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

- Teilchendichte-Operator: $\hat{n}(\vec{x}) = \sum_{\alpha} \delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}}_{\alpha})$
  - allgemeine Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_{\alpha} \hat{t}_{\alpha} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle\, a_i^{\dagger} a_j$

$$\Rightarrow \quad \hat{n}(\vec{x}) = \sum_{ij} \langle i|\delta^3(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{„c-Zahl"}}}{\vec{x}} - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Operator}}}{\hat{\vec{x}}})|j\rangle\, a_i^{\dagger} a_j$$

- Teilchendichte-Operator: $\hat{n}(\vec{x}) = \sum_\alpha \delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}}_\alpha)$
  - allgemeine Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$

$$\Rightarrow \quad \hat{n}(\vec{x}) = \sum_{ij} \langle i|\delta^3(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{„c-Zahl"}}}{\vec{x}} - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Operator}}}{\hat{\vec{x}}})|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$$

$$= \sum_{ij} \int d^3x' \int d^3x'' \langle i|\vec{x}''\rangle \underbrace{\langle \vec{x}''|\delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}})|\vec{x}'\rangle}_{\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')\,\delta^3(\vec{x}''-\vec{x}')} \langle \vec{x}'|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$$

- Teilchendichte-Operator: $\hat{n}(\vec{x}) = \sum_\alpha \delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}}_\alpha)$
  - allgemeine Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$

$$\Rightarrow \quad \hat{n}(\vec{x}) = \sum_{ij} \langle i|\delta^3(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{„c-Zahl"}}}{\vec{x}} - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Operator}}}{\hat{\vec{x}}})|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$$

$$= \sum_{ij} \int d^3x' \int d^3x'' \langle i|\vec{x}''\rangle \underbrace{\langle \vec{x}''|\delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}})|\vec{x}'\rangle}_{\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')\,\delta^3(\vec{x}''-\vec{x}')} \langle \vec{x}'|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$$

$$= \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{x})\,\varphi_j(\vec{x})\, a_i^\dagger a_j$$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Teilchendichte-Operator: $\hat{n}(\vec{x}) = \sum_\alpha \delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}}_\alpha)$
  - allgemeine Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$

$$\Rightarrow \quad \hat{n}(\vec{x}) = \sum_{ij} \langle i|\delta^3(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{„c-Zahl"}}}{\vec{x}} - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Operator}}}{\hat{\vec{x}}})|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$$

$$= \sum_{ij} \int d^3x' \int d^3x'' \langle i|\vec{x}''\rangle \underbrace{\langle \vec{x}''|\delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}})|\vec{x}'\rangle}_{\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')\,\delta^3(\vec{x}''-\vec{x}')} \langle \vec{x}'|j\rangle\, a_i^\dagger a_j$$

$$= \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{x})\, \varphi_j(\vec{x})\, a_i^\dagger a_j \quad = \quad \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$$

- Teilchendichte-Operator: $\hat{n}(\vec{x}) = \sum_\alpha \delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}}_\alpha)$
  - allgemeine Einteilchen-Operatoren: $\hat{T} = \sum_\alpha \hat{t}_\alpha = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle \, a_i^\dagger a_j$

$$\Rightarrow \quad \hat{n}(\vec{x}) = \sum_{ij} \langle i|\delta^3(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{„c-Zahl"}}}{\vec{x}} - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Operator}}}{\hat{\vec{x}}})|j\rangle \, a_i^\dagger a_j$$

$$= \sum_{ij} \int d^3x' \int d^3x'' \langle i|\vec{x}''\rangle \underbrace{\langle \vec{x}''|\delta^3(\vec{x} - \hat{\vec{x}})|\vec{x}'\rangle}_{\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')\,\delta^3(\vec{x}''-\vec{x}')} \langle \vec{x}'|j\rangle \, a_i^\dagger a_j$$

$$= \sum_{ij} \varphi_i^*(\vec{x})\,\varphi_j(\vec{x})\, a_i^\dagger a_j \quad = \quad \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$$

$\Rightarrow$ Gesamtteilchenzahl-Operator: $\hat{N} = \int d^3x \, \hat{n}(\vec{x}) = \int d^3x \, \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$

Zweite Quantisierung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\hat{n}(\vec{x}) = \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$, $\quad \hat{N} = \int d^3x\, \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$:

  formale Ähnlichkeit mit der Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. der Gesamtwahrscheinlichkeit der Schrödinger-Theorie

- Schrödinger: $\psi(\vec{x})$ = Wellenfunktion

  $\rightarrow$ $n(\vec{x})$ = Funktion (klassisches Feld), N = Zahl

- hier: $\psi(\vec{x})$ = Operator $\rightarrow$ $\hat{n}(\vec{x})$, $\hat{N}$ = Operatoren

Diese Korrespondenz nennt man „zweite Quantisierung".

