar^2/(m_e e^2)$  der Bohrsche Radius mit der Elektronenmasse  $m_e$ ,  $r_0$  der Radius eines sphärischen Volumens, in dem sich im Mittel ein Elektron befindet,  $(4\pi/3)r_0^3 n = 1$  und  $r_s \equiv r_0/a$ .

In erster Ordnung Störungstheorie lautet der Korrekturterm aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung

$$U_1 = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}, \mathbf{q}, \sigma_1, \sigma_2, q > 0} \frac{4\pi}{q^2} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{l}-\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{l}\sigma_2} a_{\mathbf{k}\sigma_1} | \psi_0 \rangle.$$

Der einzige nicht-verschwindende Beitrag kommt von Termen mit  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$  und  $\mathbf{l} = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ , so daß

$$\begin{aligned} U_1 &= -\frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma, q > 0} \frac{4\pi}{q^2} N_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} N_{\mathbf{k}\sigma} = -\frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, q > 0} \frac{4\pi}{q^2} \Theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) \Theta(k_F - k) = \\ &= V \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \epsilon_1(k) \Theta(k_F - k), \end{aligned} \quad (81)$$

mit der Energiekorrektur pro Teilchen mit Impuls  $k$ ,

$$\epsilon_1(k) = -4\pi e^2 \int \frac{d^3\mathbf{l}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta(k_F - |\mathbf{l}|)}{|\mathbf{l} - \mathbf{k}|^2} = -\frac{2e^2 k_F}{\pi} F\left(\frac{k}{k_F}\right). \quad (82)$$

wobei

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|.$$

Nach Ausführung des verbleibenden Integrals erhalten wir

$$U_1 = -\frac{3}{4} \frac{e^2 k_F}{\pi} N = -\frac{e^2}{2ar_s} \frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} N \simeq -\frac{e^2}{2a} \frac{0.916}{r_s} N. \quad (83)$$

Kombination von Gl. (80) und (83) ergibt für die innere Energie  $U = U_0 + U_1$ ,

$$\frac{U}{N} = \frac{e^2}{2a} \left( \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + \dots \right). \quad (84)$$

Dies stellt eine Störungsentwicklung nach kleinen  $r_s$  dar, da für kleine Elektronenabstände die Wechselwirkungsenergie im Vergleich zur kinetischen Energie klein wird. Für  $r_s \gg 1$  überwiegt die potentielle Energie und man erwartet die Bildung eines *Wigner-Kristalls*.

Der Druck ist damit

$$p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_N = -\left(\frac{\partial U}{\partial r_s}\right)_N \left(\frac{\partial r_s}{\partial V}\right)_N = \frac{e^2}{2a} \frac{r_s}{3V} \left( \frac{4.42}{r_s^3} - \frac{0.916}{r_s^2} + \dots \right). \quad (85)$$

Der Druck verschwindet bei  $r_s \simeq 4.83$ , wo die innere Energie demnach ein Minimum hat; allerdings gilt diese Entwicklung nur für  $r_s \ll 1$ .

Bisher sind wir im Grundzustand in Gl. (66) von freien Impuls-Eigenzuständen ausgegangen. Nun verallgemeinern wir diesen Zustand zu

$$|\psi\rangle \equiv \prod_{(\mathbf{m}, \sigma) \in \mathcal{Z}} a_{\mathbf{m}\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (86)$$

wobei die zu den Zuständen  $(\mathbf{m}, \sigma)$  gehörigen Wellenfunktion mit  $\psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r})$  bezeichnet werden und eine orthonormale Basis bilden sollen. Dabei enthält die in Gl. (86) auftretende Menge  $\mathcal{Z}$   $N$  Zustände. Die zu Gl. (76) analoge Relation lautet nun

$$\langle \psi_0 | a_{\mathbf{m}\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{n}\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{n}'\sigma_2} a_{\mathbf{m}'\sigma_1} | \psi_0 \rangle = (\delta_{\mathbf{m}\mathbf{m}'} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} - \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{\mathbf{m}\mathbf{n}'} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{m}'}) \Theta((\mathbf{m}, \sigma_1), (\mathbf{n}, \sigma_2) \in \mathcal{Z}), \quad (87)$$

wobei der letzte Faktor sicherstellt daß dies nur dann nicht verschwindet wenn die beiden Zustände  $(\mathbf{m}\sigma_1), (\mathbf{n}\sigma_2)$  in  $\mathcal{Z}$  liegen. Mit Hilfe dieser Relationen findet man nun für den Erwartungswert des Hamiltonians Gl. (58) für im allgemeinen Spin-abhängige Potentiale  $V_\sigma(\mathbf{r})$  und Wechselwirkung  $V_{\sigma_1\sigma_2}^{(2)}(\mathbf{r})$  sofort

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{(\mathbf{m}\sigma) \in \mathcal{Z}} \int d^3\mathbf{r} |\nabla \psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r})|^2 + \sum_{(\mathbf{m}\sigma) \in \mathcal{Z}} \int d^3\mathbf{r} V_\sigma(\mathbf{r}) |\psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r})|^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{(\mathbf{m}\sigma_1), (\mathbf{n}\sigma_2) \in \mathcal{Z}} \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 V_{\sigma_1\sigma_2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \left[ |\psi_{\mathbf{m}\sigma_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{\mathbf{n}\sigma_2}(\mathbf{r}_2)|^2 - \right. \\ &\quad \left. - \delta_{\sigma_1\sigma_2} \psi_{\mathbf{m}\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{\mathbf{n}\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{\mathbf{m}\sigma_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{\mathbf{n}\sigma_2}(\mathbf{r}_1) \right]. \end{aligned} \quad (88)$$

Wir wenden nun das *Ritzsche Variationsprinzip* an, um einen Funktionensatz  $\psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r})$  zu finden, der den Erwartungswert der Energie Gl. (88) minimiert. Die Ergebnisse der Störungstheorie erster Ordnung von Gl. (84) entspricht dabei gerade dem freien Variationszustand Gl. (66). Um die Normierung zu gewährleisten, führen wir die Lagrange-Multiplikatoren  $\epsilon_{\mathbf{m}\sigma}$  ein und setzen die Funktionalableitungen

$$\frac{\delta}{\delta\psi_{\mathbf{m}\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1)} \left[ \langle \psi | H | \psi \rangle - \sum_{\mathbf{m}\sigma \in \mathcal{Z}} \epsilon_{\mathbf{m}\sigma} \left( \int d^3\mathbf{r} |\psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r})|^2 - 1 \right) \right] = 0,$$

unter Benutzung von

$$\frac{\delta\psi_{\mathbf{n}\sigma_1}^*(\mathbf{r}_1)}{\delta\psi_{\mathbf{m}\sigma_2}^*(\mathbf{r}_2)} = \delta_{\mathbf{m}\mathbf{n}} \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (89)$$

und erhalten die *Hartree-Fock Gleichungen*

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_\sigma(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r}) + \sum_{(\mathbf{n}\sigma') \in \mathcal{Z}} \int d^3\mathbf{r}' V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_{\mathbf{n}\sigma'}(\mathbf{r}')|^2 \psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r}) - \\ - \sum_{(\mathbf{n}\sigma) \in \mathcal{Z}} \int d^3\mathbf{r}' V_{\sigma\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\mathbf{n}\sigma}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{n}\sigma}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{m}\sigma} \psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (90)$$

Die Lagrange-Multiplikatoren  $\epsilon_{\mathbf{m}\sigma}$  können damit als Einteilchen-Energien interpretiert werden. Gegenüber den *Hartree-Gleichungen* tritt hier zusätzlich der *Austauschterm*

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{r}' V_{\sigma\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r}')|^2 \psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r}) - \sum_{(\mathbf{n}\sigma) \in \mathcal{Z}} \int d^3\mathbf{r}' V_{\sigma\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\mathbf{n}\sigma}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{n}\sigma}(\mathbf{r}) = \\ = - \sum_{(\mathbf{n}\sigma) \in \mathcal{Z}, \mathbf{n} \neq \mathbf{m}} \int d^3\mathbf{r}' V_{\sigma\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\mathbf{n}\sigma}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{m}\sigma}(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{n}\sigma}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (91)$$

auf.

Die Hartree-Fock Gleichungen werden oft auf Atome oder Ionen der Ladung  $Z$  mit  $N$  Elektronen angewandt, wofür

$$V_\sigma(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad V_{\sigma_1\sigma_2}^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} \quad (92)$$

Spin-unabhängig sind.

## 1.3 Bosegase

### 1.3.1 Freie Bosonen

Wir setzen hier Bosonen mit Spin Null voraus, so daß hier keine Spinquantenzahl  $\sigma$  auftritt. Wir betrachten zunächst die freien Zustände der Gl. (29) für Bosonen

$$|\psi_0\rangle \equiv |\{N_{\mathbf{n}}\}\rangle^+ = \frac{1}{(\prod_{\mathbf{n}} N_{\mathbf{n}}!)^{1/2}} \prod_{\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}}^\dagger)^{N_{\mathbf{n}}} |0\rangle. \quad (93)$$

Wie für Fermionen erhält man aus Gl. (51)

$$\langle \psi_0 | \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) | \psi_0 \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} = \frac{N}{V} = n. \quad (94)$$

Die *Einteilchen-Korrelationsfunktion* ist wie in Gl. (72) für Fermionen definiert,

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} N_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (95)$$

Ähnlich wie in Gl. (74) für Fermionen definieren wir auch die Paarverteilungsfunktion als

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= \left( \frac{1}{n} \right)^2 \langle \psi_0 | \psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi^\dagger(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1) | \psi_0 \rangle = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_1} e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{r}_2} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{k}'} | \psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (96)$$

Für den darin auftretenden Erwartungswert erhalten wir nun über den analogen Ausdruck Gl. (76) hinaus auch Beiträge für  $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ ,

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{k}'} | \psi_0 \rangle &= (1 - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}) \left( \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{q}} | \psi_0 \rangle \right) + \\ &\quad + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle = \\ &= (1 - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}) (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}'} ) N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{q}} + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} N_{\mathbf{k}} (N_{\mathbf{k}} - 1). \end{aligned} \quad (97)$$

Einsetzen in Gl. (96) ergibt

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{N^2} \left[ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (1 - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}) [1 + e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}] N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} (N_{\mathbf{k}} - 1) \right] = \\ &= \frac{1}{N^2} \left[ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} N_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{q}} + \left| \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} N_{\mathbf{k}} \right|^2 - 2 \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}^2 - \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} \right] = \\ &= 1 + \left| \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} N_{\mathbf{k}} \right|^2 - \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} (N_{\mathbf{k}} + 1) = \\ &= 1 + \left[ \frac{G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{n} \right]^2 - \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} (N_{\mathbf{k}} + 1). \end{aligned} \quad (98)$$

Gegenüber Gl. (77) zeigt dieser Ausdruck zwei Unterschiede: Das Vorzeichen des Terms proportional zu  $G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$  ist nun positiv, was auf die Vertauschungs-Relationen zurückzuführen ist, und es tritt ein zusätzlicher dritter Term auf, da Zustände mehrfach besetzt sein können.

Wir werten nun Gl. (98) für zwei Besetzungszahl-Verteilungen aus. Wenn nur eine Impulsmode besetzt ist,

$$N_{\mathbf{k}} = N \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_0}, \quad (99)$$

folgt

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = n e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}, \quad g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = 1 - \frac{1}{N}. \quad (100)$$

Dies ist ortsunabhängig und kann als Produkt der Wahrscheinlichkeit interpretiert werden, zunächst ein Teilchen mit Wahrscheinlichkeit Eins und darauf ein zweites Teilchen mit Wahrscheinlichkeit  $1 - 1/N$  zu detektieren. Nun betrachten wir eine Gauss-Verteilung,

$$N_{\mathbf{k}} = n \left( \frac{2\pi}{\sqrt{\pi}\Delta} \right)^3 e^{-(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2/\Delta^2}, \quad (101)$$

mit  $\sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} = N$ . Man sieht zunächst sofort daß der dritte Term in Gl. (98) im thermodynamischen Limes,  $N \rightarrow \infty$ , wie  $1/N$  gegen Null geht. Ferner ist

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} N_{\mathbf{k}} = n e^{-\Delta^2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2/4} e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}, \\ g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= 1 + e^{-\Delta^2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2/2}. \end{aligned} \quad (102)$$

Bei kleinen Abständen,  $r \lesssim \Delta^{-1}$ , ist damit die Wahrscheinlichkeit, zwei Bosonen zu finden, erhöht und ist für  $r = 0$  doppelt so groß wie für  $r \rightarrow \infty$ .

