15 Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren kennen wir bereits von den Phononen. Sie waren das Vorbild für die Photonen- Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren der Quantenelektrodynamik. Fast zur gleichen Zeit stellte sich heraus, dass man sie auch für Teilchen, die durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben werden, verwenden kann. Tatsächlich nimmt durch ihre Verwendung der Hamilton-Operator eine wesentlich übersichtliche Form an. Ihre Verwendung erlaubt über die Schrödinger-Gleichung hinaus auch Prozesse zu beschreiben, bei denen die Anzahl der Teilchen nicht erhalten ist.

Es sei angemerkt, dass die Operatoren, die wir hier betrachten, eine (nicht-kommutative) Algebra bilden. Es gelten also Kommutativ- und Assoziativ-gesetz der Addition, das Assoziativ-Gesetz der Multiplikation und das Distributiv-Gesetz.

15.a Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Fermionen

Wir wollen nun die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Fermionen einführen. Hierzu gehen wir aus von einem vollständigen Satz orthonormierter Einteilchenfunktionen $\phi_i(q)$, wobei wir der Einfachheit halber Orts- und Spinfreiheitsgrad zu einer Variablen $q = (\mathbf{r}, s)$ zusammengefasst haben. Statt einer Orts- und Spinbasis kann man auch von einer anderen ausgehen. Tatsächlich wird die Basis, in der wir schließlich arbeiten, aus den Zuständen der Basis, die wir mit i gekennzeichnet haben, aufgebaut. Wir können nun die Slaterdeterminante aus N Teilchen schreiben als

$$|i_1, i_2, ...i_N\rangle \hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{i_1}(q_1) & \phi_{i_1}(q_2) & ... & \phi_{i_1}(q_N) \\ \phi_{i_2}(q_1) & \phi_{i_2}(q_2) & ... & \phi_{i_2}(q_N) \\ ... & ... & & ... \\ \phi_{i_N}(q_1) & \phi_{i_N}(q_2) & ... & \phi_{i_N}(q_N) \end{vmatrix}, \tag{15.1}$$

genauer $\langle q_1, q_2, ...q_N|i_1, i_2, ...i_N\rangle = |...|$. (Der Faktor $1/\sqrt{N!}$ verschwindet, wenn wir für die Definition von $|q_1, q_2, ...q_N\rangle$ die gleiche Konvention verwenden). Vertauschen wir die Zeilen der Nummern m und n, so ändert sich das Vorzeichen. Die Wellenfunktion ist antisymmetrisch

$$|i_1...i_m...i_n...i_N\rangle = -|i_1...i_n...i_m...i_N\rangle. \tag{15.2}$$

Im Folgenden benötigen wir noch eine Formel zur Bestimmung des Überlapps

$$\langle j_1, j_2...j_N|i_1, i_2...i_N\rangle = \frac{1}{N!} \int \mathrm{d}q_1 \mathrm{d}q_2 ... \mathrm{d}q_N \det_{k,l}(\phi^*_{j_k}(q_l)) \det_{k,l}(\phi_{i_k}(q_l)). \tag{15.3}$$

Hierzu wollen wir beispielsweise zunächst die $\phi^*_{j_1}$-Integrale durchführen. Diese Funktion tritt für alle q_1, ... q_N auf. Wollen wir gerade über $\phi^*_{j_1}(q_l)$ integrieren, so können wir die Spalte l mit der Spalte 1 in beiden Determinanten vertauschen und dann die Integrations-Variable q_1 mit q_l vertauschen. Das ergibt N gleiche Beiträge und es bleibt

$$\langle j_1, j_2...j_N|i_1, i_2...i_N\rangle = \frac{1}{(N-1)!} \int \mathrm{d}q_1 \mathrm{d}q_2 ... \mathrm{d}q_N \phi^*_{j_1}(q_1) \det_{k>1,l>1}(\phi^*_{j_k}(q_l)) \det_{k,l}(\phi_{i_k}(q_l)). \tag{15.4}$$