Zweite Quantisierung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $\hat{n}(\vec{x}) = \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x}), \quad \hat{N} = \int d^3x\, \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$:

  formale Ähnlichkeit mit der Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. der Gesamtwahrscheinlichkeit der Schrödinger-Theorie

- Schrödinger: $\psi(\vec{x})$ = Wellenfunktion

  $\rightarrow$ $n(\vec{x})$ = Funktion (klassisches Feld), N = Zahl

- hier: $\psi(\vec{x})$ = Operator $\rightarrow$ $\hat{n}(\vec{x})$, $\hat{N}$ = Operatoren

Diese Korrespondenz nennt man „zweite Quantisierung".

- Einteilchen-Operatoren:
  - $\hat{T} = \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 \right) \psi(\vec{x})$
  - $\hat{U} = \int d^3x\, \psi^\dagger(\vec{x})\, U(\vec{x})\, \psi(\vec{x})$

  sehen aus wie Erwartungswerte, sind aber Operatoren

Feldgleichungen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Heisenberg-Bild: zeitabhängige Feldoperatoren $\psi(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

Feldgleichungen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Heisenberg-Bild: zeitabhängige Feldoperatoren $\psi(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$
- Kommutator-Relationen zu gleichen Zeiten:

$$\left[\psi(\vec{x}, t), \psi(\vec{x}', t)\right]_\pm = \left[\psi^\dagger(\vec{x}, t), \psi^\dagger(\vec{x}', t)\right]_\pm = 0, \quad \left[\psi(\vec{x}, t), \psi^\dagger(\vec{x}', t)\right]_\pm = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

Feldgleichungen

- Heisenberg-Bild: zeitabhängige Feldoperatoren $\psi(\vec{x},t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$
- Kommutator-Relationen zu gleichen Zeiten:

$$\left[\psi(\vec{x},t),\psi(\vec{x}',t)\right]_{\pm} = \left[\psi^{\dagger}(\vec{x},t),\psi^{\dagger}(\vec{x}',t)\right]_{\pm} = 0, \quad \left[\psi(\vec{x},t),\psi^{\dagger}(\vec{x}',t)\right]_{\pm} = \delta^3(\vec{x}-\vec{x}')$$

- Heisenberg-Gleichung: $\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\psi(\vec{x},t), H\right]$

Feldgleichungen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Heisenberg-Bild: zeitabhängige Feldoperatoren $\psi(\vec{x},t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$
- Kommutator-Relationen zu gleichen Zeiten:

$$\left[\psi(\vec{x},t),\psi(\vec{x}',t)\right]_\pm = \left[\psi^\dagger(\vec{x},t),\psi^\dagger(\vec{x}',t)\right]_\pm = 0, \quad \left[\psi(\vec{x},t),\psi^\dagger(\vec{x}',t)\right]_\pm = \delta^3(\vec{x}-\vec{x}')$$

- Heisenberg-Gleichung: $\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\psi(\vec{x},t),H\right]$
- explizite Auswertung für

$$H = \int d^3x\,\psi^\dagger(\vec{x},t)\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{x})\Big)\psi(\vec{x},t)$$
$$+\frac{1}{2}\int d^3x_1 d^3x_2\,\psi^\dagger(\vec{x}_1,t)\,\psi^\dagger(\vec{x}_2,t)\,V(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\,\psi(\vec{x}_1,t)\,\psi(\vec{x}_2,t)$$

Feldgleichungen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Heisenberg-Bild: zeitabhängige Feldoperatoren $\psi(\vec{x},t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$
- Kommutator-Relationen zu gleichen Zeiten:

$$\left[\psi(\vec{x},t),\psi(\vec{x}',t)\right]_\pm = \left[\psi^\dagger(\vec{x},t),\psi^\dagger(\vec{x}',t)\right]_\pm = 0, \quad \left[\psi(\vec{x},t),\psi^\dagger(\vec{x}',t)\right]_\pm = \delta^3(\vec{x}-\vec{x}')$$

- Heisenberg-Gleichung: $\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\psi(\vec{x},t), H\right]$
- explizite Auswertung für

$$H = \int d^3x\, \psi^\dagger(\vec{x},t)\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{x})\Big)\psi(\vec{x},t)$$
$$+\frac{1}{2}\int d^3x_1 d^3x_2\, \psi^\dagger(\vec{x}_1,t)\,\psi^\dagger(\vec{x}_2,t)\,V(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\,\psi(\vec{x}_1,t)\,\psi(\vec{x}_2,t)$$

$\longrightarrow$ Form einer nichtlinearen Schrödinger-Gleichung (s. Übungen):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{x})\Big)\psi(\vec{x},t)$$
$$+\int d^3x'\,\psi^\dagger(\vec{x}',t)\,V(\vec{x},\vec{x}')\,\psi(\vec{x}',t)\,\psi(\vec{x},t)$$