Wir betrachten noch den durch eine komplexe Funktion  $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  charakterisierten Zweiteilchen-Zustand

$$|2\rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi^\dagger(\mathbf{r}_2) |0\rangle. \quad (103)$$

Die zwei möglichen Kontraktionen in

$$\langle 0 | \psi(\mathbf{r}'_2) \psi(\mathbf{r}'_1) \psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi^\dagger(\mathbf{r}_2) |0\rangle = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_1)$$

ergeben für die Normierung

$$\langle 2|2\rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \phi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) [\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] = 1. \quad (104)$$

Faktoriert die Zweiteilchen-Funktion,

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2), \quad (105)$$

mit normierten Einteilchen-Funktionen,  $\int d^3\mathbf{r} |\phi_i(\mathbf{r})|^2 = 1$ , so lautet die normierte Zweiteilchen-Funktion daher

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2)}{[1 + |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2]^{1/2}}, \quad (106)$$

wobei das Skalarprodukt der Einteilchen-Wellenfunktionen  $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = \int d^3\mathbf{r} \phi_1^*(\mathbf{r}) \phi_2(\mathbf{r})$ . Den Erwartungswert des Dichteoperators im Zweiteilchen-Zustand erhält man dann durch Summation über alle möglichen Kontraktionen,

$$\begin{aligned} \langle 2 | n(\mathbf{r}) | 2 \rangle &= \\ &= \frac{\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}'_1 d^3\mathbf{r}'_2 \phi_1^*(\mathbf{r}_1) \phi_2^*(\mathbf{r}_2) \phi_1(\mathbf{r}'_1) \phi_2(\mathbf{r}'_2) \langle 0 | \psi(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}'_1) \psi^\dagger(\mathbf{r}'_2) |0\rangle}{1 + |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2} \\ &= \frac{|\phi_1(\mathbf{r})|^2 + |\phi_2(\mathbf{r})|^2 + [|\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle| \phi_2^*(\mathbf{r}) \phi_1(\mathbf{r}) + \text{c.c.}]}{1 + |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2}, \end{aligned} \quad (107)$$

wobei +c.c. Addition des komplex konjugierten Terms bedeutet, Man beachte den *Interferenzterm*, der für orthogonale Einteilchen-Zustände,  $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0$ , verschwindet, so daß in diesem Fall

$$\langle 2 | n(\mathbf{r}) | 2 \rangle = |\phi_1(\mathbf{r})|^2 + |\phi_2(\mathbf{r})|^2.$$

Das Integral von Gl. (107) über den Raum ist

$$\int d^3\mathbf{r} \langle 2 | n(\mathbf{r}) | 2 \rangle = 2,$$

wie es für einen Zweiteilchen-Zustand sein muß.

### 1.3.2 Wechselwirkende Bosonen

Die Bose-Statistik zusammen mit der Wechselwirkung zwischen Bosonen in verschiedenen Einteilchen-Zuständen können zu interessanten Effekten in Quanten-Flüssigkeiten und -Gasen führen. So kann man in der wichtigsten Bose-Flüssigkeit mit Spin 0,  $^4\text{He}$ , die Wechselwirkung zwischen den  $^4\text{He}$ -Atomen durch ein *Lennard-Jones-Potential*,

$$V(r) \simeq 3.523 \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \text{ meV}, \quad (108)$$

mit der Skala  $r_0 \simeq 2.556 \text{ \AA}$ . Wir betrachten im folgenden schwach wechselwirkende Bose-gase.

Aus der Thermodynamik des idealen (nicht-wechselwirkenden) Bose-gases weiss man daß sich die Gesamtanzahl  $N = N_0 + N_{>0}$  der Bosonen aufteilt in  $N_0$  Bosonen im Grundzustand und  $N_{>0}$  Bosonen in angeregten Zuständen, wobei in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$ ,

$$\begin{aligned} \frac{N_{>0}}{N} &= \begin{cases} 1 & \text{falls } T \geq T_c \\ \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} & \text{falls } T < T_c \end{cases}, \\ \frac{N_0}{N} &= \begin{cases} 0 & \text{falls } T \geq T_c \\ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} & \text{falls } T < T_c \end{cases}, \end{aligned} \quad (109)$$

wobei die *kritische Temperatur* durch

$$k_B T_c = \left[ \frac{n}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \frac{2\pi\hbar^2}{m}, \quad (110)$$

gegeben ist. Für  $T < T_c$  kommt es damit zu einer *Bose-Einstein-Kondensation*.

Wir wollen nun die Frage untersuchen wie sich dieses Resultat ändert, wenn die Bosonen schwach miteinander wechselwirken. Dazu gehen wir von dem allgemeinen Hamiltonian Gl. (52) ohne stationäres Potential aus ( $\hbar = 1$  im folgenden),

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{l}, \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{l}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{k}}. \quad (111)$$

Wir werden später sehen daß sich die meisten Bosonen im Grundzustand befinden,  $N_{>0} = N - N_0 \ll N_0$ , so daß für die Dichten  $n_0 \equiv N_0/V$  und  $n_{>0} \equiv N_{>0}/V$  der Teilchen im Grundzustand bzw. in angeregten Zuständen  $n_{>0} \ll n_0$  gilt. Da in Gl. (111) Terme mit einer ungeraden Anzahl von  $a_0$  und  $a_0^\dagger$  wegen Impulserhaltung ausgeschlossen sind, besteht Gl. (111) bis auf Faktoren der Form  $V_{\mathbf{k}}/V$  aus Termen der Größenordnungen  $N_0^2$ ,  $N_0 N_{>0}$  und  $N_{>0}^2$ . Vernachlässigung der kleinsten Terme der Ordnung  $N_{>0}^2$  entspricht Vernachlässigung der Wechselwirkungen angeregter Teilchen untereinander und führt für spiegelsymmetrisches Potential,  $V_{-\mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}}$ , auf

$$H \simeq \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{V_0}{2V} a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0 + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}}' (V_0 + V_{-\mathbf{k}}) a_0^\dagger a_0 a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}}' V_{\mathbf{k}} \left( a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_0 a_0 + a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right), \quad (112)$$

wobei der Strich an der Summe den Fall  $\mathbf{k} = 0$  ausschließt. Wegen  $N_0 \gg 1$  ist  $N_0 \simeq N_0 - 1$ , so daß wir wegen Gl. (26) und Gl. (27)

$$a_0 \simeq a_0^\dagger \simeq N_0^{1/2} \quad (113)$$

substituieren können. Damit wird aus Gl. (112)

$$H \simeq \sum_{\mathbf{k}}' \frac{\mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{V_0}{2V} N_0^2 + \frac{N_0}{V} \sum_{\mathbf{k}}' \left[ (V_0 + V_{-\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} V_{\mathbf{k}} \left( a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right) \right],$$

Ausdrücken von dem noch unbekanntem  $N_0$  durch  $N$ ,

$$N = N_0 + \sum_{\mathbf{k}}' a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \quad (114)$$

ergibt schließlich in linearer Ordnung in  $N_{>0}$  [der Term  $N(V_0/V) \sum_{\mathbf{k}}' a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$  kürzt sich in dieser Ordnung],

$$H \simeq \sum_{\mathbf{k}}' \frac{\mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{N^2}{2V} V_0 + \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k}}' V_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{N}{2V} \sum_{\mathbf{k}}' V_{\mathbf{k}} \left( a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right). \quad (115)$$

Die *Bogoliubov-Näherung* besteht darin, Terme der Ordnung  $n_{>0}^2$  zu vernachlässigen, wodurch Gl. (115) also quadratisch wird. Wir diagonalisieren nun Gl. (115), indem wir neue Erzeuger  $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$  und Vernichter  $\alpha_{\mathbf{k}}$  für *Quasiteilchen* einführen,

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ a_{\mathbf{k}}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (116)$$

mit reellen Koeffizienten  $u_{\mathbf{k}}$  und  $v_{\mathbf{k}}$ . Man sieht leicht daß beide Paare von Erzeugern und Vernichtern genau dann die kanonischen Vertauschungsrelationen Gl. (19) erfüllen, wenn

$$u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1 \quad (117)$$

gilt. Dann nennt man Gl. (116) eine *Bogoliubov-Transformation*. Nach längerer Rechnung findet man mit Hilfe einer solchen Transformation für Gl. (115)

$$H \simeq \frac{N^2}{2V} V_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}' \left( \frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}} \right) + \sum_{\mathbf{k}}' \omega_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \equiv U_0 + \sum_{\mathbf{k}}' \omega_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}}, \quad (118)$$

wobei

$$\omega_{\mathbf{k}} \equiv \left[ \left( \frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}} \right)^2 - (nV_{\mathbf{k}})^2 \right]^{1/2} = \left[ \left( \frac{k^2}{2m} \right)^2 + \frac{nk^2 V_{\mathbf{k}}}{m} \right]^{1/2} \quad (119)$$

und

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\omega_{\mathbf{k}} + \frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}}, \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{-\omega_{\mathbf{k}} + \frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}}, \quad (120)$$

sowie

$$U_0 \equiv \frac{N^2}{2V} V_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}' \left( \omega_{\mathbf{k}} - \frac{k^2}{2m} - nV_{\mathbf{k}} \right). \quad (121)$$

Der Hamiltonian Gl. (118) besteht aus einer Grundzustands-Energie und einer Summe von freien Oszillatoren der Energie  $\omega_{\mathbf{k}}$ . Der Grundzustand  $|\psi_0\rangle$  des Systems entspricht daher dem Quasi-Teilchen-Vakuum

$$\alpha_{\mathbf{k}} |\psi_0\rangle = 0 \quad \forall \mathbf{k}. \quad (122)$$

Die Grundzustands-Energie  $U_0$  besteht aus den ersten beiden Termen in Gl. (118). Der erste Term entspricht der Wechselwirkungs-Energie, wenn sich alle Bosonen im Kondensat befinden würden, während der zweite Term wegen Gl. (119) negativ ist. Man sieht die Konvergenzeigenschaften der Wellenzahl-Summe im zweiten Terms indem man den zweiten Ausdruck für  $\omega_{\mathbf{k}}$  in Gl. (119) für große  $k$  entwickelt,

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}} - \frac{m}{k^2} (nV_{\mathbf{k}})^2 + \dots, \quad (123)$$

woraus man abliest daß die Summe konvergiert solange  $V_{\mathbf{k}}$  schneller als  $k^{-1/2}$  abfällt. Im Grundzustand  $|\psi_0\rangle$  ist die Anzahl  $N_{>0}$  von Bosonen in angeregten Zuständen nach Gl. (116) damit

$$N_{>0} = \langle \psi_0 | \sum_{\mathbf{k}}' a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \sum_{\mathbf{k}}' v_{\mathbf{k}}^2 \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger | \psi_0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}}' v_{\mathbf{k}}^2. \quad (124)$$

Für ein Kontakt-Potential,  $V(\mathbf{r}) = \lambda \delta^3(\mathbf{r})$ , ist  $V_{\mathbf{k}} = \lambda = \text{const}$  und Gl. (120) ergibt

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{2(nm\lambda)^2}{k^2} \frac{1}{k^2 + 4nm\lambda + (k^2 + 2nm\lambda) \left(1 + \frac{4nm\lambda}{k^2}\right)^{1/2}}.$$

Geht man dann in Gl. (124) zum Impuls-Integral über, lässt sich das Integral leicht ausführen und man erhält

$$n_{>0} = \frac{N_{>0}}{V} = \frac{(nm\lambda)^{3/2}}{3\pi^2}. \quad (125)$$

Es handelt sich dabei um ein *nicht-perturbatives* Resultat, da sich die Abhängigkeit  $(n\lambda)^{3/2}$  nicht durch eine Potenzreihe in dem kleinen Parameter  $n\lambda$  ausdrücken lässt. Allerdings divergiert für das eigentlich unphysikalische Kontaktpotential  $V_{\mathbf{k}} = \lambda$  die Grundzustands-Energie für große  $k$ , wie man nach Einsetzen der Entwicklung Gl. (123) in den zweiten Term in Gl. (118) sieht, was einen Term  $\propto \sum_{\mathbf{k}}' k^{-2}$  ergibt. Das liegt daran, daß in zweiter Ordnung der Bornschen Näherung die Streulänge divergiert: Wir erinnern an das asymptotische Verhalten der stationären Wellenfunktion

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}, k\mathbf{r}/r), \quad (126)$$

und die Definition der Streuamplitude

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (127)$$

In erster Ordnung Bornscher Näherung hat man damit

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')_1 = -\frac{m}{2\pi} V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} = -\frac{m\lambda}{2\pi}. \quad (128)$$