Wir führen jetzt die Integration über q_1 durch und erhalten

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_2...j_N|i_1, i_2...i_N\rangle &= \sum_m \delta_{j_1,i_m} \frac{(-)^{m-1}}{(N-1)!} \int \mathrm{d}q_2 ... \mathrm{d}q_N \det_{k>1,l>1}(\phi^*_{j_k}(q_l)) \det_{k\neq m,l>1}(\phi_{i_k}(q_l)) \\ &= \sum_m \delta_{j_1,i_m} (-)^{m-1} \langle j_2...j_N|i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle. \end{aligned} \tag{15.5}$$

Diese Gleichung kann iteriert werden und ergibt schließlich

$$\langle j_1, j_2...j_N|i_1, i_2...i_N\rangle = \det_{m,n}(\delta_{j_m,i_n}). \tag{15.6}$$

Wir bemerken, dass Zustände unterschiedlicher Teilchenzahl als orthogonal auf einander angesehen werden

$$\langle j_1, j_2 ... j_M | i_1, i_2 ... i_N \rangle = 0 \text{ für } M \neq N. \tag{15.7}$$

Die Rekursionsformel (15.5) bleibt (ohne den Zwischenschritt mit der q-Integration) gültig für Zustände unterschiedlicher Teilchenzahl. Für $N \neq M$ steht eben links und rechts 0

$$\langle j_1, j_2 ... j_M | i_1, i_2 ... i_N \rangle = \sum_m \delta_{j_1, i_m} (-)^{m-1} \langle j_2 ... j_M | i_1 ... i_{m-1}, i_{m+1} ... i_N \rangle. \tag{15.8}$$

Wir definieren nun den Erzeugungs-Operator $c_i^\dagger$ durch seine Wirkung auf einen beliebigen Zustand

$$c_i^\dagger | i_1 ... i_N \rangle = | i, i_1 ... i_N \rangle. \tag{15.9}$$

Er fügt also dem N-Teilchenzustand ein weiteres Teilchen im Zustand i hinzu. Ist dieser Zustand bereits im N-Teilchenzustand besetzt, so ist das Ergebnis 0. Ein Zustand kann nicht zweimal besetzt werden. Bei Anwendung zweier Erzeugungs-Operatoren folgt

$$c_i^\dagger c_j^\dagger | i_1 ... i_N \rangle = | i, j, i_1 ... i_N \rangle = -| j, i, i_1 ... i_N \rangle = -c_j^\dagger c_i^\dagger | i_1 ... i_N \rangle. \tag{15.10}$$

Da dies bei Anwendung auf beliebige Zustände gilt, folgt generell für die Operatoren

$$c_i^\dagger c_j^\dagger = -c_j^\dagger c_i^\dagger, \tag{15.11}$$

das heißt, die Erzeugungs-Operatoren antikommutieren, was man auch

$$[c_i^\dagger, c_j^\dagger]_+ = c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger = 0 \tag{15.12}$$

schreibt. Wir kennzeichnen hier den Antikommutator mit $[.., ..]_+$. Auch die Bezeichnung $\{.., ..\}$ ist üblich.

Als nächstes führen wir Vernichtungs-Operatoren als hermitesch adjungierte Operatoren zu $c^\dagger$ ein

$$\begin{aligned} \langle j_1 ... j_M | c_i | i_1 ... i_N \rangle &= \langle i_1 ... i_N | c_i^\dagger | j_1 ... j_M \rangle^* = \langle i_1 ... i_N | i, j_1 ... j_M \rangle^* = \langle i, j_1 ... j_M | i_1 ... i_N \rangle \\ &= \begin{cases} \sum_m (-)^{m-1} \delta_{i, i_m} \langle j_1 ... j_M | i_1 ... i_{m-1}, i_{m+1} ... i_N \rangle & N = M+1 \\ 0 & N \neq M+1 \end{cases} \end{aligned} \tag{15.13}$$

