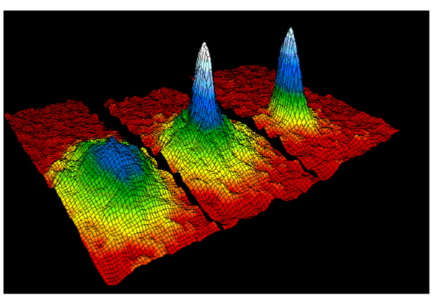
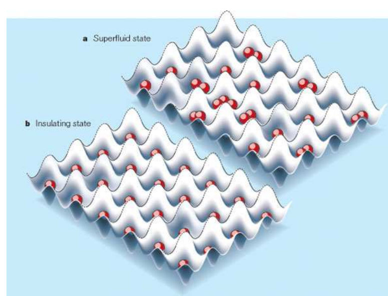
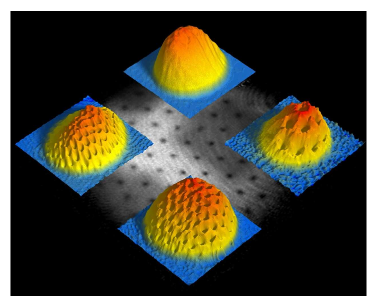
Ultra-kalte Quantengase

Prof. Dr. Michael Fleischhauer

Technische Universität Kaiserslautern



0 Einleitung

Wenn Atome so weit abgekühlt werden bzw. ihre Dichte so weit erhöht wird, dass die Kohärenzlänge ihrer Materiewellen

$$\lambda_{dB} = \frac{2\pi\hbar}{m\sqrt{\langle v^2\rangle_T}} \tag{1}$$

gößer wird als ihr mittlerer Abstand $n^{-1/3}$, kann vom Quantencharakter der Atome nicht mehr abgesehen werden

$$n\lambda_{dB}^3 \geq 1 \quad \Longrightarrow \text{Quantenregime} \tag{2}$$

Durch die Erfindung der Laserkühlung und anderer effizienter Kühlungsverfahren für Atome (erste Ideen: T.W Hänsch & A. Schawlow; Nobelpreis 1997: Claude Cohen-Tanoudji, Steven Chu, William Philipps) ist es Mitte der 90er Jahre erstmals gelungen, ein makroskopisches Quantenphänomen, die Bose-Einstein Kondensation, an ultrakalten neutralen Atomen zu beobachten. Dies ist 2001 mit dem Nobelpreis für Eric A. Cornell, Wolfgang Ketterle und Carl E. Wiemann gewürdigt worden. In dieser Vorlesung werden wir uns mit diesem und anderen Quantenphänomenen in Ensemblen identischer Atome beschäftigen.

<u>Komposit Teilchen:</u>
Solange der mittlere Abstand der Atome groß gegen den Atomradius ist, und Übergänge zwischen verschiedenen internen Zuständen der Atome entweder energetisch oder aufgrund von Auswahlregeln verboten sind, können sie als Kompositteilchen betrachtet werden. Atome im selben internen Zustand werden als ununterscheidbar betrachtet. Der Spin der Kompositteilchen setzt sich aus Kern- und Elektronenspins zusammen.

Bei neutralen Alkaliatomen mit vollständig besetzten Rumpfzuständen ist der Gesamtspin nur durch das Leuchtelektron und den Kern bestimmt. Alkaliatome mit gerader Anzahl von Nukleonen (Protonen und Neutronen) haben halbzahligen Spin und sind daher <u>Fermionen</u>. Alkaliatome mit ungerader Nukleonenzahl sind <u>Bosonen</u>. Für Erdalkaliatome mit zwei Leuchtelektronen gilt das Umgekehrte:

Bosonen:	^{1}H, ^{7}Li, ^{23}Na, ^{89}K, ^{85}Rb, ^{87}Rb, ^{133}Cs, ^{4}He, ^{24}Mg, ^{40}Ca, ^{88}Sr, ^{138}Ba
Fermionen:	^{3}He, ^{6}Li, ^{40}K

1 Zweite Quantisierung des Schrödingerfeldes

1.1 Systeme identischer Teilchen

Heisenbergsche Unschärfe $\Longrightarrow$ "Bahnen" mikroskopischer Teilchen in Wechselwirkungsprozessen nicht mehr verfolgbar.

