Quantum Theory of Condensed Matter I

WS 09/10

H. Schoeller

Content:

I. Quantum mechanics (special topics) 5

1.1. Brillouin-Wigner perturbation theory 5
1.2. Molecules, chemical bonds, magnetism 11
1.3. Quantum decay theory 28
1.4. Time reversal transformation 43
1.5. Landauer-Büttiker formalism and tight-binding models 57
1.6 Phonons 82

II. Green's and correlation functions 92

2.1. Linear response theory 92
2.2. Correlation functions in real and imaginary time 10
2.3. Quasiparticle concept 12

III. Diagrammatic perturbation theory

3.1. Partition function 138
3.2. Green's functions in imaginary time 166
3.3. Correlation functions in imaginary time 181

IV. Applications

4.1 Electron gas 186
4.2 Electrons and phonons 210
4.3 Superconductivity 226

Literatur

Einführung:

- W. Nolting, Grundkurs: Theoretische Physik, Band 7: Viel-Teilchen-Theorie, Zimmermann-Neufang, 1992
- E.K.U. Gross + E. Runge, Vielteilchentheorie, Teubner, 1986
- A.N. Zagoskin, Quantum Theory of Many-Body Systems, Springer, 1998.

Ausführliche Lehrbücher:

- J.W. Negele + H. Orland, Quantum Many-Particle Systems, Addison-Wesley, 1988
- G.D. Mahan, Many-Particle Physics, Plenum Press, 1990
- A.A. Abrikosov + L.P. Gorkov + I.E. Dzyaloshinski, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics, Dover Publications, 1975
- A.L. Fetter + J.D. Walecka, Quantum Theory of Many Particle Systems, McGraw-Hill, 1971
- G. Rickayzen, Green's Functions and Condensed Matter, Academic Press, 1980

Speziell: Wegintegrale:

- R.P. Feynman + A.R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill, 1965
- L.S. Schulman, Techniques and Applications of Path Integration, Wiley, 1981
- H. Kleinert, Pfadintegrale in Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik, B.I. Wissenschaftsverlag, 19

Speziell: Fermi-Flüssigkeits-Theorie

- P. Nozières, Theory of Interacting Fermi Systems, Benjamin, 1963
- D. Pines + P. Nozières, The Theory of Quantum Liquids, Benjamin, 1966
- W. Metzner et al., Advances in Physics 47, 317 (1998).
- G. Baym & C. Pethick, in "The Physics of Liquid and Solid Helium", Part II, ed. K.H. Bennemann & J.B. Ketterson (Wiley, '78), p.

Speziell: Real-Zeit Formalismus (s.a. Mahan, Zagoskin)

- J. Rammer & H. Smith, Rev. Mod. Phys. 58, 323 ('86)
- D.C. Langreth, in "Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids", NATO Advanced Study Institute Series B, Vol. 17, ed. J.T. Devreese & E. van Doren (Plenum, New York/London), p. 3
- L.P. Kadanoff & G. Baym, "Quantum Statistical Mechanics", Benjamin, 1962.
- A. Kamenev, cond-mat/0109316 (gut für weitere Referenzen)
- E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevskii, Statistical Physics, Part II, Pergamon Press, 1980.

I. Quantum mechanics (Special topics)

1.1. Brillouin-Wigner perturbation theory

Problem:

$$H = H_0 + V \tag{1}$$

$$H_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \tag{2}$$

We want to solve

$$H |\Psi\rangle = E |n\rangle \tag{3}$$

where

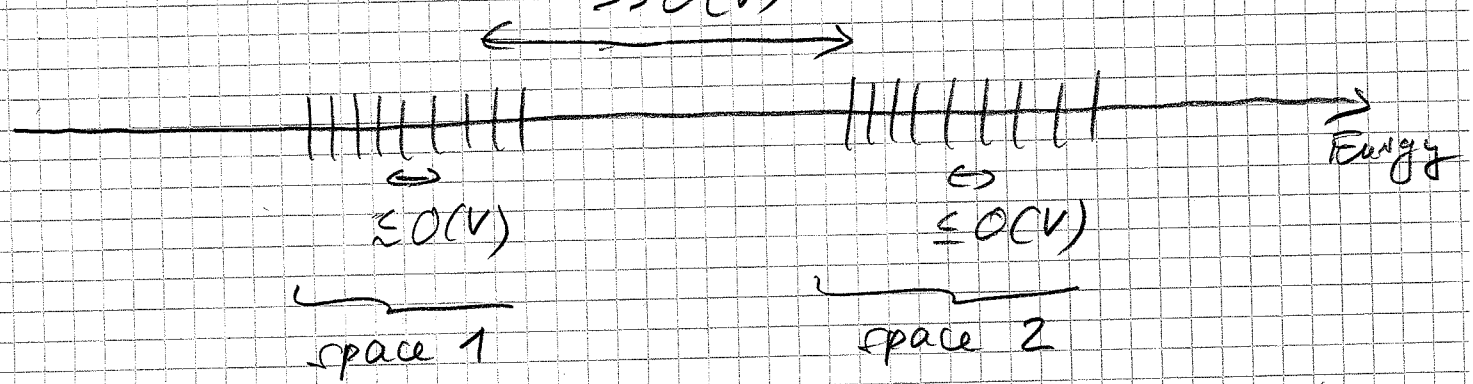
$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + \cdots \tag{4}$$

$$|\Psi\rangle = |\Psi^{(0)}\rangle + |\Psi^{(1)}\rangle + \cdots \tag{5}$$

and $E^{(k)}, |\Psi^{(k)}\rangle \sim \mathcal{O}(V^k)$.

Instead of Rayleigh-Schrödinger we solve this problem by the more physically intuitive Brillouin-Wigner method: (→ see also QM I script, IV.1.1.)

Spectrum of H_0:



We look for an energy eigenvalue E close to the energies in space 1.

Matrix notation:

$$H = H_0 + V = \left(\begin{array}{c|c} H_{11} & H_{12} \\ \hline H_{21} & H_{22} \end{array}\right) \begin{matrix} \} \text{ states of space 1} \\ \} \text{ states of space 2} \end{matrix} \qquad (6)$$

$$\hat{=} \left(\begin{array}{c|c} H_1^{(0)} + V_{11} & V_{12} \\ \hline V_{21} & H_2^{(0)} + V_{22} \end{array}\right) \qquad (7)$$

H_0 diagonal in space 1/2

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \,, \quad |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \left(\begin{array}{c|c} H_{11} & H_{12} \\ \hline H_{21} & H_{22} \end{array}\right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad H_{11}\Psi_1 + H_{12}\Psi_2 = E\Psi_1$$

$$H_{21}\Psi_1 + H_{22}\Psi_2 = E\Psi_2 \rightsquigarrow \boxed{\Psi_2 = \frac{1}{E - H_{22}} H_{21}\Psi_1} \qquad (8)$$

(insert ←)

(9)

with $\frac{1}{A} := A^{-1}$.

(7), (8), (9)

$$\Rightarrow \boxed{\left(H_1^{(0)} + V_{11} + V_{12} \frac{1}{E - H_2^{(0)} - V_{22}} V_{21}\right)\Psi_1 = E\Psi_1} \qquad (10)$$

→ effective eigenvalue problem in space 1

V_{11} → trivial correction terms in $O(V)$

$V_{12} \frac{1}{E - H_2^{(0)} - V_{22}} V_{21}$ → correction terms in $O(V^n)$, $n \geq 2$

Perturbation theory:

$$\frac{1}{E - H_2^{(0)} - V_{22}} = \frac{1}{(E - H_2^{(0)})\left(1 - \frac{1}{E - H_2^{(0)}} V_{22}\right)}$$

$(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$

$$= \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{E - H_2^{(0)}} V_{22}\right)} \cdot \frac{1}{E - H_2^{(0)}} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{E - H_2^{(0)}} V_{22}\right)^k \frac{1}{E - H_2^{(0)}}$$

$$\frac{1}{1-A} = 1 + A + A^2 + \dots$$

(also valid for operators
→ take spectral representation)

$$V_{12} \frac{1}{E - H_2^{(0)} - V_{22}} V_{21} = V_{12} \frac{1}{E - H_2^{(0)}} V_{21} + V_{12} \frac{1}{E - H_2^{(0)}} V_{22} \frac{1}{E - H_2^{(0)}} V_{21} + \dots$$

↑ lowest order term

↑ $O(V^3)$

Matrix element: $n, n' \in$ space 1
$m, m_i \in$ space 2

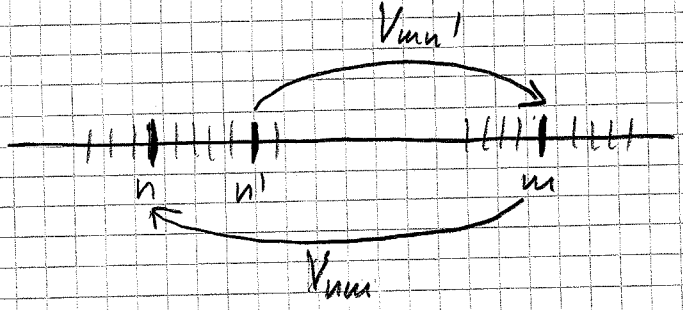
$$\langle n | V_{12} \frac{1}{E - H_2^{(0)} - V_{22}} V_{21} | n' \rangle =$$

$$= \sum_{m \in 2} V_{nm} \frac{1}{E - \varepsilon_m} V_{mn'} \qquad (11a)$$

$$+ \sum_{m_1, m_2 \in 2} V_{n m_1} \frac{1}{E - \varepsilon_{m_1}} V_{m_1 m_2} \frac{1}{E - \varepsilon_{m_2}} V_{m_2 n'} \qquad (11b)$$

$+ \dots$

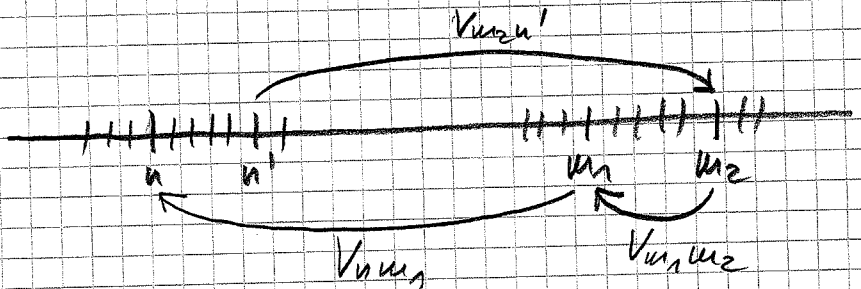
Process (11a):



→ hopping from $n' \to m \to n$

↑ virtual intermediate state

Process (11b):



→ hopping from $n' \to m_2 \to m_1 \to n$

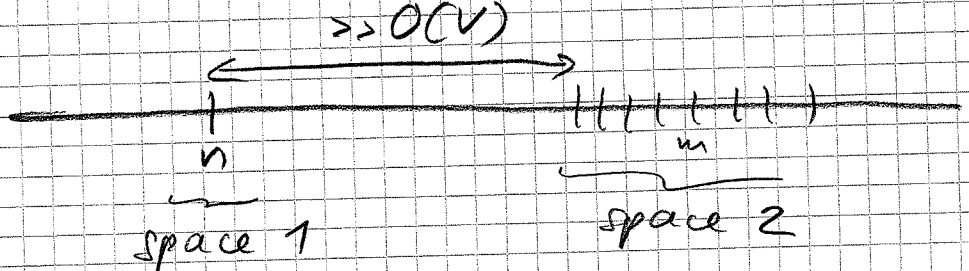
↑ ↑

two virtual intermediate states

Perturbation theory well-defined if

$$\boxed{|V_{nm}|, |V_{nm'}| \ll |\varepsilon_n - \varepsilon_{m''}|} \qquad \begin{matrix} n \in 1 \\ m, m', m'' \in 2 \end{matrix} \qquad (12)$$

Nondegenerate perturbation theory:



space 1

↑

only one state

space 2

Take matrix element $\langle n| \ldots |n\rangle$ of (10):

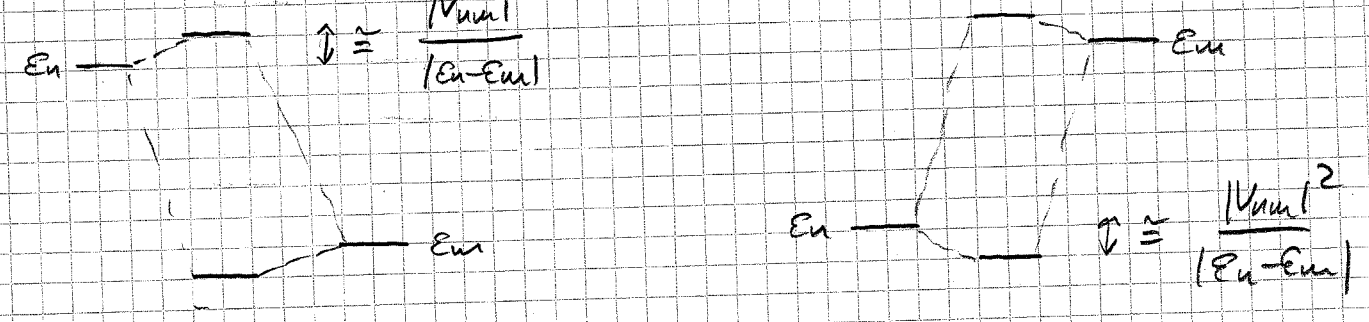
$$\left(\varepsilon_n + V_{nn} + \langle n| V_{12} \underbrace{\frac{1}{E - H_2^{(0)} - V_{22}}}_{\cong \frac{1}{E-H_2^{(0)}} + O(V) \cong \frac{1}{\varepsilon_n - H_2^{(0)}} + O(V)} V_{21} |n\rangle\right) \psi_n = E \psi_n$$

$$E = \varepsilon_n + V_{nn} + \sum_{m \in 2} V_{nm} \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} V_{mn} + O(V^3)$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} E^{(0)} &= \varepsilon_n \\ E^{(1)} &= V_{nn} \\ E^{(2)} &= \sum_{m \in 2} \frac{|V_{nm}|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \end{aligned}} \qquad (13)$$

- $E^{(2)}$ → like an independent sum of 2 state problems:

$$\begin{matrix} \varepsilon_n & - \\ & n \end{matrix} \quad \overset{V_{nm}}{\longleftrightarrow} \quad \begin{matrix} - & \varepsilon_m \\ m & \end{matrix} \qquad \begin{pmatrix} \varepsilon_n & V_{nm} \\ V_{nm} & \varepsilon_m \end{pmatrix}$$



→ pushes ε_n up → pushes ε_n down

⇒ levels repel each other

Calculation of eigenstate

$$\psi_2 \overset{(9)}{=} \frac{1}{E - H_2^{(0)} - V_{22}} V_{21} \psi_1 \cong \frac{1}{\varepsilon_n - H_2^{(0)}} V_{21} \psi_1 + O(V^2)$$

take matrix element: $m \in 2$, $\psi_m = \langle m | \psi \rangle$

$$\psi_m = \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} V_{mn} \psi_n \tag{14}$$

ψ_n → normalization: $|\psi_n|^2 + \underbrace{\sum_m |\psi_m|^2}_{O(V^2)} = 1$

$$\Rightarrow \quad \psi_n = 1 + O(V^2)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} \psi_n^{(0)} &= 1 \,, \quad \psi_n^{(1)} = 0 \\ \psi_m^{(0)} &= 0 \,, \quad \psi_m^{(1)} = \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \end{aligned}} \tag{15}$$

or

$$\boxed{\begin{aligned} |\psi^{(0)}\rangle &= |n\rangle \\ |\psi^{(1)}\rangle &= \sum_{m \in 2} |m\rangle \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \end{aligned}} \tag{16}$$

Higher order terms, degenerate perturbation theory

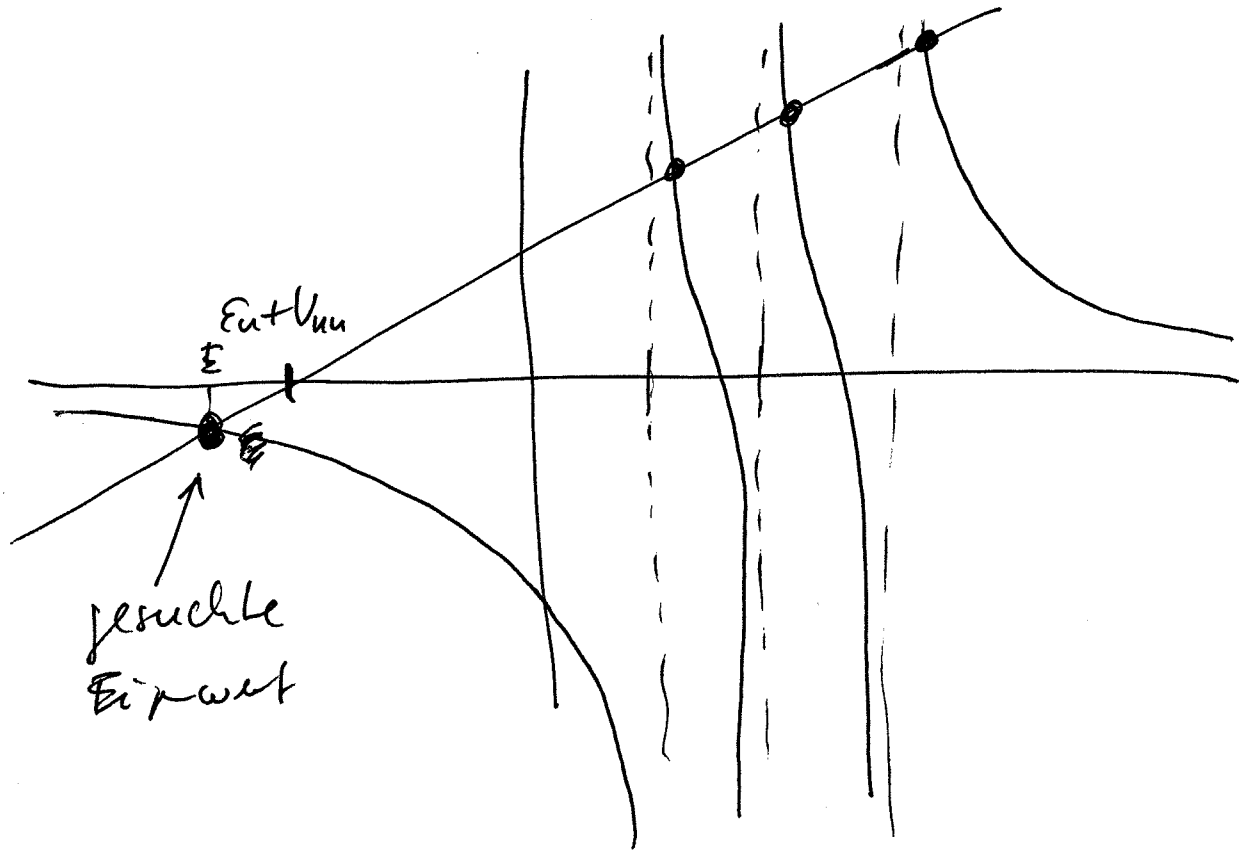
→ see QM I script, IV. 1.1.

Raum 1 = one state

$$E = \varepsilon_u + V_{uu} + \langle u | V_{12} \frac{1}{E - H_{22}} V_{21} | u \rangle \quad \text{exakt}$$

$$= \varepsilon_u + V_{uu} + \sum_i \frac{|\langle u | V_{12} | \lambda_i \rangle|^2}{E - E_{\lambda i}}$$

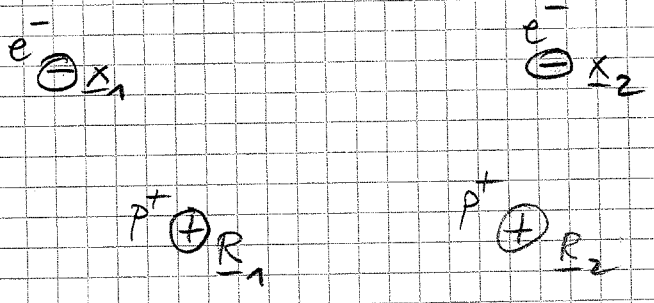
mit $H_{22} | \lambda_i \rangle = E_{\lambda i} | \lambda_i \rangle$



1.2 Molecules, chemical bonds, magnetism

To understand the fundamental reasons for the occurence of chemical bonds and the occurence of magnetic interactions, we consider the simplest molecule H_2:

H_2-molecule:



$\leftarrow$ electrons

$\leftarrow$ nuclei

Nuclei $\rightarrow$ take at fixed positions $\underline{R}_1, \underline{R}_2$
(large mass, "Born-Oppenheimer approx.")