Einsetzen dieses Ausdrucks in Gl. (126), was wiederum in Gl. (127) eingesetzt wird, ergibt in zweiter Ordnung

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m\lambda}{2\pi} + \left(\frac{m\lambda}{2\pi}\right)^2 \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \delta^3(\mathbf{r}) \frac{e^{ikr}}{r} + \mathcal{O}(\lambda^3).$$

Das hier auftretende Integral kann man mit Hilfe der Parsevalschen Identität berechnen,

$$\int d^3\mathbf{r} \phi_1^*(\mathbf{r}) \phi_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}}' \tilde{\phi}_1^*(\mathbf{q}) \tilde{\phi}_2(\mathbf{q}),$$

wobei

$$\tilde{\phi}_i(\mathbf{q}) \equiv \int d^3\mathbf{r} \phi_i(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

die diskreten Fourier-Transformierten sind. Anwendung auf  $\phi_1(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \delta^3(\mathbf{r})$  und  $\phi_2(\mathbf{r}) = e^{ikr}/r$  ergibt schließlich für die *Streulänge*

$$a \equiv -\lim_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow 0} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{m\lambda}{2\pi} \left[ 1 - \frac{2m\lambda}{V} \sum_{\mathbf{q}}' \frac{1}{q^2} + \mathcal{O}(\lambda^2) \right], \quad (129)$$

wobei der Term für  $\mathbf{q} = 0$  in der Summe ausgeschlossen werden kann, da er im Kontinuumslimit nichts beiträgt. Da Streulänge und Streuamplitude physikalische Größen und damit endlich sind, kann man Gl. (129) als Definition der nicht messbaren, unendlichen Potentialstärke  $\lambda$  verwenden, welche die divergierende Summe *renormiert*. Die formale Umkehrung von Gl. (129) lautet

$$\lambda = \frac{2\pi a}{m} \left[ 1 + \frac{4\pi a}{V} \sum_{\mathbf{q}}' \frac{1}{q^2} + \mathcal{O}(a^2) \right]. \quad (130)$$

Wir ersetzen nun

$$V_0 = \lambda \rightarrow \frac{2\pi a}{m} \left[ 1 + \frac{4\pi a}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} + \mathcal{O}(a^2) \right], \quad V_{\mathbf{k}} = \lambda \rightarrow \frac{2\pi a}{m}, \quad (131)$$

womit die Grundzustands-Energie aus Gl. (121)

$$U_0 = \frac{\pi a N^2}{m V} + \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{4m} \left[ k^2 (1 + 4C/k^2)^{1/2} - k^2 - 2C + 2C^2/k^2 \right]$$

wird, mit der Konstanten  $C = 2\pi a n$ . Ausführen des Integrals gibt schließlich

$$U_0 = \frac{\pi a N^2}{m V} \left[ 1 + \frac{64}{15(2\pi)^{1/2}} (a^3 n)^{1/2} \right]. \quad (132)$$

Für kleine  $k$  erhält man aus Gl. (119) eine lineare Dispersionsrelation,

$$\omega_{\mathbf{k}} = c_s k + \dots, \quad \text{mit } c_s = \left( \frac{n V_0}{m} \right)^{1/2}, \quad (133)$$

wobei  $c_s$  die Schallgeschwindigkeit darstellt. Diese Niederenergie-Anregungen sind als *Phononen* bekannt. Aus der Wellengleichung für Schall folgt auch daß

$$c_s = \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)^{1/2} = \frac{1}{(\rho \kappa)^{1/2}},$$

wobei im Grundzustand, bei Temperatur  $T = 0$ , der Druck durch  $p = -(\partial U_0 / \partial V)$  gegeben ist, und  $\kappa \equiv -(\partial V / \partial p) / V$  die *Kompressibilität* und  $\rho = mn$  die Massendichte sind.

Wir betrachten noch den Dichte-Operator

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} n_{\mathbf{k}},$$

wobei in diesem Fall nach Gl. (55), (113), (116) und Gl. (120)

$$n_{\mathbf{k}} \simeq \sqrt{N_0} (a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}}) = k \left( \frac{N_0}{2m\omega_{\mathbf{k}}} \right)^{1/2} (\alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger) \equiv C_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger). \quad (134)$$

Damit folgt

$$n(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}(\mathbf{r}) + \tilde{\rho}^\dagger(\mathbf{r}), \quad \text{mit } \tilde{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \alpha_{\mathbf{k}}. \quad (135)$$

Analog zu kohärenten Zuständen des harmonischen Oszillators gilt dann für den *kohärenten Zustand* von *Quasiteilchen-Anregungen*

$$|\beta_{\mathbf{k}}\rangle = e^{-|\beta_{\mathbf{k}}|^2/2} e^{\beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger} |\psi_0\rangle, \quad \tilde{\rho}(\mathbf{r}) |\beta_{\mathbf{k}}\rangle = \beta_{\mathbf{k}} \frac{C_{\mathbf{k}}}{V} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\beta_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (136)$$

und somit schwingt der Erwartungswert des Dichte-Operators wie eine Dichtewelle,

$$\langle \beta_{\mathbf{k}} | n(\mathbf{r}) | \beta_{\mathbf{k}} \rangle = 2 \frac{C_{\mathbf{k}}}{V} |\beta_{\mathbf{k}}| \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \delta_{\mathbf{k}}), \quad (137)$$

wobei wir  $\beta_{\mathbf{k}} = |\beta_{\mathbf{k}}|e^{i\delta_{\mathbf{k}}}$  geschrieben haben.

Wir wollen noch kurz diskutieren, welche Eigenschaften die Dispersionsrelation Gl. (119) der Quasiteilchen haben muss, um *Suprafluidität* zu ermöglichen, bei der eine Flüssigkeit reibungsfrei an einer Grenzfläche entlangzuströmen. Dazu stellen wir die Frage, unter welchen Umständen es im Ruhesystem der Grenzfläche für die Flüssigkeit energetisch möglich ist, durch Anregung eines Quasiteilchens Energie abzugeben. Die Energie  $E$  im Ruhesystem der Grenzfläche und die Energie  $E_0$  im Ruhesystem der Flüssigkeit im Grundzustand bei  $T = 0$  stehen durch eine Lorentztransformation in Beziehung, die in zweiter Ordnung in der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  der Flüssigkeit relativ zur Grenzfläche

$$E = E_0 + \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{v} + \frac{M}{2} \mathbf{v}^2$$

lautet, wobei  $\mathbf{p}_0$  und  $M$  der Impuls bzw. die Masse der Flüssigkeit im Ruhesystem der Flüssigkeit im Grundzustand sind. Im Grundzustand ist  $\mathbf{p}_0 = 0$ ,  $E_0 = E_0^g$ , während nach Anregung eines Phonons mit Impuls  $\hbar\mathbf{k}$  im Bezugssystem der Flüssigkeit  $\mathbf{p}_0 = \hbar\mathbf{k}$  und  $E_0 = E_0^g + \hbar\omega_{\mathbf{k}}$  ist. Die Energieänderung ist daher

$$\Delta E = \hbar(\omega_{\mathbf{k}} + \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}), \quad (138)$$

was nur dann negativ sein kann, wenn

$$|\mathbf{v}| > \min_{\mathbf{k}} \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{|\mathbf{k}|}. \quad (139)$$

Für kleinere Relativgeschwindigkeiten ist kein Energie-Übertrag möglich und die Flüssigkeit befindet sich im superfluiden Zustand.

## 1.4 Streuung und Korrelationsfunktionen

Wir betrachten die Streuung eines nicht-relativistischen Teilchens an einem Körper, der durch den Hamilton-Operator  $H_0$  mit Eigenzustände  $|n\rangle$  und Energie-Eigenwerte  $E_n$ ,  $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ , beschrieben wird. Die Wechselwirkung zwischen Substanz und Teilchen werde durch einen Operator  $W(\{\mathbf{x}_i\}, \mathbf{r})$  charakterisiert, wobei  $\mathbf{x}_i = \mathbf{r}_i f_i$  für die Ortsvektoren  $\mathbf{r}_i$  und eventuell andere Freiheitsgrade  $f_i$  der Teilchen in der Substanz steht und  $\mathbf{r}\sigma$  Ortsvektor und Spin-Freiheitsgrad des gestreuten Teilchens bezeichnen. Der Gesamt-Hamiltonian ist damit

$$H = H_0 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + W(\{\mathbf{x}_i\}, \mathbf{r}\sigma),$$

wobei  $\mathbf{p}$  der Impuls des gestreuten Teilchens ist. Ähnlich wie für die Einteilchen-Operatoren in Gl. (52) ergibt sich daraus in zweiter Quantisierung

$$H = H_0 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \sum_{\mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2} a_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_1\sigma_1} W_{\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1}^{\sigma_1\sigma_2}(\{\mathbf{x}_i\}), \quad (140)$$

wobei

$$W_{\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1}^{\sigma_1\sigma_2}(\{\mathbf{x}_i\}) = \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}} W^{\sigma_1\sigma_2}(\{\mathbf{x}_i\}, \mathbf{r}). \quad (141)$$

Eine Streuung überführe nun einen Anfangszustand  $|\mathbf{k}_1\sigma_1, n_1\rangle$  in einen Endzustand  $|\mathbf{k}_2\sigma_2, n_2\rangle$ . Fermi's goldene Regel ergibt für die Übergangsrage vom Anfangszustand in den Endzustand

$$\Gamma(\mathbf{k}_1\sigma_1, n_1 \rightarrow \mathbf{k}_2\sigma_2, n_2) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}_2\sigma_2, n_2 | W | \mathbf{k}_1\sigma_1, n_1 \rangle|^2 \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega). \quad (142)$$

Hier ist

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2 - k_2^2) \\ \langle \mathbf{k}_2\sigma_2, n_2 | W | \mathbf{k}_1\sigma_1, n_1 \rangle &= \langle n_2 | W_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1}^{\sigma_1\sigma_2}(\{\mathbf{x}_i\}) | n_1 \rangle. \end{aligned} \quad (143)$$

Wir können spin-unabhängige, kurzreichweitige Wechselwirkungen durch eine Kontakt-Wechselwirkung der Form

$$W(\{\mathbf{x}_i\}, \mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{i=1}^N a_i \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \quad (144)$$

approximieren, wobei  $a_i$  die Streulänge von Teilchen  $i$  ist, wie aus Gl. (128) für  $\lambda = (2\pi\hbar^2)a_i/m$  und der Definition der Streulänge  $a = \lim_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \rightarrow 0} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  folgt. Mit der Definition Gl. (141) erhält man daraus

$$\langle n_2 | W_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1}(\{\mathbf{x}_i\}) | n_1 \rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{mV} \sum_{i=1}^N a_i \langle n_2 | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} | n_1 \rangle, \quad (145)$$

mit  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$  dem Impulsübertrag auf das System bei der Streuung. Wir nehmen weiterhin an, daß die Streulängen unabhängig von der Lage sind mit

$$\begin{aligned} \langle a_i a_j \rangle &= \begin{cases} \bar{a}^2 & \text{für } i \neq j \\ \bar{a}^2 & \text{für } i = j \end{cases} = \bar{a}^2 + \delta_{ij} (\bar{a}^2 - \bar{a}^2), \\ \bar{a} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_i, \quad \bar{a}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_i^2, \end{aligned} \quad (146)$$

womit

$$\begin{aligned} &|\langle \mathbf{k}_2\sigma_2, n_2 | W | \mathbf{k}_1\sigma_1, n_1 \rangle|^2 = \\ &= \left( \frac{2\pi\hbar^2}{mV} \right)^2 \left[ \bar{a}^2 \sum_{i,j=1}^N \langle n_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} | n_2 \rangle \langle n_2 | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} | n_1 \rangle + (\bar{a}^2 - \bar{a}^2) \sum_{i=1}^N |\langle n_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} | n_2 \rangle|^2 \right]. \end{aligned} \quad (147)$$

Wir nehmen nun an, daß nur die Impulse und nicht die Spins des Teilchens vor und nach der Streuung gemessen werden. Dabei seien  $p(n_1)$  die Wahrscheinlichkeit, daß sich das System vor der Streuung im Zustand  $|n_1\rangle$  befindet und  $p(\sigma_1)$  die Wahrscheinlichkeit daß der Spin des Teilchens vor der Streuung  $\sigma_1$  ist. Dann ist

$$\Gamma(\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}_2) = \sum_{n_1, n_2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} p(n_1)p(\sigma_1)\Gamma(\mathbf{k}_1\sigma_1, n_1 \rightarrow \mathbf{k}_2\sigma_2, n_2) \quad (148)$$

Der *doppelt differentielle, unpolarisierte Wirkungsquerschnitt* ist dann gegeben durch