Identische Quantenteilchen müssen als ununterscheidbar angesehen werden. Erwartungswerte von Observablen dürfen sich daher bei Vertauschen zweiter Teilchen nicht ändern

$$\boxed{\begin{aligned}&\int dx^N \psi^*(x_1, \ldots x_j \ldots x_k \ldots x_N) \hat{B} \psi(x_1 \ldots x_j \ldots x_k \ldots x_N)\\ &\stackrel{!}{=} \int dx^N \psi^*(x_1 \ldots x_k \ldots x_j \ldots x_N) \hat{B} \psi(x_1 \ldots x_k \ldots x_j \ldots x_N)\end{aligned}} \tag{1}$$

wobei $x \equiv (\vec{r}, s)$ Orts- und Spinfreiheitsgrade zusammengefaßt. D.h. es dürfen nur solche Wellenfunktionen zugelassen werden, die (1)* für alle Observablen erfüllen. Bezeichne $\hat{P}_{jK}$ den Permutationsoperator zwischen Teilchen j und k

$$\hat{P}_{jk} \psi(x_1 \ldots x_j \ldots x_k \ldots x_N) = \psi(x_1 \ldots x_k \ldots x_j \ldots x_N) \tag{2}$$

so gilt:

$$\hat{P}^{\,2}_{jn} = 1 \qquad\qquad \hat{P}^{\,-1}_{jn} = \hat{P}_{jn} \tag{3}$$

Gl. (1) impliziert

$$\langle\psi|\, \hat{B} \,|\psi\rangle \;=\; \langle\psi|\, \hat{P}^{\,+}_{jk} \hat{B} \hat{P}_{jk} \,|\psi\rangle \qquad \forall jk \tag{4}$$

$$\text{mit } \langle\phi|\, \hat{B} \,|\psi\rangle \;=\; \frac{1}{4}\Big\{ \langle\phi+\psi|\, \hat{B} \,|\phi+\psi\rangle - \langle\phi-\psi|\, \hat{B} \,|\phi-\psi\rangle - i\,\langle\phi+i\psi|\, \hat{B} \,|\phi+i\psi\rangle + i\,\langle\phi-i\psi|\, \hat{B} \,|\phi-i\psi\rangle \Big\}$$

folgt auch

$$\langle\phi|\, \hat{B} \,|\psi\rangle = \langle\phi|\, \hat{P}^{+}_{jk} \hat{B} \hat{P}_{jk} \,|\psi\rangle \tag{5}$$

d.h.

$$\hat{B} = \hat{P}^{+}_{jk}\, \hat{B}\, \hat{P}_{jk} \tag{6}$$

im Hilbertraum der <u>zugelassenen</u> Wellenfunktionen. Für $\hat{B} = \mathbf{1}$ hat man

$$\boxed{\hat{P}^{-1}_{jk} = \hat{P}_{jk} = \hat{P}^{+}_{jk}} \tag{7}$$

mit den Eigenwerten

$$\lambda = \pm 1 \tag{8}$$

*Gleichungsnummerierung in jedem Kapitel neu

Aus (6) folgt weiterhin

$$\text{(9)} \qquad \left[\hat{B}, \hat{P}_{jk}\right] = 0 \qquad \text{insbesondere} \qquad \boxed{\left[\hat{H}, \hat{P}_{jk}\right] = 0}$$

D.h. jede Lösung der stationären Schrödingergleichung im Raum der zugelassenen Wellenfunktionen ist simultane Eigenfunktion von $\hat{H}$ und allen $\hat{P}_{jk}$. Dabei sind die Eigenwerte aller $\hat{P}_{jk}$ gleich, denn

$$\text{(10)} \qquad \hat{P}_{jk} = \hat{P}_{1j}\,\hat{P}_{2k}\,\hat{P}_{12}\,\hat{P}_{2k}\,\hat{P}_{1j}$$

d.h.

$$\text{(11)} \qquad \hat{P}_{jk}\,|\psi\rangle = (\lambda_{1j})^2(\lambda_{2k})^2\lambda_{12}\,|\psi\rangle$$