Hamiltonian for the electrons ($\underline{R}_1, \underline{R}_2$ fixed)

$$H(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{p}_1, \underline{p}_2) = h(\underline{x}_1, \underline{p}_1) + h(\underline{x}_2, \underline{p}_2) + v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \quad (1)$$

($h(\underline{x}_1, \underline{p}_1)$: electron 1; $h(\underline{x}_2, \underline{p}_2)$: electron 2; $v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2)$: Coulomb)

$$h(\underline{x}, \underline{p}) = \frac{\underline{p}^2}{2m} - v(\underline{x} - \underline{R}_1) - v(\underline{x} - \underline{R}_2) \quad (2)$$

($-v(\underline{x} - \underline{R}_1)$: attraction from nucleus 1; $-v(\underline{x} - \underline{R}_2)$: attraction from nucleus 2)

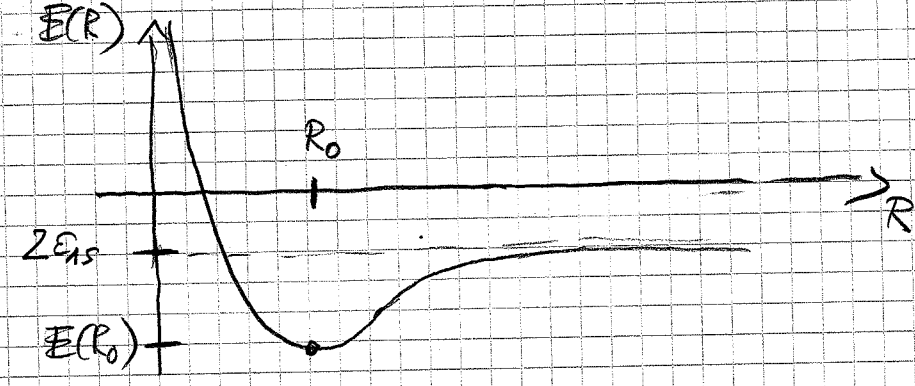
Coulomb interaction: $$\boxed{v(\underline{x}) = \frac{e^2}{|\underline{x}|}} \quad (3)$$

Symbolically: $$H = h_1 + h_2 + v_{12}$$
$$h_i = h(\underline{x}_i, \underline{p}_i) \;, \quad v_{12} = v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \quad (4)$$

Once the ground-state energy $E_0(|\underline{R}_1 - \underline{R}_2|)$ of (1) has been determined, we have to minimize

$$E(|\underline{R}_1 - \underline{R}_2|) = E_0(|\underline{R}_1 - \underline{R}_2|) + v(\underline{R}_1 - \underline{R}_2) \quad (5)$$

to get the ground state of H_2:



(6)

← ground state of 2 isolated H-atoms

The difference of $2E_{1s} - E(R_0)$ is the <u>binding energy</u> and leads to a <u>chemical bond</u>.

<u>General considerations</u>:

We want to solve $$H\psi = E\psi$$

$\psi \rightarrow$ eigenstate

$E \rightarrow$ eigenenergy

$\underline{x}, S_z$ representation: $\psi(\underline{x}_1 \sigma_1, \underline{x}_2 \sigma_2)$; $\sigma_i \equiv \pm \equiv \uparrow, \downarrow$

↑ spin in z-direction

① H spin independent :

$$\Rightarrow \quad \psi(\underline{x}_1 \sigma_1, \underline{x}_2 \sigma_2) = \varphi(\underline{x}_1, \underline{x}_2)\, \underbrace{\chi(\sigma_1, \sigma_2)}_{\text{arbitrary}} \qquad (7)$$

② H invariant under permutation $1 \leftrightarrow 2$

$\Rightarrow$ $\varphi(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$ can be chosen as an eigenfunction of the permutation operator

$\Rightarrow$ $\varphi(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$ is either symmetric or antisymmetric

$$\varphi_{\pm}(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \pm\, \varphi_{\pm}(\underline{x}_2, \underline{x}_1) \qquad (8)$$

③ ψ must be antisymmetric under $1 \leftrightarrow 2$

(Pauli principle)

$$\psi(\underline{x}_1 \sigma_1, \underline{x}_2 \sigma_2) = - \psi(\underline{x}_2 \sigma_2, \underline{x}_1 \sigma_1) \qquad (9)$$

①, ②, ③ $\Rightarrow$ $\boxed{\psi = \varphi_+ \chi_- \quad \text{or} \quad \psi = \varphi_- \chi_+}$ (10)

with $\varphi_{\pm}(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \pm\, \varphi_{\pm}(\underline{x}_2, \underline{x}_1)$

$\chi_{\pm}(\sigma_1, \sigma_2) = \pm\, \chi_{\pm}(\sigma_2, \sigma_1)$

$\chi_{\pm}(\sigma_1, \sigma_2)$: add two spin $1/2$ $\Rightarrow$ $S = 0, 1$

↑ Singlet ↑ Triplet

Triplet : $S_z = 0, \pm 1$ $\rightarrow$ $\chi_+^{0, \pm 1}$

Singlet : $S_z = 0$ $\rightarrow$ χ_-

Explicitly: $\alpha(\sigma) := \delta_{\sigma\uparrow}$, $\beta(\sigma) = \delta_{\sigma\downarrow}$

"spin up state" "spin down state"

$$\Rightarrow \quad \chi_+^0(\sigma_1,\sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) + \alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)\right]$$

$$\chi_+^1(\sigma_1,\sigma_2) = \alpha(\sigma_1)\alpha(\sigma_2) \qquad (11)$$

$$\chi_+^{-1}(\sigma_1,\sigma_2) = \beta(\sigma_1)\beta(\sigma_2)$$

$$\chi_-(\sigma_1,\sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)\right]$$

Dirac notation:

$$|\chi_+^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

$$|\chi_+^1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \qquad (12)$$

$$|\chi_+^{-1}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$|\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

where $|\sigma\sigma'\rangle := |\sigma\rangle \otimes |\sigma'\rangle$ is a product state:

$$\langle\sigma_1\sigma_2|\sigma\sigma'\rangle := \langle\sigma_1|\sigma\rangle \cdot \langle\sigma_2|\sigma'\rangle$$

Magnetism: $H\varphi_\pm = E_\pm \varphi_\pm$

$E_+ \neq E_-$ due to Coulomb interaction:

$\varphi_-(\underline{x},\underline{x}) = 0 \Rightarrow$

(1) It is not favourable that both electrons are between the nuclei $\Rightarrow E_- > E_+$

(2) The two electrons do not come close together $\underset{v_{12}}{\Rightarrow} E_- < E_+$

$\Rightarrow$ due to <u>Coulomb interaction</u> + <u>Pauli-principle</u>

either the singlet $(\psi_+ \chi_-)$ or the

triplet $(\psi_- \chi_+)$ state will be the ground state

$\Rightarrow$ **magnetic interaction induced by Coulomb interaction (→ strong!) + quantum mechanics (→ Pauli principle)** (13)

<u>Formally</u>, Consider subspace $\{\psi_+\chi_-, \psi_-\chi_+\}$

$\Rightarrow$

$$H = -\frac{1}{\hbar^2} J \underline{S}_1 \underline{S}_2 + \text{const}$$

$$J = E_+ - E_- = E_{\text{singlet}} - E_{\text{triplet}} \qquad (14)$$

J → exchange constant

$J > 0$ → ferromagnetism: ↑↑, triplet

$J < 0$ → antiferromagnetism: ↑↓, singlet

<u>Proof</u>:

$$-\frac{1}{\hbar^2}\underline{S}_1\underline{S}_2 = -\frac{1}{\hbar^2}\frac{1}{2}\{\underbrace{(\underline{S}_1+\underline{S}_2)^2}_{\hbar^2 S(S+1)} - \underbrace{\underline{S}_1^2 - \underline{S}_2^2}_{-2\hbar^2\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}\}$$

$$= -\frac{1}{2}S(S+1) + \text{const}$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{singlet } (S=0) \\ -1 & \text{Triplet } (S=1) \end{cases} + \text{const}$$

□

Determination of $\hat{\sigma}$: first find an appropriate basis for 2-particle states:

Atomic orbitals: (all others are neglected -> high energy)

$$\left.\begin{aligned}\phi_1(\underline{x}) &= \phi_{1s}(\underline{x}-\underline{R}_1)\\ \phi_2(\underline{x}) &= \phi_{1s}(\underline{x}-\underline{R}_2)\end{aligned}\right\}\leftarrow \text{real} \qquad (15)$$

where $\phi_{1s}(\underline{x})$ is the 1s-orbital of one H-atom.

There is an overlap:

$$\alpha := \int d^3x\, \phi_1(\underline{x})\,\phi_2(\underline{x}) \neq 0 \qquad (16)$$

Wannier-basis: orthogonalize ϕ_1 and ϕ_2 by

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ \alpha & 1 \end{pmatrix} =: S \;;\; \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} := S^{-1/2} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow\dots\Rightarrow \quad \boxed{\begin{aligned}&\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}\\ &\varphi_{1/2} = \frac{1}{2\sqrt{1-\alpha^2}}\left\{\left(\sqrt{1-\alpha}\pm\sqrt{1+\alpha}\right)\phi_1 + \left(\sqrt{1-\alpha}\mp\sqrt{1+\alpha}\right)\phi_2\right\}\end{aligned}} \qquad (17)$$

$\alpha = 0 \Rightarrow \varphi_1 = \phi_1 \,,\; \varphi_2 = \phi_2$

$\alpha \neq 0 \rightsquigarrow \varphi_i$ -> more concentrated at $\underline{R}_i$

Basis for 1-particle states:

$$\left\{ |i\sigma\rangle = \varphi_i \otimes |\sigma\rangle \right\}_{\substack{i=1,2 \\ \sigma=\uparrow,\downarrow}} \qquad (18)$$

with

$$\langle \underline{x}\,\sigma\,|\,i\,\sigma'\rangle := \varphi_i(\underline{x}) \cdot \underbrace{\langle\sigma|\sigma'\rangle}_{\delta_{\sigma\sigma'}} \qquad (19)$$

Basis for 2-particle states : states determinants

$$|i\sigma, j\sigma'\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|i\sigma\rangle \otimes |j\sigma'\rangle - |j\sigma'\rangle \otimes |i\sigma\rangle\}$$

(↑ particle 1, ↑ particle 2)

$$\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\{|i\sigma, j\sigma'\rangle - |j\sigma', i\sigma\rangle\}$$

i.e. $\langle \underline{x}_1\sigma_1, \underline{x}_2\sigma_2 | \left(|i\sigma\rangle \otimes |j\sigma'\rangle\right) \cdot =$

$$= \langle \underline{x}_1\sigma_1, \underline{x}_2\sigma_2 | i\sigma, j\sigma'\rangle$$

$$= \langle \underline{x}_1\sigma_1 | i\sigma\rangle \cdot \langle \underline{x}_2\sigma_2 | j\sigma'\rangle$$

$$= \varphi_i(\underline{x}_1)\underbrace{\langle\sigma_1|\sigma\rangle}_{\delta_{\sigma_1\sigma}} \cdot \varphi_j(\underline{x}_2)\underbrace{\langle\sigma_2|\sigma'\rangle}_{\delta_{\sigma_2\sigma'}}$$

This gives 6 possible states :

↑↑	↓↓	↑↓	↓↑	↑↓ −	− ↑↓
$\|1\uparrow, 2\uparrow\rangle_-$	$\|1\downarrow, 2\downarrow\rangle_-$	$\|1\uparrow, 2\downarrow\rangle_-$	$\|1\downarrow, 2\uparrow\rangle_-$	$\|1\uparrow\downarrow, 1\rangle_-$	$\|2\uparrow\downarrow, 2\rangle_-$

(20)

Classification according to $\underline{S}^2, S_z$: $\underline{S} = \underline{S}_1 + \underline{S}_2$

$S_z = S_{z1} + S_{z2}$

$\|S_1\rangle = \uparrow\downarrow -$
$\|S_2\rangle = - \uparrow\downarrow$
$\|S_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$

Singlet states : $S=0$

$\|T_1\rangle = \uparrow\uparrow$
$\|T_{-1}\rangle = \downarrow\downarrow$
$\|T_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$

Triplet states : $S=1$ (21

Explicitly:

$$|S_1\rangle = \psi_1\psi_1 \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta-\beta\alpha)$$

$$|S_2\rangle = \psi_2\psi_2 \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta-\beta\alpha)$$

$$|S_0\rangle = \frac{1}{2}(\psi_1\alpha\psi_2\beta - \psi_2\beta\psi_1\alpha - \psi_1\beta\psi_2\alpha + \psi_2\alpha\psi_1\beta)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\psi_2+\psi_2\psi_1)\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta-\beta\alpha)$$

$$|T_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\psi_2-\psi_2\psi_1)\alpha\alpha \qquad (22)$$

$$|T_{-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\psi_2-\psi_2\psi_1)\beta\beta$$

$$|T_0\rangle = \frac{1}{2}(\psi_1\alpha\psi_2\beta - \psi_2\beta\psi_1\alpha + \psi_1\beta\psi_2\alpha - \psi_2\alpha\psi_1\beta)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\psi_2-\psi_2\psi_1)\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta+\beta\alpha)$$

(i.e. we get always $|S_{0,1,2}\rangle \equiv \psi_+\chi_-$, $|T_{0,1,-1}\rangle \equiv \psi_-\chi_+$ but the representation as slater determinants is much more elegant)

Hamilton matrix: $[H, \underline{S}^2] = [H, S_z] = 0$

$\Rightarrow$ only singlets can couple

$$\langle S_{0,1,2}|H|T_{0,1,-1}\rangle = 0$$

$$\begin{array}{c} \\ S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ T_0 \\ T_1 \\ T_{-1} \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccc} S_0 & S_1 & S_2 \end{array} \\
\left(\begin{array}{ccc|ccc}
x_1 & x_2 & x_3 & & & \\
x_4 & x_5 & x_6 & & 0 & \\
x_7 & x_8 & x_9 & & & \\
\hline
 & & & T_0 & & \\
 & 0 & & & E_T\cdot\underline{1} & \\
 & & & & &
\end{array}\right)
\end{array}
\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccc} T_0 & T_1 & T_{-1} \end{array} \\
\\ \\ \\ \\ \\ \\
\end{array}
= H \left(\begin{array}{c}\text{in subspace}\\ \text{of the}\\ \text{considered}\\ 6\text{ states}\end{array}\right) \qquad (23)$$

$\Rightarrow$ one has to diagonalize 3×3-matrix

(exactly possible, but not very instructive)

To understand the physics better, we take

$\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$ instead of $|S_0\rangle$, $|T_0\rangle$:

Leaving out $|T_\pm\rangle$ (decouple from the rest),

we then get: (→ exercise)

$$H = \begin{array}{c} \\ \uparrow\downarrow \\ \downarrow\uparrow \\ \uparrow\!\!\uparrow \\ \downarrow\!\!\downarrow \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \uparrow\!\!\uparrow & \downarrow\!\!\downarrow \end{array} \\ \left(\begin{array}{cc|cc} E_0 - V_x & -V_x & -t' & -t' \\ -V_x & E_0 & t' & t' \\ \hline -t' & t' & E_1 & V_x \\ -t' & t' & V_x & E_1 \end{array}\right) \end{array} =: \left(\begin{array}{c|c} H_{11} & H_{12} \\ \hline H_{21} & H_{22} \end{array}\right) \qquad (24)$$

$$E_0 = 2\varepsilon + V_c \,, \quad E_1 = 2\varepsilon + U \qquad (25)$$

$$\varepsilon = \langle \varphi_1 | h | \varphi_1 \rangle \,, \quad t = -\langle \varphi_1 | h | \varphi_2 \rangle \,, \quad t' = t - V_{cx} \qquad (26)$$

$$U = \langle \varphi_1\varphi_1 | v_{12} | \varphi_1\varphi_1 \rangle = \int d^3x_1 d^3x_2 \, \rho_1(\underline{x}_1)\rho_1(\underline{x}_2) v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \qquad (27)$$

$$V_c = \langle \varphi_1\varphi_2 | v_{12} | \varphi_1\varphi_2 \rangle = \int d^3x_1 d^3x_2 \, \rho_1(\underline{x}_1)\rho_2(\underline{x}_2) v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \qquad (28)$$

$$V_x = \langle \varphi_1\varphi_2 | v_{12} | \varphi_2\varphi_1 \rangle = \int d^3x_1 d^3x_2 \, \rho_x(\underline{x}_1)\rho_x(\underline{x}_2) v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \qquad (29)$$

$$V_{cx} = \langle \varphi_1\varphi_1 | v_{12} | \varphi_1\varphi_2 \rangle = \int d^3x_1 d^3x_2 \, \rho_1(\underline{x}_1)\rho_x(\underline{x}_2) v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \qquad (30)$$

$$\rho_i(\underline{x}) = \varphi_i(\underline{x})^2 \,, \quad \rho_x(\underline{x}) = \varphi_1(\underline{x})\varphi_2(\underline{x}) \qquad (31)$$

ε → on-site energy

t → hopping, $t' = t - V_{cx}$ → effective hopping

U → on-site Coulomb energy

V_c → nearest neighbor Coulomb interaction

V_x → exchange interaction

V_{cx} → correlated hopping

ρ_i → charge density, ρ_x → exchange density

One can prove (→ exercises)

$$\boxed{\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon_{1s} - \frac{1}{1-\alpha^2}\int d^3x \left\{ \varrho_1^{at}(x) - \alpha\, \varrho_x^{at}(x)\right\} v(x-R_2) \\ t &= \frac{1}{1-\alpha^2}\int d^3x \left\{ \varrho_x^{at}(x) - \alpha\, \varrho_1^{at}(x)\right\} v(x-R_2) \end{aligned}} \qquad (32)$$

with $\varrho_1^{at}(x) = \phi_1(x)^2$, $\varrho_x^{at}(x) = \phi_1(x)\phi_2(x)$

$$\boxed{V_x = \int d^3k \, |\tilde{\varrho}_x(k)|^2 v_k > 0} \qquad v_k = \frac{4\pi e^2}{k^2} \qquad (33)$$

with $\tilde{\varrho}_x(k) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3x \, e^{-ikx}\, \varrho_x(x)$.