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{\Gamma(\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}_2)}{Nj} \frac{d^2\mathcal{N}_{\text{out}}}{d\Omega d\epsilon}(\mathbf{k}_2). \quad (149)$$

Hier ist  $N$  die Anzahl der Streuzentren,  $j$  der Betrag des Flusses

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\psi_{\text{in}}^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}) \nabla \psi_{\text{in}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r})] = \frac{1}{V} \frac{\hbar \mathbf{k}_1}{m},$$

des durch die im Volumen  $V$  auf Eins normierte Wellenfunktion  $\psi_{\text{in}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}}/V^{1/2}$  beschriebenen einfallenden Teilchens,  $\epsilon = (\hbar k_2)^2/(2m)$  die Energie des gestreuten Teilchens und

$$\frac{d^2\mathcal{N}_{\text{out}}}{d\Omega d\epsilon}(\mathbf{k}_2) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{d^3\mathbf{k}_2}{d\Omega d\epsilon} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{mk_2}{\hbar^2}$$

die Anzahl der Streuzustände pro Raumwinkelelement  $d\Omega$  und Energie-Intervall  $d\epsilon$ , wobei  $d^3\mathbf{k}_2 = k_2^2 d\Omega dk_2$  und  $d\epsilon = \hbar^2 k_2 dk_2/m$  benutzt wurden. Einsetzen von Gl. (142), (147), (148) und der beiden letzten Gleichungen in Gl. (149) ergibt schließlich

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = A_{\text{coh}} S_{\text{coh}}(\mathbf{k}, \omega) + A_{\text{inc}} S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega), \quad (150)$$

mit den Faktoren

$$A_{\text{coh}} = \bar{a}^2 \frac{k_2}{k_1}, \quad A_{\text{inc}} = \left( \bar{a}^2 - \bar{a}^2 \right) \frac{k_2}{k_1} \quad (151)$$

und den *kohärenten* bzw. *inkohärenten dynamischen Strukturfunktionen*

$$\begin{aligned} S_{\text{coh}}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \sum_{n_1, n_2} p(n_1) \langle n_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} | n_2 \rangle \langle n_2 | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} | n_1 \rangle \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega), \\ S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{n_1, n_2} p(n_1) |\langle n_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} | n_2 \rangle|^2 \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega). \end{aligned} \quad (152)$$

Die kohärente Strukturfunktion beschreibt die Korrelationen der verschiedenen Streuzentren untereinander und berücksichtigt Interferenzeffekte, während die inkohärente Strukturfunktion die Autokorrelation einzelner Streuzentren beschreibt.

Mit Hilfe der Darstellung  $\delta(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t}/(2\pi)$  der Dirac'schen Delta-Funktion kann man umformen,

$$\begin{aligned} \langle n_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} | n_2 \rangle \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega)t/\hbar} \langle n_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} | n_2 \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i\omega t} \langle n_1 | e^{iH_0 t/\hbar} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} e^{-iH_0 t/\hbar} | n_2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i\omega t} \langle n_1 | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j(t)} | n_2 \rangle, \end{aligned}$$

womit wegen der Vollständigkeitsrelation  $\sum_{n_2} |n_2\rangle \langle n_1| = 1$ ,

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i\omega t} \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \langle e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j(t)} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i(t=0)} \rangle,$$

wobei der Erwartungswert als

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_n p(n) \langle n | \mathcal{O} | n \rangle = \text{Tr}(\rho \mathcal{O})$$

mit der *Dichtematrix*

$$\rho = \sum_n p(n) |n\rangle \langle n|. \quad (153)$$

definiert ist. Zum Beispiel hat man für einen zeit-unabhängigen Hamilton-Operator  $H_0$  im thermischen Gleichgewicht bei Temperatur  $T$  die *kanonische Verteilung* bei gegebener Teilchenzahl  $N$

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_0}, \quad Z = \text{Tr}(e^{-\beta H_0}) = \sum_m e^{-\beta E_m(N)} \quad (154)$$

mit  $\beta = 1/T$  und  $E_m(N)$  den Energie-Eigenwerten bei Teilchenzahl  $N$ , oder bei Temperatur  $T$  und chemischem Potential  $\mu$  die *großkanonische Verteilung*

$$\rho = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta(H_0 - \mu N)}, \quad \mathcal{Z} = \text{Tr}(e^{-\beta(H_0 - \mu N)}) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_m e^{-\beta[E_m(N) - \mu N]}, \quad (155)$$

falls die Teilchenzahl  $N$  wegen Austausch mit dem Wärmebad fluktuiert. Der Dichte-Operator ist

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)], \quad (156)$$

und hat die Fouriertransformierte Gl. (55)

$$n_{\mathbf{k}}(t) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i(t)}, \quad (157)$$

womit man schließlich schreiben kann

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i\omega t} \frac{1}{N} \langle n_{\mathbf{k}}(t) n_{-\mathbf{k}}(0) \rangle. \quad (158)$$

Wir betrachten nun die allgemeine *Korrelationsfunktion* von Operatoren  $A(t)$  und  $B(t)$  in der Heisenberg-Darstellung,

$$C(t, t') \equiv \langle A(t) B(t') \rangle = \text{Tr} \left( \rho e^{iH_0(t-t')/\hbar} A e^{-iH_0(t-t')/\hbar} B \right) = C(t - t', 0) \quad (159)$$

wobei die zyklische Invarianz der Spur und  $[H_0, \rho] = 0$  verwendet wurden. Die Korrelationsfunktionen sind also invariant unter einer Zeitverschiebung. Wir definieren nun

$$G_{AB}^>(t) \equiv \langle A(t) B(0) \rangle, \quad (160)$$

$$G_{AB}^<(t) \equiv \langle B(0) A(t) \rangle, \quad (161)$$

mit der Fourier-Transformierten

$$G_{AB}^{\geq}(\omega) \equiv \int dt e^{i\omega t} G_{AB}^{\geq}(t). \quad (162)$$

Mit Hilfe von  $A(t) = e^{iH_0t/\hbar} A e^{-iH_0t/\hbar}$  und der Vollständigkeitsrelation für die Eigenzustände  $|n\rangle$  von  $H_0$  zum Eigenwert  $E_n$  erhält man daraus die *Spektraldarstellungen*

$$G_{AB}^>(\omega) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} \langle n|A|m\rangle \langle m|B|n\rangle \delta\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} + \omega\right), \quad (163)$$

$$G_{AB}^<(\omega) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle \delta\left(\frac{E_m - E_n}{\hbar} + \omega\right), \quad (164)$$

Diese haben die Eigenschaften

$$G_{AB}^>(-\omega) = G_{BA}^<(\omega), \quad (165)$$

$$G_{AB}^<(\omega) = G_{AB}^>(\omega) e^{-\beta(\hbar\omega - \mu\Delta N_B)}. \quad (166)$$

Die erste Relation folgt durch Invertierung des Vorzeichens des Arguments der Delta-Funktion und für die zweite Relation vertauscht man in der Darstellung von  $G_{AB}^<(\omega)$  in Gl. (163)  $n$  mit  $m$  und verwendet die Delta-Funktion um  $E_m$  im Exponenten durch  $E_n$  auszudrücken, wobei angenommen wird daß der Operator  $B$  die Teilchenzahl um  $\Delta N_B = N_m - N_n$  ändert. Daraus folgt auch

$$G_{AB}^>(-\omega) = G_{BA}^>(\omega) e^{-\beta(\hbar\omega - \mu\Delta N_A)},$$

was nach Gl. (158) durch Anwendung für  $A = n_{\mathbf{k}}$ ,  $B = n_{-\mathbf{k}}$  auf

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{k}, -\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} S_{\text{coh}}(-\mathbf{k}, \omega) \quad (167)$$

führt. Für Paritäts-invariante Systeme folgt auch

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{k}, -\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} S_{\text{coh}}(\mathbf{k}, \omega) \quad (168)$$

Da die Strukturfunktion  $S_{\text{coh}}(\mathbf{k}, \omega)$  proportional zur Übergangswahrscheinlichkeit  $W_{n \rightarrow m}$  von einem Zustand  $|n\rangle$  in einen Zustand  $|m\rangle$  unter Änderung von Energie und Impuls des Systems um  $(\mathbf{k}, \omega)$  ist und für die Besetzungswahrscheinlichkeiten  $p_n$  und  $p_m$  dieser Zustände  $p_m = e^{-\beta\hbar\omega} p_n$  gilt, folgt aus Gl. (168) sofort

$$W_{n \rightarrow m} p_n = W_{m \rightarrow n} p_m,$$

was bedeutet daß sich die Besetzungswahrscheinlichkeiten nicht ändern, was als *detailliertes Gleichgewicht* bekannt ist.

## 1.5 Dynamische Suszeptibilität

Ein System werde durch einen ungestörten, zeitunabhängigen Hamiltonian  $H_0$  beschrieben und befinde sich in einem Zustand, der durch eine Dichtematrix  $\rho_0$  beschrieben wird, die nur von  $H_0$  abhängt und damit auch mit  $H_0$  kommutiert,  $[\rho_0, H_0] = 0$ . Beispiele sind die Dichtematrizen der kanonischen und großkanonischen Verteilungen Gl. (154) bzw. (155).

Wir interessieren uns nun für den zeitabhängigen Erwartungswert  $\langle A \rangle(t)$  eines nicht explizit zeitabhängigen Operators  $A$  in der Gegenwart einer im allgemeinen zeitabhängigen Störung  $V(t)$  welche zur Zeit  $t = t_0$  eingeschaltet werde, d.h. für einen Hamiltonian

$$H(t) = H_0 + V(t) = H_0 - Bf(t), \quad (169)$$

wobei  $B$  ein zeitunabhängiger Operator und  $f(t)$  eine reelle Funktion mit  $f(t) = 0$  für  $t < t_0$  sei. Zunächst gilt allgemein für beliebigen Hamiltonian  $H(t)$

$$\langle A \rangle(t) = \text{Tr} [\rho(t)A] = \text{Tr} [\rho_0 A_H(t)], \quad (170)$$

wobei die Zeitabhängigkeit entweder auf die Dichtematrix

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho_0 U^\dagger(t, t_0) \quad (171)$$

oder auf den Operator  $A$  in der Heisenberg Darstellung abgewälzt werden kann,

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0)A(t_0)U(t, t_0), \quad (172)$$

mit dem zu  $H$  gehörigen unitären Entwicklungsoperator  $U(t, t_0) = T \exp \left[ - (i/\hbar) \int_{t_0}^t dt' H(t') \right]$ .

Man beachte daß  $U$  und  $U^\dagger$  in Gl. (171) und (172) vertauscht sind. In Abwesenheit der Störung ist  $\langle A \rangle(t)$  zeitunabhängig,

$$\langle A \rangle(t) \equiv \langle A \rangle_0 = \text{Tr} [\rho_0 A],$$

da  $[U(t, t_0), \rho_0] = 0$ .