Damit folgt dann, dass c_i ein Teilchen mit der Quantenzahl i vernichtet,

$$c_i | i_1 ... i_N \rangle = \sum_m (-)^{m-1} \delta_{i, i_m} | i_1 ... i_{m-1}, i_{m+1} ... i_N \rangle, \tag{15.14}$$

$$c_i | \text{vak} \rangle = 0. \tag{15.15}$$

Dabei ist $|\text{vak}\rangle$ der Vakuum-Zustand, also der Zustand ohne Teilchen. Wir finden weiter

$$\langle a | c_i c_j | b \rangle = \langle b | c_j^\dagger c_i^\dagger | a \rangle^* = -\langle b | c_i^\dagger c_j^\dagger | a \rangle^* = -\langle a | c_j c_i | b \rangle. \tag{15.16}$$

Daher antikommutieren auch c_i und c_j,

$$c_i c_j = -c_j c_i \text{ oder } [c_i, c_j]_+ = c_i c_j + c_j c_i = 0. \tag{15.17}$$

Wir werten noch $[c_i^\dagger, c_j]_+ = c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger$ aus

$$c_i^\dagger c_j | i_1 ... i_N \rangle = \sum_m (-)^{m-1} \delta_{j, i_m} | i i_1 ... i_{m-1} i_{m+1} ... i_N \rangle, \tag{15.18}$$

$$c_j c_i^\dagger | i_1 ... i_N \rangle = c_j | i, i_1 ... i_N \rangle = \delta_{i,j} | i_1 ... i_N \rangle + \sum_m (-)^m \delta_{j, i_m} | i i_1 ... i_{m-1} i_{m+1} ... i_N \rangle, \tag{15.19}$$

$$(c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger) | i_1 ... i_N \rangle = \delta_{i,j} | i_1 ... i_N \rangle. \tag{15.20}$$

Damit ergibt sich für den Antikommutator

$$[c_j, c_i^\dagger]_+ = c_j c_i^\dagger + c_i^\dagger c_j = \delta_{j,i}. \tag{15.21}$$

Häufig arbeitet man mit orthonormierten Zuständen. Dies ist aber nicht zwingend. Falls die Zustände nicht orthonormiert sind, folgt

$$\langle \text{vak}|[c_j, c_i^\dagger]_+|\text{vak}\rangle = \langle j|i\rangle, \tag{15.22}$$

zum Beispiel mit Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren im Orts-Raum

$$\psi^\dagger(\mathbf{r})|\text{vak}\rangle = |\mathbf{r}\rangle, \quad [\psi(\mathbf{r}'), \psi^\dagger(\mathbf{r})]_+ = \delta^3(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \tag{15.23}$$

Allgemein ist dann in den obigen Formeln $\delta_{j,i}$ durch $\langle j|i\rangle$ zu ersetzen. Es gelten weiterhin die Anti-Kommutatoren (15.12 und 15.17).

15.b Einteilchen-Operatoren

Wir betrachten nochmal Gleichung (15.18). Vertauschen wir der Reihe nach i mit $i_1, ...i_m$, so finden wir

$$c_i^\dagger c_j |i_1...i_N\rangle = \sum_m \delta_{j,i_m} |i_1..i_{m-1}, i, i_{m+1}...i_N\rangle. \tag{15.24}$$

Falls sich also j unter den Quantenzahlen i_m befindet, so wird es durch i ersetzt. Wir betrachten nun den Teilchenzahl-Operator. Er lautet

$$\mathcal{N} = \sum_i c_i^\dagger c_i, \tag{15.25}$$

denn aus

$$c_i^\dagger c_i |i_1...i_N\rangle = (\delta_{i,i_1} + ...\delta_{i,i_N})|i_1...i_N\rangle \tag{15.26}$$

folgt nach Summation über i

$$\mathcal{N}|i_1...i_N\rangle = N|i_1...i_N\rangle. \tag{15.27}$$

Die Anwendung des Operators $\mathcal{N}$ multipliziert also den N-Teilchen-Zustand mit N.