Perturbation theory:

Consider the case of well-separated atoms:

$$\boxed{E_1 - E_0 = U - V_c =: U' >> t'} \qquad (34)$$

$\Rightarrow$ $\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$ → low-lying states → "space 1"

$\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$ → high-lying states → "space 2"

Using "space 2" as virtual states, we get an effective Hamiltonian on "space 1"; → (1.1.10)

$$H_{11}^{eff}(E) = H_{11} + H_{12}\frac{1}{E - H_{22}}H_{21} \cong H_{11} + H_{12}\frac{1}{E_0 - E_1}H_{21} + O(t'^3)$$

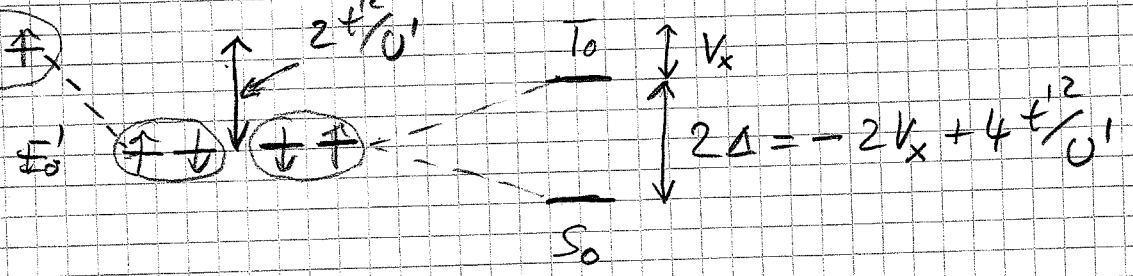
$$H_m^{eff} \simeq \begin{pmatrix} E_0 & -V_x \\ -V_x & E_0 \end{pmatrix} - \frac{t'^2}{U'} \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}}$$

$$= \begin{pmatrix} E_0 - 2\frac{t'^2}{U'} & -V_x + 2\frac{t'^2}{U'} \\ -V_x + 2\frac{t'^2}{U'} & E_0 - 2\frac{t'^2}{U'} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} E_0' & \Delta \\ \Delta & E_0' \end{pmatrix}$$

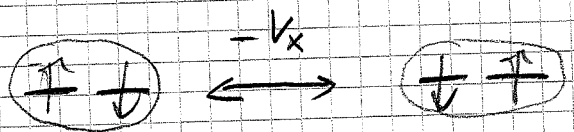
with $E_0' = E_0 - 2\frac{t'^2}{U'}$

$\Delta = -V_x + 2\frac{t'^2}{U'}$

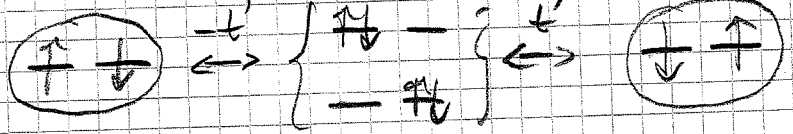
This gives rise to the following energy shifts:



or in terms of processes:

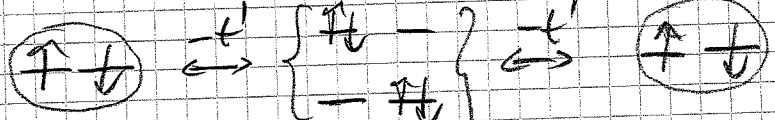


$-V_x$ direct exchange $\Delta_{direct} = -V_x$



$-t'$ t' indirect exchange

$\Delta_{indirect} = 2t'^2/U'$



$-t'$ $-t'$ energy shift

$E_0' = E_0 - 2t'^2/U'$

So we get the following result for the energies of S_0 (singlet) and T_0 (triplet) in perturbation theory:

$$E_{S_0} = E_0 - 2t'^2/U' - \Delta = E_0 + V_x - 4t'^2/U'$$

$$E_{T_0} = E_0 - 2t'^2/U' + \Delta = E_0 - V_x$$

(25) $\Rightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned} E_{S_0} &= 2\varepsilon + V_c + V_x - 4t'^2/U' \\ E_{T_0} &= 2\varepsilon + V_c - V_x \end{aligned}} \qquad (35)$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{J = E_{S_0} - E_{T_0} = 2V_x - 4t'^2/U'} \qquad (36)$$

$2V_x$: direct exchange, ferromagnetic

$-4t'^2/U'$: indirect exchange, antiferromagnetic

Physical origin of magnetic phenomena:

$V_x \rightarrow$ ferromagnetism

$\rightarrow$ parallel spins minimize Coulomb repulsion since Pauli-principle prohibits particles with same spin to be at the same place

(Compare with Hund's rule in atomic physics)

$-t'^2/U' \rightarrow$ antiferromagnetism

$\rightarrow$ for antiparallel spins hopping processes are possible which delocalizes the electrons and minimizes kinetic energy (larger wavelength $\Rightarrow$ smaller kinetic energy)

Often the effect of V_x is small as since

$$V_x = \int d^3x_1 d^3x_2 \; \rho_x(\underline{x}_1)\, \rho_x(\underline{x}_2)\, v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2)$$

$\rho_x(\underline{x}) = \psi_1(\underline{x})\,\psi_2(\underline{x})$ → can be positive or negative
⇒ many terms under the integral cancel each other

Only if the atoms are very close to each other, V_x can dominate (→ Hund's rule in atoms)

Typical orders:

$$\begin{aligned} V_x &\sim 0.1\,eV \\ V_c &\sim 1\,eV \\ U &\sim 10\,eV \end{aligned} \qquad (37)$$

Chemical bond

The mechanisms leading to magnetic interactions are often not strong enough to lead to a chemical bond. For a chemical bond to occur, the atoms have to be quite close together, so that the electrons can profit from the attraction to the other nucleus. In this regime perturbation theory in t^2 is not justified.

To see this let us consider the exact ground state energy when one diagonalizes the matrix (23) exactly! (including the term $U(R_1 - R_2)$)

$$E_a = \underbrace{2\varepsilon + V_c + v(R_1 - R_2) + V_x + \frac{U'}{2} - \sqrt{\left(\frac{U'}{2}\right)^2 + 4t'^2}}_{=: E_0 = 2\varepsilon_{1s} + \text{electrostatic terms} + O(\alpha)} \qquad (38)$$

① $\underline{|t'| \ll U'}$: $E_a \cong E_0 + \underbrace{V_x - 4t'^2/U'}_{\text{small effect}}$

② $\underline{|t'| \gg U'}$: $E_a \cong E_0 + V_x \underbrace{- 2|t'|}_{\text{large effect}}$

→ covalent bonds

③ $\underline{U' < 0}$: ~~H_2~~ — has smallest energy

→ ionic bond (purely electrostatic)

→ for H_2 not possible, but for bonds between different atoms

To treat the case $|t'| \gg U'$ also analytically, we choose a different basis for the one-particle states:

→ Hund-Mulliken method

or MO-Method (MO = molecular orbital)

Molecular orbitals :

$\alpha = \int d^3x \, \phi_1(x) \phi_2(x)$ large $\Rightarrow$ $U \sim V_c \sim t$

$\Rightarrow$ electrons strongly delocalized

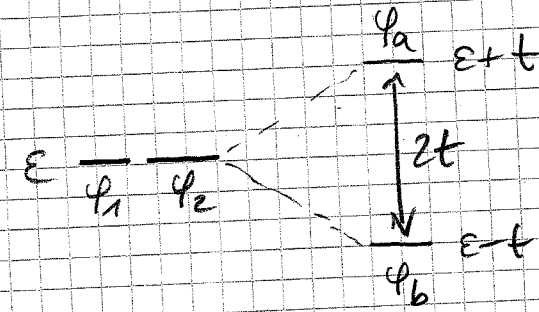
$\Rightarrow$ we choose 1-particle states as eigenfunctions of $h = h(x,p) = \frac{p^2}{2m} - U(x - R_1) - U(x - R_2)$

In φ_1, φ_2 – basis we have (see (26))

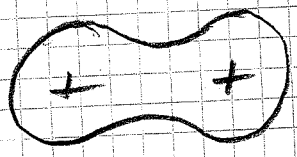
$$h = \begin{pmatrix} \varepsilon & -t \\ -t & \varepsilon \end{pmatrix} \Rightarrow \boxed{\begin{aligned} h\,\varphi_{a/b} &= \varepsilon_{a/b}\,\varphi_{a/b} \\ \varphi_{a/b} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 \mp \varphi_2) \\ \varepsilon_{a/b} &= \varepsilon \pm t \end{aligned}} \quad (39)$$

$\varphi_{a/b}$ -> molecular basis or <u>Block basis</u>

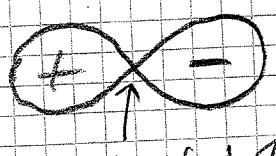
For $t > 0$, we have:



$\varphi_b \sim \phi_1 + \phi_2$ binding MO



$\varphi_a \sim \phi_1 - \phi_2$ antibinding MO



zero probability

A good approximation for the ground state is then:

— φ_a

↑↓ φ_b

$$\boxed{|\Psi_a\rangle \cong |\varphi_b\uparrow, \varphi_b\downarrow\rangle_-} \quad (40)$$

→ singlet state

energy gain mainly by hopping t

$$|\Psi_a\rangle = \frac{1}{2}\,|\varphi_1+\varphi_2\uparrow,\ \varphi_1+\varphi_2\downarrow\rangle_-$$

$$= \frac{1}{2}\{|\varphi_1\uparrow,\varphi_1\downarrow\rangle_- + |\varphi_2\uparrow,\varphi_2\downarrow\rangle_- + |\varphi_1\uparrow,\varphi_2\downarrow\rangle_- + \underbrace{|\varphi_2\uparrow,\varphi_1\downarrow\rangle_-}_{=\,-|\varphi_1\downarrow,\varphi_2\uparrow\rangle_-}\}$$

$$\overset{(21)}{=} \frac{1}{2}\{|S_1\rangle + |S_2\rangle + \sqrt{2}\,|S_0\rangle\}$$

→ linear combination of all singlet states in Wannier basis

Energy: $E_a = \langle\Psi_a|\underset{\parallel}{H}|\Psi_a\rangle + v(\underline{R}_1-\underline{R}_2)$

$h_1+h_2+v_{12}$

$$E_a = -\langle\varphi_b\uparrow,\varphi_b\downarrow|\,h_1+h_2+v_{12}\,|\varphi_b\uparrow,\varphi_b\downarrow\rangle_- + v(\underline{R}_1-\underline{R}_2)$$

$$= 2(\varepsilon-t) + \bar{V}_c + v(\underline{R}_1-\underline{R}_2)$$

$$\bar{V}_c = \langle\varphi_b\varphi_b|v_{12}|\varphi_b\varphi_b\rangle = \int d^3x_1\, d^3x_2\, \varrho_b(\underline{x}_1)\,\varrho_b(\underline{x}_2)\,v(\underline{x}_1-\underline{x}_2)$$

$$\varrho_b(\underline{x}) = \varphi_b(\underline{x})^2 = \frac{1}{2}(\varphi_1+\varphi_2)(\underline{x})^2 = \frac{1}{2}(\varrho_1+\varrho_2) + \varrho_x$$

$$\Rightarrow \quad \bar{V}_c = V_c + \frac{1}{2}U' + V_x + 2V_{cx}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_a = 2\varepsilon + V_c + v(\underline{R}_1 - \underline{R}_2) + V_x + \frac{U'}{2} - 2t'} \quad (41)$$

This coincides with the exact result (38) in the regime $t' \gg U'$.

Kapitel 3
N-Teilchen Quantensysteme

Betrachte:

- Quantensystem mit N Teilchen
- 1-Teilchensorte (Boson oder Fermion)
  $\Rightarrow$ ununterscheidbare Teilchen $\Rightarrow$
  - symmetrische Wellenfunktion (Bosonen)
  - anti-symmetrische Wellenfunktion (Fermionen)
- Teilchenzahl erhalten (d.h. Wechselwirkungen sollen Teilchenzahl und Teilchenart nicht ändern.)
- ansonsten beliebige Wechselwirkung (2-Teilchen, 3-Teilchen,...)

3.1 Hamiltonian

$$H = \underbrace{\sum_{i=1}^{N} h_i}_{\substack{\text{1-Teilchen}\\ \text{Terme}}} + \underbrace{\sum_{1\leqslant i<j\leqslant N} v_{ij}}_{\substack{\text{2-Teilchen}\\ \text{Terme}}} + \underbrace{\sum_{1\leqslant i<j<k\leqslant N} v_{ijk}}_{\substack{\text{3-Teilchen}\\ \text{Terme}}} + \ldots \tag{3.1}$$

$v_{i_1\ldots i_r} \rightarrow$ hängt von der Koordinaten (Ort, Impuls, Spin,...) der Teilchen $i_1,\ldots,i_r$ ab.

Beispiel 3.1.

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{1\leqslant i<j\leqslant N} v(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \tag{3.2}$$

d.h. $h_i = \mathbf{p}_i^2/2m$, $v_{ij} = v(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$.

$v_{i_1\ldots i_r}$ soll symmetrisch sein, d.h.

$$v_{i_1\ldots i_r} = v_{i_{P(1)}\ldots i_{P(r)}} \tag{3.3}$$

für eine beliebige Permutation P. Dies ist klar, da eine Vertauschung von identische Teilchen keine Änderung der Energie bedeuten darf.

Für Gl. (3.2) bedeutet dies

$$v_{12} = v(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = v_{21} = v(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)$$

bzw.

$$v(\mathbf{x}) = v(-\mathbf{x}) \quad \textbf{actio=reactio}$$

r-Teilchen Term mit $r \geqslant 3$ kommt in einen mikroskopische Hamiltonian nicht vor. Kann aber effektiv erzeugt werden

3.2 Zustandsraum

Ein VONS für den N-Teilchen-Raum erhält man als direktes Produkt von 1-Teilche-Zuständen

$$\boxed{|\alpha_1\ldots\alpha_N\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \ldots \otimes |\alpha_N\rangle} \tag{3.4}$$

mit

$$\{|\alpha\rangle\}_\alpha = \text{VONS für 1 Teilchen}$$

und

$$\langle\alpha_1...\alpha_N|\beta_1...\beta_N\rangle = \langle\alpha_1|\beta_1\rangle...\langle\alpha_N|\beta_N\rangle$$

Beispiel 3.2.

- $\alpha = \mathbf{x}\sigma$: Ort-Spin-Darstellung
- $\alpha = \mathbf{p}\sigma$: Impuls-Spin-Darstellung

Nehme an (Verallgemeinerung später): α **diskret**

$$\{|\alpha\rangle\} \text{ VONS } \Rightarrow \boxed{\begin{array}{rcll} \langle\alpha|\alpha'\rangle & = & \delta_{\alpha\alpha'} & \text{Orthonormierung} \\ \sum\limits_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| & = & 1 & \text{Vollständigkeit} \end{array}} \tag{3.5}$$

$|\alpha_1...\alpha_N\rangle$ beschreibt unterscheidbare Teilchen:

- Teilchen 1 $\rightarrow$ Zustand α_1
- Teilchen 2 $\rightarrow$ Zustand α_2
- ...
- Teilchen N $\rightarrow$ Zustand α_N

3.3 Ununterscheidbare Teilchen

Zustände müssen (anti-)symmetrisiert werden :

$$\boxed{|\alpha_1...\alpha_N\rangle_\sigma = \left(\frac{N!}{\prod_l n_l!}\right)^{\frac{1}{2}} S^\sigma |\alpha_1...\alpha_N\rangle} \tag{3.6}$$

mit

$$\boxed{\sigma = \begin{cases} + & \text{Bosonen} \\ - & \text{Fermionen} \end{cases}} \tag{3.7}$$

$$\boxed{S^\sigma|\alpha_1...\alpha_N\rangle = \frac{1}{N!}\sum_P \sigma^P |\alpha_{P(1)}...\alpha_{P(N)}\rangle} \tag{3.8}$$

- P = Permutation von $1,...,N$
- $\sigma^P = -1$ für ungerade Permutation **und** Fermionen
- $n_l =$ Zahl der gleichen α's der Sorte l:
  - Fermionen $n_l = 0, 1$
  - Bosonen $n_l = 0, 1, 2, ...$

Beispiel 3.3.

$$|\underbrace{\alpha_1\alpha_1\alpha_1}_{n_1=3}\ \underbrace{\alpha_2\alpha_2}_{n_2=3}\ \underbrace{\alpha_3\alpha_3\alpha_3\alpha_3}_{n_3=4}\rangle$$

Es gilt:

$$\begin{array}{rcl} (S^\sigma)^2 & = & S^\sigma \quad (\rightarrow S^\sigma \text{ Projektor}) \\ (S^\sigma)^\dagger & = & S^\sigma \quad \text{(selbstadjungiert)} \end{array} \tag{3.9}$$

$$\boxed{\{|\alpha_1...\alpha_N\rangle_\sigma\}_{\alpha_1\leqslant\alpha_2\leqslant...\leqslant\alpha_N} \begin{array}{c} \text{bilden VONS für alle} \\ \text{(anti-)symmetrische Wellenfunktionen} \end{array}} \tag{3.10}$$

$\alpha_1 \leqslant \alpha_2 \leqslant ... \leqslant \alpha_N \rightarrow$ irgendeine Reihenfolge der α's festlegen.

3.4 Besetzungszahl-Darstellung

Für diskrete Werte von α ist es (für Bosonen) möglich, dass die α's mehrfach vorkommen können. Um dies zu vereinfachen, verwendet man genau die Besetzungszahl-Darstellung:

$$\boxed{|n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} n_{\alpha_3} ...\rangle \equiv |\alpha_1 ... \alpha_1\, \alpha_2 ... \alpha_2\, \alpha_3 ... \alpha_3 ...\rangle_\sigma} \tag{3.11}$$

mit

$$\boxed{\alpha_1 < \alpha_2 < \alpha_3 < ..., \quad n_{\alpha_i} = \begin{cases} 0,1,2,... & \text{Bosonen} \\ 0,1 & \text{Fermionen} \end{cases}}$$

Beachte, dass es für Fermionen wichtig ist, eine bestimmte Reihenfolge der α's in Gl. (3.11) festzulegen. Da die Teilchenzahl fest ist, gilt

$$N = \sum_i n_{\alpha_i}$$

Formal definiert man aber einen Zustandsraum wo alle Teilchenzahlen zugelassen werden (da die unten definierten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die Teilchenzahl ändern):

$$\boxed{\begin{aligned} \text{Fock-Raum} &\equiv \{|n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ...\rangle\}_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, ...} \\ N &= \sum_i n_{\alpha_i} \textit{ beliebig} \end{aligned}} \tag{3.12}$$

Skalarprodukte zwischen Zuständen aus unterschiedliche Teilchensorten werden dabei per Definition null gesetzt.

Definition:

$$\boxed{\text{Vakuum} = |0\rangle \equiv \text{Zustand wo alle } n_\alpha = 0}$$

3.5 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (=Feldoperatoren)

In Analogie zu den harmonische Oszillator definieren wir nun die folgenden Operatoren

- Bosonen

$$\boxed{\begin{aligned} a^\dagger_{\alpha_i} |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ... n_{\alpha_i} ...\rangle &= \sqrt{1+n_{\alpha_i}}\, |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ... n_{\alpha_i} + 1 ...\rangle \\ a_{\alpha_i} |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ... n_{\alpha_i} ...\rangle &= \sqrt{n_{\alpha_i}}\, |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ... n_{\alpha_i} - 1 ...\rangle \end{aligned}} \tag{3.13}$$

  Merkregel: für $a^\dagger_\alpha, a_\alpha$ immer das grössere nehmen: $\sqrt{1+n_{\alpha_i}}, \sqrt{n_{\alpha_i}}$.

- Fermionen

$$\boxed{\begin{aligned} a^\dagger_{\alpha_i} |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ... n_{\alpha_i} ...\rangle &= (-1)^{n_{\alpha_1}+n_{\alpha_2}+...+n_{\alpha_{i-1}}} |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ... n_{\alpha_i} + 1 ...\rangle \\ a_{\alpha_i} |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ... n_{\alpha_i} ...\rangle &= (-1)^{n_{\alpha_1}+n_{\alpha_2}+...+n_{\alpha_{i-1}}} |n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} ... n_{\alpha_i} - 1 ...\rangle \end{aligned}} \tag{3.14}$$

  Vorzeichen! als null definiert, wenn $n_{\alpha_i}+1>1$, $n_{\alpha_i}-1<0$

  Beispiel 3.4. für Fermionen

$$\begin{aligned} a^\dagger_\alpha |110_\alpha 0...\rangle &= |111_\alpha 0...\rangle \\ a^\dagger_\alpha |010_\alpha 0...\rangle &= -|011_\alpha 0...\rangle \end{aligned}$$

In der ursprüngliche Darstellung Gl. (3.6) gilt offensichtlich für Fermionen und Bosonen:

$$\begin{aligned} a^\dagger_\alpha |\alpha_1 ... \alpha_N\rangle_\sigma &= \sqrt{1+\sigma n_\alpha}\, |\alpha \alpha_1 ... \alpha_N\rangle_\sigma \\ a_\alpha |\alpha \underbrace{\alpha_1 ... \alpha_N}\rangle_\sigma &= \sqrt{n_\alpha}\, |\alpha_1 ... \alpha_N\rangle_\sigma \end{aligned} \tag{3.15}$$

(alle $\alpha_i \neq \alpha$ für Fermionen, sonst null)

Merkregel: mit n_α= Zahl der Teilchen im Zustand α auf der **linken** Seite von Gl. (3.15).

Mit

$$\boxed{\begin{array}{rcl}[A,B]_+ \equiv \{A,B\} &=& AB+BA \text{ Antikommutator}\\ [A,B]_- \equiv [A,B] &=& AB-BA \text{ Kommutator}\end{array}} \tag{3.16}$$

folgt:

$$\boxed{(a_\alpha)^\dagger = a_\alpha^\dagger} \tag{3.17}$$

$$\boxed{[a_\alpha, a_{\alpha'}]_{-\sigma} = [a_\alpha^\dagger, a_{\alpha'}^\dagger]_{-\sigma} = 0 \ , \ [a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger]_{-\sigma} = \delta_{\alpha\alpha'}} \tag{3.18}$$

d.h. Bosonen erfüllen Vertauschungsrelationen und Fermionen Antivertauschungsrelationen.

