

ZUSÄTZLICHES ZUM ÜBUNGSBLATT NR.11

Systeme aus Bosonen, Fermionen und das Spin-Statistik-Theorem

Wir betrachten ein quantenmechanisches System, das sich aus Zuständen zusammensetzt, welche durch Wellenfunktionen $\phi_1(x_1), \phi_2(x_2), \dots$ beschrieben werden können. Dies kann beispielsweise ein unendlich hoher eindimensionaler Potentialtopf zwischen $x_1 = 0$ und $x_2 = a$ sein mit den möglichen Wellenfunktionen

$$\phi_1(x_1) = \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right), \quad \phi_2(x_2) = \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right), \dots, \phi_i(x_i) = \sin\left(\frac{i\pi}{a}x_i\right). \quad (1)$$

Diese Wellenfunktionen beschreiben Ein-Teilchen-Zustände, haben wir nämlich dazu die Schrödingergleichung

$$\hat{H}\phi_i(x_i) = E_i\phi_i(x_i), \quad (2)$$

für ein einziges Teilchen gelöst. Das System soll nun mit einer Gesamtheit von N Bosonen bzw. N Fermionen besetzt werden. Für unser Beispiel des unendlich hohen Potentialtopfes bedeutet dies, dass wir N Bosonen bzw. Fermionen auf die möglichen Zustände verteilen möchten. Ein Mikrozustand des Systems wird durch die Besetzungszahlen der Ein-Teilchen-Zustände $\phi_i(x_i)$ beschrieben. Es besteht jedoch die Frage, ob wir die Teilchen irgendwie auf die ϕ_i verteilen können oder ob wir uns dabei an bestimmte Regeln halten müssen. In der Tat müssen wir das, es gilt nämlich das sogenannte **Spin-Statistik-Theorem**:

- 1.) Die Wellenfunktion eines Systems aus Teilchen mit halbzahligem Spin (Fermionen) muss sich bezüglich des Vertauschens zweier Teilchen antisymmetrisch verhalten.
- 2.) Die Wellenfunktion eines Systems aus Teilchen mit ganzzahligem Spin (Bosonen) muss sich bezüglich des Vertauschens zweier Teilchen symmetrisch verhalten.

Das heißt, wir müssen die N Teilchen so auf die Ein-Teilchen-Wellenfunktionen verteilen, dass die Mehrteilchenwellenfunktion für Fermionen antisymmetrisch und für Bosonen symmetrisch ist (und zwar, wenn man zwei der Teilchen vertauscht). Wir nummerieren die Ein-Teilchen-Zustände anhand ihrer Quantenzahlen durch, also betrachten wir $\phi_i(x_j)$, wobei i die Quantenzahl ist, welche den Zustand charakterisiert. In der Variablen x_j fassen wir die Koordinaten und internen Quantenzahlen der Teilchen (beispielsweise Spin), die nichts mit der Quantenzahl des Zustands zu tun haben, zusammen. Es ist also $x_j = (\mathbf{r}_j, \sigma_j)$. Wir nehmen zunächst an, dass genauso viele Ein-Teilchen-Zustände wie Teilchen vorhanden sind; jedes der N Teilchen kann also einem Zustand zugeordnet werden. Dann bilden wir alle möglichen Produkte dieser Ein-Teilchen-Wellenfunktionen, also

$$\phi_1(1)\phi_2(2)\phi_3(3)\dots\phi_N(N), \quad \phi_2(1)\phi_1(2)\phi_3(3)\dots\phi_N(N), \quad (3a)$$

$$\phi_1(1)\phi_3(2)\phi_2(3)\dots\phi_N(N), \quad \phi_3(1)\phi_2(2)\phi_1(3)\dots\phi_N(N), \quad (3b)$$

um nur einige der vielen Beispiele zu nennen. Was man hier macht, ist nicht anderes, als die N Zustände mit den Quantenzahlen $i = 1, 2, \dots, N$ auf die N Teilchen zu verteilen. Das heißt, man bildet alle unterschiedlichen Permutationen der Quantenzahlen $\{1, 2, \dots, N\}$ und schreibt dementsprechend die Produkte der Ein-Teilchen-Wellenfunktionen auf. Um für Bosonen eine symmetrische Wellenfunktion zu bilden, muss über alle diese Permutationen summiert werden. Diese Darstellung wird in der Musterlösung verwendet. Ich selbst bevorzuge jedoch eine etwas alternative Schreibweise, die im Folgenden erklärt werden soll.