Wir betrachten nun den allgemeinen Einteilchen-Operator $\mathcal{T}$. Er wirkt im Ortsraum im Allgemeinen als Integral-Kern auf die Wellenfunktion

$$\mathcal{T}|\Phi\rangle \hat{=} \int \mathrm{d}^3r' t(r_1, r')\Phi(r', r_2...r_N) + \int \mathrm{d}^3r' t(r_2, r')\Phi(r_1, r'...r_N) + ... + \int \mathrm{d}^3r' t(r_N, r')\Phi(r_1, r_2...r'). \tag{15.28}$$

Mit der Transformation auf die Basis der i

$$t(r, r') = \sum_{i,j} t_{i,j}\phi_i(r)\phi_j^*(r') \Longleftrightarrow t_{i,j} = \int \mathrm{d}^3r \mathrm{d}^3r' \phi_i^*(\mathbf{r}) t(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\phi_j(\mathbf{r}') \tag{15.29}$$

folgt zunächst für den Einteilchen-Zustand

$$\mathcal{T}|i_1\rangle \hat{=} \sum_{i,j} t_{i,j}\phi_i(\mathbf{r}_1) \underbrace{\int \mathrm{d}^3r' \phi_j^*(\mathbf{r}')\phi_{i_1}(\mathbf{r}')}_{\delta_{j,i_1}} = \sum_i t_{i,i_1}\phi_i(\mathbf{r}_1) \tag{15.30}$$

und

$$\mathcal{T}|i_1\rangle = \sum_i t_{i,i_1}|i\rangle. \tag{15.31}$$

Für den N-Teilchen-Zustand gilt dann

$$\mathcal{T}|i_1...i_N\rangle = \sum_i t_{i,i_1}|i, i_2...i_N\rangle + \sum_i t_{i,i_2}|i_1, i, i_3...i_N\rangle + ..., \tag{15.32}$$

da der Operator auf jeden Einteilchenzustand wirkt, die anderen aber ungeändert lässt. Daraus schließen wir

$$\mathcal{T} = \sum_{i,j} t_{i,j} c_i^\dagger c_j, \tag{15.33}$$

denn der Einteilchen-Zustand j wird stets durch $\sum_i t_{i,j} i$ ersetzt.

Beispiele: Einteilchenpotential

$$t(\mathbf{r},\mathbf{r}') = V(\mathbf{r})\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \Longleftrightarrow t_{i,j} = \int \mathrm{d}^3 r \phi_i^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}). \tag{15.34}$$

Kinetische Energie:

$$t_{i,j} = \int \mathrm{d}^3 r \phi_i^*(\mathbf{r})(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle)\phi_j(\mathbf{r}). \tag{15.35}$$

Verwenden wir speziell ebene Wellen

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_{\mathrm{P}}}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{15.36}$$

so folgt

$$\mathcal{T} = \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k},s}^\dagger c_{\mathbf{k},s}, \tag{15.37}$$

wobei jetzt die Spin-Variable s (genauer die z-Komponente) wieder hinzugefügt wurde. Dies ist die kinetische Energie in der Impuls-Darstellung.

15.c Zwei-Teilchen-Operatoren

Die Coulomb-Wechselwirkung ist wie viele anderen Wechselwirkungen ein Zwei-Teilchen-Operator. Wir betrachten daher jetzt seine Darstellung durch Erzeuger und Vernichter . Die Wirkung eines Zwei-Teilchen-Operators $\mathcal{V}$ auf einen N-Teilchen-Zustand ist gegeben durch einen Integralkern V mit der Wirkung

$$\begin{aligned}
\langle r_1, r_2 ... r_N|\mathcal{V}|\Phi\rangle &= \int \mathrm{d}^3 r' \mathrm{d}^3 r'' V(r_1, r_2, r', r'')\Phi(r', r'', r_3 ... r_N) + ... \\
&= \sum_{i<j} \int \mathrm{d}^3 r' \mathrm{d}^3 r'' V(r_i, r_j, r', r'')\Phi(... r_{i-1}, r', r_{i+1} ... r_{j-1}, r'', r_{j+1} ...)
\end{aligned} \tag{15.38}$$