Definition:
Eine Vielteilchenwellenfunktion $\psi(x_1, \ldots x_N)$ (Diraczustand $|\psi\rangle$) heißt:

$$\begin{aligned} \underline{\text{symmetrisch}} \quad &\Longleftrightarrow \quad \hat{P}_{jk}\psi_S = \psi_S \qquad \forall jk \\ \underline{\text{antisymmetrisch}} \quad &\Longleftrightarrow \quad \hat{P}_{jk}\psi_A = -\psi_A \quad \forall jk \end{aligned}$$

Die Menge aller möglichen Permutationsoperatoren

$$\text{(12)} \qquad \hat{P} = \prod \hat{P}_{jk}$$

bilden eine (nichtabelsche) Gruppe, die Permutationsgruppe S_N mit der Hintereinanderausführung als Gruppenoperation

Für $\hat{P} \in S_N$ gilt

$$\text{(13)} \qquad \boxed{\hat{P}\psi_S = \psi_S} \qquad \boxed{\hat{P}\psi_A = \operatorname{sgn}(P)\psi_A}$$

wobei sgn $(P) = +1$ falls P aus gerader Anzahl elementarer Permutationen P_{jk} und sgn (P) = -1 gilt, falls P aus einer ungeraden Anzahl zusammengesetzt ist.

Der Raum der symmetrischen Wellenfunktionen ist orthogonal zum Raum der antisymmetrischen Wellenfunktionen, da

$$\left\langle \psi_A | \psi_S \right\rangle = \langle \psi_A|\,\hat{P}_{jk}\,|\psi_S\rangle = \langle \psi_A|\,\hat{P}^{+}_{jk}\,|\psi_S\rangle = -\left\langle \psi_A | \psi_S \right\rangle$$

Symmetriepostulat Der Hilbertraum der Zustände identischer Teilchen enthält entweder nur symmetrische (Bosonen) oder nur antisymmetrische (Fermionen) Funktionen

Spin-Statistik Theorem (W. Pauli, Phys. Rev. 58, 716 (1940))

Bosonen haben ganzzahligen Spin, Fermionen halbzahligen

Bei der Definition von ψ_S und ψ_A haben wir angenommen, dass gemeinsame Eigenfunktionen zu allen $\hat{P}_{jk}$ existieren. Da die $\hat{P}_{jk}$ nicht kommutieren, ist dies nicht klar. Wir werden jetzt durch explizite Konstruktion die Existenz dieser beweisen. Seien

$$\text{(14)} \qquad \boxed{\hat{S} = \sum_{P \in S_N} \hat{P}} \qquad \boxed{\hat{A} = \sum_{P \in S_N} \operatorname{sgn}(P)\hat{P}}$$

der Symmetrisierungs- bzw. Antisymmetrisierungsoperator, dann gilt für jede normierte Funktion $f(x_1,\ldots,x_N)$ bis auf Normierung

$$\boxed{\hat S\, f(x_1,\ldots,x_N) = f_S(x_1,\ldots,x_N)} \tag{15}$$

$$\boxed{\hat A\, f(x_1,\ldots,x_N) = f_A(x_1,\ldots,x_N)} \tag{16}$$

denn:

$$\begin{aligned}
\hat P_{jk}\,\hat S &= \sum_{P\in S_N} \hat P_{jk}\,\hat P = \sum_{\hat P'\in S_N} \hat P\,' = \hat S \\
\hat P_{jk}\,\hat A &= \sum_{P\in S_N} \mathrm{sgn}\,(\hat P)\hat P_{jk}\,\hat P = \sum_{P\in S_N} (-\mathrm{sgn}\,(\hat P_{jk}\hat P))\hat P_{jk}\,\hat P \\
&= -\sum_{\hat P'\in S_N} \mathrm{sgn}\,(\hat P\,')\hat P\,' = -\hat A \qquad \square
\end{aligned}$$

Beispiel: System nicht wechselwirkender Teilchen

$$\hat H = \sum_{i=1}^{N} \hat h_i \qquad \text{mit} \qquad \hat H_i \equiv \hat h \tag{17}$$