Die zweite Quantisierung und die Besetzungszahldarstellung

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik können in der Quantenmechanik beobachtbare Größen (beispielsweise Energie, Drehimpuls usw.) quantisiert sein. Diese Quantisierung war eine Folge der quantenmechanischen Postulate und ergab sich damit aus der Lösung der Schrödingergleichung für bestimmte physikalische Systeme wie beispielsweise den harmonischen Oszillator. Man spricht bei dieser Art der Quantisierung von „erster Quantisierung“. Das Ganze lässt sich nun derart weitertreiben, dass man Operatoren einführt, die nicht mehr direkt auf Wellenfunktionen in Abhängigkeit von Ort bzw. Impuls wirken, sondern direkt auf die Anzahl

von Teilchen! Diese Art der Beschreibung nennt man „zweite Quantisierung“ und sie ist dann nützlich zur Beschreibung von Vielteilchensystemen. Dazu möchten wir in der Besetzungszahldarstellung arbeiten. Das heißt, wir führen Zustandsvektoren der Art

$$|N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle, \quad (4)$$

ein, wobei die erste Zahl N (welche von den anderen durch ein Semikolon abgetrennt ist) die gesamte Anzahl der Bosonen bzw. Fermionen ist. Die Zahlen N_1, N_2 usw. geben die Besetzungszahlen der Zustände an, welche durch die Quantenzahl 1, 2 usw. gekennzeichnet ist. Wir machen zur Veranschaulichung eine Tabelle:

Position (Teilchen)	1	2	...	a	$a+1$	b	$b+1$
Zustand	1	1	...	2	2	i	i
Besetzungszahl	N_1			N_2			...	N_i			...

Für die Besetzungszahlen gilt

$$N_i \in \begin{cases} \mathbb{N} \cup \{0\} & \text{für Bosonen} \\ \{0; 1\} & \text{für Fermionen} \end{cases}. \quad (5)$$

Dies spiegelt wider, dass sich eine beliebig große Anzahl von Bosonen in einem Zustand $|i\rangle$ aufhalten kann, jedoch aufgrund des Pauliprinzipis nur maximal ein Fermion. Die Vektoren der Besetzungszahldarstellung bilden ein vollständiges Orthonormalsystem. Ist also nur eine einzige Besetzungszahl verschieden, so stehen die Vektoren orthogonal aufeinander:

$$\langle N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots | N+1; N_1, N_2, \dots, N_i+1, \dots \rangle = 0, \quad (6a)$$

$$\langle N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots | N; N_1, N_2, \dots, N_i+1, \dots, N_j-1, \dots \rangle = 0, \quad (6b)$$

usw. Solche Zustände spannen den sogenannten Fock-Raum auf.

Möchte man für ein System aus N Bosonen einen vollständig symmetrischen bzw. für ein System aus N Fermionen einen vollständig antisymmetrischen Zustand konstruieren, muss man wie folgt vorgehen. Die Teilchen sind auf alle erdenklichen Arten und Weisen auf Ein-Teilchen-Zustände $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots\}$ zu verteilen. Daraus folgen N -Teilchen-Zustände der Art

$$\underbrace{|1\rangle \otimes |1\rangle \otimes \dots \otimes |1\rangle}_{N_1 \text{ mal}} \otimes \underbrace{|2\rangle \otimes |2\rangle \otimes \dots \otimes |2\rangle}_{N_2 \text{ mal}} \otimes \dots \otimes \underbrace{|i\rangle \otimes |i\rangle \otimes \dots \otimes |i\rangle}_{N_i \text{ mal}} \otimes \dots \equiv | \underbrace{1, 1, \dots, 1}_{N_1 \text{ mal}}, \underbrace{2, 2, \dots, 2}_{N_2 \text{ mal}}, \dots, \underbrace{i, i, \dots, i}_{N_i \text{ mal}} \rangle, \quad (7)$$

also N -Teilchen-Zustände, in denen die Ein-Teilchen-Zustände auf alle möglichen Arten angeordnet sind. Operatoren wirken auf eine bestimmte Position im einem solchen Zustandsvektor; die Position steht für die Nummer des Teilchens (siehe obige Tabelle). Die Permutationen sorgen dafür, dass alle möglichen Zustände und damit Quantenzahlen auf die Teilchen verteilt werden; die Nummer und damit Position der Teilchen innerhalb des Zustandsvektors bleiben gleich, nur die Quantenzahlen werden anders verteilt.