Wir stellen nun V in der Basis der i dar

$$V(r_1, r_2, r', r'') = \sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} \phi_i(r_1)\phi_j(r_2)\phi_{i'}^*(r')\phi_{j'}^*(r''), \tag{15.39}$$

dann folgt

$$\begin{aligned}
\langle r_1, r_2|\mathcal{V}|i_1, i_2\rangle &= \int \mathrm{d}^3 r' \mathrm{d}^3 r'' \sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} \phi_i(r_1)\phi_j(r_2)\phi_{i'}^*(r')\phi_{j'}^*(r'') \\
&\times \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{i_1}(r')\phi_{i_2}(r'') - \phi_{i_2}(r')\phi_{i_1}(r'')) \\
&= \sum_{i,j}(V_{i,j,i_1,i_2} - V_{i,j,i_2,i_1})\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_i(r_1)\phi_j(r_2) = \sum_{ij} V_{i,j,i_1,i_2}\langle r_1, r_2|i, j\rangle.
\end{aligned} \tag{15.40}$$

Das heißt für den Zwei-Teilchen-Zustand gilt

$$\mathcal{V}|i_1, i_2\rangle = \sum_{i,j} V_{i,j,i_1,i_2}|i, j\rangle. \tag{15.41}$$

Dementsprechend ergibt die Wirkung von $\mathcal{V}$ auf den N-Teilchenzustand eine Überlagerung der Anwendung der Zweiteilchen-Wechselwirkung auf alle Paare, wobei die übrigen Zustände unverändert bleiben,

$$\mathcal{V}|i_1...i_N\rangle = \sum_{m<n}\sum_{i,j} V_{i,j,i_m,i_n}|...i_m \to i...i_n \to j...\rangle. \tag{15.42}$$

Diese Operation wird durch Operatoren $c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}$ bewirkt. Zum Nachweis berechnen wir mittels (15.18)

$$\begin{aligned} c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'}|i_1...i_N\rangle &= c_i^\dagger c_{i'}\sum_n \delta_{j',i_n}|...i_n \to j...\rangle \\ &= \delta_{j,i'}\sum_n \delta_{j',i_n}|...i_n \to i...\rangle \\ &+ \sum_{m\neq n}\delta_{j',i_n}\delta_{i',i_m}|...i_m \to i...i_n \to j...\rangle. \end{aligned} \tag{15.43}$$

Der Term in der zweiten Zeile kann geschrieben werden

$$\delta_{j,i'}\sum_n \delta_{j',i_n}|...i_n \to i...\rangle = [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_i^\dagger c_{j'}|i_1...i_N\rangle. \tag{15.44}$$

Bringen wir ihn auf die linke Seite der Gleichung, so bleibt dort vor dem Zustand $|i_1...i_N\rangle$ der Operator

$$c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'} - [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_i^\dagger c_{j'} = c_i^\dagger c_{i'} c_j^\dagger c_{j'} - c_i^\dagger [c_j^\dagger, c_{i'}]_+ c_{j'} = -c_i^\dagger c_j^\dagger c_{i'} c_{j'} = c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'} \tag{15.45}$$

und damit

$$\begin{aligned} &\sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}|i_1...i_N\rangle \\ &= \sum_{m<n}\sum_{i,j} V_{i,j,i_m,i_n}|...i_m \to i...i_n \to j...\rangle. + \sum_{n<m}\sum_{i,j} V_{i,j,i_m,i_n}|...i_n \to j...i_m \to i...\rangle, \end{aligned} \tag{15.46}$$

wobei wir explizit die beiden möglichen Reihenfolgen von m und n berücksichtigt haben. Wir können nun in der zweiten Summe m mit n und i mit j vertauschen. Dann ist die letzte Summe ebenfalls eine mit $m < n$, das ket ist das gleiche wie in der vorhergehenden Summe und aus V_{i,j,i_m,i_n} wird durch diese Vertauschung V_{j,i,i_n,i_m}. Generell ist aber wegen der Gleichheit (Ununterscheidbarkeit) der Teilchen $V_{i,j,i_m,i_n} = V_{j,i,i_n,i_m}$. Daher stimmen die letzte und die vorletzte Summe überein und wir haben

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2}\sum_{i,j,i',j'} V_{i,j,i',j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}. \tag{15.47}$$

Beachten Sie den Faktor 1/2 und die Reihenfolge der Indices. Der Faktor 1/2 rührt daher, dass sowohl der Term $V_{i,j,i',j'} c_i^\dagger c_j^\dagger c_{j'} c_{i'}$ als auch der Term $V_{j,i,j',i'} c_j^\dagger c_i^\dagger c_{i'} c_{j'}$ das ket $|i'j'\rangle$ in das ket $|ij\rangle$ überführt. Diese Doppelzählung wird durch den Faktor 1/2 korrigiert.