Eigenfunktionen von $\hat h$ seien bekannt:

$$\hat h\phi_\nu(x) = \epsilon_\nu \phi_\nu(x) \tag{18}$$

$\Rightarrow$

$$f_{\nu_1,\ldots,\nu_N}(x_1,\ldots,x_N) = \phi_{\nu_1}(x_1)\ldots\phi_{\nu_N}(x_N) \tag{19}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\phi^{(S)}_{\nu_1,\ldots,\nu_N}(x_1,\ldots,x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!\prod\limits_k n_k!}} \sum_{P\in S_N} P\phi_{\nu_1}(x_1)\ldots\phi_{\nu_N}(x_N)} \tag{20}$$

$$\boxed{\begin{aligned}
\phi^{(AS)}_{\nu_1,\ldots,\nu_N}(x_1,\ldots,x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P\in S_N} \mathrm{sgn}(P)\, P\phi_{\nu_1}(x_1)\ldots\phi_{\nu_N}(x_N) \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{\nu_1}(x_1) & \phi_{\nu_1}(x_2) & \cdots & \phi_{\nu_1}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{\nu_N}(x_1) & \phi_{\nu_N}(x_2) & \cdots & \phi_{\nu_N}(x_N) \end{vmatrix}
\end{aligned}} \tag{21}$$

n_k ist die Anzahl der Teilchen im selben Zustand ν_k

Aus (21) folgt unmittelbar das Pauli-Prinzip

$$\phi^{(A)} \equiv 0 \begin{cases} \text{falls } \nu_i = \nu_j & \text{für ein Paar } i \neq j \\ \text{falls } x_i = x_j & \text{für ein Paar } i \neq j \end{cases} \tag{22}$$

Falls $\{\phi_\nu(x)\}$ einen vollständigen Satz von Wellenfunktionen im 1-Teilchen Hilbertraum bilden, sind die $\{\phi^{(S)}\}$ und $\{\phi^{(A)}\}$ vollständig im Raum der zugelassenen Vielteilchenwellenfunktionen.

1.2 Zweite Quantisierung und Vielteilchenwellenfunktionen

Die Quantentheorie identischer Teilchen läßt sich formal sehr einfach in der Sprache der zweiten Quantisierung formulieren. Die zweite Quantisierung führt dabei zu keiner neuen Physik, sondern ist im Wesentlichen nur eine elegante Form der Buchhaltung. Im Rahmen der Vielteilchentheorie gibt es keine Teilchenerzeugung bzw. -vernichtung. Die Teilchenzahl bleibt stets erhalten (Superauswahlregel).

(A) Fock-Raum und Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$\mathcal{H}(\mathcal{N})$ sei Hilbertraum von N identischen Teilchen. Dann seien $\hat{c}_k, \hat{c}_k^+$ bzw. $\hat{b}_k, \hat{b}_k^+$ lineare Abbildungen

(23)
$$\begin{array}{lll} \hat{b}_k, \hat{c}_k : & \mathcal{H}(N) \longrightarrow \mathcal{H}(N-1) & \text{“Vernichter”} \\ b_k^+ c_k^+ : & \mathcal{H}(N) \longrightarrow \mathcal{H}(N+1) & \text{“Erzeuger”} \end{array}$$

mit den Eigenschaften:

<u>Fermionen</u>

(24)
$$\begin{array}{ll} \hat{c}_k \phi^{(A)}_{\nu_1 \dots \nu_N}(x_1, \dots, x_N) = 0 & k \notin \{\nu_1, \dots, \nu_N\} \\ \hat{c}_k \phi^{(A)}_{\nu_1 \dots \nu_N} = (-1)^{j-1} \phi^{(A)}_{\nu_1 \dots \nu_{j-1} \nu_{j+1} \dots \nu_N} & k = \nu_j \end{array}$$

wobei die $\{\phi^{(A)}_{\nu_1 \dots \nu_N}\}$ den vollständigen Satz der Slaterdeterminanten aus nicht wechselwirkenden N Fermionen bedeutet.

<u>Bosonen</u>

(25)
$$\begin{array}{ll} \hat{b}_k \, \phi^{(S)}_{\nu_1 \dots \nu_N} = 0 & k \notin \{\nu_1, \dots, \nu_N\} \\ \hat{b}_k \, \phi^{(S)}_{\nu_1 \dots \nu_N} = \sqrt{n_k} \, \phi^{(S)}_{\nu_1 \dots \nu_{j-1} \nu_{j+1} \dots \nu_N} & k = \nu_j \end{array}$$

wobei n_k die Anzahl der Teilchen im selben Zustand $\nu_i = k$ bedeutet.