Beispiel: 3 Bosonen in einem endlichen Potentialtopf

Wir betrachten einen endlichen Potentialtopf, der so gebaut sein soll, dass er nur zwei gebundene Zustände besitzt, nämlich $|1\rangle$ und $|2\rangle$. In diesen möchten wir drei Bosonen einbringen. (Der Spin der Bosonen sei 0. Bei einem Spin $\neq 0$ gibt es nämlich mehr Zustände, sofern man den Spin zusätzlich berücksichtigt.) Für die Verteilung der Bosonen auf die beiden Zustände gibt es nun vier Möglichkeiten, die wir gemäß der Besetzungszahldarstellung schreiben als:

- Zustand $|3; 3, 0\rangle$: Dabei handelt es sich um einen Drei-Teilchen-Zustand, bei dem auf dem ersten Ein-Teilchen-Zustand $|1\rangle$ drei Bosonen sitzen, der zweite $|2\rangle$ jedoch unbesetzt ist. Für die Anordnung der Ein-Teilchen-Zustände gibt es nur die eine Möglichkeit $|1, 1, 1\rangle$, also gilt

$$|3; 3, 0\rangle = |1, 1, 1\rangle. \quad (8)$$

- Zustand $|3; 2, 1\rangle$: Hier sitzen zwei Bosonen auf $|1\rangle$ und ein einziges auf $|2\rangle$. Dieses mal gibt es folgende Permutationen: $|1, 1, 2\rangle$, $|1, 2, 1\rangle$ und $|2, 1, 1\rangle$.

$$|3; 2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1, 1, 2\rangle + |1, 2, 1\rangle + |2, 1, 1\rangle). \quad (9)$$

- Zustand $|3; 1, 2\rangle$: Hier gibt es analog die Permutationen $|1, 2, 2\rangle$, $|2, 1, 2\rangle$ und $|2, 2, 1\rangle$.

$$|3; 1, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1, 2, 2\rangle + |2, 1, 2\rangle + |2, 2, 1\rangle). \quad (10)$$

- Zustand $|3; 0, 3\rangle$: Es gibt nur eine Möglichkeit der Anordnung, nämlich $|2, 2, 2\rangle$.

$$|3; 3, 0\rangle = |2, 2, 2\rangle. \quad (11)$$

Beispiel: 3 Fermionen in einem endlichen Potentialtopf

Bei Fermionen spielt das Pauliprinzip eine große Rolle, das besagt, dass maximal ein Fermion in einem Zustand Platz nehmen kann. Da Pauliprinzip ist eine direkte Folge des Spin-Statistik-Theorems. Betrachten wir noch einmal unseren Potentialtopf mit den beiden Zuständen $|1'\rangle$ und $|2'\rangle$. In diesen wollen wir drei Fermionen mit Spin-1/2 bringen. Berücksichtigt man zusätzlich den Spin, gibt es im Prinzip vier Zustände:

$$|1\rangle \equiv |1'\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad |2\rangle \equiv |1'\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |3\rangle \equiv |2'\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad |4\rangle \equiv |2'\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (12)$$

wobei die tensorielle Verknüpfung mit den Spinzuständen $|S, S_z\rangle$ durchgeführt wurde (mit der Spinquantenzahl $S = 1/2$ und den Spineinstellungen $S_z = \pm 1/2$). Es sind alle Fermionen auf die verschiedenen Zustände zu verteilen; dabei sind also alle möglichen Permutationen zu berücksichtigen. Zusätzlich müssen ungerade Permutationen, also Permutationen, die sich aus einer ungeraden Anzahl von Transpositionen (Vertauschungen von benachbarten Zuständen) zusammensetzen, mit einem Minuszeichen versehen. Über die möglichen Permutationen ist anschließend zu summieren. Das Ganze gewährleistet, dass der gesamte fermionische Zustand antisymmetrisch bezüglich der Vertauschung zweier Fermionen ist.

- Zustand $|3; 1, 1, 1, 0\rangle$: Hier sind die drei Fermionen auf die ersten drei Zustände $|1\rangle$, $|2\rangle$ und $|3\rangle$ verteilt:

$$|3; 1, 1, 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1, 2, 3\rangle + |2, 3, 1\rangle + |3, 1, 2\rangle - |3, 2, 1\rangle - |1, 3, 2\rangle - |2, 1, 3\rangle). \quad (13)$$

- Zustand $|3; 1, 1, 0, 1\rangle$: Im Gegensatz zu vorher sitzt hier ein Fermion in $|4\rangle$ anstelle von $|3\rangle$:

$$|3; 1, 1, 0, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1, 2, 4\rangle + |2, 4, 1\rangle + |4, 1, 2\rangle - |4, 2, 1\rangle - |1, 4, 2\rangle - |2, 1, 4\rangle). \quad (14)$$

Die restlichen Zustände $|3; 1, 0, 1, 1\rangle$, $|3; 0, 1, 1, 1\rangle$ könnt ihr mal selbst bestimmen ;-)