15.d Lokales Potential

Als Beispiel betrachten wir ein lokales Potential

$$V(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \mathbf{r}_1', s_1', \mathbf{r}_2', s_2') = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')\delta^3(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2')\delta_{s_1,s_1'}\delta_{s_2,s_2'}. \tag{15.48}$$

Stellen wir es in der Impuls-Darstellung dar, so finden wir

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}_1,s_1,\mathbf{k}_2,s_2,\mathbf{k}_1',s_1',\mathbf{k}_2',s_2'} &= \delta_{s_1,s_1'}\delta_{s_2,s_2'}\int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\phi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1)\phi^*_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\phi_{\mathbf{k}_2'}(\mathbf{r}_2)\phi_{\mathbf{k}_1'}(\mathbf{r}_1) \\ &= \delta_{s_1,s_1'}\delta_{s_2,s_2'}\frac{1}{V_\mathrm{P}^2}\int \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_1'-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}_1+\mathrm{i}(\mathbf{k}_2'-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}_2}V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \end{aligned} \tag{15.49}$$

Die Exponential-Funktion können wir auch

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_1'-\mathbf{k}_1)\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)+\mathrm{i}(\mathbf{k}_2'-\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_1')\cdot\mathbf{r}_2} \tag{15.50}$$

schreiben. Führen wir nun statt $\mathbf{r}_1$ und $\mathbf{r}_2$ als unabhängige Variable $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ und $\mathbf{r}_2$ ein, so ergibt die Integration über $\mathbf{r}_2$ gerade $V_{\mathrm{P}}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'}$. In der δ-Funktion steckt die Impuls-Erhaltung, der Impuls $\mathbf{k}_1' + \mathbf{k}_2'$ der beiden Teilchen wird neu in $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ aufgeteilt. Dabei bezeichnet man

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_1' - \mathbf{k}_1 = -(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2) \tag{15.51}$$

als den Impuls-Übertrag. Das Matrix-Element ergibt sich dann zu

$$V_{\mathbf{k}_1,s_1,\mathbf{k}_2,s_2,\mathbf{k}_1',s_1',\mathbf{k}_2',s_2'} = \delta_{s_1,s_1'}\delta_{s_2,s_2'}\frac{1}{V_{\mathrm{P}}}V(\mathbf{q})\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'}, \quad V(\mathbf{q}) = \int \mathrm{d}^3r \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r}). \tag{15.52}$$

$V(\mathbf{q})$ ist also die Fourier-Transformierte des lokalen Potentials, das sich

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2V_{\mathrm{P}}}\sum_{k_1,k_2,q,s_1,s_2} V(\mathbf{q})c^\dagger_{\mathbf{k}_1,s_1}c^\dagger_{\mathbf{k}_2,s_2}c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}. \tag{15.53}$$

schreiben lässt. Speziell für die Berechnung für das Coulomb-Potential gehen wir aus von einem abgeschirmten Coulomb-Potential (Yukawa-Potential) $V(r) = \frac{e^2}{r}\mathrm{e}^{-\lambda r}$ und finden

$$\begin{aligned} V(q) &= e^2\int \mathrm{d}^3r\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\lambda r}}{r} = e^2\int \mathrm{d}\Omega\int_0^\infty r\mathrm{d}r\mathrm{e}^{\mathrm{i}(q\cos\theta-\lambda)r} = e^2\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_{-1}^1 \mathrm{d}\cos\theta\frac{1}{(\lambda-\mathrm{i}q\cos\theta)^2} \\ &= 2\pi e^2\frac{1}{\mathrm{i}q}\left(\frac{1}{\lambda-\mathrm{i}q}-\frac{1}{\lambda+\mathrm{i}q}\right) = \frac{4\pi e^2}{\lambda^2+q^2}, \end{aligned} \tag{15.54}$$

was für $\lambda = 0$ den Limes des Coulomb-Potentials liefert.