4.5 Impulsdarstellung

4.5 Impulsdarstellung

- Berechnungen im Impulsraum oft bequemer (vgl. Streutheorie)

4.5 Impulsdarstellung

- Berechnungen im Impulsraum oft bequemer (vgl. Streutheorie)
- Einteilchenbasis: ebene Wellen $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) \propto e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$

4.5 Impulsdarstellung

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Berechnungen im Impulsraum oft bequemer (vgl. Streutheorie)
- Einteilchenbasis: ebene Wellen $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) \propto e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$
- Vereinfachung: endliches Volumen + periodische Randbedingungen
  - $V = L_x\, L_y\, L_z$,
  - $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x} + L_x\vec{e}_x) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x} + L_y\vec{e}_y) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x} + L_z\vec{e}_z)$

$\rightarrow$ normierbare, diskrete Basiszustände $|\vec{k}\rangle$

4.5 Impulsdarstellung

- Berechnungen im Impulsraum oft bequemer (vgl. Streutheorie)
- Einteilchenbasis: ebene Wellen $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) \propto e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$
- Vereinfachung: endliches Volumen + periodische Randbedingungen
  - $V = L_x \, L_y \, L_z$,
  - $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x} + L_x\vec{e}_x) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x} + L_y\vec{e}_y) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x} + L_z\vec{e}_z)$

  → normierbare, diskrete Basiszustände $|\vec{k}\rangle$
- orthonormierte Basis-Wellenfunktionen:

$$\langle\vec{x}|\vec{k}\rangle = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad \vec{k} \in 2\pi\left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z}\right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow \quad \langle\vec{k}'|\vec{k}\rangle = \int_V d^3x \; \varphi^*_{\vec{k}'}(\vec{x})\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

- kinetische Energie:

$$t_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle \vec{k}' | \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \, \delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

- kinetische Energie:

$$t_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle \vec{k}' | \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{T} = \sum_{\vec{k}',\vec{k}} t_{\vec{k}',\vec{k}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\, \hat{n}_{\vec{k}}$$

- kinetische Energie:

$$t_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle \vec{k}' | \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{T} = \sum_{\vec{k}',\vec{k}} t_{\vec{k}',\vec{k}} \, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \, \hat{n}_{\vec{k}}$$

- Einteilchen-Potenzial:

$$U_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle \vec{k}' | U(\hat{\vec{x}}) | \vec{k} \rangle = \int d^3x \int d^3x' \, \langle \vec{k}' | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | U(\hat{\vec{x}}) | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle$$

- kinetische Energie:

$$t_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle \vec{k}' | \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{T} = \sum_{\vec{k}',\vec{k}} t_{\vec{k}',\vec{k}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\, \hat{n}_{\vec{k}}$$

- Einteilchen-Potenzial:

$$U_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle \vec{k}' | U(\hat{\vec{x}}) | \vec{k} \rangle = \int d^3x \int d^3x' \, \langle \vec{k}' | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | U(\hat{\vec{x}}) | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle$$

$$= \int d^3x \, \varphi^*_{\vec{k}'}(\vec{x})\, U(\vec{x})\, \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{V} \int d^3x \, e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}\, U(\vec{x})$$

- kinetische Energie:

$$t_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle\vec{k}'|\frac{\hbar^2\hat{\vec{k}}^2}{2m}|\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\langle\vec{k}'|\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\,\delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

$$\Rightarrow\quad \hat{T} = \sum_{\vec{k}',\vec{k}} t_{\vec{k}',\vec{k}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\, \hat{n}_{\vec{k}}$$

- Einteilchen-Potenzial:

$$U_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle\vec{k}'|U(\hat{\vec{x}})|\vec{k}\rangle = \int d^3x \int d^3x'\, \langle\vec{k}'|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|U(\hat{\vec{x}})|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\vec{k}\rangle$$

$$= \int d^3x\, \varphi^*_{\vec{k}'}(\vec{x})\, U(\vec{x})\, \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{V}\int d^3x\, e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}\, U(\vec{x}) \quad = \frac{1}{V}\tilde{U}(\vec{k}'-\vec{k})$$

(Fourier-Transformierte)

- kinetische Energie:

$$t_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle\vec{k}'|\frac{\hbar^2\hat{\vec{k}}^2}{2m}|\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\langle\vec{k}'|\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\,\delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{T} = \sum_{\vec{k}',\vec{k}} t_{\vec{k}',\vec{k}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\,\hat{n}_{\vec{k}}$$