Der Zeitentwicklungsoperator in Wechselwirkungsdarstellung  $U_I(t, t_0)$  ist definiert durch

$$U_I(t, t_0) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} U(t, t_0). \quad (173)$$

und steht damit in dem Zusammenhang

$$|\psi(t)\rangle_I = U_I(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (174)$$

mit dem Zustand  $|\psi(t)\rangle_I$  in Wechselwirkungsdarstellung. Aus

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I = V_I(t) |\psi(t)\rangle_I, \quad (175)$$

mit der Störung in Wechselwirkungsdarstellung

$$V_I(t) \equiv e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} V(t) e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}. \quad (176)$$

folgt damit die Differentialgleichung für die Evolution von  $U_I(t, t_0)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0), \quad (177)$$

welche zu

$$\begin{aligned}
U_I(t, t_0) &= T \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right] = \\
&= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') + \dots,
\end{aligned} \tag{178}$$

iteriert werden kann, mit dem Zeitordnungs-Operator  $T$ . Aus Gl. (170), (172), (173) und (178) folgt nun in erster Ordnung in der kleinen Störung  $B$ ,

$$\langle A \rangle(t) = \langle A \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [A_I(t), V_I(t')] \rangle_0 = \langle A \rangle_0 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [A_I(t), B_I(t')] \rangle_0 f(t'), \tag{179}$$

wobei der Index 0 bedeutet daß der Erwartungswert mit der ungestörten Dichtematrix  $\rho_0$  berechnet wird. Dies schreibt man gewöhnlich als Integral

$$\langle A \rangle(t) - \langle A \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{AB}(t - t') f(t') \tag{180}$$

der *dynamischen kausalen Suszeptibilität* oder *linearen Response-Funktion*

$$\chi_{AB}(t - t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \langle [A_I(t), B_I(t')] \rangle_0, \tag{181}$$

wobei die Theta-Funktion Kausalität sicherstellt. Damit ist auch die Fourier-Transformierte für  $z \in \mathbb{C}$

$$\chi_{AB}(z) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{izt} \chi_{AB}(t) \tag{182}$$

analytisch in der oberen Halbebene. Mit ihrer Hilfe kann man die Antwort auf eine langsam eingeschaltete periodische Störung,  $\epsilon \rightarrow 0+$ ,

$$V(t) = - (B f e^{-i\omega t} + B^\dagger f^* e^{i\omega t}) e^{\epsilon t} \tag{183}$$

schreiben als

$$\langle A \rangle(t) - \langle A \rangle_0 = \chi_{AB}(\omega) f e^{-i\omega t} + \chi_{AB}(-\omega) f^* e^{i\omega t}. \tag{184}$$

Der Cauchysche Integralsatz besagt

$$\chi_{AB}(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz' \frac{\chi_{AB}(z')}{z' - z}, \tag{185}$$

wobei  $C$  eine beliebige geschlossene im Gegen-Uhrzeigersinn zu durchlaufende Kurve im Analytizitätsgebiet ist. Beispielsweise kann man  $C$  aus der Integration entlang der reellen Achse von  $-R$  bis  $+R$  und einem Halbkreis in der oberen Halbebene mit Zentrum im Ursprung und Radius  $R$  zusammensetzen. Wächst  $\chi_{AB}(t)$  für große  $t$  höchstens wie eine Potenz von  $t$  an, so trägt der Halbkreis für  $R \rightarrow \infty$  nichts bei und man erhält

$$\chi_{AB}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{\chi_{AB}(x')}{x' - z}, \tag{186}$$

Für  $z = x$  reell folgt daraus

$$\begin{aligned}\chi_{AB}(x) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \chi_{AB}(x + i\epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx'}{2\pi i} \frac{\chi_{AB}(x')}{x' - x - i\epsilon} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx'}{2\pi i} \left[ \text{P} \frac{1}{x' - x} + i\pi\delta(x' - x) \right] \chi_{AB}(x'),\end{aligned}\quad (187)$$

wobei für eine reelle Funktion mit einer Singularität bei  $x = x_0$  der *Hauptwert* für  $a < x_0 < b$  als

$$\text{P} \int_a^b dx f(x) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_a^{x_0 - \epsilon} dx f(x) + \int_{x_0 + \epsilon}^b dx f(x) \quad (188)$$

definiert ist, falls der Grenzwert existiert. Aus Gl. (187) folgt

$$\chi_{AB}(x) = \frac{1}{\pi i} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{\chi_{AB}(x')}{x' - x}. \quad (189)$$

Daraus folgen die *Dispersionsrelationen*, oder *Kramers-Kronig-Relationen*

$$\begin{aligned}\text{Re} \chi_{AB}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Im} \chi_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega}, \\ \text{Im} \chi_{AB}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Re} \chi_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega}.\end{aligned}\quad (190)$$

Die *dissipative Antwort* ist definiert als

$$\chi''_{AB}(t) \equiv \frac{1}{2\hbar} \langle [A_I(t), B(0)] \rangle_0. \quad (191)$$

Mit Hilfe des Residuensatzes erhält man leicht die Fourier-Darstellung der Stufenfunktion

$$\Theta(t) = - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega + i\epsilon}. \quad (192)$$

Damit folgt aus Gl. (181) wegen  $\chi_{AB}(t) = 2i\Theta(t)\chi''_{AB}(t)$  für Gl. (182) für  $z = \omega$  reell

$$\chi_{AB}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\chi''_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega - i\epsilon} = \frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\chi''_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega} + i\chi''_{AB}(\omega). \quad (193)$$

Dies schreibt man kurz als

$$\chi_{AB}(\omega) = \chi'_{AB}(\omega) + i\chi''_{AB}(\omega) \quad (194)$$

mit

$$\chi'_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\chi''_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega}. \quad (195)$$

Man zeigt leicht daß wenn  $A^\dagger = B$ ,  $\chi'_{AB}(\omega)$  und  $\chi''_{AB}(\omega)$  reell sind, womit Gl. (195) einer Zerlegung in Real- und Imaginärteil entspricht und mit Gl. (190) identisch ist.

## 1.6 Das Fluktuations-Dissipations-Theorem

Aus den Definitionen Gl. (191) und Gl. (160) folgt nun sofort das *Fluktuations-Dissipations-Theorem*

$$\chi''_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\hbar} [G_{AB}^>(\omega) - G_{AB}^<(\omega)] = \frac{1}{2\hbar} G_{AB}^>(\omega) [1 - e^{-\beta(\hbar\omega - \mu\Delta N_B)}] , \quad (196)$$

wobei die letzte Identität aus Gl. (165) folgt. Die Funktion  $G_{AB}^>$  beschreibt per Definition die zeitliche Korrelation von Fluktuationen von  $A$  und  $B$ . Andererseits induziert eine Störung der Form

$$H' = \Theta(t) (A^\dagger F e^{-i\omega t} + A F^* e^{i\omega t}) ,$$

mit  $F$  einer komplexen Zahl, gemäß Fermi's goldener Regel übergänge von einem Zustand  $n$  in einen Zustand  $m$  mit der Rate

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} [\delta(E_m - E_n - \hbar\omega) |\langle m | A^\dagger F | n \rangle|^2 + \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) |\langle m | A F^* | n \rangle|^2] .$$

Mit Hilfe von Gl. (163) wird damit die absorbierte Leistung

$$P = \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}}{Z} (E_m - E_n) \Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{\omega}{\hbar} |F|^2 [G_{AA^\dagger}^>(\omega) - G_{AA^\dagger}^<(\omega)] = 2\omega \chi''_{AA^\dagger}(\omega) |F|^2 , \quad (197)$$

wobei wir im letzten Schritt Gl. (196) verwendet haben.

Im klassischen Grenzfall  $\beta\hbar\omega \ll 1$ , welcher dem Hochtemperatur-Limes entspricht, folgt aus Gl. (196) für  $\Delta N_B = 0$ ,

$$\chi''_{AB}(\omega) = \frac{\beta\omega}{2} G_{AB}^>(\omega) . \quad (198)$$

Im klassischen Grenzfall ist ferner auch  $G_{AB}^>(\omega) = 0$  für  $\beta\hbar|\omega| \gtrsim 1$ , so daß aus der Integraldarstellung Gl. (193) folgt

$$\chi_{AB}(0) \simeq \beta \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} G_{AB}^>(\omega') = \beta G_{AB}^>(t=0) . \quad (199)$$

Die statische Suzeptibilität ist damit ungefähr gleich der gleichzeitigen Korrelationsfunktion von  $A$  und  $B$  dividiert durch  $k_B T$ .

Als **Beispiel** betrachten wir einen harmonischen Kristall mit Gitterpunkten  $\mathbf{n}$ . Der Ortsvektor des zugehörigen Atoms sei  $\mathbf{r}_\mathbf{n} = \mathbf{a}_\mathbf{n} + \mathbf{u}_\mathbf{n}$ , wobei  $\mathbf{a}_\mathbf{n}$  die Gleichgewichtslagen sind und die Auslenkungen  $\mathbf{u}_\mathbf{n}(t)$  als Summe von harmonischen Schwingungen, den *Phononen*, dargestellt werden können,

$$\mathbf{u}_\mathbf{n}(t) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_\mathbf{n}} \mathbf{Q}_{\mathbf{k}\lambda}(t) . \quad (200)$$

Hier ist  $N$  die Anzahl der Gitterpunkte und die Phonon-Operatoren sind gegeben durch

$$Q_{\mathbf{k}\lambda}^i(t) = \epsilon_{\mathbf{k}\lambda}^i \left( \frac{\hbar}{2m\omega_{\mathbf{k}\lambda}} \right)^{1/2} \left[ a_{\mathbf{k}\lambda}(t) + a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger(t) \right] , \quad (201)$$

wobei der Index  $i$  die räumlichen Komponenten darstellt,  $m$  die Masse der Atome ist, und  $\mathbf{k}$  und  $\lambda$  Wellenzahl und Polarisation der Eigenschwingung sind, welche durch den Polarisationsvektor  $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$ , dem Vernichter  $a_{\mathbf{k}\lambda}$  und der zugehörigen Schwingungsfrequenz  $\omega_{\mathbf{k}\lambda}$  charakterisiert sind. Man kann dann zeigen daß Phonon-Korrelationsfunktion  $D_{ij}(\mathbf{q}, \omega)$  und dissipative Antwort  $\chi''_{ij}(\mathbf{q}, \omega)$  gegeben sind durch

$$\begin{aligned}
D_{ij}(\mathbf{q}, \omega) &\equiv \sum_{\lambda} G_{Q_{\mathbf{q}\lambda}^i Q_{-\mathbf{q}\lambda}^j}^{>}(\omega) = \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_{\mathbf{n}}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle u_{\mathbf{n}+\mathbf{n}'}^i(t) u_{\mathbf{n}'}^j(0) \rangle = \quad (202) \\
&= \frac{\pi\hbar}{m} \sum_{\lambda} \frac{\epsilon_{\mathbf{q}\lambda}^i \epsilon_{\mathbf{q}\lambda}^j}{\omega_{\mathbf{q}\lambda}} [(1+n_{\mathbf{q}\lambda})\delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}\lambda}) + n_{\mathbf{q}\lambda}\delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}\lambda})] \\
\chi''_{ij}(\mathbf{q}, \omega) &\equiv \sum_{\lambda} \chi''_{Q_{\mathbf{q}\lambda}^i Q_{-\mathbf{q}\lambda}^j}(\omega) = \frac{1}{2\hbar} D_{ij}(\mathbf{q}, \omega)(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) = \quad (203) \\
&= \frac{\pi}{2m} \sum_{\lambda} \frac{\epsilon_{\mathbf{q}\lambda}^i \epsilon_{\mathbf{q}\lambda}^j}{\omega_{\mathbf{q}\lambda}} [\delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}\lambda}) - \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}\lambda})],
\end{aligned}$$

wobei der Gitterpunkt  $\mathbf{n}'$  aufgrund der Translationsinvarianz beliebig ist und

$$n_{\mathbf{q}\lambda} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}} - 1} \quad (204)$$

die bosonischen Besetzungszahlen der Phonon-Moden im thermischen Gleichgewicht bei Temperatur  $T$  sind. Die Phonon-Korrelationsfunktion  $D_{ij}(\mathbf{q}, \omega)$  beschreibt nach Gl. (150) Streuung am Kristall und ist daher auch positiv definit. Sie besteht aus einer Summe von Delta-Funktionen im Energie-Übertrag, welche den diversen Phonon-Energien entsprechen und für realistische gedämpfte Schwingungen eine endliche Breite haben.

## 2 Relativistische Wellengleichungen

### 2.1 Die Klein-Gordon-Gleichung

Für die Minkowskische Vierermetrik der speziellen Relativitätstheorie verwenden wir im folgenden die Konvention

$$\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1), \quad (205)$$

womit der kontravariante Vierer-Impuls

$$p^{\mu} = (p^0, p^1, p^2, p^3) = \left( \frac{E}{c_0}, p_x, p_y, p_z \right) = \left( \frac{E}{c_0}, \mathbf{p} \right) \quad (206)$$

mit der Vakuum-Lichtgeschwindigkeit  $c_0$  gegeben ist. Der kovariante Vierer-Impuls ist

$$p_{\mu} = \eta_{\mu\nu} p^{\nu} = (p_0, p_1, p_2, p_3) = \left( \frac{E}{c_0}, -p_x, -p_y, -p_z \right) = \left( \frac{E}{c_0}, -\mathbf{p} \right) \quad (207)$$

und das Skalarprodukt

$$p^2 = p_{\mu} p^{\mu} = \frac{E^2}{c_0^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c_0^2. \quad (208)$$

Substitution des *Korrespondenzprinzips*

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar \nabla \quad (209)$$

in die quadratische Dispersionsrelation Gl. (208) ergibt die *Klein-Gordon-Gleichung*

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = (-\hbar^2 c_0^2 \nabla^2 + m^2 c_0^4) \psi. \quad (210)$$

Mit der relativistisch kovarianten Notation

$$x^\mu = (x^0, \mathbf{r}) = (c_0 t, r^i) = (c_0 t, \mathbf{r}), \quad \partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

lässt sich das Korrespondenzprinzip Gl. (209) kompakt schreiben als

$$p_\mu = i\hbar \partial_\mu, \quad p^\mu = i\hbar \partial^\mu = i\hbar \eta^{\mu\nu} \partial_\nu, \quad (211)$$

und die Klein-Gordon-Gleichung (210) wird

$$- [p^2 - (mc_0)^2] \psi = [\hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu + (mc_0)^2] \psi = [\hbar^2 \square + (mc_0)^2] \psi = 0, \quad (212)$$

mit dem *d'Alembertian* oder Wellenoperator  $\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = c_0^{-2} \partial^2 / \partial t^2 - \nabla^2$ . Dies ist eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung und hat ebene Wellen der Form

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) / \hbar}, \quad E = \pm (\mathbf{p}^2 c_0^2 + m^2 c_0^4)^{1/2} \quad (213)$$

als Lösung, welche damit auch beliebig negative Energien enthalten können. Durch Subtraktion der komplex konjugierten Gleichung erhält man aus G. (212) sofort

$$\partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) = \partial_t (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) - \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0,$$

was sich in die Form einer *Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (214)$$

bringen lässt mit

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{i\hbar}{2mc_0^2} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) = \frac{\hbar}{mc_0^2} \text{Im} [\psi \partial_t \psi^*], \\ \mathbf{j} &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\psi^* \nabla \psi], \end{aligned} \quad (215)$$

wobei der Koeffizient so gewählt wurde, daß die Stromdichte  $\mathbf{j}$  dem nicht-relativistischen Fall entspricht. Die Dichte  $\rho$  ist nicht positiv definit und muss daher als Ladungsdichte interpretiert werden. Die Klein-Gordon Gleichung beschreibt Teilchen mit Spin Null.