Beweis. Wir beschränken uns beim Beweis auf dem Unterraum $|n_\alpha\rangle$ bzw. $|n_\alpha n_{\alpha'}\rangle$. Für allg. Zustände kommen bei Fermionen nur triviale Vorzeichen dazu, die sich auf beide Seiten immer wegheben. Für Fermionen und Bosonen gilt:

$$\left.\begin{array}{rcll}\langle n_\alpha - 1|a_\alpha|n_\alpha\rangle &=& \sqrt{n_\alpha}\langle n_\alpha - 1|n_\alpha - 1\rangle &= \sqrt{n_\alpha}\\ \langle a_\alpha^\dagger(n_\alpha - 1)|n_\alpha\rangle &=& \sqrt{n_\alpha}\langle n_\alpha|n_\alpha\rangle &= \sqrt{n_\alpha}\end{array}\right\} \Rightarrow (a_\alpha)^\dagger = a_\alpha^\dagger$$

$\alpha \neq \alpha'$:

$$\begin{array}{rcll}a_\alpha a_{\alpha'}|n_\alpha n_{\alpha'}\rangle &=& \sigma^{n_\alpha}\sqrt{n_{\alpha'}}a_\alpha|n_\alpha n_{\alpha'}-1\rangle &= \sigma^{n_\alpha}\sqrt{n_{\alpha'}}\sqrt{n_\alpha}|n_\alpha - 1 n_{\alpha'}-1\rangle\\ a_{\alpha'}a_\alpha|n_\alpha n_{\alpha'}\rangle &=& \sqrt{n_\alpha}a_{\alpha'}|n_\alpha - 1 n_{\alpha'}\rangle &= \sigma^{n_\alpha - 1}\sqrt{n_\alpha}\sqrt{n_{\alpha'}}|n_\alpha - 1 n_{\alpha'}-1\rangle\end{array} \quad (*)$$

$$\Rightarrow a_\alpha a_{\alpha'} = \sigma a_{\alpha'}a_\alpha \text{ oder } [a_\alpha, a_{\alpha'}]_{-\sigma} = 0 \text{ für } \alpha \neq \alpha'$$

$\alpha = \alpha'$:

$$\left\{\begin{array}{lll}\text{Bosonen} & [a_\alpha, a_{\alpha'}]_- = 0 & \text{trivial}\\ \text{Fermionen} & [a_\alpha, a_\alpha]_+ = 2(a_\alpha)^2 = 0 & \text{2 Fermionen können nicht}\\ & & \text{im gleichen Zustand sein.}\end{array}\right.$$

$$[a_\alpha, a_{\alpha'}]_{-\sigma} = 0 \quad \Rightarrow \quad [a_\alpha^\dagger, a_{\alpha'}^\dagger]_{-\sigma} = 0$$

$(*)$ Analog für $a_\alpha a_{\alpha'}^\dagger \Rightarrow [a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger]_{-\sigma} = 0$ für $\alpha \neq \alpha'$.

$\alpha = \alpha'$: Bosonen

$$\left.\begin{array}{rcll}a_\alpha a_\alpha^\dagger|n_\alpha\rangle &=& \sqrt{1+n_\alpha}a_\alpha|n_\alpha+1\rangle &= (1+n_\alpha)|n_\alpha\rangle\\ a_\alpha^\dagger a_\alpha|n_\alpha\rangle &=& \sqrt{n_\alpha}a_\alpha^\dagger|n_\alpha - 1\rangle &= n_\alpha|n_\alpha\rangle\end{array}\right\} \Rightarrow a_\alpha a_\alpha^\dagger - a_\alpha^\dagger a_\alpha = 1$$

Fermionen

$$\left.\begin{array}{rcl}a_\alpha a_\alpha^\dagger|0\rangle &=& a_\alpha|1\rangle = |0\rangle\\ a_\alpha^\dagger a_\alpha|0\rangle &=& 0\end{array}\right. \quad \left.\begin{array}{rcl}a_\alpha a_\alpha^\dagger|1\rangle &=& 0\\ a_\alpha^\dagger a_\alpha|1\rangle &=& a_\alpha^\dagger|0\rangle = |1\rangle\end{array}\right\} \Rightarrow a_\alpha a_\alpha^\dagger + a_\alpha^\dagger a_\alpha = 1 \qquad \square$$

Beachte, dass das Vorzeichen für Fermionen nur in $(*)$ vorgekommen ist. Hätten wir es in der Definition Gl. (3.14) nicht berücksichtigt, so wäre für Fermionen $[a_\alpha, a_{\alpha'}]_- = 0$, $[a_\alpha^\dagger, a_{\alpha'}^\dagger]_- = 0$, $[a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger]_- = 0$ $(\alpha = \alpha')$, aber, $[a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger]_+ = 0$ herausgekommen. Dies wäre sehr unsystematisch gewesen.

Wie üblich definieren wir weiterhin den

$$\boxed{\hat{n}_\alpha \equiv a_\alpha^\dagger a_\alpha} \quad \textbf{Besetzungszahl operator} \tag{3.19}$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{n}_\alpha|\{n_\alpha\}\rangle = n_\alpha|\{n_\alpha\}\rangle} \tag{3.20}$$

Beweis.

$$\begin{array}{lrcl}\text{Bosonen} & a_\alpha^\dagger a_\alpha|n_\alpha\rangle &=& \sqrt{n_\alpha}a_\alpha^\dagger|n_\alpha - 1\rangle = n_\alpha|n_\alpha\rangle\\ \text{Fermionen} & a_\alpha^\dagger a_\alpha|1\rangle &=& a_\alpha^\dagger|0\rangle = |1\rangle\\ & a_\alpha^\dagger a_\alpha|0\rangle &=& 0\end{array} \qquad \square$$

Zur Berechnung diverser Kommutatoren sind die folgenden Produktregeln sehr nützlich:

$$\boxed{\begin{array}{rcl}[A,BC]_- &=& [A,B]_-C+B[A,C]_- \\ &=& [A,B]_+C-B[A,C]_+ \\ [A,BC]_+ &=& [A,B]_+C-B[A,C]_- \\ &=& [A,B]_-C+B[A,C]_+\end{array}} \tag{3.21}$$

Es folgt daraus, z.B. sofort

$$\boxed{\begin{array}{rcl}[a_\alpha,\hat{n}_{\alpha'}]_- &=& \delta_{\alpha\alpha'}a_\alpha \\ [a_\alpha^\dagger,\hat{n}_{\alpha'}]_- &=& -\delta_{\alpha\alpha'}a_\alpha^\dagger\end{array}} \tag{3.22}$$

Beweis.

$$[a_\alpha,a_{\alpha'}^\dagger a_{\alpha'}]_- = [a_\alpha,a_{\alpha'}^\dagger]_{-\sigma}a_{\alpha'}+\sigma a_{\alpha'}^\dagger[a_\alpha,a_{\alpha'}]_{-\sigma} = \delta_{\alpha\alpha'}a_\alpha$$

□

Da die Erzeugungsoperatoren jeweils ein Teilchen hinzufügen, lassen sich durch mehrfache Anwendung von $a_\alpha^\dagger$ auf das Vakuum alle Zustände des Fock-Raumes konstruieren. In diesem Zshg. ist die folgende Identität sehr nützlich:

$$\boxed{a_{\alpha_1}^\dagger\ldots a_{\alpha_N}^\dagger|0\rangle = \sqrt{N!}\,S^\sigma \underbrace{|\alpha_1\ldots\alpha_N\rangle}_{\substack{\text{Produkt-}\\ \text{Zustand!}}}} \tag{3.23}$$

die für beliebige $\alpha_1\ldots\alpha_N$ und sowohl für Bosonen, als auch Fermionen gilt.

Beweis. Sei zunächst $\alpha_1 \leqslant \alpha_2 \leqslant \ldots \leqslant \alpha_N$:

$$a_{\alpha_1}^\dagger\ldots a_{\alpha_N}^\dagger|0\rangle = \sqrt{\prod_l n_l!}\,|\alpha_1\ldots\alpha_N\rangle_\sigma = \sqrt{\prod_l n_l!}\,\sqrt{\frac{N!}{\prod_l n_l!}}\,S^\sigma|\alpha_1\ldots\alpha_N\rangle = \sqrt{N!}S^\sigma|\alpha_1\ldots\alpha_N\rangle$$

Vertauscht man links und rechts α's, so bleibt alles gleich, da eventuelle Vorzeichen für Fermionen sich wegheben. □

Gl. (3.23) kann man auch als *Definition*sgleichung für $a_\alpha^\dagger$ ansehen, indem man suksessive von Vakuum beginnend die Wirkung von $a_\alpha^\dagger$ definiert.

3.6 Basiswechsel

Ausgehend von einer 1-Teilchen-VONS-Basis $\{|\alpha\rangle_\alpha\}$ haben wir a_α, $a_\alpha^\dagger$ definiert. Sei nun $\{|r\rangle\}_r$ ein anderes 1-Teilchen-VONS und b_r, $b_r^\dagger$ die zugehörigen Vernichter und Erzeuger. Wie hängen a_α, und b_r zusammen? Es gilt:

$$\boxed{\begin{array}{rclcrcl}b_r &=& \sum_\alpha \langle r|\alpha\rangle a_\alpha & & a_\alpha &=& \sum_r \langle\alpha|r\rangle b_r \\ b_r^\dagger &=& \sum_\alpha a_\alpha^\dagger\langle\alpha|r\rangle & & a_\alpha^\dagger &=& \sum_r b_r^\dagger\langle r|\alpha\rangle\end{array}} \tag{3.24}$$

Beweis. Sei

$$b_r^\dagger \equiv \sum_\alpha a_\alpha^\dagger\langle\alpha|r\rangle$$

mit dieser Definition beweisen wir Gl. (3.23) mit $a \to b \Rightarrow$ Behauptung:

$$\begin{aligned} b_{r_1}^\dagger\ldots b_{r_N}^\dagger|0\rangle &= \sum_{\alpha_1\ldots\alpha_N} \underbrace{\langle\alpha_1|r_1\rangle\ldots\langle\alpha_N|r_N\rangle}_{\langle\alpha_1\ldots\alpha_N|r_1\ldots r_N\rangle} \underbrace{a_{\alpha_1}^\dagger\ldots a_{\alpha_N}^\dagger|0\rangle}_{\overset{(3.23)}{=}\sqrt{N!}S^\sigma|\alpha_1\ldots\alpha_N\rangle} \\ &= \sqrt{N!}S^\sigma \sum_{\alpha_1\ldots\alpha_N} |\alpha_1\ldots\alpha_N\rangle\langle\alpha_1\ldots\alpha_N|r_1\ldots r_N\rangle \\ &= \sqrt{N!}S^\sigma|r_1\ldots r_N\rangle \end{aligned}$$

□

Merkregel: wende $b_r^\dagger$ auf $|0\rangle$ an:

$$b_r^\dagger|0\rangle = |r\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|r\rangle = \left(\sum_\alpha a_\alpha^\dagger \langle\alpha|r\rangle\right)|0\rangle$$

Mit Gl. (3.24) lassen sich auch leicht Erzeuger und Vernichter definieren falls α kontinuierlich ist, z.B.

$$\underset{\text{diskret/periodische RB}}{|\mathbf{k}\sigma\rangle} \longrightarrow \underset{\text{kontinuierlich } 0\leqslant x_i\leqslant L}{|\mathbf{x}\sigma\rangle}$$

Seien $a_{\mathbf{k}\sigma}$, $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ die Operatoren zu $\{|\mathbf{k}\sigma\rangle\}_{k\sigma}$. Gemäss Gl. (3.24) definieren wir dann

$$\boxed{\begin{aligned}\hat\psi_\sigma(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k}} \langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle a_{\mathbf{k}\sigma} \\ \hat\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \langle\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle\end{aligned}} \qquad \langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tag{3.25}$$

Es folgt aus Gl. (3.18) mit $\varepsilon = \pm$ für Bosonen / Fermionen:

$$\boxed{\begin{aligned}\left[\hat\psi_\sigma(\mathbf{x}), \hat\psi_{\sigma'}(\mathbf{x}')\right]_{-\varepsilon} &= \left[\hat\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{x}), \hat\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}')\right]_{-\varepsilon} = 0 \\ \left[\hat\psi_\sigma(\mathbf{x}), \hat\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}')\right]_{-\varepsilon} &= \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta_{\sigma\sigma'}\end{aligned}} \tag{3.26}$$

Beweis. $[\psi,\psi]_{-\varepsilon} = [\psi^\dagger,\psi^\dagger]_{-\varepsilon} = 0$ ist klar

$$\begin{aligned}\left[\hat\psi_\sigma(\mathbf{x}), \hat\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}')\right]_{-\varepsilon} &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{x}'\rangle \left[a_{\mathbf{k}\sigma}, a_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\right]_{-\varepsilon} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{x}'\rangle\delta_{\sigma\sigma'} \qquad = \langle\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle\delta_{\sigma\sigma'} = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta_{\sigma\sigma'}\end{aligned}$$

□

Man beachte, dass $\hat\psi_\sigma(\mathbf{x})$ ein **Operator** im **Vielteilchen-Raum** ist, und keine 1-Teilchen-Wellenfunktion! Daher haben wir zur Vermeidung von Missverständnissen das Operatorsymbol $\hat{}$ ergänzt, was wir im folgenden weglassen werden.

Die Definition Gl. (3.24) ist konsistent mit den Definition Gl. (3.13), (3.14), (3.15) auch für kontinuierliche Indizes. Dabei ist zu berücksichtigen, dass in Zuständen

$$|\alpha_1 ... \alpha_N\rangle_\sigma$$

der Fall gleicher α's nicht relevant ist wenn die α's kontinuierlich sind, d.h. man hat nur $n_\alpha = 0, 1$ zu berücksichtigen (auch für Bosonen).

Man erhält für **kontinuierliche α**:

$$\boxed{\begin{aligned}a_\alpha^\dagger|\alpha_1...\alpha_N\rangle_\sigma &= |\alpha\alpha_1...\alpha_N\rangle_\sigma \\ a_\alpha|\alpha\alpha_1...\alpha_N\rangle_\sigma &= |\alpha_1...\alpha_N\rangle_\sigma\end{aligned}}$$

mit $\alpha, \alpha_1, ..., \alpha_N$ alle verschieden. Dies ist konsistent mit Gl. (3.25) da für $\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_N$ alle verschieden (Spin weggelassen):

$$\begin{aligned}\psi^\dagger(\mathbf{x})|\mathbf{x}_1...\mathbf{x}_N\rangle_\sigma &= \psi^\dagger(\mathbf{x})\sqrt{N!}S^\sigma|\mathbf{x}_1...\mathbf{x}_N\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1...\mathbf{k}_N} \langle\mathbf{k}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{k}_1|\mathbf{x}\rangle...\langle\mathbf{k}_N|\mathbf{x}_N\rangle\, a_{\mathbf{k}}^\dagger \underbrace{\sqrt{N!}S^\sigma|\mathbf{k}_1...\mathbf{k}_N\rangle}_{\overset{(3.23)}{=} a_{\mathbf{k}_1}^\dagger...a_{\mathbf{k}_N}^\dagger|0\rangle} \\ &\qquad \underbrace{\qquad\qquad}_{\overset{(3.23)}{=}\sqrt{(N+1)!}S^\sigma|\mathbf{k}\mathbf{k}_1...\mathbf{k}_N\rangle} \\ &= \sqrt{N+1!}S^\sigma|\mathbf{x}\mathbf{x}_1...\mathbf{x}_N\rangle \overset{(3.6)}{=} |\mathbf{x}\mathbf{x}_1...\mathbf{x}_N\rangle_\sigma\end{aligned}$$

Man sieht also, dass $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{x})$ physikalisch *ein Teilchen am Ort x mit Spin σ erzeugt!*

3.7 Darstellung von Operatoren

Wir kommen nun zur wichtigsten Anwendung, nämlich der Darstellung von beliebigen r-Teilchen-Operatoren mit a_α, $a_\alpha^\dagger$. Im Fock-Raum (d.h. N beliebig) gilt

$$\boxed{\sum_{i_1<\ldots<i_r} v_{i_1\ldots i_r} = \frac{1}{r!} \sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r \\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}} \langle\alpha'_1\ldots\alpha'_r|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_r\rangle\, a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r} a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1}} \tag{3.27}$$

Bemerkungen:

- Gl. (3.27) gilt nur im Unterraum der (anti-)symmetrisierten Zustände.
- $\langle\alpha'_1\ldots\alpha'_r|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_r\rangle$ ist ein Matrixelement von $v_{1\ldots r}$ mit Produktzuständen im r-Teilchenraum.
- Man beachte die Reihenfolge der $a^\dagger$, a und die zugehörige Numerierung im Matrixelement von $v_{1\ldots r}$ (Wichtig für Vorzeichen bei Fermionen!):

$$a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r}\ \underbrace{a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1}}_{\text{anders herum!}}$$

- Jeder Term auf der rechte Seite von Gl. (3.27) kann anschaulich wie folgt dargestellt werden: $\alpha'_1,\ldots,\alpha'_r$ wird erzeugt, $\alpha_1,\ldots,\alpha_r$ wird vernichtet.

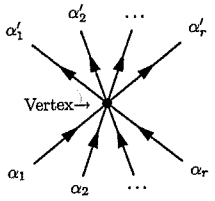


Abbildung 3.1.

Beweis. Betrachte Gl. (3.27) für Teilchenzahl $= N$

$$\sum_{1\leqslant i_1<\ldots<i_r\leqslant N} v_{i_1\ldots i_r} \underbrace{=}_{\substack{\uparrow \\ \text{im Unterraum der (anti-)symm. Zustände}}} S^\sigma \sum_{1\leqslant i_1<\ldots<i_r\leqslant N} v_{i_1\ldots i_r} S^\sigma = \frac{N!}{N-r!r!}\, S^\sigma v_{1\ldots r} S^\sigma \qquad (*)$$

$$= \sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_N \\ \alpha'_1\ldots\alpha'_N}} \underbrace{S^\sigma|\alpha'_1\ldots\alpha'_N\rangle}_{\substack{(3.23) \\ = \\ \frac{1}{\sqrt{N!}} a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_N}|0\rangle}} \underbrace{\langle\alpha'_1\ldots\alpha'_N|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_N\rangle}_{\substack{\langle\alpha'_1\ldots\alpha'_r|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_r\rangle \\ \cdot\prod_{i=r+1}^N \delta_{\alpha_i\alpha'_i}}} \underbrace{\langle\alpha_1\ldots\alpha_N|S^\sigma}_{\substack{(3.23) \\ = \\ \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|a_{\alpha_N}\ldots a_{\alpha_1}}}$$

$$= \frac{1}{N!} \sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r \\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}} \langle\alpha'_1\ldots\alpha'_r|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_r\rangle a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r} \sum_{\alpha_{r+1}\ldots\alpha_N} \underbrace{a^\dagger_{\alpha_{r+1}}\ldots a^\dagger_{\alpha_N}|0\rangle\langle 0|a_{\alpha_N}\ldots a_{\alpha_{r+1}}}_{(N-r)!S^\sigma|\alpha_{r+1}\ldots\alpha_N\rangle\langle\alpha_{r+1}\ldots\alpha_N|S^\sigma} \times a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1}$$

$$= \frac{(N-r)!}{N!} \sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r \\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}} \langle\alpha'_1\ldots\alpha'_r|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_r\rangle a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r} \times S^\sigma \underbrace{\sum_{\alpha_{r+1}\ldots\alpha_N} |\alpha_{r+1}\ldots\alpha_N\rangle\langle\alpha_{r+1}\ldots\alpha_N|}_{1} S^\sigma \times a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1}$$

$$= \frac{N-r!}{N!} \sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r \\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}} \langle\alpha'_1\ldots\alpha'_r|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_r\rangle a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r} a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1} \qquad (**)$$

S^σ kann man weglassen, da wir sowieso im (anti-)symmetrischen Unterraum sind. Setzt man ($*$ $*$) in ($*$) ein, so folgt die Behauptung. □

Da die Erzeuger und Vernichter untereinander (anti-)vertauschen, lässt sich das Matrixelment in Gl. (3.27) leicht (anti-)symmetrisieren, d.h. es gilt

$$\boxed{\begin{aligned}\sum_{i_1<\ldots<i_r} v_{i_1\ldots i_r} &= \frac{1}{r!}\sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r\\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}} v_{\alpha'_1\ldots\alpha'_r,\alpha_1\ldots\alpha_r} a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r} a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1}\\ &= \frac{1}{(r!)^2}\sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r\\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}} v^\sigma_{\alpha'_1\ldots\alpha'_r,\alpha_1\ldots\alpha_r} a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r} a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1}\end{aligned}} \tag{3.28}$$

mit

$$\begin{aligned} v_{\alpha'_1\ldots\alpha'_r,\alpha_1\ldots\alpha_r} &= \langle\alpha'_1\ldots\alpha'_r|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_r\rangle\\ v^\sigma_{\alpha'_1\ldots\alpha'_r,\alpha_1\ldots\alpha_r} &= \frac{1}{r!}\sum_{PP'}\sigma^P\sigma^{P'}\langle\alpha'_{P'(1)}\ldots\alpha'_{P'(r)}|v_{1\ldots r}|\alpha_{P(1)}\ldots\alpha_{P(r)}\rangle\\ &= \sum_P \sigma^P\langle\alpha'_1\ldots\alpha'_r|v_{1\ldots r}|\alpha_{P(1)}\ldots\alpha_{P(r)}\rangle \quad (\text{da } v_{1\ldots r} \text{ symmetrisch})\\ &= \sum_P \sigma^P\langle\alpha'_{P(1)}\ldots\alpha'_{P(r)}|v_{1\ldots r}|\alpha_1\ldots\alpha_r\rangle \quad \text{siehe Gl. (3.3)}) \end{aligned} \tag{3.29}$$

$v^\sigma_{\alpha'_1\ldots\alpha'_r,\alpha_1\ldots\alpha_r}$ ist (anti-)symmetrisch unter Vertauschung von zwei α'_i oder zwei α_i.