15.e Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Bosonen

Wir werden uns hier vorwiegend mit Elektronen und Phononen befassen. Für letztere kennen wir bereits die Erzeuger und Vernichter. Es stellt sich heraus, dass für bosonische Teilchen die gleichen Beziehungen für Erzeuger und Vernichter gelten wir für Phononen. Wir wollen diese bosonischen Erzeuger und Vernichter hier in Analogie zu denen für Fermionen einführen. Zunächst möchte ich die fermionische Determinante (15.1) in etwas anderer Form schreiben

$$\begin{aligned} |i_1,i_2...i_N\rangle &\hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-)^P\phi_{i_1}(q_{P1})\phi_{i_2}(q_{P2})...\phi_{i_N}(q_{PN}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-)^P\phi_{i_{P1}}(q_1)\phi_{i_{P2}}(q_2)...\phi_{i_{PN}}(q_N). \end{aligned} \tag{15.55}$$

Dabei läuft P über alle $N!$ Permutationen der Zahlen $1,2...N$. $(-)^P$ ist $+1$ oder -1 je nachdem, ob P eine gerade oder ungerade Permutation ist. Es hängt also davon ab, ob man die Permutation durch eine gerade oder ungerade Anzahl von Transpositionen erhält. Eine Transposition ist der Austausch von zwei Zahlen der Zahlen 1 bis N. Die aus (1,2,3) entstehenden Permutationen (1,2,3), (2,3,1) und (3,1,2) sind gerade, während (1,3,2), (2,1,3) und (3,2,1) ungerade sind. Unter Pi verstehen wir die Zahl, die durch die jeweilige Permutation aus i entsteht. So ergibt die Permutation (1,2,3)→(2,1,3) zum Beispiel $P1 = 2, P2 = 1, P3 = 3$. Für Bosonen führen wir nun ein

$$\begin{aligned} |i_1,i_2...i_N\rangle &\hat{=} \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P\phi_{i_1}(q_{P1})\phi_{i_2}(q_{P2})...\phi_{i_N}(q_{PN}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P\phi_{i_{P1}}(q_1)\phi_{i_{P2}}(q_2)...\phi_{i_{PN}}(q_N). \end{aligned} \tag{15.56}$$