- Einteilchen-Potenzial:

$$U_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle\vec{k}'|U(\hat{\vec{x}})|\vec{k}\rangle = \int d^3x \int d^3x'\,\langle\vec{k}'|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|U(\hat{\vec{x}})|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\vec{k}\rangle$$

$$= \int d^3x\,\varphi^*_{\vec{k}'}(\vec{x})\,U(\vec{x})\,\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{V}\int d^3x\, e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}\,U(\vec{x}) \quad = \frac{1}{V}\tilde{U}(\vec{k}'-\vec{k})$$

(Fourier-Transformierte)

$$\Rightarrow \quad \hat{U} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}',\vec{k}} \tilde{U}(\vec{k}'-\vec{k})\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

- kinetische Energie:

$$t_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle \vec{k}' | \frac{\hbar^2 \hat{\vec{k}}^2}{2m} | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \, \delta_{\vec{k}',\vec{k}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{T} = \sum_{\vec{k}',\vec{k}} t_{\vec{k}',\vec{k}} \, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \, a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \, \hat{n}_{\vec{k}}$$

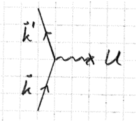
- Einteilchen-Potenzial:

$$U_{\vec{k}',\vec{k}} = \langle \vec{k}' | U(\hat{\vec{x}}) | \vec{k} \rangle = \int d^3x \int d^3x' \, \langle \vec{k}' | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | U(\hat{\vec{x}}) | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle$$

$$= \int d^3x \, \varphi^*_{\vec{k}'}(\vec{x}) \, U(\vec{x}) \, \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{V} \int d^3x \, e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\cdot\vec{x}} \, U(\vec{x}) \quad = \frac{1}{V} \tilde{U}(\vec{k}' - \vec{k})$$

(Fourier-Transformierte)

$$\Rightarrow \quad \hat{U} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}',\vec{k}} \tilde{U}(\vec{k}' - \vec{k}) \, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$



- Zweiteilchen-Potenzial: $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2}\; a^\dagger_{\vec{k}_3} a^\dagger_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$

$$V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \int d^3x_1\, d^3x_2\; \varphi^*_{\vec{k}_3}(\vec{x}_1)\, \varphi^*_{\vec{k}_4}(\vec{x}_2)\, V(x_1, x_2)\, \varphi_{\vec{k}_1}(\vec{x}_1)\, \varphi_{\vec{k}_2}(\vec{x}_2)$$

- Zweiteilchen-Potenzial: $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum\limits_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2}\; a^\dagger_{\vec{k}_3} a^\dagger_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$

$$V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \int d^3x_1\, d^3x_2\; \varphi^*_{\vec{k}_3}(\vec{x}_1)\, \varphi^*_{\vec{k}_4}(\vec{x}_2)\, V(x_1,x_2)\, \varphi_{\vec{k}_1}(\vec{x}_1)\, \varphi_{\vec{k}_2}(\vec{x}_2)$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{x}_1}\; e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2)\cdot\vec{x}_2}\; V(x_1,x_2)$$

- Zweiteilchen-Potenzial: $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2}\; a^\dagger_{\vec{k}_3} a^\dagger_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$

$$V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \int d^3x_1\, d^3x_2\; \varphi^*_{\vec{k}_3}(\vec{x}_1)\, \varphi^*_{\vec{k}_4}(\vec{x}_2)\, V(x_1, x_2)\, \varphi_{\vec{k}_1}(\vec{x}_1)\, \varphi_{\vec{k}_2}(\vec{x}_2)$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3 - \vec{k}_1)\cdot\vec{x}_1}\; e^{-i(\vec{k}_4 - \vec{k}_2)\cdot\vec{x}_2}\; V(x_1, x_2)$$

Translationsinvarianz:

V hängt nur von den Relativkoordinaten ab: $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$

- Zweiteilchen-Potenzial: $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2}\, a^\dagger_{\vec{k}_3} a^\dagger_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$

$$V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \int d^3x_1\, d^3x_2\; \varphi^*_{\vec{k}_3}(\vec{x}_1)\, \varphi^*_{\vec{k}_4}(\vec{x}_2)\, V(x_1, x_2)\, \varphi_{\vec{k}_1}(\vec{x}_1)\, \varphi_{\vec{k}_2}(\vec{x}_2)$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{x}_1}\, e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2)\cdot\vec{x}_2}\, V(x_1, x_2)$$

Translationsinvarianz:

V hängt nur von den Relativkoordinaten ab: $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$

Fouriertransformation: $\tilde{V}(\vec{q}) = \int d^3x\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, V(\vec{x}) \;\Leftrightarrow\; V(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, \tilde{V}(\vec{q})$