<u>Fock-Raum</u>

(26)
$$\mathcal{F} = \mathcal{H}(0) \oplus \mathcal{H}(1) \oplus \mathcal{H}(2) \oplus \dots \oplus \mathcal{H}(N) \oplus \cdots$$

Bisher Ortsdarstellung des Vielteilchenzustandes

(27)
$$\phi_{\nu_1 \dots \nu_N}(x_1, \dots, \nu_N) = \langle x_1, \dots, x_N | \phi \rangle$$

Oft jedoch sog. Besetzungzahldarstellung vorteilhaft

$$\underbrace{|n_1, n_2, \dots n_N\rangle}_{\substack{\uparrow \\ \text{Anzahl der Teilchen} \\ \text{im Zustand } \nu_1}} \qquad \begin{cases} n_i \in \{0, 1\} & \text{Fermionen} \\ n_i \in \mathbb{N} & \text{Bosonen} \end{cases}$$

In dieser Darstellung läßt sich die Wirkung der Erzeugung- und Vernichtungsoperatoren wie folgt schreiben

(28)
$$\boxed{\hat{c}_k|n_1,\dots n_N\rangle \underset{\text{Fermi}}{=} (-1)^{\sum\limits_{j<k} n_j} n_k|n_1,\dots n_{k-1},0_k,n_{k+1}\dots n_N\rangle}$$

(29)
$$\boxed{\hat{b}_k|n_1,\dots n_N\rangle \underset{\text{Bose}}{=} \sqrt{n_k}\,|n_1,\dots n_{k-1},(n_k-1),n_{k+1}\dots n_N\rangle}$$

In (28) kann der Vorfaktor n_k auch durch $\sqrt{n_k}$ ersetzt werden. Die Wirkung der Erzeugungsoperatoren $\hat{b}_k^+$ und $\hat{c}_k^+$ ergibt sich aus (28), (29) durch adjungieren

(30)
$$\boxed{\hat{c}_k^+|n_1,\dots n_N\rangle \underset{\text{Fermi}}{=} (-1)^{\sum\limits_{j<k} n_j}(1-n_k)|n_1\dots 1_k\dots n_N\rangle}$$

(31)
$$\boxed{\hat{b}_k^+|n_1,\dots n_N\rangle \underset{\text{Bose}}{=} \sqrt{n_k+1}\,|n_1,\dots(n_k+1)\dots n_N\rangle}$$

Aus (30) und (31) sieht man, dass alle N-Teilchenzustände durch Anwendung von Erzeugungsoperatoren aus dem Vakuum (keine Teilchen) generiert werden können

(32)
$$\begin{aligned}|n_1\dots n_N\rangle &\underset{\text{Fermi}}{=} \hat{c}_1^{+n_1}\dots\hat{c}_N^{+n_N}|0\rangle \\ &= \prod_j(\hat{c}_j^+)^{n_j}|0\rangle \qquad n_j\in\{0,1\}\end{aligned}$$

(33)
$$|n_1\dots n_N\rangle = \prod_j \frac{(\hat{b}_j^+)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}}\,|0\rangle \qquad n_j\in\mathbb{N}$$

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren genügen den folgenden Vertauschungsregeln:

(34)
$$\boxed{\left[\hat{b}_k,\hat{b}_\ell\right]=0 \qquad \left[\hat{b}_k,\hat{b}_\ell^+\right]=\delta_{k\ell}}$$

(35)
$$\boxed{\{\hat{c}_k,\hat{c}_\ell\}=0 \qquad \left\{\hat{c}_k,\hat{b}_\ell^+\right\}=\delta_{k\ell}}$$

<u>Beweis:</u>

(i) Bosonen:

$$\begin{array}{lcl}
\bullet\ \hat{b}_k\hat{b}_\ell = \hat{b}_\ell\hat{b}_k & & \text{trivial} \\
\bullet\ \hat{b}_k\hat{b}_k^+|\dots n_k\dots\rangle & = & \hat{b}_k\sqrt{n_k+1}|\dots(n_k+1)\dots\rangle \\
& = & (n_k+1)\,|\dots n_k\dots\rangle \\
\hat{b}_k^+\hat{b}_k\,|\dots n_k\dots\rangle & = & \hat{b}_k^+\sqrt{n_k}|\dots(n_k-1)\dots\rangle \\
& = & n_k|\dots n_k\dots\rangle
\end{array}$$

$$\Rightarrow (b_k b_k^+ - b_k^+ b_k)|\dots n_k\dots\rangle = |\dots n_k\dots\rangle \qquad \Box$$