Mit Hilfe von Gl. (3.28) lassen sich Operatoren sehr elegant im Fock-Raum darstellen ohne dass man die Komplikationen der (Anti-)Symmetrisierung mühsam berücksichtigen muss. Gl. (3.28) ist der Ausgangspunkt aller quantenfeldtheoretischen Behandlungen von Vielteilchen-Problemen.

Beweis.

$$\begin{aligned} &\frac{1}{r!}\sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r\\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}} v_{\alpha'_1\ldots\alpha'_r,\alpha_1\ldots\alpha_r} \underbrace{a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r}}_{\sigma^{P'}a^\dagger_{\alpha'_{P'(1)}}\ldots a^\dagger_{\alpha'_{P'(r)}}} \underbrace{a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1}}_{\sigma^P a_{\alpha_{P(r)}}\ldots a_{\alpha_{P(1)}}}\\ &= \frac{1}{r!}\left(\frac{1}{r!}\right)^2\sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r\\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}}\sum_{PP'}\sigma^P\sigma^{P'}v_{\alpha'_1\ldots\alpha'_r,\alpha_1\ldots\alpha_r}a^\dagger_{\alpha'_{P'(1)}}\ldots a^\dagger_{\alpha'_{P'(r)}}a_{\alpha_{P(r)}}\ldots a_{\alpha_{P(1)}}\\ &= \frac{1}{(r!)^2}\sum_{\substack{\alpha_1\ldots\alpha_r\\ \alpha'_1\ldots\alpha'_r}}\frac{1}{r!}\sum_{PP'}\sigma^P\sigma^{P'}v_{\alpha'_{P(1)}\ldots\alpha'_{P(r)},\alpha_{P(1)}\ldots\alpha_{P(r)}}a^\dagger_{\alpha'_1}\ldots a^\dagger_{\alpha'_r}a_{\alpha_r}\ldots a_{\alpha_1} \end{aligned}$$

□

Wir betrachten nun einige Beispiele und Anwendungen.

3.7.1 1-Teilchen Operatoren

Für

$$H_0 = \sum_i h_i \ , \ h_i = h\left(\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{S}}_i\right)$$

folgt

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\alpha\alpha'}\varepsilon_{\alpha\alpha'}a^\dagger_\alpha a_{\alpha'}\\ \varepsilon_{\alpha\alpha'} &\equiv \langle\alpha'|h(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{p}},\hat{\mathbf{S}})|\alpha\rangle \end{aligned} \tag{3.30}$$

Wählt man $|\alpha\rangle$ speziell so, dass

$$h|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle \Rightarrow \boxed{H_0 = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha a^\dagger_\alpha a_\alpha} \tag{3.31}$$

ε_α = Energie des Zustandes α, $n_\alpha = a^\dagger_\alpha a_\alpha$ = Zahl der Teilchen im Zustand α.

Im Spezialfall $h=\hat{\mathbf{p}}^2/2\mathrm{m}$, $|\alpha\rangle\equiv|\mathbf{k}\sigma\rangle$, $\mathbf{p}=\hbar\,\mathbf{k}$ erhalten wir

$$\boxed{\sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_k a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} \;,\; \varepsilon_k = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}} \tag{3.32}$$

und für $h=\hat{\mathbf{p}}^2/2\mathrm{m}$, $|\alpha\rangle\equiv|\mathbf{x}\sigma\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}'\sigma'|\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}|\mathbf{x}\sigma\rangle &= -\,\delta_{\sigma\sigma'}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{x}'}\langle\mathbf{x}'|\mathbf{x}\rangle = -\,\delta_{\sigma\sigma'}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{x}}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \\
\Rightarrow\; H_0 &= \sum_\sigma \int d^3x \int d^3x' \Big\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{x}}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\Big\}\psi^\dagger_\sigma(\mathbf{x}')\psi_\sigma(\mathbf{x}) \\
&= -\sum_\sigma \int d^3x \int d^3x' \frac{\hbar^2}{2m}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\psi^\dagger_\sigma(\mathbf{x}')\Delta_{\mathbf{x}}\psi_\sigma(\mathbf{x}) \\
\Rightarrow &\boxed{H_0 = -\sum_\sigma \int d^3x\, \psi^\dagger_\sigma(\mathbf{x})\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\sigma(\mathbf{x})}
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Dies hat diesselbe Form wie der Erwartungswert der kinetische Energie von einem Teilchen mit Wellenfunktion $\psi_\sigma(\mathbf{x})$. Wieder aber betonen wir, dass Gl. (3.33) einen Vielteilchenoperator darstellt und das $\psi_\sigma(\mathbf{x})=\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})$ ein Operator ist

3.7.1.1 Dichte- und Stromoperatoren

Ein Beispiel für Gl. (3.30) sind auch **Dichte- und Stromoperatoren**:

$$\boxed{\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x}) &= \sum_i \delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}}_i) \\
j(\mathbf{x}) &= \sum_i \frac{1}{2m}\{\hat{\mathbf{p}}_i\,\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}}_i)+\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}}_i)\,\hat{\mathbf{p}}_i\}
\end{aligned}} \tag{3.34}$$

(dabei haben wir das externe Vektorpotential null gesetzt, ansonsten muss man $\hat{\mathbf{p}}_i \to \hat{\mathbf{p}}_i - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}_i, t)$ ersetzen). Es gilt:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}'|\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}})|\mathbf{k}\rangle &= \int d^3x' \langle\mathbf{k}'|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\mathbf{k}\rangle\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \\
&= \langle\mathbf{k}'|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{V}e^{i\,(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}_1'|\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}})|\mathbf{x}_1\rangle &= \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)\langle\mathbf{x}_1'|\mathbf{x}_1\rangle \\
&= \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)\delta\big(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1'\big)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}'|\hat{\mathbf{p}}\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}})+\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{k}\rangle &= \hbar(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\langle\mathbf{k}'|\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')|\mathbf{k}\rangle \\
&= \hbar(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\frac{1}{V}e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}_1'|\hat{\mathbf{p}}\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}})+\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}})\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{x}_1\rangle &= \big(\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)+\delta\big(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1'\big)\big)\langle\mathbf{x}_1'|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{x}_1\rangle \\
&= \big(\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)+\delta\big(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1'\big)\big)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_1'}\delta\big(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1'\big)
\end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x}) &= \frac{1}{V}\sum_{\sigma\,\mathbf{k}\,\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} a^\dagger_{\mathbf{k}'\sigma}a_{\mathbf{k}\sigma} \\
&= \sum_\sigma \int d^3x_1 \int d^3x_1'\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)\delta\big(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1'\big)\psi^\dagger_\sigma\big(\mathbf{x}_1'\big)\psi_\sigma(\mathbf{x}_1) \\
\mathbf{j}(\mathbf{x}) &= \frac{\hbar}{2mV}\sum_{\sigma\mathbf{k}\,\mathbf{k}'}(\mathbf{k}+\mathbf{k}')e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} a^\dagger_{\mathbf{k}'\sigma}a_{\mathbf{k}\sigma} \\
&= \frac{\hbar}{2mi}\sum_\sigma \int d^3x_1 \int d^3x_1'\big(\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1)+\delta\big(\mathbf{x}-\mathbf{x}_1'\big)\big)\Big(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}_1'}\delta\big(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_1'\big)\Big)\psi^\dagger_\sigma\big(\mathbf{x}_1'\big)\psi_\sigma(\mathbf{x}_1)
\end{aligned}$$

Nach einigen triviale Umformungen erhält man

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\rho}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\sigma}\psi^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{x})\psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \\ \text{mit } \hat{\rho}_{\mathbf{q}} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}a_{\mathbf{k}\sigma} = \int d^3x e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\hat{\rho}(\mathbf{x}) \end{aligned}} \tag{3.35}$$

und

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{2mi}\sum_{\sigma}\Big(\psi^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{x})(\nabla\psi_{\sigma}(\mathbf{x})) - \Big(\nabla\psi^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{x})\Big)\psi_{\sigma}(\mathbf{x})\Big) \\ &\text{mit } \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{2m}\sum_{\mathbf{k}\sigma}(2\mathbf{k}-\mathbf{q})\,a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}a_{\mathbf{k}\sigma} = \int d^3x e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}) \end{aligned}} \tag{3.36}$$

Wiederum hat $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x})$ bzgl. der $|\mathbf{x}\sigma\rangle$-Basis die gleiche Darstellung wie die Stromdichte einer 1-Teilchen-Wellenfunktion.

Man beweist einfach analoge Gleichungen für die **Spindichte und die Spinstromdichte**

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x}) &= \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i \otimes \delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}}_i) \\ \mathbf{j}_s(\mathbf{x}) &= \sum_i \frac{1}{2m}\{\hat{\mathbf{s}}_i \otimes \hat{\mathbf{p}}_i\delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}}_i) + \hat{\mathbf{s}}_i \otimes \delta(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{x}}_i)\hat{\mathbf{p}}_i\} \end{aligned}} \tag{3.37}$$

wobei $\otimes$ = Tensorprodukt

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{V}\sum_{q} e^{i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\hat{\mathbf{s}}_q = \sum_{\sigma}\hat{\mathbf{s}}_{\sigma'\sigma}\psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{x})\psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \\ \text{mit } \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{q}} &= \sum_{k\sigma\sigma'}\hat{\mathbf{s}}_{\sigma'\sigma}a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma'}a_{\mathbf{k}\sigma} = \int d^3x e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\hat{\rho}(\mathbf{x}) \end{aligned}} \tag{3.38}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}_s(\mathbf{x}) &= \frac{1}{V}\sum_{q} e^{i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\hat{\mathbf{j}}_{s\,\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{2mi}\sum_{\sigma\sigma'}\hat{\mathbf{s}}_{\sigma'\sigma}\otimes\Big(\psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{x})(\nabla\psi_{\sigma}(\mathbf{x})) - \Big(\nabla\psi^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{x})\Big)\psi_{\sigma}(\mathbf{x})\Big) \\ &\text{mit } \hat{\mathbf{j}}_{s\,\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{2m}\sum_{k\sigma}\hat{\mathbf{s}}_{\sigma'\sigma}\otimes(2\mathbf{k}-\mathbf{q})\,a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}a_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned}} \tag{3.39}$$

Bemerkungen:

- Ersetzt man $\mathbf{k}\to\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}$ in Gl. (3.36), so erhält man

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}} &= \sum_{k\sigma}\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\,a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\sigma}a_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\sigma} \\ \text{mit } \mathbf{v}_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \text{ Geschwindigkeit} \end{aligned}} \tag{3.40}$$

  Diese Schreibweise ist jedoch nicht ganz präzise, da der Zustand $|\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\rangle$ für bestimmte $\mathbf{q}$ nicht mehr der periodischen Randbedingungen genügt. Dies wird aber oft ignoriert, da dieser Fehler im Kontinuumslimes verschwindet.

- Obige Definition Gl. (3.34) für die Stromdichte ist nur physikalisch sinnvoll wenn die Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho} = \frac{i}{\hbar}[H,\rho(\mathbf{x})] = -\nabla\cdot\mathbf{j}(\mathbf{x}) \tag{3.41}$$

  gilt. I.a. wird Gl. (3.41) mit der Definition (3.34) aber nicht gelten. Daher sollte man für ein beliebiges H den Stromdichteoperator gemäss

$$\boxed{\nabla\cdot\mathbf{j}(\mathbf{x}) = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho(\mathbf{x})]} \Leftrightarrow \boxed{-\mathbf{q}\cdot\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\hbar}[H,\rho_{\mathbf{q}}]} \tag{3.42}$$

definieren. Gilt speziell

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} \text{ und } [H, \rho(\mathbf{x})] = [H_0, \rho(\mathbf{x})] \tag{3.43}$$

so folgt aus Gl. (3.42):

$$-\mathbf{q}\cdot\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\hbar}\sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}\right) a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}$$

und somit für **kleine q** wiederum Gl. (3.40), aber mit

$$\boxed{v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \quad (\mathbf{q} \to 0)} \tag{3.44}$$

3.7.1.2 Externe Potentiale

Für ein externes 1-Teilchen-Potential der Form

$$\boxed{V = \sum_i v(\hat{\mathbf{x}}_i)} \tag{3.45}$$

gilt mit Gl. (3.34):

$$\boxed{V = \int d^3x\, v(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x})} \tag{3.46}$$

und damit mit Gl. (3.35):

$$V = \frac{1}{V}\sum_q \int d^3x\, e^{i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} v(\mathbf{x})\rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v_{-\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{q}}$$

$$\Rightarrow \boxed{V = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\,\mathbf{q}\sigma} v_{\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}} \tag{3.47}$$

mit

$$\boxed{v_{\mathbf{q}} = \int d^3x\, e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} v(\mathbf{x})} \tag{3.48}$$

Graphisch:

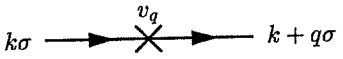


Abbildung 3.2.

Für die Ankopplung an ein externes Magnetfeld erhält man für die kinetische Energie

$$\begin{aligned} H_0(t) &= \sum_i \frac{1}{2m}\Big(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}_i, t)\Big)^2 \\ &= \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{q}{2mc}\sum_i \left(\hat{\mathbf{p}}_i\cdot\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}_i,t) + \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}_i,t)\cdot\hat{\mathbf{p}}_i\right) + \frac{q^2}{2mc^2}\sum_i \left(\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}_i,t)\right)^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \sum_i \frac{1}{2m}\Big(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}_i,t)\Big)^2 &= \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{q}{c}\int d^3x\, \mathbf{A}(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{j}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \frac{q^2}{2mc^2}\int d^3x (\mathbf{A}(\mathbf{x},t))^2\rho(\mathbf{x}) \end{aligned}} \tag{3.49}$$

und somit Gl. (3.32), Gl. (3.35), und Gl. (3.36):

$$\boxed{\begin{aligned} \sum_i \frac{1}{2m}\Big(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}_i,t)\Big)^2 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{q}{c}\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}_{\mathbf{q}}(t)\cdot\mathbf{j}_{-\mathbf{q}}(\mathbf{x}) \\ &\quad + \frac{q^2}{2mc^2}\sum_{\mathbf{q}} \left(\mathbf{A}(t)^2\right)_{\mathbf{q}}\rho_{-\mathbf{q}} \end{aligned}} \tag{3.50}$$

mit

$$\boxed{\begin{aligned} \mathbf{A}_{\mathbf{q}}(t) &= \frac{1}{V}\int d^3x e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\mathbf{A}(\mathbf{x},t) \\ \left(\mathbf{A}(t)^2\right)_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{V}\int d^3x e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\mathbf{A}(\mathbf{x},t)^2 \end{aligned}} \tag{3.51}$$

(die Volumefaktoren sind in Gl. (3.47) und Gl. (3.51) so definiert, dass die Fouriertransformation unabhängig von V wird. Dies ist der Fall, falls $v(\mathbf{x})$ kurzreichweitig ist und $\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ über die ganze Probe wirkt).

3.7.2 2-Teilchen-Operatoren

3.7.2.1 Elektron-Electron Wechselwirkung

Wir betrachten nun eine Wechselwirkung der Form

$$\boxed{V = \sum_{i<j} v_{ij} \;,\; v_{ij} = v(\hat{\mathbf{x}}_i - \hat{\mathbf{x}}_j)} \tag{3.52}$$

Es folgt

$$V = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\alpha_1\alpha_2 \\ \alpha_1'\alpha_2'}} v_{\alpha_1'\alpha_2',\alpha_1\alpha_2}\, a^\dagger_{\alpha_1'} a^\dagger_{\alpha_2'} a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} \tag{3.53}$$

mit

$$v_{\alpha_1'\alpha_2',\alpha_1\alpha_2} = \langle \alpha_1'\alpha_2' | v(\hat{\mathbf{x}}_i - \hat{\mathbf{x}}_j) | \alpha_1\alpha_2\rangle$$

Bzgl. $|\mathbf{x}\sigma\rangle$ und $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ erhält man für die Matrixelemente:

$$\langle \mathbf{x}_1'\mathbf{x}_2' | v(\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2) | \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\rangle = v(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\,\langle \mathbf{x}_1'\mathbf{x}_2' | \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{v_{\mathbf{x}_1'\sigma_1'\mathbf{x}_2'\sigma_2',\mathbf{x}_1\sigma_1\mathbf{x}_2\sigma_2} = \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'} v(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\,\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')\delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_2')} \tag{3.54}$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' | v(\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2) | \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\rangle &= \int d^3x_1 \int d^3x_2\, \langle \mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' | v(\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2) | \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\rangle \langle \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 | \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\rangle \\ &= \int d^3x_1 \int d^3x_2 \underbrace{v(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}_{=\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)}} \langle \mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' | \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\rangle \underbrace{\langle \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 | \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\rangle}_{\propto e^{i(\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x}_1 + \mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x}_2)}} \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \int d^3x_1 \int d^3x_2\, \langle \mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' | \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\rangle \langle \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 | \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}\,\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}\rangle \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' | \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}\,\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{v_{\mathbf{k}_1'\sigma_1'\mathbf{k}_2'\sigma_2',\mathbf{k}_1\sigma_1\mathbf{k}_2\sigma_2} = \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_2'\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}} \tag{3.55}$$

Da $v(\hat{\mathbf{x}}_i - \hat{\mathbf{x}}_j)$ spinunabhängig ist, gilt $\sigma_1 = \sigma_1'$, $\sigma_2 = \sigma_2'$. Damit wirdt Gl. (3.53):

$$\boxed{\begin{aligned} V &= \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int d^3x \int d^3x'\, v(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,\psi^\dagger_\sigma(\mathbf{x})\psi^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{x}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{x}')\psi_\sigma(\mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{2V}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}\, a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} a^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} a_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned}} \tag{3.56}$$

mit

$$\boxed{v_{\mathbf{q}} = \int d^3x e^{-i\,\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} v(\mathbf{x})} \tag{3.57}$$

Speziell für ein Yukawa-Potential erhält man:

$$v(\mathbf{x}) = \frac{e^{-\alpha|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|} \Rightarrow \boxed{v_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi}{|\mathbf{q}|^2 + \alpha^2}} \tag{3.58}$$

Graphisch:

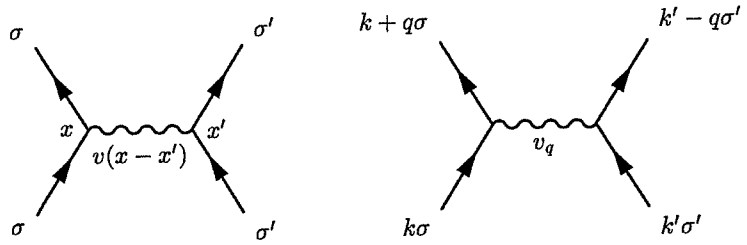


Abbildung 3.3.