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Zweiteilchen-Potenzial: $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2}\; a^\dagger_{\vec{k}_3} a^\dagger_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$

$$V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \int d^3x_1\, d^3x_2\; \varphi^*_{\vec{k}_3}(\vec{x}_1)\, \varphi^*_{\vec{k}_4}(\vec{x}_2)\, V(x_1, x_2)\, \varphi_{\vec{k}_1}(\vec{x}_1)\, \varphi_{\vec{k}_2}(\vec{x}_2)$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{x}_1}\; e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2)\cdot\vec{x}_2}\; V(x_1, x_2)$$

Translationsinvarianz:

V hängt nur von den Relativkoordinaten ab: $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$

Fouriertransformation: $\tilde{V}(\vec{q}) = \int d^3x\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, V(\vec{x}) \;\Leftrightarrow\; V(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, \tilde{V}(\vec{q})$

$$\Rightarrow\quad V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \frac{1}{V^3} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1-\vec{q})\cdot\vec{x}_1}\; e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2+\vec{q})\cdot\vec{x}_2}$$

- Zweiteilchen-Potenzial: $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2}\, a^\dagger_{\vec{k}_3} a^\dagger_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$

$$V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \int d^3x_1\, d^3x_2\; \varphi^*_{\vec{k}_3}(\vec{x}_1)\, \varphi^*_{\vec{k}_4}(\vec{x}_2)\, V(x_1, x_2)\, \varphi_{\vec{k}_1}(\vec{x}_1)\, \varphi_{\vec{k}_2}(\vec{x}_2)$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{x}_1}\, e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2)\cdot\vec{x}_2}\, V(x_1, x_2)$$

Translationsinvarianz:

V hängt nur von den Relativkoordinaten ab: $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$

Fouriertransformation: $\tilde{V}(\vec{q}) = \int d^3x\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, V(\vec{x}) \;\Leftrightarrow\; V(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, \tilde{V}(\vec{q})$

$$\Rightarrow\quad V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \frac{1}{V^3} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1-\vec{q})\cdot\vec{x}_1}\, e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2+\vec{q})\cdot\vec{x}_2}$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q})\, \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_1+\vec{q}}\, \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_2-\vec{q}}$$

- Zweiteilchen-Potenzial: $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} \, a^\dagger_{\vec{k}_3} a^\dagger_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$

$$V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \int d^3x_1 \, d^3x_2 \; \varphi^*_{\vec{k}_3}(\vec{x}_1) \, \varphi^*_{\vec{k}_4}(\vec{x}_2) \, V(x_1, x_2) \, \varphi_{\vec{k}_1}(\vec{x}_1) \, \varphi_{\vec{k}_2}(\vec{x}_2)$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3x_1 \, d^3x_2 \; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{x}_1} \, e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2)\cdot\vec{x}_2} \, V(x_1, x_2)$$

Translationsinvarianz:

V hängt nur von den Relativkoordinaten ab: $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$

Fouriertransformation: $\tilde{V}(\vec{q}) = \int d^3x \, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} V(\vec{x}) \;\Leftrightarrow\; V(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \tilde{V}(\vec{q})$

$$\Rightarrow \quad V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \frac{1}{V^3} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \int d^3x_1 \, d^3x_2 \; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1-\vec{q})\cdot\vec{x}_1} \, e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2+\vec{q})\cdot\vec{x}_2}$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \, \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_1+\vec{q}} \, \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_2-\vec{q}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \, a^\dagger_{\vec{k}_1+\vec{q}} a^\dagger_{\vec{k}_2-\vec{q}} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$$

- **Zweiteilchen-Potenzial:** $\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2}\; a^\dagger_{\vec{k}_3} a^\dagger_{\vec{k}_4} a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$

$$V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \int d^3x_1\, d^3x_2\; \varphi^*_{\vec{k}_3}(\vec{x}_1)\, \varphi^*_{\vec{k}_4}(\vec{x}_2)\, V(x_1, x_2)\, \varphi_{\vec{k}_1}(\vec{x}_1)\, \varphi_{\vec{k}_2}(\vec{x}_2)$$

$$= \frac{1}{V^2} \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{x}_1}\, e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2)\cdot\vec{x}_2}\, V(x_1, x_2)$$

Translationsinvarianz:

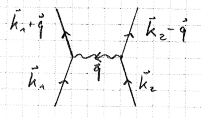
V hängt nur von den Relativkoordinaten ab: $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$

Fouriertransformation: $\tilde{V}(\vec{q}) = \int d^3x\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, V(\vec{x}) \;\Leftrightarrow\; V(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, \tilde{V}(\vec{q})$

$$\Rightarrow\quad V_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{k}_1\vec{k}_2} = \frac{1}{V^3} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \int d^3x_1\, d^3x_2\; e^{-i(\vec{k}_3-\vec{k}_1-\vec{q})\cdot\vec{x}_1}\, e^{-i(\vec{k}_4-\vec{k}_2+\vec{q})\cdot\vec{x}_2}$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q})\, \delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_1+\vec{q}}\, \delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_2-\vec{q}}$$

$$\Rightarrow\quad \hat{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q})\; a^\dagger_{\vec{k}_1+\vec{q}}\, a^\dagger_{\vec{k}_2-\vec{q}}\, a_{\vec{k}_2}\, a_{\vec{k}_1}$$