(ii) Fermionen: $\theta_\ell \equiv (-1)^{\sum\limits_{j<\ell} n_j}$

$$\begin{array}{lcl}
\bullet\ \hat{c}_k\hat{c}_\ell|\dots n_k\dots n_\ell\dots\rangle & = & \theta_\ell\hat{c}_k n_\ell|\dots n_k\dots 0_\ell\dots\rangle \\
& = & \theta_\ell\theta_k\, n_\ell n_k|\dots 0_k\dots 0_\ell\dots\rangle \\
\hat{c}_\ell\hat{c}_k|\dots n_k\dots n_\ell\dots\rangle & = & \theta_k\hat{c}_k n_\ell|\dots 0_k\dots n_\ell\dots\rangle \\
& = & -\theta_\ell\theta_k n_\ell n_k|\dots 0_k\dots 0_\ell\dots\rangle
\end{array}$$

$$\Rightarrow (\hat{c}_\ell\hat{c}_k + \hat{c}_k\hat{c}_\ell)|\dots n_k\dots n_\ell\dots\rangle = 0 \qquad \Box$$

$$\begin{array}{lcl}
\bullet\ \hat{c}_k\hat{c}_k^+ + \hat{c}_k\hat{c}_\ell)|\dots n_k\dots\rangle & = & \hat{c}_k\theta_k(1-n_k)|\dots 1_k\dots\rangle \\
& = & \theta_k^2(1-n_k)|\dots 0_k\dots\rangle \\
\hat{c}_k^+\hat{c}_k|\dots n_k\dots\rangle & = & \hat{c}_k^+\theta_k n_k|\dots 0_k\dots\rangle \\
& = & \hat{c}_k^+\theta_k n_k|\dots 0_k\dots\rangle \\
(\hat{c}_k\hat{c}_k^+ + \hat{c}+_k\hat{c}_k)|\dots n_k\dots\rangle & = & \begin{cases}|\dots 0_k\dots\rangle & n_k=0\\ |\dots 1_k\dots\rangle & n_k=1\end{cases} \\
& = & |\dots n_k\dots\rangle \qquad \Box
\end{array}$$

<u>Darstellung von Operatoren des N-Teilchensystems in zweiter Quantisierung</u>

Observable in einem System von N ununterscheidbaren Teilchen müssen Operatoren entsprechen, die auf alle Teilchen gleichsam wirken. Für <u>Einteilchen-Observable</u> gilt

(36) $$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\hat{h}_i \qquad \hat{h}_i \equiv \hat{h}$$

D.h. für Erwartungswerte erhölt man mit der Vielteilchenwellenfunktion in Ortsdarstellung

$$\begin{array}{rcl}
\langle\hat{H}\rangle & = & \int dx^N \psi^*(x_1\dots x_N)\hat{H}_D\,\psi(x_1\dots x_n) \\
& = & \int dx^N \sum_{j=1}^{N}\psi^*(x_1\dots x_N)\hat{h}_D[x_i]\psi(x_1\dots x_N)
\end{array} \qquad (37)$$

Für <u>2-Teilchen-Observable</u> gilt entsprechend

(38) $$\hat{V} = \sum_{i\neq j=1}^{N}\hat{v}_{ij} \qquad \hat{v}_{ij} \equiv \hat{v}$$

$$\langle \hat{V} \rangle = \int dx^N \sum_{i \neq j = 1}^{N} \Psi^*(x_k \dots x_N) \hat{v}_D[x_i, x_j] \psi(x_1 \dots x_N) \tag{39}$$

usw. Hierbei ist die Abhängigkeit "$[x_i]$" bzw. "$[x_i, x_j]$" symbolisch gemeint und kann auch $\frac{\partial}{\partial x_i}$ enthalten.