(Anti-)symmetrisiert man die Matrixelemente gemäss Gl. (3.29), so erhält man aus Gl. (3.55):

$$\begin{aligned}
v^{\pm}_{\mathbf{k}_1'\sigma_1'\mathbf{k}_2'\sigma_2',\mathbf{k}_1\sigma_1\mathbf{k}_2\sigma_2} &= v_{\mathbf{k}_1'\sigma_1'\mathbf{k}_2'\sigma_2',\,\mathbf{k}_1\sigma_1\mathbf{k}_2\sigma_2} \pm v_{\mathbf{k}_1'\sigma_1'\mathbf{k}_2'\sigma_2',\,\mathbf{k}_2\sigma_2\mathbf{k}_1\sigma_1} \\
&= \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_2'\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \pm \delta_{\sigma_1\sigma_2'}\delta_{\sigma_2\sigma_1'}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_2'\mathbf{k}_1-\mathbf{q}} \\
&= \left(\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\frac{1}{V}v_{\mathbf{k}_1'-\mathbf{k}_1} \pm \delta_{\sigma_1\sigma_2'}\delta_{\sigma_2\sigma_1'}\frac{1}{V}v_{\mathbf{k}_1'-\mathbf{k}_2}\right)\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'} \\
&= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}}\left(\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}v_{\mathbf{q}} \pm \delta_{\sigma_1\sigma_2'}\delta_{\sigma_2\sigma_1'}v_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}\right)\delta_{\mathbf{k}_1'-\mathbf{k}_1,\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'}
\end{aligned}$$

$$\boxed{v^{\pm}_{\mathbf{k}_1'\sigma_1'\mathbf{k}_2'\sigma_2',\mathbf{k}_1\sigma_1\mathbf{k}_2\sigma_2} = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}}\Gamma^{\sigma_1\sigma_2,\sigma_1'\sigma_2'}_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_1'-\mathbf{k}_1,\mathbf{q}}\,\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'}} \tag{3.59}$$

mit

$$\boxed{\Gamma^{\sigma_1\sigma_2,\sigma_1'\sigma_2'}_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}} = \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\,\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\,v_{\mathbf{q}} \pm \delta_{\sigma_1\sigma_2'}\,\delta_{\sigma_2\sigma_1'}\,v_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}} \tag{3.60}$$

$$\boxed{V = \frac{1}{4V}\sum_{\mathbf{k}\,\mathbf{k}'\mathbf{q}}\sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2\\ \sigma_1'\sigma_2'}}\Gamma^{\sigma_1\sigma_2,\sigma_1'\sigma_2'}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}\,a^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma_1'}a^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma_2'}\,a_{\mathbf{k}'\sigma_2}a_{\mathbf{k}\sigma_1}} \tag{3.61}$$

Graphisch:

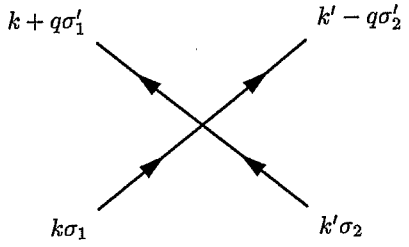


Abbildung 3.4.

Der Nachteil hier ist, das 4 verschiedene Spinsymbole geschrieben werden müssen (da beide Möglichkeiten $\sigma_1 = \sigma_1'$, $\sigma_2 = \sigma_2'$ und $\sigma_1 = \sigma_2'$, $\sigma_2 = \sigma_1'$ noch möglich sind). Der Vorteil ist, dass Vertauschung von rauslaufenden Linien nichts neues gibt, d.h. in Gl. (3.60) sind bereits zwei Prozesse aufsummiert.

1.3 Quantum decay theory

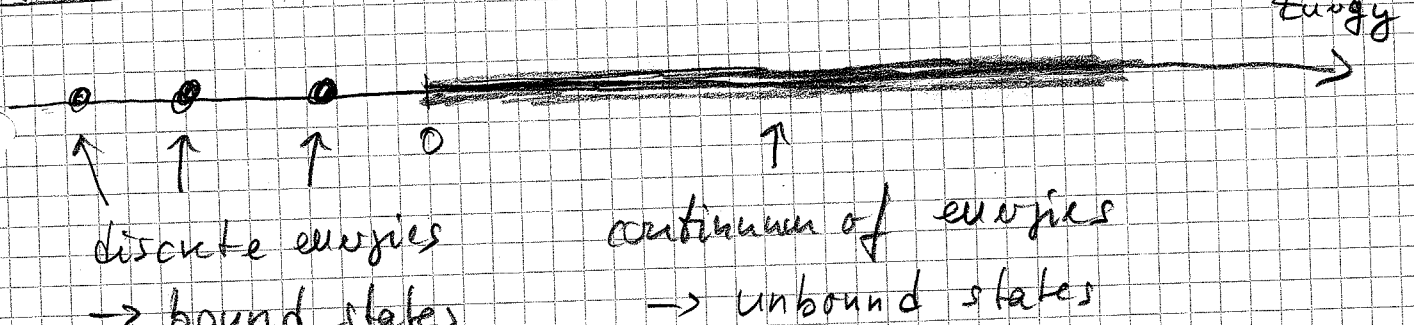
Problem :

$$H = H_0 + V$$

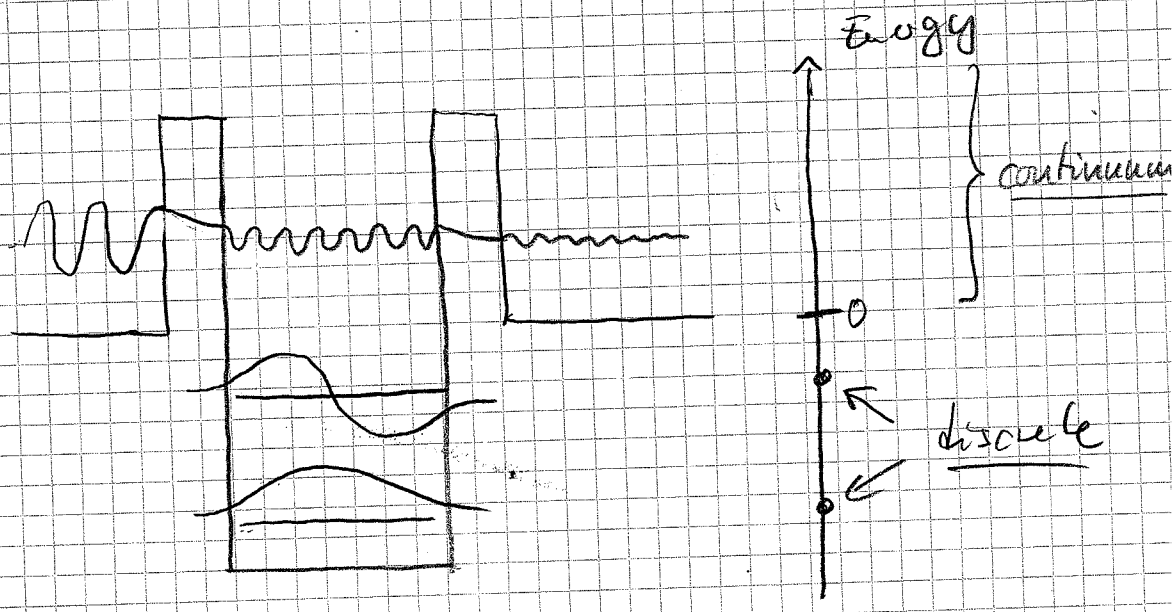
$$H_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \quad \text{unperturbed eigenstates}$$

$$H |\lambda\rangle = E_\lambda |\lambda\rangle \quad \text{full eigenstates} \qquad (1)$$

Spectrum of H: (analog for H_0)



E.g.:



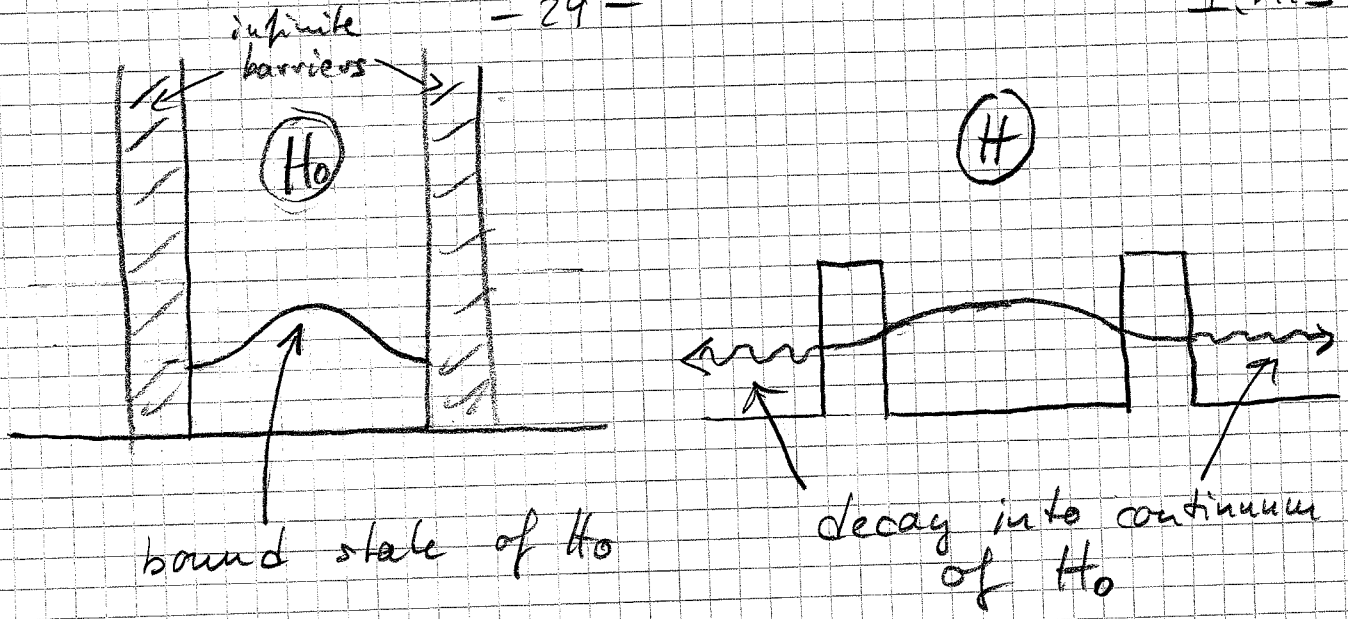
Prepare system in a **bound** state $|n\rangle$ of H_0 and study its decay.

$$\langle n' | U(t,0) | n \rangle = ? \qquad U(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \qquad (2)$$

evolution operator

$$\lim_{t \to \infty} \to ?$$

Eg.:



t-dependent perturbation theory (→QM I) Golde rule

$$U(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\left[1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \underbrace{V(t')_I}_{e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t'} V e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t'}} + O(V^2)\right]$$

$$\langle n'|U(t,0)|n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{n'}t}\left[\delta_{nn'} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{n'}-\varepsilon_n)t'} V_{n'n} + \ldots\right]$$

$$\Rightarrow \langle n'|U(t,0)|n\rangle \simeq \delta_{nn'} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{n'}t} + \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{n'}t} - e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}}{\varepsilon_{n'}-\varepsilon_n} V_{n'n}$$

$n=n'$: $$\boxed{\langle n|U(t,0)|n\rangle \simeq e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}} \quad (3$$

$n\neq n'$: $$\boxed{\langle n'|U(t,0)|n\rangle \simeq V_{n'n}\frac{1}{\varepsilon_{n'}-\varepsilon_n}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{n'}t} - e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}\right)} \quad (4$$

$$\boxed{P_{n\to n'}(t) = |\langle n'|U(t,0)|n\rangle|^2 \simeq t\,\frac{2\pi}{\hbar}|V_{n'n}|^2 \delta_{t/\hbar}(\varepsilon_{n'}-\varepsilon_n)} \quad (5$$

with $\delta_\alpha(x) := \frac{2\alpha}{\hbar}\frac{\sin^2 x/2\alpha}{x^2}$

$\int \delta_\alpha(x) = 1$

(3)-(5) are only valid for very small times:

$$t \ll \hbar / |V_{nn'}| \quad \text{such that} \quad P_{n \to n'}(t) \ll 1 \qquad (6)$$
$$(n \neq n')$$

Open problem: what happens for large times?

Rough answer (as we will see ...):

$$V \longrightarrow t\text{-matrix} \qquad (6a)$$

$$\varepsilon_n \longrightarrow E_0 - i\Gamma_0/2$$

E_0: renormalized energy; $\Gamma_0/2$: broadening due to finite life-time (-> Heisenberg uncertainty)

$$\langle n' | U(t,0) | n \rangle \cong t_{n'n} \frac{1}{\varepsilon_{n'} - E_0 + i\Gamma_0/2} \left[e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{n'} t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} e^{-\frac{1}{2\hbar}\Gamma_0 t} \right] \qquad (7)$$
$$(n' \neq n)$$

asymptotic behaviour; exponential decay

+ oscillatory terms (bound states)

+ algebraic terms (small prefactor)

$$\langle n | U(t,0) | n \rangle \cong e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} e^{-\frac{1}{2\hbar}\Gamma_0 t} \xrightarrow[t \to \infty]{} 0 \qquad (8)$$

-> these results are valid for all times!

General consideration : $H|\lambda\rangle = E_\lambda|\lambda\rangle$

bound states : $|\lambda_i\rangle$; $i=1,2,\ldots$; $E_{\lambda_i}<0$ discret (8a)
unbound states : $|\lambda\rangle$; $E_\lambda>0$ continuous

VONS : $$\sum_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| + \int d\lambda\, |\lambda\rangle\langle\lambda| = \mathbb{1} \qquad (9)$$
$$\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle = \delta_{ij}\,,\quad \langle\lambda_i|\lambda\rangle = 0\,,\quad \langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta(\lambda-\lambda')$$

t-evolution :

$$\langle n'|U(t,0)|n\rangle = \langle n'|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|n\rangle$$
$$\underset{(9)}{=} \sum_i \langle n'|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|n\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\lambda_i}t} + \int d\lambda\, \langle n'|\lambda\rangle\langle\lambda|n\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_\lambda t} \qquad (10)$$

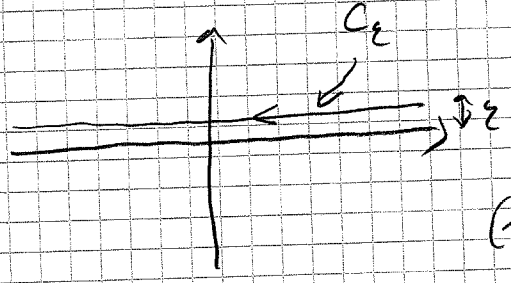
① ↓ coherent oscillations (from bound states)

② ↓ approaches stationary value + exponential decay + algebraic decay

② → difficult to analyse in form (10), since $\int d\lambda$ unclear and $\langle n'|\lambda\rangle$ singular for n' unbound state.

Laplace-transformation :

$$\boxed{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = \frac{1}{2\pi i}\int_{C_\varepsilon} dz\, e^{-\frac{i}{\hbar}zt}\,\frac{1}{z-H}} \qquad (1$$



$(\varepsilon>0,\ t>0)$

Proof: act on eigenvectors $|\lambda\rangle$ on both sides of (11) and use (with $x \equiv E_\lambda$):

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{C_t} dz\, e^{-\frac{i}{\hbar}zt}\,\frac{1}{z-x} = \frac{1}{2\pi i}\int dz\, e^{-\frac{i}{\hbar}zt}\,\frac{1}{z-x} = e^{-\frac{i}{\hbar}xt}$$

close contour in lower half ($t>0$) — Cauchy

□

Green's function:

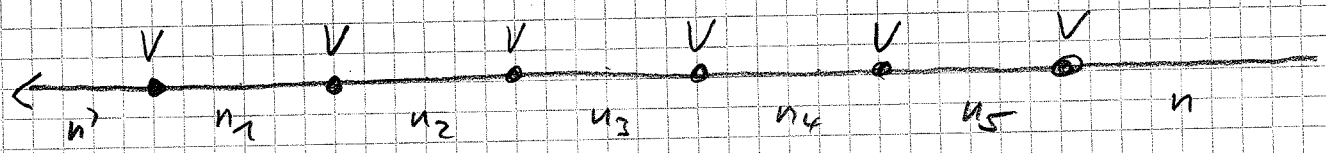
$$\boxed{G(z) := \frac{1}{z-H}} \tag{12}$$

$$\boxed{G_{n'n}(z) := \langle n'|G(z)|n\rangle} \tag{13}$$

Expand in V:

$$\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_0-V} = \frac{1}{z-H_0}\sum_{k=0}^{\infty}\left(V\frac{1}{z-H_0}\right)^k \quad \text{geometric series}$$

Taking matrix elements and inserting $\mathbb{1} = \sum_i |n_i\rangle\langle n_i|$ between the V's we get:



$$\hat{=}\ \frac{1}{z-\varepsilon_{n'}}V_{n'n_1}\frac{1}{z-\varepsilon_{n_1}}V_{n_1n_2}\frac{1}{z-\varepsilon_{n_2}}V_{n_2n_3}\cdots\frac{1}{z-\varepsilon_{n_5}}V_{n_5n}\frac{1}{z-\varepsilon_n}$$

Decompose each $\sum_{n_i}$ into $n_i = n$ and $n_i \neq n$ or, equivalently, insert

$$\boxed{\begin{aligned}&\mathbb{1} = P_n + Q_n\\ &P_n = |n\rangle\langle n|\,,\quad Q_n = 1-P_n\end{aligned}} \tag{14}$$

between all adjacent V's.

Resumming all parts with $n_i \neq n$ leads to

with $$t_n(z) = V + V Q_n \frac{1}{z-H_0} V + V Q_n \frac{1}{z-H_0} V Q_n \frac{1}{z-H_0} V + \dots \quad (15)$$

↑ ↑ ↑

with Q_n one projects $|n\rangle$ as intermediate matrix element

Defining

$$\boxed{\begin{aligned} R_{n'n}(z) &= \langle n' | t_n(z) | n \rangle \\ R_n(z) &= \langle n | t_n(z) | n \rangle \end{aligned}} \quad (16)$$

we get:

$$G_{n'n}(z) = f_{nn'} \frac{1}{z-\varepsilon_n} + \frac{1}{z-\varepsilon_{n'}} R_{n'n}(z) \frac{1}{z-\varepsilon_n} + \frac{1}{z-\varepsilon_{n'}} R_{n'n}(z) \frac{1}{z-\varepsilon_n} R_n(z) \frac{1}{z-\varepsilon_n} + \dots$$

$$= f_{nn'} \frac{1}{z-\varepsilon_n} + \frac{1}{z-\varepsilon_{n'}} R_{n'n}(z) \left\{ \frac{1}{z-\varepsilon_n} + \frac{1}{z-\varepsilon_n} R_n(z) \frac{1}{z-\varepsilon_n} + \dots \right\}$$

$$= f_{nn'} \frac{1}{z-\varepsilon_n} + \frac{1}{z-\varepsilon_{n'}} R_{n'n}(z) \frac{1}{z-\varepsilon_n - R_n(z)}$$

$\Rightarrow$ $\underline{n \neq n'}$:

$$\boxed{G_{n'n}(z) = \frac{1}{z-\varepsilon_{n'}} \cdot \frac{R_{n'n}(z)}{z-\varepsilon_n - R_n(z)}} \quad (17)$$

$\underline{n = n'}$:

$$\boxed{G_{nn}(z) = \frac{1}{z-\varepsilon_n - R_n(z)}} \quad (18)$$

For $t_n(z)$ one obtains from (15):

$$\boxed{t_n(z) = V + V Q_n \frac{1}{z - H_n} Q_n V} \qquad \boxed{H_n = Q_n H Q_n} \tag{18}$$

$\rightarrow$ t-matrix for the system without state $|n\rangle$

Proof: $Q_n^2 = Q_n$, $Q_n H_0 = H_0 Q_n \Rightarrow Q_n \frac{1}{z - H_0} = Q_n \frac{1}{z - Q_n H_0 Q_n} Q_n$

$H_n^0 := Q_n H_0 Q_n$, $V_n = Q_n V Q_n$ $\overset{(15)}{\rightsquigarrow}$

$$t_n(z) = V + V Q_n \left(\frac{1}{z - H_n^0} + \frac{1}{z - H_n^0} V_n \frac{1}{z - H_n^0} + \cdots \right) Q_n V$$

$$= V + V Q_n \frac{1}{z - H_n^0 + V_n} Q_n V = V + V Q_n \frac{1}{z - H_n} Q_n V \qquad \square$$

Taking (11), (17), (18) together, we get finally:

$n \neq n'$:
$$\boxed{\langle n' | U(t,0) | n \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_\varepsilon} dz\, e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{R_{n'n}(z)}{(z - \varepsilon_{n'})(z - \varepsilon_n - R_n(z))}} \tag{20}$$

$n = n'$:
$$\boxed{\langle n | U(t,0) | n \rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_\varepsilon} dz\, e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{1}{z - \varepsilon_n - R_n(z)}} \tag{21}$$

What have we gained?