- Feldoperator:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a_{\vec{k}}\,, \qquad \psi^\dagger(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}}$$

- Feldoperator:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a_{\vec{k}}\,, \qquad \psi^\dagger(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}}$$

- Teilchendichte:

$$n(\vec{x}) = \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

- Feldoperator:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a_{\vec{k}}\,, \qquad \psi^\dagger(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}}$$

- Teilchendichte:

$$n(\vec{x}) = \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

Fouriertransformation:

$$\tilde{n}(\vec{q}) = \int d^3x\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, n(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \int d^3x\, e^{-i(\vec{q}+\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}-\vec{q}} a_{\vec{k}}$$

- Feldoperator:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a_{\vec{k}}\,, \qquad \psi^\dagger(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}}$$

- Teilchendichte:

$$n(\vec{x}) = \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

Fouriertransformation:

$$\tilde{n}(\vec{q}) = \int d^3x\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\, n(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \int d^3x\, e^{-i(\vec{q}+\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}}\, a^\dagger_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}-\vec{q}} a_{\vec{k}}$$

$$\Rightarrow \quad \tilde{n}(\vec{0}) = \sum_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}} = \hat{N}$$ (Gesamtteilchenzahl-Operator)

Berücksichtigung des Spins

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Berücksichtigung des Spins

- Teilchen mit Spin:

  Basiszustände zusätzlich charakterisiert durch z-Komponente des Spins

Berücksichtigung des Spins

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Teilchen mit Spin:

  Basiszustände zusätzlich charakterisiert durch z-Komponente des Spins

  → Feldoperatoren: $$\psi(\vec{x}) = \sum_i \varphi_i(\vec{x})\, a_i = \sum_{\vec{k},s} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x}) = \sum_s \psi_s(\vec{x})$$

  $$\psi_s(\vec{x}) \equiv \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x})$$

Berücksichtigung des Spins

- Teilchen mit Spin:

  Basiszustände zusätzlich charakterisiert durch z-Komponente des Spins

  $\longrightarrow$ Feldoperatoren: $\psi(\vec{x}) = \sum_i \varphi_i(\vec{x})\, a_i = \sum_{\vec{k},s} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x}) = \sum_s \psi_s(\vec{x})$

  $$\psi_s(\vec{x}) \equiv \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x})$$

- Kommutator-Relationen:

  $$\left[\psi_s(\vec{x}), \psi_{s'}(\vec{x}')\right]_\pm = \left[\psi_s^\dagger(\vec{x}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = 0, \quad \left[\psi_s(\vec{x}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = \delta_{ss'}\,\delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

Berücksichtigung des Spins

- Teilchen mit Spin:

  Basiszustände zusätzlich charakterisiert durch z-Komponente des Spins

  → Feldoperatoren: $\psi(\vec{x}) = \sum_i \varphi_i(\vec{x})\, a_i = \sum_{\vec{k},s} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x}) = \sum_s \psi_s(\vec{x})$

  $$\psi_s(\vec{x}) \equiv \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x})$$

- Kommutator-Relationen:

  $$\left[\psi_s(\vec{x}), \psi_{s'}(\vec{x}')\right]_\pm = \left[\psi_s^\dagger(\vec{x}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = 0, \quad \left[\psi_s(\vec{x}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = \delta_{ss'}\,\delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

- Ersetzungsregel für Spin-unabhängige Größen:

  $$\int d^3x \;\to\; \sum_s \int d^3x, \qquad \sum_{\vec{k}} \;\to\; \sum_{\vec{k},s}$$

Berücksichtigung des Spins

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Teilchen mit Spin:

  Basiszustände zusätzlich charakterisiert durch z-Komponente des Spins

  $\longrightarrow$ Feldoperatoren: $\psi(\vec{x}) = \sum_i \varphi_i(\vec{x})\, a_i = \sum_{\vec{k},s} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x}) = \sum_s \psi_s(\vec{x})$

  $$\psi_s(\vec{x}) \equiv \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x})$$

- Kommutator-Relationen:

  $$\left[\psi_s(\vec{x}), \psi_{s'}(\vec{x}\,')\right]_\pm = \left[\psi_s^\dagger(\vec{x}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}\,')\right]_\pm = 0, \quad \left[\psi_s(\vec{x}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}\,')\right]_\pm = \delta_{ss'}\,\delta^3(\vec{x} - \vec{x}\,')$$