Die Vorzeichen-Faktoren $(-)^P$ fallen also weg, da es sich um Bosonen handelt. Die Wellenfunktionen sind symmetrisch
$$|i_1...i_m...i_n...i_N\rangle = |i_1...i_n...i_m...i_N\rangle \tag{15.57}$$
Für den Überlapp erhält man eine ähnliche Rekursions-Formel
$$\langle j_1, j_2...j_M|i_1, i_2...i_N\rangle = \sum_m \delta_{j_1,i_m}\langle j_2...j_M|i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle. \tag{15.58}$$
Die bosonischen Erzeuger $b_i^\dagger$ werden nun durch
$$b_i^\dagger|i_1...i_N\rangle = |i, i_1...i_N\rangle \tag{15.59}$$
definiert. Jetzt gilt allerdings
$$b_i^\dagger b_j^\dagger|i_1...i_N\rangle = |i, j, i_1...i_N\rangle = |j, i, i_1...i_N\rangle = b_j^\dagger b_i^\dagger|i_1...i_N\rangle, \tag{15.60}$$
also kommutieren die Erzeuger
$$[b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0. \tag{15.61}$$
Für den Vernichtungs-Operator definiert als hermitesch Adjungiertes des Erzeugungs-Operators findet man dann
$$\begin{aligned}\langle j_1...j_M|b_i|i_1...i_N\rangle &= \langle i_1...i_N|b_i^\dagger|j_1...j_M\rangle^* = \langle i_1...i_N|i, j_1...j_M\rangle^* = \langle i, j_1...j_M|i_1...i_N\rangle \\ &= \sum_m \delta_{i,i_m}\langle j_1...j_M|i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle.\end{aligned} \tag{15.62}$$
und
$$b_i|i_1...i_N\rangle = \sum_m \delta_{i,i_m}|i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle, \tag{15.63}$$
$$b_i|\text{vak}\rangle = 0. \tag{15.64}$$
Weiter folgt
$$\langle a|b_i b_j|b\rangle = \langle b|b_j^\dagger b_i^\dagger|a\rangle^* = \langle b|b_i^\dagger b_i^\dagger|a\rangle^* = \langle a|b_j b_i|b\rangle, \tag{15.65}$$
also
$$[b_i, b_j] = b_i b_j - b_j b_i = 0. \tag{15.66}$$
Schließlich betrachten wir noch den Kommutator zwischen Vernichter und Erzeuger
$$b_i^\dagger b_j|i_1...i_N\rangle = \sum_m \delta_{j,i_m}|i, i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle, \tag{15.67}$$
$$b_j b_i^\dagger|i_1...i_N\rangle = b_j|i, i_1...i_N\rangle = \delta_{j,i}|i_1...i_N\rangle + \sum_m \delta_{j,i_m}|i, i_1...i_{m-1}, i_{m+1}...i_N\rangle, \tag{15.68}$$
$$(b_j b_i^\dagger - b_i^\dagger b_j)|i_1...i_N\rangle = \delta_{j,i}|i_1...i_N\rangle. \tag{15.69}$$
Das ergibt für den Kommutator
$$[b_j, b_i^\dagger] = \delta_{j,i}. \tag{15.70}$$
Iteriert man den Ausdruck für den Überlapp (15.58), so findet man
$$\langle j_1...j_N|i_1..i_N\rangle = \sum_P \delta_{j_1,i_{P1}}\delta_{j_2,i_{P2}}...\delta_{j_N,i_{PN}}. \tag{15.71}$$

Teilchenzahl-Darstellung: Das Matrix-Element ist nur von 0 verschieden, wenn beide N-Teilchen-Zustände alle Einteilchen-Zustände in gleicher Anzahl besetzt haben. Auf die Reihenfolge kommt es nicht an. Man kann also angeben, wie oft jeder Zustand i besetzt ist. Bezeichnet man diese

Anzahl mit n_i, dann stellt sich heraus, dass der Überlapp das Produkt aller $n_i!$ ist, da es jeweils $n_i!$ Permutationen gibt, für die die Kronecker-Delta gleich 1 werden,

$$\langle i_1 ... i_N | i_1 ... i_N \rangle = \prod_i n_i!, \quad n_i = \sum_{m=1}^{N} \delta_{i,i_m}. \tag{15.72}$$

Das Produkt läuft dabei über alle Einteilchen-Zustände i des Hilbert-Raums. Verwendet man statt der obigen Notation, in der wir die N Einteilchen-Zustände aufführen, die Besetzungen, so führt man die normierten Zustände, die durch alle Besetzungszahlen n_i charakterisiert sind, ein

$$|...n_i...\rangle = \prod_i \frac{(b_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |\mathrm{vak}\rangle. \tag{15.73}$$

Man erkennt, dass für diese die bereits von den Phononen bekannten Beziehungen

$$b_i^\dagger |...n_i...\rangle = \sqrt{n_i + 1} |...n_i + 1...\rangle, \quad b_i |...n_i...\rangle = \sqrt{n_i} |...n_i - 1...\rangle \tag{15.74}$$

gelten. Für Fermionen kann man diese Teilchenzahl-Darstellung auch verwenden, allerdings muss man die Reihenfolge der Zustände wegen der Vorzeichen genau definieren. Die Faktoren $n_i!$ spielen dann keine Rolle, da dann nur $n_i = 0$ und $n_i = 1$ auftritt und $0! = 1! = 1$, allerdings ist dann in (15.74) $\sqrt{n_i + 1}$ durch $\sqrt{1 - n_i}$ zu ersetzen.