- closing the contour C_z in the lower half of the complex plane, the analytic structure of the integrand (poles + branch-cuts) will give rise to several important contributions:

  pole at $z = \varepsilon_{n'}$ → asymptotic behaviour

  pole at $z = \varepsilon_n + R_n(z)$ → exponential decay

  branch-cuts of $R_{n'n}(z)$ → algebraic decay

- in contrast to (10), there is no problem with ill-defined matrix elements $\langle n'|\lambda\rangle$

To see all this, let us analyse $R_{n'n}(z)$:

$$R_{n'n}(z) \overset{(16),(19)}{=} V_{n'n} + \langle n'| V Q_n \frac{1}{z - H_n} Q_n V |n\rangle$$

For $z = E \pm i\xi$, $\xi = 0^+$, we decompose:

$$\frac{1}{E - H_n \pm i\xi} = P\left(\frac{1}{E - H_n}\right) \mp i\pi\, \delta(E - H_n)$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} R_{n'n}(E \pm i\xi) &= \Delta_{n'n}(E) \mp i \tfrac{1}{2} \Gamma_{n'n}(E) \\ \Delta_{n'n}(E) &= \langle n'| V + V Q_n P\left(\frac{1}{E - H_n}\right) Q_n V |n\rangle \\ \Gamma_{n'n}(E) &= 2\pi \langle n'| V Q_n \delta(E - H_n) Q_n V |n\rangle \end{aligned}} \quad (22)$$

$$\Rightarrow \boxed{R_{n'n}(z) = V_{n'n} + \frac{1}{\pi} \int dE\, \frac{\Gamma_{n'n}(E)}{z - E}} \quad (23)$$

(z arbitrary)

Spectral properties of H_n : $H_n|\mu\rangle = a_\mu|\mu\rangle$ (24)

$|\mu_i\rangle \rightarrow$ bound states, $a_{\mu_i} < 0$

$|\mu\rangle \rightarrow$ unbound states, $a_\mu > 0$

$\underline{n'=n}$) $\Delta_n(E) := \Delta_{n'n}(E)$; $\Gamma_n(E) := \Gamma_{n'n}(E)$

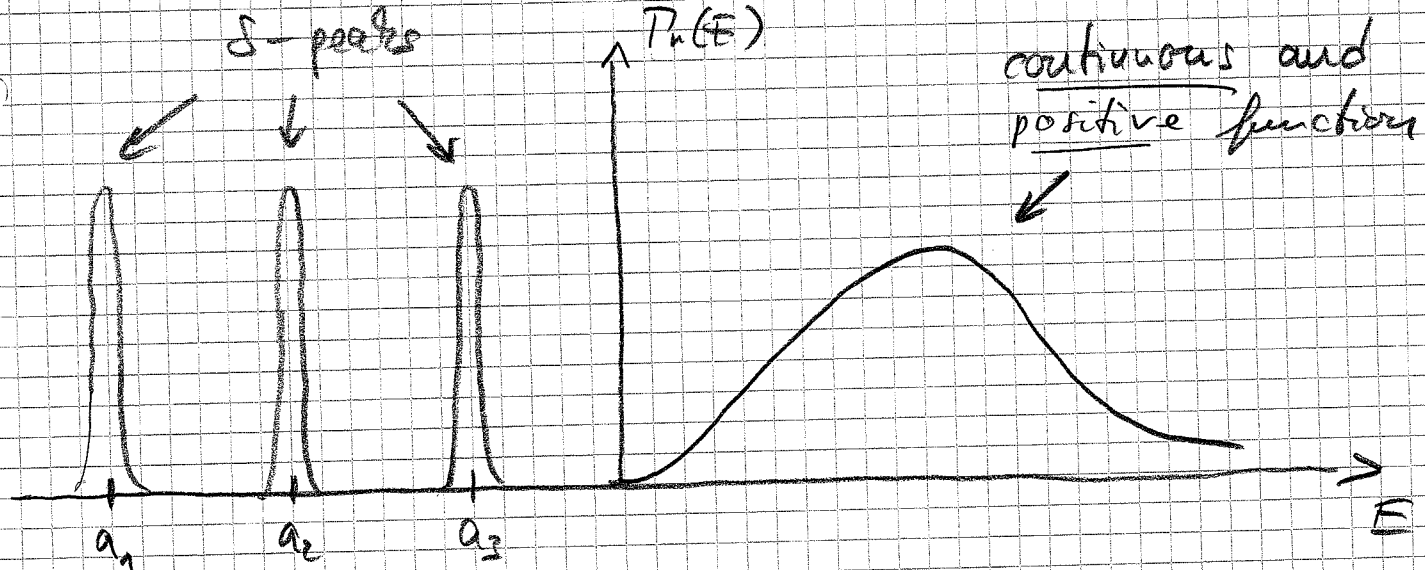
$$\Delta_n(E) = V_{nn} + \oint_\mu |\langle n|VQ_n|\mu\rangle|^2 \frac{1}{E-a_\mu}$$

$$\Gamma_n(E) = 2\pi \oint_\mu |\langle n|VQ_n|\mu\rangle|^2 \delta(E-a_\mu) \qquad (25)$$

↑ well-defined matrix elements! (due to V)

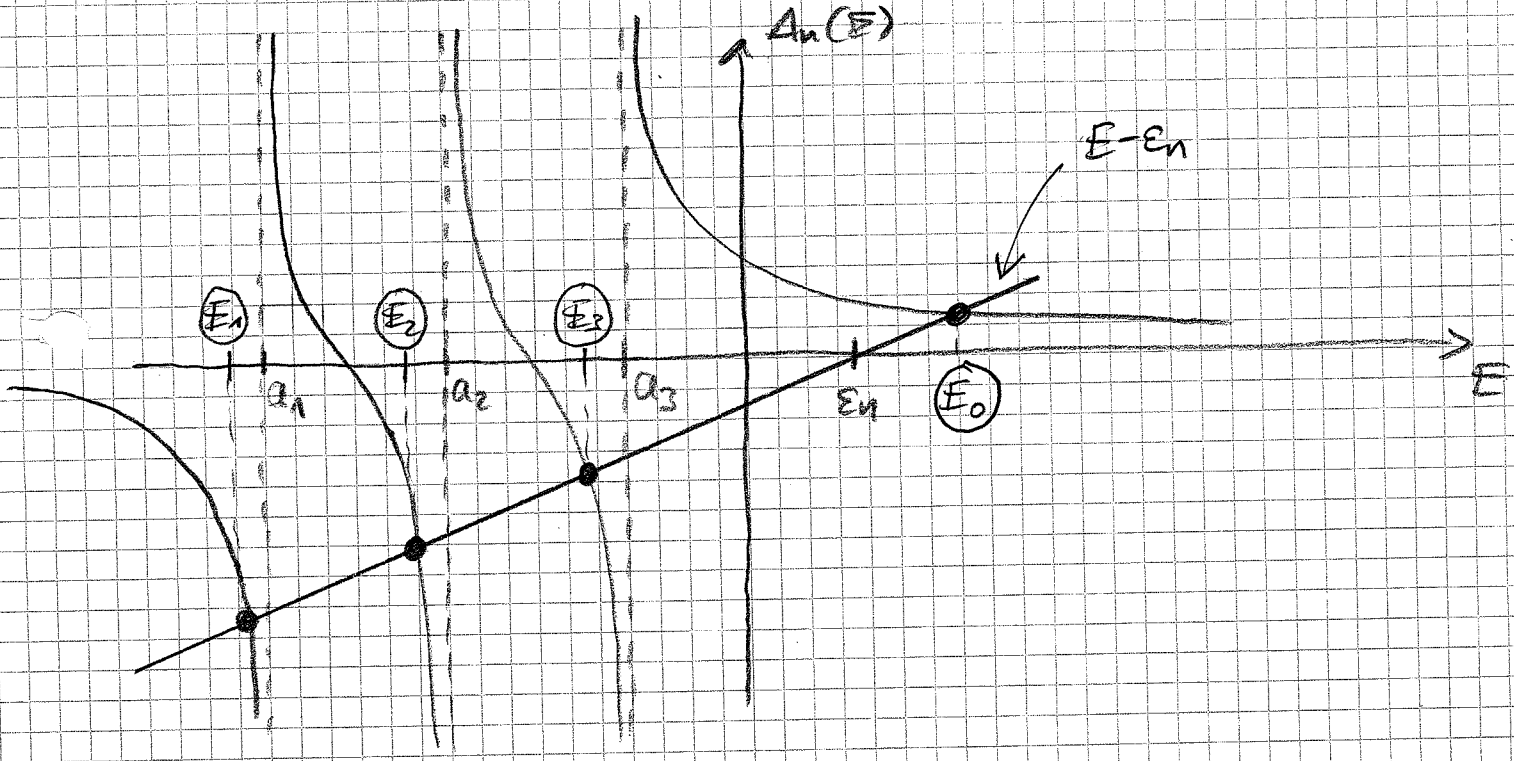
$$\Gamma_n(E) = 2\pi \sum_i |\langle n|VQ_n|\mu_i\rangle|^2 \delta(E-a_{\mu_i}) \quad \leftarrow \delta\text{-peaks}$$

$$+ 2\pi \int d\mu\, |\langle n|VQ_n|\mu\rangle|^2 \delta(E-a_\mu) \quad \leftarrow \text{continuous function}$$



$$\Delta_n(E) = V_{nn} + \sum_i |\langle n|VQ_n|\mu_i\rangle|^2 \frac{1}{E-a_{\mu i}} \quad \leftarrow \text{singularities + jumps at } E=a_{\mu i}$$

$$+ \int d\mu\, |\langle n|VQ_n|\mu\rangle|^2 \frac{1}{E-a_\mu} \quad \leftarrow \text{continuous function}$$



$E_1, E_2, \ldots$ → solutions of $z = \varepsilon_n + R_n(z)$ since

$$\boxed{E_i = \varepsilon_n + \Delta_n(E_i)\ ;\ \Gamma_n(E_i) = 0}$$

→ bound states of H (26)

E_0 → not a solution of $z = \varepsilon_n + R_n(z)$ since

$$\boxed{E_0 = \varepsilon_n + \Delta_n(E_0)\ ;\ \Gamma_n(E_0) \neq 0}$$

→ finite broadening $\Gamma_n(E_0)$ (27)

→ state which decays on time scale $\sim \hbar/\Gamma_n(E_0)$

Analytic structure :

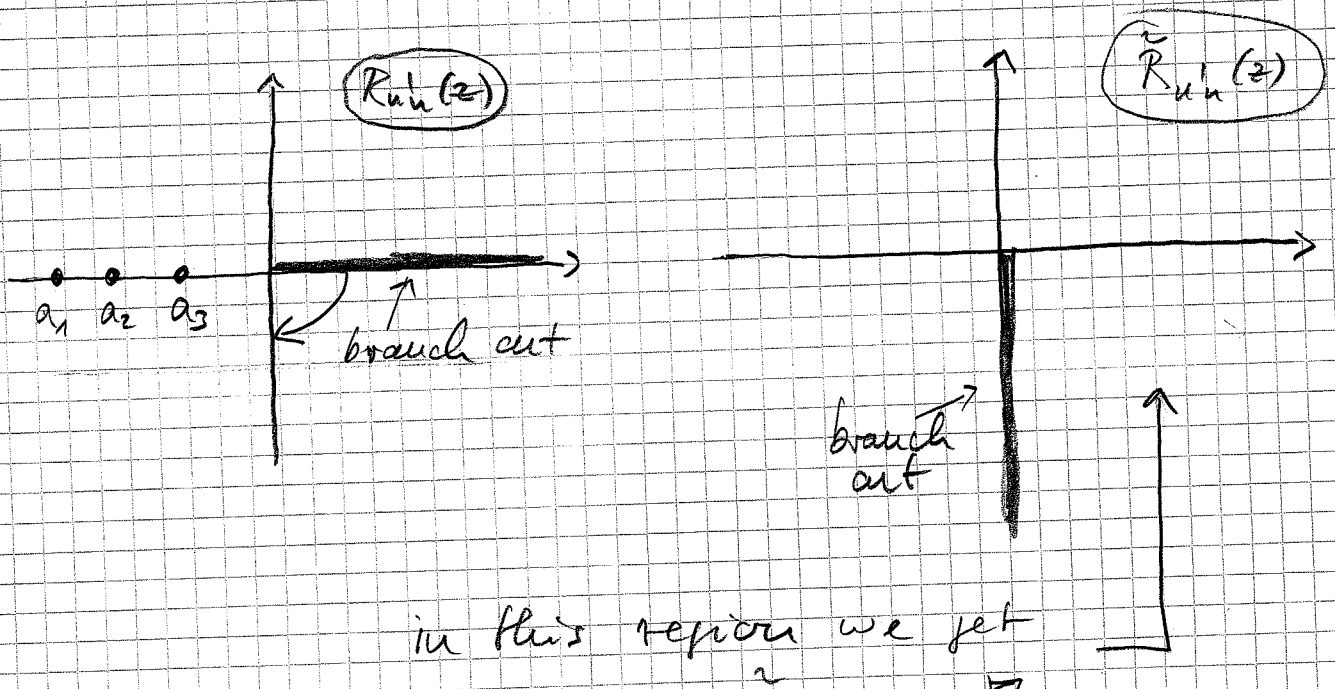
$$\operatorname{Im} R_n(z) \underset{(23)}{=} -\frac{1}{\pi}\int dE\, \underbrace{P_n(E)\,\frac{1}{|z-E|^2}}_{>0} \quad \operatorname{Im} z \to \begin{cases} <0 & \operatorname{Im} z > 0 \\ >0 & \operatorname{Im} z < 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \boxed{z = \varepsilon_n + R_n(z) \text{ has no solutions for } \operatorname{Im} z \neq 0} \tag{28}$$

i.e. $\dfrac{1}{z-\varepsilon_n-R_n(z)}$ → poles at $z = E_1, E_2, \dots$
branch cut for $z \in \mathbb{R}^+$

and the same for $\dfrac{R'_n(z)}{z-\varepsilon_n-R_n(z)}$ since the poles at $z = a_i$ of numerator and denominator cancel each other.

We now turn the branch cuts of $R'_n(z)$ from $\mathbb{R}^+$ on the negative imaginary axis, and get a new function $\tilde{R}'_n(z)$ for $-\frac{\pi}{2} < \arg(z) < 0$:



in this region we get

$$R'_n(z) \neq \tilde{R}'_n(z) \quad !$$

Note:

(1) Since we need $R_{n'n}(z)$ only on C_ε in (20), (21), it does not matter whether we take $R_{n'n}(z)$ or $\tilde{R}_{n'n}(z)$.

(2) Since $R_{n'n}(z) \neq \tilde{R}_{n'n}(z)$ for $-\frac{\alpha}{2} < \arg(z) < 0$, we get now solutions for

$$\boxed{z = \varepsilon_n + \tilde{R}_n(z)} \longrightarrow \boxed{z = E_0 - i\,\Gamma_0/2} \qquad (29)$$

For $E_0 \gg \Gamma_0$, we get approximately:

$$E_0 - i\,\Gamma_0/2 \cong \varepsilon_n + \tilde{R}_n(E_0)$$

$$= \varepsilon_n + R_n(E_0 + i\xi)$$

$$\underset{(22)}{=} \varepsilon_n + \Delta_n(E_0) - i\,\tfrac{1}{2}\Gamma_n(E_0)$$

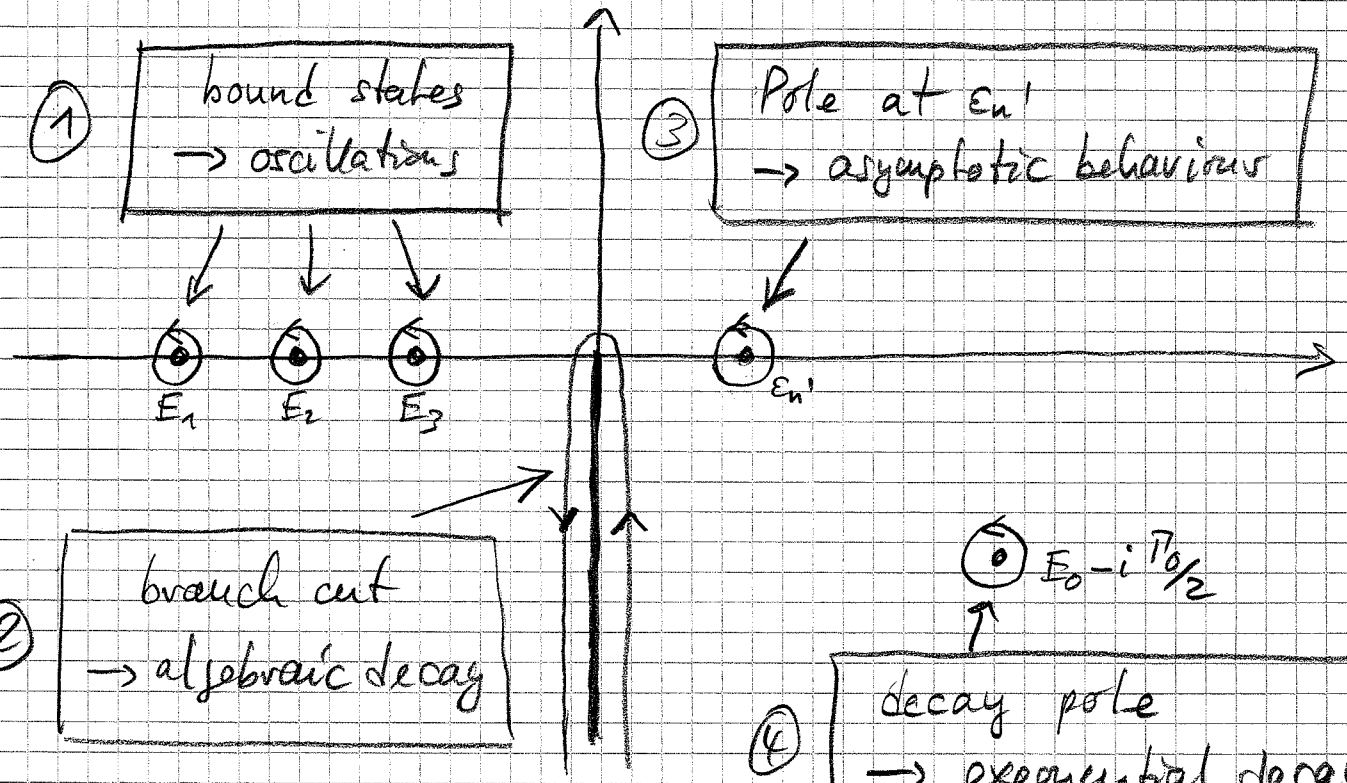
$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} E_0 &\cong \varepsilon_n + \Delta_n(E_0) \\ \Gamma_0 &\cong \Gamma_n(E_0) \end{aligned}} \quad \underline{\text{decay pole}} \qquad (30)$$

i.e. precisely the graphical solution for E_0 on p. 37.

Calculation of $\langle u'|U(t,0)|u\rangle$ $(u' \neq u)$

$$\langle u'|U(t,0)|u\rangle \overset{(20)}{=} \frac{1}{2\pi i}\int dz\, e^{-\frac{i}{\hbar}zt}\,\frac{\tilde{R}_{u'u}(z)}{(z-\varepsilon_{u'})(z-\varepsilon_u-\tilde{R}_u(z))}$$

close C_t in lower half for $t>0$



$$\langle u'|U(t,0)|u\rangle = U(t)^{(b)}_{u'u} + U(t)^{(bc)}_{u'u} + U(t)^{(as)}_{u'u} + U(t)^{(exp)}_{u'u}$$

bound states	branch cuts	asymptotic behaviours	exponential decay
①	②	③	④

→ exercises

Asymptotic behaviour : pole at $z = \varepsilon_{n'}$

$$U(t)^{(as)}_{n'n} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{n'}t} \frac{R_{n'n}(\varepsilon_{n'}+i\xi)}{\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n - R_n(\varepsilon_{n'}+i\xi)}$$

$$R_{n'n}(\varepsilon_{n'}+i\xi) \underset{(16)}{=} \langle n' | t_n(\varepsilon_{n'}+i\xi) | n \rangle$$

$$R_n(\varepsilon_{n'}+i\xi) \underset{(22)}{=} \Delta_n(\varepsilon_{n'}) - i\frac{1}{2}\Gamma_n(\varepsilon_{n'})$$

$$\boxed{U(t)^{(as)}_{n'n} = \langle n' | t_n(\varepsilon_{n'}+i\xi) | n \rangle \frac{1}{\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n - \Delta_n(\varepsilon_{n'}) + i\frac{1}{2}\Gamma_n(\varepsilon_{n'})} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{n'}t}} \quad (31)$$

$|U(t)^{(as)}_{n'n}|^2$ becomes maximal at $\varepsilon_{n'} = E_0 = \varepsilon_n + \Delta_n(E_0)$.