- Ersetzungsregel für Spin-unabhängige Größen:

  $$\int d^3x \;\rightarrow\; \sum_s \int d^3x, \quad \sum_{\vec{k}} \;\rightarrow\; \sum_{\vec{k},s}$$

- Beispiel: $\hat{N} = \int d^3x\, \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x}) = \sum_s \int d^3x\, \psi_s^\dagger(\vec{x})\psi_s(\vec{x}) = \sum_s n_s(\vec{x})$

Berücksichtigung des Spins

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Teilchen mit Spin:

  Basiszustände zusätzlich charakterisiert durch z-Komponente des Spins

  → Feldoperatoren: $\psi(\vec{x}) = \sum_i \varphi_i(\vec{x})\, a_i = \sum_{\vec{k},s} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x}) = \sum_s \psi_s(\vec{x})$

  $$\psi_s(\vec{x}) \equiv \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k},s}(\vec{x})$$

- Kommutator-Relationen:

  $$\left[\psi_s(\vec{x}), \psi_{s'}(\vec{x}')\right]_\pm = \left[\psi_s^\dagger(\vec{x}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = 0, \qquad \left[\psi_s(\vec{x}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{x}')\right]_\pm = \delta_{ss'}\,\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')$$

- Ersetzungsregel für Spin-unabhängige Größen:

  $$\int d^3x \;\to\; \sum_s \int d^3x, \qquad \sum_{\vec{k}} \;\to\; \sum_{\vec{k},s}$$

- Beispiel: $\hat{N} = \int d^3x\, \psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x}) = \sum_s \int d^3x\, \psi_s^\dagger(\vec{x})\psi_s(\vec{x}) = \sum_s n_s(\vec{x}) \;= \tilde{n}(\vec{0})$

  $$\tilde{n}(\vec{q}) = \sum_{\vec{k},s} a^\dagger_{\vec{k}-\vec{q},s}\, a_{\vec{k},s}$$

4.6 Fermion-Vielteilchensysteme
Teil 1: Nichtwechselwirkende Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen

- Grundzustand: bis zum Fermi-Impuls $p_F = \hbar k_F$ gefüllte Fermi-Kugel

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\substack{\vec{k} \\ |\vec{k}| \leq k_F}} \prod_s a^\dagger_{\vec{k},s} |0\rangle$$

- Grundzustand: bis zum Fermi-Impuls $p_F = \hbar k_F$ gefüllte Fermi-Kugel

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\substack{\vec{k} \\ |\vec{k}| \le k_F}} \prod_s a^\dagger_{\vec{k},s}|0\rangle$$

$\Rightarrow$ Besetzungszahlen:

$$n_{\vec{k},s} = \langle\phi_0|a^\dagger_{\vec{k},s}a_{\vec{k},s}|\phi_0\rangle = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad |\vec{k}| \le k_F \\ 0 & \phantom{\text{für}} \quad |\vec{k}| > k_F \end{cases} = \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

4.6 Fermion-Vielteilchensysteme
Teil 1: Nichtwechselwirkende Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- Grundzustand: bis zum Fermi-Impuls $p_F = \hbar k_F$ gefüllte Fermi-Kugel

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\substack{\vec{k} \\ |\vec{k}| \leq k_F}} \prod_s a^\dagger_{\vec{k},s} |0\rangle$$

$\Rightarrow$ Besetzungszahlen:

$$n_{\vec{k},s} = \langle \phi_0 | a^\dagger_{\vec{k},s} a_{\vec{k},s} | \phi_0 \rangle = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad |\vec{k}| \leq k_F \\ 0 & \phantom{\text{für}} \quad |\vec{k}| > k_F \end{cases} = \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

$\Rightarrow$ Gesamtteilchenzahl:

$$N = \sum_{\vec{k},s} n_{\vec{k},s} = \sum_s \sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|) = 2 \sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

Thermodynamischer Limes

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $N = 2\sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)\,, \qquad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{k_z}$

Thermodynamischer Limes

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $N = 2 \sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)$, $\quad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z}$
- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

Thermodynamischer Limes

- $N = 2\sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)\,, \quad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{k_z}$
- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi\left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z}\right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

  $\Rightarrow \quad k_i = \Delta k_i\, n_i \quad \text{mit} \quad \Delta k_i \equiv \frac{2\pi}{L_i}$

Thermodynamischer Limes

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $N = 2 \sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)$, $\quad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z}$
- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

$\Rightarrow \quad k_i = \Delta k_i \, n_i \quad \text{mit} \quad \Delta k_i \equiv \frac{2\pi}{L_i}$