## 2.2 Die Dirac-Gleichung

Wir suchen nun eine relativistische Wellengleichung erster Ordnung der Form

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-i\hbar c_0 \alpha^k \partial_k + \beta m c_0^2) \psi \equiv H \psi, \quad (216)$$

wobei  $\psi = (\psi_1, \dots, \psi_N)^T$  ein *Spinor* mit  $N$  Komponenten ist, die *Dirac-Matrizen*  $\alpha^k$  und  $\beta$   $N \times N$  Matrizen sind und  $k$  über die räumlichen Indizes 1,2,3 läuft. Wir fordern daß die Komponenten von  $\psi$  die Klein-Gordon Gleichung erfüllen, ein erhaltener Viererstrom mit positiver Dichte als nullter Komponente existiert und daß Gl. (216) Lorentz-kovariant ist. Diese Bedingungen legen die Matrizen  $\alpha^k$  und  $\beta$  weitgehend fest. Zunächst folgt aus zweifacher Anwendung von  $H$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c_0^2 \sum_{ij=1}^3 \frac{1}{2} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \partial_i \partial_j \psi - i\hbar m c_0^2 \sum_{i=1}^3 (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) \partial_i \psi + \beta^2 m^2 c_0^4 \psi.$$

Vergleich mit Gl. (210) ergibt

$$\begin{aligned} \alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i &= 2\delta^{ij} \mathbf{1}, \\ \alpha^i \beta + \beta \alpha^i &= 0, \\ (\alpha^i)^2 = \beta^2 &= \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (217)$$

Multiplikation der *Dirac-Gleichung* (216) mit dem adjungierten Spinor  $\psi^\dagger = (\psi_1^*, \dots, \psi_N^*)$  und Subtraktion der resultierenden komplex konjugierten Gleichung führt auf

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) = -c_0 [(\partial_i \psi^\dagger) (\alpha^i)^\dagger \psi + \psi^\dagger \alpha^i \partial_i \psi] + \frac{i m c_0^2}{\hbar} (\psi^\dagger \beta^\dagger \psi - \psi^\dagger \beta \psi).$$

Dies hat die Form einer Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (218)$$

mit Dichte  $\rho$  und Stromdichte  $\mathbf{j}$

$$\begin{aligned} \rho &= \psi^\dagger \psi = \sum_{\alpha=1}^N \psi_\alpha^* \psi_\alpha, \\ j^k &= c_0 \psi^\dagger \alpha^k \psi, \end{aligned} \quad (219)$$

falls die Matrizen  $\alpha^i$  und  $\beta$  hermitesch sind,

$$(\alpha^i)^\dagger = \alpha^i, \quad \beta^\dagger = \beta. \quad (220)$$

Mit

$$j^\mu = (j^0, j^i) = (c_0 \rho, j^i) \quad (221)$$

kann dies kovariant geschrieben werden als

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{1}{c_0} \frac{\partial j^0}{\partial t} + \frac{\partial j^i}{\partial r^i} = 0. \quad (222)$$

Die Dichte in Gl. (219) ist nun positiv definit.

Aus Gl. (217) folgt  $\alpha^i = -\beta\alpha^i\beta$  und  $\beta = -\alpha^i\beta\alpha^i$ , woraus folgt daß diese Matrizen spurlos sind,

$$\text{Tr}(\alpha^i) = \text{Tr}(\beta) = 0, \quad (223)$$

womit die Eigenwerte gleich  $\pm 1$  sind, mit gleich vielen positiven und negativen Eigenwerten. Daraus folgt daß  $N$  gerade und  $N \geq 4$  ist, da die Paulimatrizen mit keiner anderen Matrix gleichzeitig anti-kommutieren. Die Standard-Darstellung der Dirac-Matrizen ist

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad (224)$$

mit  $\sigma^i$  den üblichen Pauli-Matrizen.

Wir definieren nun die Gamma-Matrizen

$$\gamma^0 \equiv \beta, \quad \gamma^i \equiv \beta\alpha^i. \quad (225)$$

Aus den Eigenschaften von  $\alpha^i$  und  $\beta$  folgt

$$\begin{aligned} (\gamma^0)^\dagger &= \gamma^0, & (\gamma^i)^\dagger &= -\gamma^i \\ \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu &= 2\eta^{\mu\nu}\mathbf{1}. \end{aligned} \quad (226)$$

Die entsprechenden kovarianten Komponenten sind  $\gamma_\mu = \eta_{\mu\nu}\gamma^\nu$ . Multiplikation der Dirac-Gleichung (216) mit  $\hbar\beta$  führt auf die kovariante Form

$$(-i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + mc_0)\psi = (-i\hbar\not{\partial} + mc_0)\psi = (-\not{p} + mc_0)\psi = 0, \quad (227)$$

wobei für die Kontraktion eines beliebigen Vektors  $v^\mu$  gerne die *slash-Notation*

$$\not{v} \equiv \gamma^\mu v_\mu$$

verwendet wird. Beispielsweise gilt für jeden beliebigen Vierer-Vektor  $v$  aufgrund von Gl. (226)

$$\not{v}\not{v} = (v)^2 = v_\mu v^\mu \mathbf{1} = v^2.$$

In der Standarddarstellung Gl. (224) lauten die Gamma-Matrizen schließlich

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}. \quad (228)$$

Die Lösungen der Dirac-Gleichung für ein Teilchen in Ruhe,  $\mathbf{p} = 0$ , lauten

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}^+(t, \mathbf{r}) &= e^{-imc_0^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \psi_{\downarrow}^+(t, \mathbf{r}) &= e^{-imc_0^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \psi_{\uparrow}^-(t, \mathbf{r}) &= e^{+imc_0^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \psi_{\downarrow}^-(t, \mathbf{r}) &= e^{+imc_0^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (229)$$

wobei  $\pm$  für das Vorzeichen der Energie und  $\uparrow$  und  $\downarrow$  für den Spin stehen.

Wie in der klassischen Mechanik und in der nicht-relativistischen Quantenmechanik erhält man die Kopplung eines Teilchens mit Ladung  $e$  an ein durch ein Vektorpotential  $\mathbf{A}(t, \mathbf{r})$  und ein Skalarpotential  $\phi(t, \mathbf{r})$  beschriebenes elektromagnetisches Feld durch die Substitution

$$E \rightarrow E - e\phi(t, \mathbf{r}), \quad \mathbf{p} \rightarrow \left[ \mathbf{p} - \frac{e}{c_0} \mathbf{A}(t, \mathbf{r}) \right] \equiv \boldsymbol{\pi}, \quad (230)$$

für den kanonischen Impuls  $\mathbf{p}$  bzw. Energie  $E$ , wo  $\boldsymbol{\pi}$  der *kinetische Impuls* ist. In kovarianter Schreibweise ist dies

$$p_\mu \rightarrow p_\mu - \frac{e}{c_0} A_\mu, \quad i\hbar\partial_\mu \rightarrow i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c_0} A_\mu, \quad (231)$$

wobei das Viererpotential

$$A^\mu = (\phi, \mathbf{A}).$$

Damit wird aus der Dirac-Gleichung (227)

$$\left[ -\gamma^\mu \left( i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c_0} A_\mu \right) + mc_0 \right] \psi = \left( -i\hbar\not{\partial} + \frac{e}{c_0} \not{A} + mc_0 \right) \psi = 0. \quad (232)$$

oder in nicht-relativistischer Schreibweise

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[ c_0\boldsymbol{\alpha} \cdot \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c_0} \mathbf{A} \right) + \beta mc_0^2 + e\phi \right] \psi = 0, \quad (233)$$

### 2.3 Pauli-Gleichung als nicht-relativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung

Mit dem Ansatz

$$\psi = e^{-imc_0^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (234)$$

führt die Dirac-Gleichung (233) auf

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c_0 \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \chi \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \varphi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc_0^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (235)$$

Im nicht-relativistischen Grenzfall sind in der unteren Komponente  $i\hbar\partial_t\chi$  und  $e\phi\chi$  gegen  $2mc_0^2\chi$  vernachlässigbar, woraus sich  $\chi$  gemäß

$$\chi = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2mc_0} \varphi \quad (236)$$

eliminieren lässt. Einsetzen in die obere Komponente von Gl. (235) ergibt

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left[ \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})}{2m} + e\phi \right] \varphi. \quad (237)$$

Verwenden der Eigenschaft der Pauli-Matrizen  $\sigma^i\sigma^j = \delta_{ij} + i\epsilon^{ijk}\sigma^k$ , oder

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

für zwei beliebige Vektoren  $\mathbf{a}$  und  $\mathbf{b}$  ergibt

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) = \boldsymbol{\pi}^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi}) = \boldsymbol{\pi}^2 - \frac{e\hbar}{c_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = \boldsymbol{\pi}^2 - \frac{e\hbar}{c_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B},$$

wobei wir Gl. (230) und Gl. (209) und  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  verwendet haben. Damit wird aus Gl. (237)

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c_0} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + e\phi \right] \varphi, \quad (238)$$

was die *Pauli-Gleichung* für den *Pauli-Spinor*  $\varphi$  ist. In einem konstanten Magnetfeld  $\mathbf{B}$  mit

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B} \times \mathbf{r}}{2}. \quad (239)$$

kann man den Mischterm im quadratischen Term in Gl. (238) wegen  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = -i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  schreiben als  $-\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = -2\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = -(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} = -(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{B} = -\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$  mit dem Bahn-Drehimpuls  $\mathbf{L}$ , womit

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc_0} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{2mc_0^2} \mathbf{A}^2 + e\phi \right] \varphi, \quad (240)$$

wobei Bahn-Drehimpuls und Spin durch

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad \mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \quad (241)$$

gegeben sind. Das magnetische Moment ist damit

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}} = \boldsymbol{\mu}_p + \boldsymbol{\mu}_d = \frac{e}{2mc_0} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) - \frac{e^2 \mathbf{B}}{4mc_0^2} \langle r_{\perp}^2 \rangle = \frac{e}{e_0} \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) - \frac{e^2 \mathbf{B}}{4mc_0^2} \langle r_{\perp}^2 \rangle, \quad (242)$$

wobei  $\boldsymbol{\mu}_p$  und  $\boldsymbol{\mu}_d$  den para- bzw. diamagnetischen Anteil bezeichnen,  $\mathbf{r}_{\perp}$  gemäß Gl. (239) der Anteil von  $\mathbf{r}$  senkrecht zu  $\mathbf{B}$  ist, und im zweiten Ausdruck das *Bohrsche Magneton*

$$\mu_B \equiv \frac{e_0 \hbar}{2mc_0} \quad (243)$$

verwendet wurde, wobei  $e_0$  die positive Elementarladung ist. Der Proportionalitätskoeffizient  $e/(2mc_0)$  in  $\boldsymbol{\mu}_p = \boldsymbol{\mu}_L = e/(2mc_0) \mathbf{L}$  wird dabei oft als *gyromagnetisches Verhältnis* bezeichnet. Das paramagnetische Moment ist damit

$$\boldsymbol{\mu}_p = \frac{e}{2mc_0} (\mathbf{L} + g\mathbf{S}) = \frac{e}{2mc_0} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}), \quad (244)$$

womit auch abgeleitet wurde daß der *gyromagnetische Faktor*, auch *Landé-Faktor* genannt, durch

$$g = 2 \quad (245)$$

gegeben ist. Die Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld kann man daher durch den Hamiltonian

$$H_{\text{em}} = -\boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{B} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_d \cdot \mathbf{B} + e\phi \quad (246)$$

ausdrücken.