Den Observablen im Hilbertraum $\mathcal{H}(\mathcal{N})$ von N identischen Tilchen lassen sich Operatoren im Fockraum $\mathcal{F}$ zuordnen. Da die Observablen den Superauswahlregeln genügen müssen, d.h. mit dem Teilchenzahloperator kommutieren müssen, ist die Wirkung der Fockraumoperatoren auf Zustände mit N Teilchen identisch zu der Wirkung der Hilbertraumoperatoren. Wir werden später sehen, dass es für bestimmte Rechnungen oft nützlich ist, die Superauswahlregeln ein wenig zu verletzen und in Approximationen eine Verletzung der Erhaltung der Teilchenzahl zuzulassen.

$$\boxed{\hat{H}_N = \sum_{j=1}^{N} \hat{h}_j \leftrightarrow \hat{H} = \sum_{k,\ell} \langle k | \hat{h} | \ell \rangle \hat{c}_k^+ \hat{c}_\ell} \tag{40}$$

mit orthogonalen Einteilchenwellenfunktionen $\phi_\ell(x)$ und

$$\langle k | \hat{h} | \ell \rangle = \int dx \phi_k^+(x) \hat{h}_D(x) \phi_\ell(x) \tag{40a}$$

sowie

$$\boxed{\hat{V}_N = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j = 1}^{N} \hat{v}_{ij} \leftrightarrow \hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{k\ell mn} \langle k\ell | \hat{v} | nm \rangle \hat{c}_k^+ \hat{c}_\ell^+ \hat{c}_m \hat{c}_n} \tag{41}$$

mit

$$\langle k\ell | \hat{v} | mn \rangle = \int dx \int dx' \phi_k^*(x) \phi_\ell^*(x') \hat{v}_D(x, x') \phi_m(x) \phi_k(x') \tag{41a}$$

Analoge Ausdrücke findet man für Bosonen mit $\hat{c} \to \hat{b}$

(B) Feldoperatoren

In den Gleichungen (40) und (41) tauchen stets Größen der Art ($\hat{c} \to$ Fermionen, $\hat{b} \to$ Bosonen)

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\Psi}^+(x) &\equiv \sum_j \phi_j^*(x) \hat{c}_j^+ \\ \hat{\Psi}(x) &\equiv \sum_j \phi_j(x) \hat{c}_j \end{aligned}} \quad \begin{aligned} &\text{bzw. mit } \hat{b}_j^+ \\ &\text{bzw. mit } \hat{b}_j \end{aligned} \tag{42}$$

auf, wobei die $\{\phi_j(x)\}$ einen vollständigen (hier diskreter) und orthogonalen Satz von Einteilchenwellenfunktionen darstellen. Diese Größen wollen wir Schrödinger-Feldoperatoren nennen. Die Vollständigkeit der $\phi_j(x)$

$$\sum_j \phi_j^*(x) \, \phi_j(x') = \delta(x - x') \tag{43}$$

impliziert die folgenden Vertauschungsregeln:

(i) Bosonen:

$$\boxed{\left[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')\right] = 0} \tag{44}$$

$$\left[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x')\right] = \sum_{ij} \phi_i(x)\ \phi_j^*(x') \big[\underbrace{b_i, b_i^+}_{\delta_{ij}}\big] = \delta(x-x')$$

$$\boxed{\left[\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x')\right] = \delta(x-x')} \tag{45}$$

Analog findet man für

(ii) Fermionen:

$$\boxed{\left\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')\right\} = 0} \tag{46}$$

$$\boxed{\left\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x')\right\} = \delta(x-x')} \tag{47}$$

Mit Hilfe der Feldoperatoren lassen sich die Ein- bzw. Zweiteilchenoperatoren wie folgt schreiben

$$\boxed{\hat{H} \int dx \hat{\Psi}^+(x)\, \hat{h}_D(x)\, \hat{\Psi}(x)} \tag{48}$$

$$\boxed{\hat{V} = \tfrac{1}{2} \int dx \int dx'\ \hat{\Psi}^+(x)\ \hat{\Psi}^+(x')\ \ \hat{v}_D(x,x')\ \hat{\Psi}(x)\ \hat{\Psi}(x')} \tag{49}$$

Bem:

(i) Wir haben hier nur diskrete Spektren betrachtet. Das ist für unsere Zwecke ausreichend. In einer echten Quantenfeldtheorie treten natürlich auch kontinuierliche Spektren auf, deren Behandlung etwas mehr Sorgfalt erfordert.