If we approximate $\varepsilon_{n'}$ in $\Delta_n(\varepsilon_{n'})$, $\Gamma_n(\varepsilon_{n'})$, $t_n(\varepsilon_{n'}+i\xi)$ by E_0, we get :

$$\boxed{U(t)^{(as)}_{n'n} \cong \langle n' | t_n(E_0+i\xi) | n \rangle \frac{1}{\varepsilon_{n'} - E_0 + i\,\Gamma_0/2} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_{n'}t}} \quad (32)$$

→ like first term of golden rule result (4)

with

$$V_{n'n} \to \langle n' | t_n(E_0+i\xi) | n \rangle$$
$$\varepsilon_n \to E_0 - i\,\Gamma_0/2 \quad (33)$$

(Compare with (6a), (7))

Exponential decay: decay pole at $z = E_0 - i\Gamma_0/2 =: z_0$

(we assume that there is only one, for several ones just sum over all)

Residuum:

$$\frac{1}{z - \varepsilon_n - \tilde{R}_n(z)} = \frac{1}{z - \varepsilon_n - \tilde{R}_n(z_0) - \tilde{R}_n'(z_0)(z - z_0)}$$

$$\uparrow \; z \to E_0 - i\Gamma_0/2 =: z_0$$

$$= \frac{1}{z - z_0} \; \frac{1}{1 - \tilde{R}_n'(z_0)}$$

$$\uparrow \; z_0 = \varepsilon_n + \tilde{R}_n(z_0)$$

$$U(t)^{(exp)}_{n'n} = e^{-\frac{i}{\hbar} z_0 t} \; \frac{1}{z_0 - \varepsilon_{n'}} \; \frac{1}{1 - \tilde{R}_{n'}'(z_0)} \; \tilde{R}_{n'n}(z_0)$$

$$\boxed{U(t)^{(exp)}_{n'n} = - \frac{\tilde{R}_{n'n}(E_0 - i\Gamma_0/2)}{1 - \tilde{R}_n'(E_0 - i\Gamma_0/2)} \; \frac{1}{\varepsilon_{n'} - E_0 + i\Gamma_0/2} \; e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \; e^{-\frac{1}{2\hbar}\Gamma_0 t}} \tag{34}$$

If we approximate $E_0 - i\Gamma_0/2 \to E_0$ in $\tilde{R}_{n'n}(E_0 - i\Gamma_0/2)$ and $\tilde{R}_n'(E_0 - i\Gamma_0/2)$, and neglect $\frac{d R_n}{dE}(E_0) \sim \Gamma_0/E_0$, we get

$$\boxed{U(t)^{(exp)}_{n'n} \cong - \langle n' | t_n(E_0 + i\xi) | n \rangle \; \frac{1}{\varepsilon_{n'} - E_0 + i\Gamma_0/2} \; e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \; e^{-\frac{1}{2\hbar}\Gamma_0 t}} \tag{35}$$

→ like the second term of golden rule result (4) with the same replacement (33).

1.4. Zeitumkehrtransformation

→ QM I Skript

Neben den in Kap. III.2.2 bereits eingeführten Translations-, Rotations-, und Paritätstransformationen wollen wir in diesem Kapitel die noch fehlende Zeitumkehrtransformation kennenlernen.

Gemäss dem klassischen Bild der Zeitumkehr soll diese Transformation nur den Impuls (und damit auch den Drehimpuls) umdrehen, den Ort aber gleich lassen. Wir suchen also nach einem invertierbaren Transformationsoperator T mit den Eigenschaften

$$\boxed{T\,\hat{\underline{x}}\,T^{-1} = \hat{\underline{x}}\,, \quad T\,\hat{\underline{p}}\,T^{-1} = -\hat{\underline{p}}\,, \quad T\,\hat{\underline{S}}\,T^{-1} = -\hat{\underline{S}}} \tag{1}$$

wobei $\hat{\underline{x}}, \hat{\underline{p}}, \hat{\underline{S}}$ die Orts-, Impuls-, und Spinoperatoren von irgendeinem Teilchen beschreiben sollen. Die Operatoren werden dabei derart transformiert, dass gilt

$$\underbrace{(T\,A\,T^{-1})}_{\text{transformierter Operator}}\;\underbrace{(T\,|\psi\rangle)}_{\text{transformierter Zustand}} = T\,(A\,|\psi\rangle) \tag{2}$$

d.h. die Wirkung des transformierten Operators auf den transformierten Zustand ist dasselbe wie die Transformation von $A|\psi\rangle$.

Weiterhin wollen wir, dass auch die Translations- und Rotationsinvarianz respektiert wird, d.h.

$$T\,(\hat{\underline{x}}+\underline{a})\,T^{-1} = \hat{\underline{x}}+\underline{a}\,, \quad T\,\underline{\underline{R}}(\varphi)\,\hat{\underline{x}}\,T^{-1} = \underline{\underline{R}}(\varphi)\,\hat{\underline{x}} \tag{3}$$

Wie man leicht sieht, folgt dies nicht aus (1) wenn T ein normaler linearer Operator wäre:

$$T(\hat{\underline{x}}+\underline{a})T^{-1} = T e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{a}} \hat{\underline{x}} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{a}} T^{-1}$$

$$\uparrow \quad (\text{III}.3.2.10)$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} \underbrace{T\hat{\underline{p}}T^{-1}}_{-\hat{\underline{p}}}\underline{a}} \underbrace{T\hat{\underline{x}}T^{-1}}_{\hat{\underline{x}}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\underbrace{T\hat{\underline{p}}T^{-1}}_{-\hat{\underline{p}}}\underline{a}}$$

(falls T linear wäre)

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{a}} \hat{\underline{x}} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{a}} = \hat{\underline{x}} - \underline{a}$$

Das analoge Problem tritt mit Rotationen auf.

Offensichtlich kann man (3) leicht erfüllen, wenn T <u>antilinear</u> definiert wird:

$$\boxed{T(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1^* T|\psi_1\rangle + \lambda_2^* T|\psi_2\rangle} \quad (4$$

d.h.

$$\boxed{T\lambda = \lambda^* T} \quad (\lambda \in \mathbb{C}) \quad (5$$

Dann folgt nämlich

$$T e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{a}} T^{-1} = e^{\frac{1}{\hbar}\underbrace{T i\hat{\underline{p}}T^{-1}}_{=-iT\hat{\underline{p}}T^{-1}=i\hat{\underline{p}}}\underline{a}} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{a}}$$

und obiges Problem tritt nicht mehr auf.

Zusammen mit der Eigenschaft (4) ist T vollständig definiert, wenn die Wirkung auf die Basiszustände $|\underline{x}\, m\rangle$, $m=-s,\dots,+s$; in der $\underline{x}, S_z$-Darstellung bekannt ist. Wir definieren:

$$\boxed{T\,|\underline{x}\,m\rangle := (-1)^m\,|\underline{x},-m\rangle} \quad ;\ T \text{ antilinear} \qquad (6)$$

$T \to$ <u>Zeitumkehroperator</u>

mit $(-1)^m := e^{i\pi m}$ (beachte, dass m auch halbzahlig sein kann). Für einen beliebigen Zustand folgt

$$T\,|\psi\rangle = \int d^3x \sum_m T\,|\underline{x}\,m\rangle\langle\underline{x}\,m|\psi\rangle$$

$$\underset{(T\text{ antilinear})}{=} \int d^3x \sum_m \langle\underline{x}\,m|\psi\rangle^* \underbrace{T\,|\underline{x}\,m\rangle}_{e^{i\pi m}\,|\underline{x},-m\rangle}$$

$$\underset{m\to -m}{=} \int d^3x \sum_m e^{-i\pi m}\,|\underline{x}\,m\rangle\langle\underline{x},-m|\psi\rangle^*$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle\underline{x}\,m|T\psi\rangle = e^{-i\pi m}\langle\underline{x},-m|\psi\rangle^*} \qquad (7$$

(wir betrachten hier immer 1 Teilchen, für mehrere Teilchen muss man einfach das Produkt nehmen)

Ohne Spin würde T die Wellenfunktion im Ortsraum also einfach in ihr konjugiert komplexes überführen.

Im Impulsraum gilt:

$$\boxed{T\,|\underline{p}\,m\rangle = (-1)^m\,|-\underline{p},-m\rangle} \qquad (8)$$

Bew.: $T\,|\underline{p}\,m\rangle = \int d^3x\ T\,|\underline{x}\,m\rangle\langle\underline{x}|\underline{p}\rangle$

$$= \int d^3x \underbrace{\langle\underline{x}|\underline{p}\rangle^*}_{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\underline{x}}} \underbrace{T\,|\underline{x}\,m\rangle}_{(-1)^m|\underline{x},-m\rangle} = (-1)^m\,|-\underline{p},-m\rangle$$

$$= \langle\underline{x}|-\underline{p}\rangle$$

□

Für den inversen Operator T^{-1} folgt

$$T^{-1}|\underline{x}\,m\rangle = e^{-i\pi m}\,|\underline{x},-m\rangle$$
$$T^{-1}|\underline{p}\,m\rangle = e^{-i\pi m}\,|-\underline{p},-m\rangle \qquad (9)$$

wie man leicht aus (6) durch Multiplikation mit T^{-1} sieht.

Wir beweisen nun, dass der über (6) definierte Operator die gewünschten Eigenschaften (1) erfüllt:

$$T\hat{\underline{x}}T^{-1}|\underline{x}\,m\rangle \overset{(9)}{=} T\hat{\underline{x}}\,e^{-i\pi m}|\underline{x},-m\rangle = \underline{x}\,e^{i\pi m}\,T|\underline{x},-m\rangle$$
($\hat{\underline{x}} \to \underline{x}$)
$$\overset{(6)}{=} \underline{x}\,e^{i\pi m}e^{-i\pi m}|\underline{x}\,m\rangle = \hat{\underline{x}}\,|\underline{x}\,m\rangle \qquad (10)$$

$$T\hat{\underline{p}}T^{-1}|\underline{p}\,m\rangle \overset{(9)}{=} T\hat{\underline{p}}\,e^{-i\pi m}|-\underline{p},-m\rangle = -\underline{p}\,e^{i\pi m}\,T|-\underline{p},-m\rangle$$
($\hat{\underline{p}} \to -\underline{p}$)
$$\overset{(8)}{=} -\underline{p}\,e^{i\pi m}e^{-i\pi m}|\underline{p}\,m\rangle = -\hat{\underline{p}}\,|\underline{p}\,m\rangle \qquad (11)$$

$$T\hat{S}_z T^{-1}|\underline{x}\,m\rangle \overset{(9)}{=} T\hat{S}_z\,e^{-i\pi m}|\underline{x},-m\rangle = -\hbar m\,e^{i\pi m}\,T|\underline{x},-m\rangle$$
($\hat{S}_z \to -\hbar m$)
$$\overset{(6)}{=} -\hbar m\,e^{i\pi m}e^{-i\pi m}|\underline{x}\,m\rangle = -\hat{S}_z|\underline{x}\,m\rangle \qquad (12)$$

$$T\hat{S}_\pm T^{-1}|\underline{x}\,m\rangle \overset{(9)}{=} T\hat{S}_\pm\,e^{-i\pi m}|\underline{x},-m\rangle$$
$$= \pm\hbar\sqrt{s(s+1)-(-m)(-m\pm1)}\;e^{i\pi m}\,T|\underline{x},-m\pm1\rangle$$
$$\overset{(6)}{=} \pm\hbar\sqrt{s(s+1)-m(m\mp1)}\;e^{i\pi m}e^{i\pi(-m\pm1)}|\underline{x},m\mp1\rangle$$
$$= -\hat{S}_\mp|\underline{x}\,m\rangle \qquad (13)$$

$$\Rightarrow\quad T\hat{S}_x T^{-1} = T\tfrac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)T^{-1} \overset{(13)}{=} -\tfrac{1}{2}(\hat{S}_- + \hat{S}_+) = -\hat{S}_x$$

$$T\hat{S}_y T^{-1} = T\tfrac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)T^{-1} \overset{(13)}{=} \tfrac{1}{2i}(\hat{S}_- - \hat{S}_+) = -\hat{S}_y$$

Anhand des Beweises in (13) erkennt man, dass der Faktor $(-1)^m$ in der Definition (6) sehr wesentlich ist (für (10), (11), (12) ist dies nicht wichtig).

Hätte man also einen Operator $\tilde{T}$ gemäss

$$\tilde{T}\,|\underline{x}\,m\rangle = |\underline{x},-m\rangle \quad ; \quad \tilde{T} \text{ antilinear} \tag{14}$$

definiert, so erhält man analog zu (10)-(13):

$$\tilde{T}\,\hat{\underline{x}}\,\tilde{T}^{-1} = \hat{\underline{x}} \quad , \quad \tilde{T}\,\hat{p}\,\tilde{T}^{-1} = -\hat{p} \quad , \quad \tilde{T}\,\hat{S}_z\,\tilde{T}^{-1} = -\hat{S}_z \tag{15}$$

aber $$\tilde{T}\,\hat{S}_\pm\,\tilde{T}^{-1} = \hat{S}_\mp \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \tilde{T}\,\hat{S}_x\,\tilde{T}^{-1} &= \hat{S}_x \\ \tilde{T}\,\hat{S}_y\,\tilde{T}^{-1} &= \hat{S}_y \end{aligned} \tag{16}$$

d.h. $\tilde{T}$ würde nicht in allen Raumrichtungen gleich wirken.

Der Faktor $(-1)^m$ in (6) ist also sehr wichtig um die Rotationsinvarianz im Spinraum zu respektieren. Benutzt man (6) zusammen mit (1), so folgt nämlich

$$\boxed{T\,|\underline{x}\,m\rangle_{\underline{n}} = (-1)^m\,|\underline{x},-m\rangle_{\underline{n}}} \tag{17}$$

wobei $$|\underline{x}\,m\rangle_{\underline{n}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\,\underline{n}\cdot\underline{S}}\,|\underline{x}\,m\rangle \quad ; \quad \underline{\underline{R}}(\varphi)\,\underline{e}_z = \underline{n}$$

gemäss (III. 4.35) ein Eigenzustand von $\underline{n}\cdot\underline{S}$ zum Eigenwert $m\hbar$ ist.

Bew.:

$$T\,|\underline{x}\,m\rangle_{\underline{n}} = T\,e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\,\underline{n}\cdot\underline{S}}\,|\underline{x}\,m\rangle = \underbrace{T\,e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\,\underline{n}\cdot\underline{S}}\,T^{-1}}_{\overset{(*)}{=} e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\,\underline{n}\cdot\underline{S}}}\;\underbrace{T\,|\underline{x}\,m\rangle}_{\overset{(6)}{=}(-1)^m\,|\underline{x},-m\rangle}$$

$$= (-1)^m\,|\underline{x},-m\rangle_{\underline{n}}$$

□

Wir sehen also, dass wir mit der Definition (6) die Zeitumkehrtransformation gefunden haben. Diese ist nicht eindeutig, da man in (6) noch eine beliebige Phase

$$T|\pm m\rangle = e^{i\alpha}(-1)^m|\pm m\rangle \qquad (18$$

einführen könnte ohne die Eigenschaft (1) zu ändern. Daher findet man oft auch andere Definitionen von T.

Formale Ergänzungen:

T lässt sich in Operatorform auch wie folgt schreiben:

$$\boxed{T = e^{+i\pi s}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\pi S_y}\, K} \qquad (19$$

wobei der Phasenfaktor $e^{+i\pi s}$ in der Literatur normalerweise weggelassen wird und K der Operator der Komplex-Konjugation ist:

$$\langle \pm m|K|\psi\rangle := \langle \pm m|\psi\rangle^* \qquad (20$$

(19) beweist man leicht mit der in den Übungen bewiesenen Relation

$$e^{\frac{i}{\hbar}\pi S_y}|m\rangle = e^{i\pi(m+s)}|-m\rangle \qquad (2$$

$$\Rightarrow \langle \pm m|e^{-\frac{i}{\hbar}\pi S_y}K|\psi\rangle \overset{(21)}{=} e^{-i\pi(m+s)}\langle \pm,-m|K|\psi\rangle$$

$$\overset{(20)}{=} e^{-i\pi(m+s)}\langle \pm,-m|\psi\rangle^*$$

$$\overset{(7)}{=} e^{-i\pi s}\langle \pm m|T\psi\rangle \quad \Rightarrow (19)$$

Da T ein antilinearer Operator ist, ist nicht klar wie man den adjungierten Operator definiert und in welchem Sinne T unitär ist.

Für einen beliebigen antilinearen Operator A definiert man das <u>adjungierte</u> über die Gleichung

$$A \text{ antilinear} \rightarrow \boxed{\langle \psi | A^+ | \chi \rangle := \langle A\psi | \chi \rangle^*} \quad (22$$

d.h. im Gegensatz zu linearen Operatoren nimmt man das Konjugiert-Komplexe. Dies muss man machen, damit das Skalarprodukt weiterhin die gleiche Eigenschaft behält, insbesondere für $\lambda \in \mathbb{C}$:

$$\langle \lambda\psi | A^+ | \chi \rangle \overset{(22)}{=} \langle \underbrace{A\lambda}_{\lambda^* A} \psi | \chi \rangle^* = (\lambda \langle A\psi | \chi \rangle)^*$$

$$= \lambda^* \langle \psi | A^+ | \chi \rangle$$

so wie es sein muss.

Der antilineare Operator A heisst <u>antiunitär</u>, falls gilt

$$\boxed{A^+ = A^{-1} \iff A \text{ antiunitär}} \quad (23$$

Für den Zeitumkehroperator T ist diese Eigenschaft erfüllt:

$$\boxed{T T^+ = T^+ T = \mathbb{1}} \quad (24$$

<u>Beweis</u>:

$$\langle \underline{x} m | T T^+ | \psi \rangle \overset{(7)}{=} e^{-i\pi m} \langle \underline{x}, -m | T^+ | \psi \rangle^* \overset{(22)}{=} e^{-i\pi m} \langle T(\underline{x}, -m) | \psi \rangle$$

$$\overset{(6)}{=} e^{-i\pi m} e^{i\pi m} \langle \underline{x} m | \psi \rangle = \langle \underline{x} m | \psi \rangle$$

□

Basissysteme:

Um VONS $\{|n\rangle\}_n$ zu konstruieren, die sich in einer wohldefinierten Art unter der Zeitumkehrtransformation verhalten, muss man zwei Fälle unterscheiden $T^2=1$ und $T^2=-1$. Es gilt nämlich

$$\boxed{T^2 = (-1)^{2S}} \tag{25}$$

Beweis: $T^2|\underline{x}m\rangle = T\, e^{i\pi m}|\underline{x},-m\rangle = e^{-i\pi m} T|\underline{x},-m\rangle = e^{-i\pi m} e^{-i\pi m}|\underline{x}m\rangle$

$$= e^{i\pi 2S}\, e^{-i2\pi \underbrace{(m+S)}_{\text{ganzzahlig}}}|\underline{x}m\rangle = (-1)^{2S}|\underline{x}m\rangle \qquad \square$$

Für mehrere Teilchen (Spin $s_1, \dots, s_N$) bedeutet dies

$$\boxed{T^2 = (-1)^{2\sum_{i=1}^{N} s_i} = \begin{cases} 1 & \text{für gerade Zahl von Fermionen} \\ -1 & \text{“ ungerade “ “ “} \end{cases}} \tag{26}$$

(Zahl der Bosonen beliebig)

Mit der Definition eines verallgemeinerten "Komplex-Konjugats"

$$\boxed{|\psi^*\rangle := T|\psi\rangle \quad ; \quad |\psi\rangle \text{ “reell“} :\Leftrightarrow |\psi\rangle = |\psi^*\rangle} \tag{27}$$

folgt dann der wichtige Satz:

$$\boxed{T^2 = 1 \Rightarrow \text{es existiert ein VONS } \{|n\rangle\}_n \text{ mit } |n\rangle = |n^*\rangle} \tag{28}$$

$$\boxed{T^2 = -1 \Rightarrow \text{es existiert ein VONS } \{|n\rangle, |n^*\rangle\}_n \text{ mit paarweise zueinander komplex konjugierten Zuständen}} \tag{29}$$