## 2.4 Lorentz-Transformationen und Kovarianz der Dirac-Gleichung

Die Gruppe der *Poincaré-Transformationen* ist gegeben durch

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + a^{\mu} \quad (247)$$

und zerfällt in die Translationen  $a^{\mu}$  und die Lorentz-Transformationen  $\Lambda^{\mu}_{\nu}$ . Aufgrund der Invarianz der Metrik Gl. (205) gilt

$$\eta = \Lambda \eta \Lambda^T, \text{ oder } \Lambda^{\lambda}_{\mu} \eta^{\mu\nu} \Lambda^{\rho}_{\nu} = \eta^{\lambda\rho}, \quad (248)$$

woraus

$$\det \Lambda = \pm 1 \quad (249)$$

folgt. Ferner folgt durch Setzen von  $\lambda = \rho = 0$  in Gl. (248)

$$(\Lambda^0_0)^2 - \sum_{i=1}^3 (\Lambda^0_i)^2 = 1,$$

woraus folgt

$$\Lambda^0_0 \geq 1 \quad \text{oder} \quad \Lambda^0_0 \leq -1. \quad (250)$$

Es ist demnach zweckmässig, die in Tab. 1 definierten Teilmengen der Lorentz-Gruppe zu betrachten. Der diskrete Paritäts- und Zeitumkehr-Operator sind dabei gegeben durch

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad PT = -\mathbb{1}. \quad (251)$$

Name	Symbol	$\text{sgn} \Lambda^0_0$	$\det \Lambda$
eigentlich orthochron	$\mathcal{L}_+^{\uparrow}$	1	1
uneigentlich orthochron	$\mathcal{L}_-^{\uparrow} = P \cdot \mathcal{L}_+^{\uparrow}$	1	-1
Zeit-Spiegelungs-artig	$\mathcal{L}_-^{\downarrow} = T \cdot \mathcal{L}_+^{\uparrow}$	-1	-1
Raum-Zeit-Spiegelungs-artig	$\mathcal{L}_+^{\downarrow} = P \cdot T \cdot \mathcal{L}_+^{\uparrow}$	-1	1

Tabelle 1: Klassifikation von Teilmengen der Lorentz-Gruppe. Hierbei sind  $P$  und  $T$  durch Gl. (251) gegeben.

Ferner bezeichnet man  $\mathcal{L}^{\uparrow} \equiv \mathcal{L}_+^{\uparrow} \cup \mathcal{L}_-^{\uparrow}$  als orthochrone Lorentz-Gruppe,  $\mathcal{L}_+ \equiv \mathcal{L}_+^{\uparrow} \cup \mathcal{L}_+^{\downarrow}$  als eigentliche Lorentz-Gruppe und  $\mathcal{L}_0 \equiv \mathcal{L}_+^{\uparrow} \cup \mathcal{L}_-^{\downarrow}$  als paritäts-erhaltende Lorentz-Gruppe. Die auch als eingeschränkte Lorentz-Gruppe bezeichnete Gruppe  $\mathcal{L}_+^{\uparrow}$  enthält 6 kontinuierliche Parameter, 3 für die Lorentz-Boosts entlang der drei räumlichen Richtungen und 3 für Drehungen um die drei räumlichen Richtungen. Der Lorentz-Boost entlang der  $x$ -Richtung hat die allgemeine Form

$$\Lambda_1(\eta) = \begin{pmatrix} \cosh \eta & -\sinh \eta & 0 & 0 \\ -\sinh \eta & \cosh \eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (252)$$

mit

$$\cosh \eta = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \sinh \eta = \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \tanh \eta = \beta, \quad (253)$$

wobei hier und im folgenden  $\hbar = c_0 = 1$  gesetzt wird.

Unter einer Poincaré-Transformation transformiert sich der Dirac-Spinor gemäß

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x) = S(\Lambda)\psi[\Lambda^{-1}(x' - a)]. \quad (254)$$

Dabei ist  $S(\Lambda)$  so zu bestimmen daß

$$(-i\gamma^\mu \partial'_\mu + m)\psi'(x') = 0 \Leftrightarrow (-i\gamma^\mu \partial_\mu + m)\psi(x) = 0,$$

mit unveränderten Gamma-Matrizen, wobei  $\partial'_\mu \equiv \partial/\partial x'^\mu$  und

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu.$$

Verwendung dieser Identität und von  $\psi(x) = S(\Lambda)^{-1}\psi'(x')$  in der Dirac-Gleichung in ungestrichenen Koordinaten sowie Multiplikation mit  $S(\Lambda)$  von links ergibt die Dirac-Gleichung in gestrichenen Koordinaten falls  $S(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu\gamma^\mu S(\Lambda)^{-1}$ , oder

$$S(\Lambda)^{-1}\gamma^\nu S(\Lambda) = \Lambda^\nu{}_\mu\gamma^\mu. \quad (255)$$

Wir betrachten zunächst infinitesimale eigentliche, orthochrone Lorentz-Transformationen,

$$\Lambda^\nu{}_\mu = \delta^\nu{}_\mu + \Delta\omega^\nu{}_\mu, \quad |\Delta\omega^\nu{}_\mu| \ll 1. \quad (256)$$

Einsetzen in Gl. (248) ergibt

$$\Delta\omega^\nu{}_\mu = -\Delta\omega^\mu{}_\nu, \quad (257)$$

die  $\Delta\omega^\nu{}_\mu$  sind also anti-symmetrisch. Einsetzen des Ansatzes

$$S(\Lambda) = \mathbb{1} + \tau, \quad S(\Lambda)^{-1} = \mathbb{1} - \tau$$

in Gl. (255) ergibt

$$[\gamma^\mu, \tau]_- = \Delta\omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu. \quad (258)$$

Damit ist  $\tau$  bis auf ein additives Vielfaches der Einheitsmatrix bestimmt. Fordert man zusätzlich  $\det S(\Lambda) \simeq 1 + \text{Tr}(\tau) = 1$ , also  $\text{Tr}(\tau) = 0$ , so ist die eindeutige Lösung von Gl. (258)

$$\tau = \frac{1}{8}\Delta\omega^{\mu\nu}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu) = -\frac{i}{4}\Delta\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu} \quad (259)$$

mit

$$\sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]_-. \quad (260)$$

Die Verallgemeinerung von Gl. (259) auf endliche Elemente der eigentlichen, orthochronen Lorentz-Gruppe lautet dann

$$S(e^\omega) = \exp\left[-\frac{i}{4}\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right], \quad (261)$$

wobei die Elemente der anti-symmetrischen Matrix  $\omega$  gleich  $\omega^\nu_\mu$  sind.

Wir betrachten nun noch  $S(P)$  für die Paritäts-Transformation  $P$ . Gl. (255) wird zu

$$S(\Lambda)^{-1}\gamma^\nu S(\Lambda) = \eta^{\nu\nu}\gamma^\nu,$$

wobei über  $\nu$  nicht summiert wird. Aus den Eigenschaften Gl. (226) der Gamma-Matrizen folgt daß

$$S(P) = e^{i\varphi}\gamma^0 \quad (262)$$

eine Lösung ist, mit  $\varphi$  einer beliebigen Phase. Die Paritäts-Transformation lautet damit nach Gl. (254) insgesamt

$$\psi_P(x) = \psi_P(t, \mathbf{r}) = e^{i\varphi}\gamma^0\psi(t, -\mathbf{x}) = e^{i\varphi}\gamma^0\psi(Px). \quad (263)$$

Aus Gl. (226) folgt die wichtige Eigenschaft

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 \quad (264)$$

für die Dirac-Darstellung, woraus mit Gl. (261) und (262) für orthochrone Lorentz-Transformationen

$$S^\dagger = \gamma^0 S^{-1} \gamma^0, \quad \text{oder} \quad S^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 S^{-1}. \quad (265)$$

folgt. Wir definieren ferner den *adjungierten Spinor*

$$\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0, \quad (266)$$

womit  $\bar{\psi}'(x') = \psi^\dagger(x) S^\dagger \gamma^0$  und damit wegen Gl. (265)

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x) S^{-1}. \quad (267)$$

Ferner kann mit dieser Definition die Stromdichte Gl. (221) mit Gl. (219) in kovarianter Form

$$j^\mu = c_0 \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \quad (268)$$

geschrieben werden und transformiert sich aufgrund von Gl. (267) und (255) gemäß

$$j^{\mu'}(x') = c_0 \bar{\psi}(x) S^{-1}(\Lambda) \gamma^\mu S(\Lambda) \psi(x) = \Lambda^\mu_{\nu'} c_0 \bar{\psi}(x) \gamma^\nu \psi(x) = \Lambda^\mu_{\nu'} j^\nu(x) \quad (269)$$

wie ein Vektor.

Wir führen nun noch die Matrix

$$\gamma_5 \equiv \gamma^5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3, \quad (270)$$

ein, die die Eigenschaften

$$\{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0, \quad \text{und} \quad (\gamma_5)^2 = \mathbb{1} \quad (271)$$

und in der Standarddarstellung Gl. (228) die Form

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (272)$$

hat. Man kann zeigen daß die 16 Matrizen

$$\Gamma^S = \mathbb{1}, \Gamma_\mu^V = \gamma_\mu, \Gamma_{\mu\nu}^T = \sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]_-, \Gamma_\mu^A = \gamma_5 \gamma_\mu, \Gamma^P = \gamma_5 \quad (273)$$

eine vollständige Basis linear unabhängiger Matrizen im Raum der  $4 \times 4$ -Matrizen bilden, und, bis auf  $\Gamma^S$ , spurlos sind. Mit diesen Matrizen lassen sich folgende Bilineare bilden, die sich unter orthochronen Lorentz-Transformationen welche den Zeitsinn nicht ändern wie angegeben transformieren:

$$\begin{aligned} \text{Skalar} & : \quad \bar{\psi}'(x')\psi'(x') = \bar{\psi}(x)\psi(x), \\ \text{Vektor} & : \quad \bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \Lambda^\mu_\nu\bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x), \\ \text{antisymmetrischer Tensor} & : \quad \bar{\psi}'(x')\sigma^{\mu\nu}\psi'(x') = \Lambda^\mu_\rho\Lambda^\nu_\sigma\bar{\psi}(x)\sigma^{\rho\sigma}\psi(x), \\ \text{Pseudo-Vektor} & : \quad \bar{\psi}'(x')\gamma_5\gamma^\mu\psi'(x') = (\det \Lambda)\Lambda^\mu_\nu\bar{\psi}(x)\gamma_5\gamma^\nu\psi(x), \\ \text{Pseudo-Skalar} & : \quad \bar{\psi}'(x')\gamma_5\psi'(x') = (\det \Lambda)\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x). \end{aligned} \quad (274)$$

Der Faktor  $(\det \Lambda)$  im Transformationsgesetz für Pseudo-Vektoren und Pseudo-Skalare folgt aus

$$\bar{\psi}'\Gamma^{A,P}\psi' = \bar{\psi}'\gamma_5\Gamma^{S,V}\psi' = \bar{\psi}S^{-1}\gamma_5\Gamma^{S,V}S\psi = (\det \Lambda)\bar{\psi}\gamma_5S^{-1}\Gamma^{S,V}S\psi$$

wegen

$$\gamma_5 S = (\det \Lambda) S \gamma_5, \quad (275)$$

was wiederum aus Gln. (261), (262) und (271) folgt.

Wegen  $(-\not{p} + m)(\not{p} + m) = p^2 - m^2 = 0$  zeigt man leicht daß mit  $u_r(m, \mathbf{0}) = (\chi_r, 0)^T$ ,  $v_r(m, \mathbf{0}) = (0, \chi_r)^T$ , und  $\chi_\uparrow = (1, 0)^T$ ,  $\chi_\downarrow = (0, 1)^T$

$$\begin{aligned} \psi_r^+(x) = e^{-ik \cdot x} u_r(k), \quad u_r(k) & = \frac{\not{k} + m}{[2m(m+E)]^{1/2}} u_r(m, \mathbf{0}) = \begin{pmatrix} \left(\frac{E+m}{2m}\right)^{1/2} \chi_r \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \chi_r}{[2m(m+E)]^{1/2}} \end{pmatrix} \\ \psi_r^-(x) = e^{ik \cdot x} v_r(k), \quad v_r(k) & = \frac{-\not{k} + m}{[2m(m+E)]^{1/2}} v_r(m, \mathbf{0}) = \begin{pmatrix} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \chi_r}{[2m(m+E)]^{1/2}} \\ \left(\frac{E+m}{2m}\right)^{1/2} \chi_r \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (276)$$

Lösungen der freien Dirac-Gleichung (227) zum Vierer-Impuls  $k = (E, \mathbf{k})$  sind und den Orthonormalitätsrelationen

$$\bar{u}_r(k)u_s(k) = \delta_{rs}, \quad \bar{u}_r(k)v_s(k) = 0 \quad (277)$$

$$\bar{v}_r(k)v_s(k) = -\delta_{rs}, \quad \bar{v}_r(k)u_s(k) = 0 \quad (278)$$

genügen.