(ii) Die zweite Quantisierung wurde hier konstruktiv am Beispiel nichtrelativistischer Teilchen eingeführt. Ein alternativer und allgemeinerer Zugang geht über den Lagrange-Hamilton Formalismus für Felder.

(C) Zusammenhang zwischen Vielteilchenwellenfunktionen und Feldoperatoren

Jede erlaubte N-Teilchenwellenfunktion läßt sich nach symmetrischen bzw. antisymmetrischen Basisfunktionen entwickeln

$$\begin{aligned} \phi(x_1, \ldots, x_N) &= \sum_{\nu_1,\ldots,\nu_N} \xi_{\nu_1\ldots\nu_N}\ \phi^{(A/S)}_{\nu_1\ldots\nu_N}(x_1 \ldots x_N) \\ &= \left\langle x_1 \ldots x_N \middle| \phi \right\rangle_N \end{aligned} \tag{50}$$

bzw.

$$\begin{aligned} |\phi\rangle_N &= \underbrace{\int dx_1 \ldots \int dx_N\, |x_1 \ldots x_N\rangle \left\langle x_1 \ldots x_N \right|}_{\mathbf{\hat{1}}_N} \phi\rangle_N \\ &= \int dx_1 \ldots \int dx_N\ \phi(x_1 \ldots x_N)\, |x_1 \ldots x_N\rangle \end{aligned} \tag{51}$$

Behauptung:

$$|x_1 \dots x_N\rangle = \hat{\psi}^+(x_1)\dots\hat{\psi}^+(x_N)\,|0\rangle \tag{52}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
|x\rangle &\overset{?}{=} \hat{\psi}^+(x)\,|0\rangle \\
\langle y|\,\hat{\psi}^+(x)\,|0\rangle &= \langle y|\sum_\nu \phi_\nu^*(x)\hat{c}_\nu^+\,|0\rangle = \langle y|\sum_\nu \phi_\nu^*(x)\,|1_\nu\rangle \\
&= \sum_\nu \phi\nu(x)\big\langle y|1_\nu\big\rangle = \sum_\nu \phi_\nu^*(x)\,\phi_\nu(y) = \delta(x-y) \qquad \square
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{|\phi\rangle_N = \textstyle\int dx_1 \dots \int dx_N\ \phi(x_1\dots x_N)\hat{\psi}^+(x_1)\dots\hat{\psi}^+(x_N)\,|0\rangle} \tag{53}$$

Damit sehen wir z.B.

$$\begin{aligned}
{}_N\langle\phi|\,\hat{\nu}\,|\phi\rangle_N &= \int dx_1 \dots \int dx_N \int dy_1 \dots \int dy_N\, \phi^*(x_1\dots x_N)\phi(y_1,\dots,y_N) \\
&\cdot\ \langle 0|\,\hat{\Psi}(x_1)\dots\hat{\Psi}(x_N)\,\hat{V}\,\hat{\Psi}^+(y_1)\dots\hat{\Psi}^+(y_N)\,|0\rangle \\
&= \int dx_1 \dots \int dx_n \int dy_1 \dots \int dy_N\, \frac{1}{2}\int dx \int dx'\,\phi^*(x_1\dots x_n)\phi(y_1\dots y_N) \\
&\quad\ \langle 0|\,\hat{\Psi}(x_1)\dots\hat{\Psi}(x_N)\hat{\Psi}^+(x)\hat{\Psi}^+(x')\,V_D(x,x')\,\hat{\Psi}(x')\hat{\Psi}(x)\hat{\Psi}^+(y_1)\dots\hat{\Psi}^+(y_N)\,|0\rangle
\end{aligned}$$

Durchtauschen aller Ψ^+ nach links bzw. $\hat{\Psi}(x')$ nach rechts liefert unter Ausnutzung der Vertauschungsregeln (45) bzw. (47)

$${}_N\langle\phi|\,\hat{\nu}\,|\phi\rangle_N = \int dx^N \sum_{i\neq j=1}^{n} \phi^*(x_1,\dots,x_N)V_D(x_i,x_j)\phi(x_1\dots x_N)$$