$\Rightarrow \quad \sum_{k_i} = \frac{L_i}{2\pi} \sum_{k_i} \Delta k_i$

Thermodynamischer Limes

- $N = 2 \sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)\,, \quad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z}$
- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

$$\Rightarrow \quad k_i = \Delta k_i \, n_i \quad \text{mit} \quad \Delta k_i \equiv \frac{2\pi}{L_i}$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{k_i} = \frac{L_i}{2\pi} \sum_{k_i} \Delta k_i \quad \xrightarrow{L_i \to \infty} \quad \frac{L_i}{2\pi} \int dk_i$$

Thermodynamischer Limes

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $N = 2 \sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)$, $\quad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z}$

- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

$$\Rightarrow \quad k_i = \Delta k_i \, n_i \quad \text{mit} \quad \Delta k_i \equiv \frac{2\pi}{L_i}$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{k_i} = \frac{L_i}{2\pi} \sum_{k_i} \Delta k_i \overset{L_i \to \infty}{\longrightarrow} \frac{L_i}{2\pi} \int dk_i \qquad \Rightarrow \quad \sum_{\vec{k}} \to V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

Thermodynamischer Limes

- $N = 2\sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)\,, \qquad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{k_z}$
- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi\left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z}\right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

$$\Rightarrow \quad k_i = \Delta k_i\, n_i \quad \text{mit} \quad \Delta k_i \equiv \frac{2\pi}{L_i}$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{k_i} = \frac{L_i}{2\pi}\sum_{k_i}\Delta k_i \;\xrightarrow{L_i\to\infty}\; \frac{L_i}{2\pi}\int dk_i \qquad \Rightarrow \quad \sum_{\vec{k}} \to V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

$$\Rightarrow \quad N \to 2V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\theta(k_F - |\vec{k}|) = 2V\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F} k^2\,dk = \frac{Vk_F^3}{3\pi^2}$$

Thermodynamischer Limes

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $N = 2\sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)\,, \qquad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{k_z}$
- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi\left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z}\right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

$$\Rightarrow \quad k_i = \Delta k_i\, n_i \quad \text{mit} \quad \Delta k_i \equiv \frac{2\pi}{L_i}$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{k_i} = \frac{L_i}{2\pi}\sum_{k_i}\Delta k_i \quad \xrightarrow{L_i \to \infty} \quad \frac{L_i}{2\pi}\int dk_i \qquad \Rightarrow \quad \sum_{\vec{k}} \to V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

$$\Rightarrow \quad N \to 2V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\theta(k_F - |\vec{k}|) = 2V\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F} k^2\,dk = \frac{Vk_F^3}{3\pi^2} \quad \Leftrightarrow \quad k_F^3 = 3\pi^2\frac{N}{V} = 3\pi^3 n$$

Thermodynamischer Limes

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $N = 2\sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)\,, \qquad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{k_z}$
- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi\left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z}\right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

$$\Rightarrow \quad k_i = \Delta k_i\, n_i \quad \text{mit} \quad \Delta k_i \equiv \frac{2\pi}{L_i}$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{k_i} = \frac{L_i}{2\pi}\sum_{k_i}\Delta k_i \xrightarrow{L_i\to\infty} \frac{L_i}{2\pi}\int dk_i \qquad \Rightarrow \quad \sum_{\vec{k}} \to V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

$$\Rightarrow \; N \to 2V\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\theta(k_F - |\vec{k}|) = 2V\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F} k^2\,dk = \frac{Vk_F^3}{3\pi^2} \quad \Leftrightarrow \quad k_F^3 = 3\pi^2\frac{N}{V} = 3\pi^3 n$$

- thermodynamischer Limes: $N, V \to \infty,\; n = \frac{N}{V} \to const. \;\Rightarrow\; k_F \to const.$

Thermodynamischer Limes

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

- $N = 2 \sum_{\vec{k}} \theta(k_F - |\vec{k}|)\,, \quad \sum_{\vec{k}} = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z}$
- periodische Randbedingungen: $\vec{k} \in 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z} \right), \quad n_i \in \mathbb{Z}$

$$\Rightarrow \quad k_i = \Delta k_i \, n_i \quad \text{mit} \quad \Delta k_i \equiv \frac{2\pi}{L_i}$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{k_i} = \frac{L_i}{2\pi} \sum_{k_i} \Delta k_i \quad \xrightarrow{L_i \to \infty} \quad \frac{L_i}{2\pi} \int dk_i \qquad \Rightarrow \quad \sum_{\vec{k}} \to V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

$$\Rightarrow \quad N \to 2V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \theta(k_F - |\vec{k}|) = 2V \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2\, dk = \frac{V k_F^3}{3\pi^2} \quad \Leftrightarrow \quad k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} = 3\pi^3 n$$

- thermodynamischer Limes: $N, V \to \infty, \; n = \frac{N}{V} \to const. \; \Rightarrow \; k_F \to const.$
- In praktischen Rechnungen ist es oft günstig, mit einem endlichen Volumen zu starten und den thermodynamischen Limes später zu bilden.