## 2.5 Bahn-Drehimpuls und Spin

Die Transformation Gl. (254) war eine *passive Transformation* desselben Zustands  $Z$  in einem Koordinatensystem  $x$  in ein anderes Koordinatensystem  $x'$ . Indem man in Gl. (254)

$x'$  durch  $x$  ersetzt, erhält man einen neuen Zustand  $Z'$ , der in den Koordinaten  $x$  genauso aussieht wie  $Z$  in den Koordinaten  $x'$ . Dies nennt man *aktive Transformation* von  $Z$  in  $Z'$ . Unter einer infinitesimalen aktiven Transformation ohne Translation,  $a = 0$ , wird

$$\begin{aligned}\psi'(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x) &\simeq \left( \mathbb{1} - \frac{i}{4}\Delta\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu} \right) \psi(x^\rho - \Delta\omega^\rho_\nu x^\nu) \simeq \\ &\simeq \left[ \mathbb{1} + \Delta\omega^{\mu\nu} \left( -\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu} - x_\nu\partial_\mu \right) \right] \psi(x).\end{aligned}\quad (279)$$

Für den Spezialfall von Drehungen um einen Winkel  $\Delta\phi^k$  um die  $k$ -Achse hat man

$$\Delta\omega^{ij} = -\epsilon^{ijk}\Delta\phi^k,$$

so daß z.B.  $\Delta^1_2 = \Delta\phi^3$ . Damit und mit Hilfe von

$$\sigma_{ij} \equiv \frac{i}{2}[\gamma_i, \gamma_j]_- = \sigma^{ij} = \epsilon^{ijk}\Sigma^k \equiv \epsilon^{ijk} \begin{pmatrix} \sigma^k & 0 \\ 0 & \sigma^k \end{pmatrix} \quad (280)$$

wird aus Gl. (279)

$$\begin{aligned}\psi'(x) &\simeq \left[ \mathbb{1} - \epsilon^{ijl}\Delta\phi^l \left( -\frac{i}{4}\epsilon^{ijk}\Sigma^k - x^i\partial_j \right) \right] \psi(x) = \\ &= \left[ \mathbb{1} + i\Delta\phi^k \left( \frac{1}{2}\Sigma^k - i\epsilon^{kij}x^i\partial_j \right) \right] \psi(x) \equiv (1 + i\Delta\phi^k J^k) \psi(x)\end{aligned}\quad (281)$$

mit dem Gesamtdrehimpuls

$$J^k = -i\epsilon^{kij}x^i\partial_j + \frac{1}{2}\Sigma^k, \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\mathbf{\Sigma} \quad (282)$$

als Summe von Bahn-Drehimpuls  $\mathbf{L} = \hbar\mathbf{r} \times \mathbf{p}$  und Spin  $\hbar\mathbf{\Sigma}/2$ . Der Operator für den Gesamtdrehimpuls ist also die Erzeugende für Drehungen und eine Drehung um die Winkel  $\phi^k$  wird beschrieben durch

$$\psi'(x) = e^{i\phi^k J^k} \psi(x). \quad (283)$$

Ferner transformiert sich ein beliebiger Operator  $A$  unter Drehungen gemäß

$$A' = e^{i\phi^k J^k} A e^{-i\phi^k J^k}, \quad (284)$$

oder infinitesimal

$$A' = A + i\Delta\phi^i [J^i, A]. \quad (285)$$

Vergleich mit  $\varphi' = \varphi$  gibt

$$[J^k, \varphi] = 0 \quad (286)$$

für einen Skalar  $\varphi$ . Vergleich mit  $v^{i'} = v^i - \epsilon^{ijk}\Delta\phi^k v^j$  gibt

$$[J^i, v^j] = i\hbar\epsilon^{ijk}v^k \quad (287)$$

für einen Vektor  $v^k$ . Das gilt insbesondere für  $v^j = J^j$ .

## 2.6 Weitere Symmetrien

Im folgenden bezeichnen wir mit  $K_0$  die Operation, welche alle Operatoren und Spinoren die rechts von  $K_0$  stehen komplex konjugiert. Die Dirac Gleichung (232) für ein Teilchen mit Ladung  $e$  in Anwesenheit eines elektromagnetischen Potentials  $A$  lautet ( $c_0 = 1$ )

$$(-i\hbar\boldsymbol{\not{\partial}} + e\boldsymbol{\not{A}} + m)\psi = 0. \quad (288)$$

Wir suchen nun einen Spinor  $\psi_C$ , welcher der analogen Gleichung für ein Teilchen mit der Ladung  $-e$  genügt,

$$(-i\hbar\boldsymbol{\not{\partial}} - e\boldsymbol{\not{A}} + m)\psi_C = 0. \quad (289)$$

Wegen  $A^* = A$  lautet die komplex konjugierte Gl. (288)

$$[(i\hbar\partial_\mu + eA_\mu)(\gamma^\mu)^* + m]\psi^* = 0. \quad (290)$$

Für eine invertierbare Matrix  $C$  folgt daraus

$$C[(i\hbar\partial_\mu + eA_\mu)(\gamma^\mu)^* + m]C^{-1}C\psi^* = 0, \quad (291)$$

was mit

$$\psi_C = C\psi^* = C\gamma^0\bar{\psi}^T \quad (292)$$

auf die Form Gl. (289) führt falls

$$C(\gamma^\mu)^*C^{-1} = -\gamma^\mu \quad (293)$$

gilt. Nun gilt in der Standard-Darstellung  $(\gamma^\mu)^* = \gamma^\mu$  für  $\mu = 0, 1, 3$  und  $(\gamma^2)^* = -\gamma^2$ , weshalb

$$C = i\gamma^2 = C^{-1}, \quad (294)$$

wobei der Faktor  $i$  Konvention ist. Damit wird aus Gl. (292)

$$\psi_C(x) = i\gamma^2\psi^* = i\gamma^2\gamma^0\bar{\psi}^T(x) \quad (295)$$

und die gesamte Operation der *Ladungskonjugation*

$$\mathcal{C} = i\gamma^2K_0. \quad (296)$$

Wir betrachten nun noch die Zeitumkehrtransformation: Wir suchen einen Spinor  $\psi_T$  welcher der zeit-invertierten Dirac-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial\psi_T}{\partial t} = [\boldsymbol{\alpha} \cdot (-ic_0\boldsymbol{\nabla} - e\mathbf{A}_T(t, \mathbf{r})) + \beta mc_0^2 + e\phi_T(t, \mathbf{r})]\psi_T \quad (297)$$

genügt, wobei die zeit-invertierten Potentiale

$$\mathbf{A}_T(t, \mathbf{r}) = -\mathbf{A}(-t, \mathbf{r}), \quad \phi_T(t, \mathbf{r}) = \phi(-t, \mathbf{r}) \quad (298)$$

sind weil das Vektorpotential proportional zu Stromdichten ist welche bei Zeitumkehr das Vorzeichen ändern, während das elektrische Potential unverändert bleibt. Dazu machen wir den Ansatz

$$\psi_T(x) = \psi_T(t, \mathbf{r}) = T\psi^*(-t, \mathbf{r}) = TK_0\psi(-t, \mathbf{r}), \quad (299)$$

mit einer zu bestimmenden Matrix  $T$ . Aus der Dirac-Gleichung (233) folgt durch Substitution  $t \rightarrow -t$ , komplexe Konjugation und Multiplikation mit  $T$  von links

$$i\hbar \frac{\partial \psi_T(t, \mathbf{r})}{\partial t} = T \left[ \boldsymbol{\alpha}^* \cdot (ic_0 \boldsymbol{\nabla} - e\mathbf{A}_T(-t, \mathbf{r})) + \beta^* mc_0^2 + e\phi_T(-t, \mathbf{r}) \right] T^{-1} \psi_T(t, \mathbf{r}). \quad (300)$$

Dies führt auf die gewünschte Gleichung (297) falls

$$T \boldsymbol{\alpha}^* T^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}, \quad T \beta^* T^{-1} = \beta. \quad (301)$$

Da in der Standard-Darstellung  $\alpha^1$ ,  $\alpha^3$  und  $\beta$  reell und  $\alpha^2$  imaginär ist, wird Gl. (301) durch

$$T = -i\alpha^1 \alpha^3 = i\gamma^1 \gamma^3 \quad (302)$$

gelöst, wobei der Faktor  $-i$  Konvention ist. Damit lautet die Zeit-Umkehrtransformation Gl. (299) insgesamt

$$\psi_T(t, \mathbf{r}) = i\gamma^1 \gamma^3 \psi^*(-t, \mathbf{r}) = i\gamma^1 \gamma^3 \gamma^0 \psi^T(-t, \mathbf{r}) = -\gamma^2 \gamma_5 \bar{\psi}^T(-t, \mathbf{r}). \quad (303)$$

Aus der ersten Identität folgt auch

$$\bar{\psi}_T(t, \mathbf{r}) = -i\psi^T(-t, \mathbf{r}) \gamma^3 \gamma^1 \gamma^0.$$

Daraus folgt mit Hilfe von  $(\gamma^\mu)^T = \gamma^2 \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 \gamma^2$ , was wiederum aus Gln. (264), (293) und (294) folgt,

$$j_T^\mu(t, \mathbf{r}) = \bar{\psi}_T(t, \mathbf{r}) \gamma^\mu \psi_T(t, \mathbf{r}) = \bar{\psi}(-t, \mathbf{r}) \gamma_\mu \psi(-t, \mathbf{r}), \quad (304)$$

womit die räumlichen Komponenten das Vorzeichen ändern während die Ladungsdichte invariant ist.

Aus Gln. (295), (263) und (303) mit  $\varphi = 0$  folgt nun für die sogenannte *CPT-Transformation*

$$\psi_{CPT}(x) = -i\gamma_5 \psi(-x). \quad (305)$$

## 2.7 Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld: Exakte Lösungen und Strahlungskorrekturen

Man kann zeigen daß die Energie-Eigenwerte eines Elektrons im Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{Ze_0^2}{r} \quad (306)$$

lauten

$$E_{n,j} = mc_0^2 \left[ 1 + \left( \frac{Z\alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + \left[ (j + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2 \right]^{1/2}} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (307)$$

wobei  $\alpha = e_0^2/(\hbar c_0)$  die Feinstruktur-Konstante,  $j = l \pm \frac{1}{2}$  die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses und

$$n = n_r + j + \frac{1}{2} \quad (308)$$

die Hauptquantenzahl mit  $n_r$  der radialen Quantenzahl sind. Eine Reihenentwicklung von Gl. (308) bis zur Ordnung  $(Z\alpha)^4$  führt auf

$$E_{n,j} = mc_0^2 \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + \mathcal{O}((Z\alpha)^6) \right], \quad (309)$$

was mit den störungstheoretischen Ergebnissen übereinstimmt.

## Literatur

- [1] F. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*, Berlin, Springer, 4. Auflage 2005.
- [2] Walter Greiner, Ludwig Neise, Horst Stöcker, *Quantenmechanik 2: Symmetrien*, Thun und Frankfurt am Main: Harri Deutsch, 2. Auflage 1994. Enthält viele Beispiele und Aufgaben mit Lösungen.
- [3] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik III: Quantenmechanik*, Akademie-Verlag Berlin 1984.
- [4] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik IV: Quantenelektrodynamik*, Akademie-Verlag Berlin 1986.
- [5] Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5, Teil 2: Quantenmechanik: Methoden und Anwendungen*, Springer-Lehrbuch 6. Auflage, Springer 2006.
- [6] Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 7: Vielteilchentheorie*, Springer-Lehrbuch 7. Auflage, Springer 2009.
- [7] J. J. Sakurai, *Modern quantum mechanics*, Addison-Wesley
- [8] A. Messiah, *Quantenmechanik*, Band 2, 3. Auflage, de Gruyter 1990.
- [9] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, *Feynman Lectures on Physics: Volume III: Quantum mechanics*, deutsch-englisch, Addison-Wesley 1971.