Die allgemeinen symmetrischen Boson- und antisymmetrischen Fermionenzustände

Wir benötigen noch den Normierungsfaktor eines allgemeinen N -Boson-Zustandes. Die Anzahl der Möglichkeiten, N Bosonen auf N Zustände zu verteilen, ist $N!$. Hierbei muss jedoch beachtet werden, dass Vertauschungen von zwei Bosonen, die denselben Zustand besetzen, nichts an der Physik ändert, da eine Sorte von Bosonen identische Teilchen sind. Damit gibt es zwar mathematisch $N!$ Möglichkeiten, physikalisch jedoch weit weniger. Und zwar ist durch die Anzahl der Permutationen zu dividieren, die physikalisch nichts Neues bringen. Das sind generell $N_i!$ Permutationen für jeden Zustand $|i\rangle$, auf dem N_i Bosonen verteilt werden. Damit gilt also für den voll symmetrisierten Gesamtzustand von N Bosonen:

$$|N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = \sqrt{\frac{N_1! \cdot N_2! \cdot \dots \cdot N_i! \cdot \dots}{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \left| \mathcal{P} \left(\underbrace{1, 1, \dots}_{N_1 \text{ mal}}, \underbrace{2, 2, \dots}_{N_2 \text{ mal}}, \dots, \underbrace{i, i, \dots}_{N_i \text{ mal}}, \dots \right) \right\rangle. \quad (15)$$

Bei Fermionen ist das Ganze sogar einfacher. Es gibt nämlich genau $N!$ Möglichkeiten, N Bosonen auf N Zustände zu verteilen. Eine Mehrfachbesetzung ist aufgrund des Pauliprinzips nicht möglich. Damit gilt allgemein

$$|N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\chi_{\mathcal{P}}} \left| \mathcal{P} \left(\underbrace{1, 1, \dots}_{N_1 \text{ mal}}, \underbrace{2, 2, \dots}_{N_2 \text{ mal}}, \dots, \underbrace{i, i, \dots}_{N_i \text{ mal}}, \dots \right) \right\rangle, \quad (16)$$

wobei $\chi_{\mathcal{P}}$ die Anzahl der Transpositionen (Vertauschungen benachbarter Zustände) der Permutation \mathcal{P} ist.

Ein-Teilchen-Operatoren

Wir können damit Matrixelemente von Ein-Teilchen-Operatoren

$$\widehat{F}^{(1)} = \sum_{a=1}^N f_{x_a}^{(1)}, \quad (17)$$

berechnen. Hierbei bedeutet der hochgestellte Index „(1)“, dass dieser Operator nur auf ein einziges Teilchen wirkt. Der Operator lässt sich in eine Summe aus Operatoren $f_{x_a}^{(1)}$ zerlegen, von denen jeder einzelne auf das Teilchen an der Position a wirkt. Wir werden uns deshalb im Folgenden auf Matrixelemente eines Operators $f_{x_a}^{(1)}$ beschränken, wobei zum Schluss die Summe über a ausgeführt werden muss.

Diagonale Matrixelemente für Bosonen

Diagonale Matrixelemente werden gebildet aus Zuständen mit gleichen Besetzungszahlen. Wir wollen also

$$\langle N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots | f_{x_a}^{(1)} | N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots \rangle, \quad (18)$$

berechnen. Der Operator wirkt auf eine bestimmte Position a , welcher ein Zustand mit der Quantenzahl i_1 zugeordnet sei. Dann gilt allgemein

$$\begin{aligned} \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots | \widehat{f}^{(1)} | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots \rangle = \\ \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots \rangle \langle i_1 | \widehat{f}^{(1)} | i_1 \rangle = \langle i_1 | \widehat{f}^{(1)} | i_1 \rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

Da $\widehat{f}_{x_a}^{(1)}$ ja nur auf den Unterraum des Zustands $|i_1\rangle$ wirkt, welcher auf der Position a steht. Da über alle Permutationen summiert werden muss, ist über alle Quantenzahlen i zu summieren, die an der Position a stehen können. Es handelt sich dabei um N Quantenzahlen, da N Zustände $|i\rangle$ mit N Bosonen besetzt werden müssen, also läuft die Summe von $i = 1$ bis N .

$$\begin{aligned} \langle N; N_1, N_2, \dots | f_{x_a}^{(1)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \left\{ \sum_{i=1}^N \langle i | \widehat{f}^{(1)} | i \rangle \right\} \times \\ &\times \left\{ \sum_{\text{alle } \mathcal{P}, \mathcal{P}'} \langle \underbrace{\mathcal{P}(1, \dots, 1)}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots | \underbrace{\mathcal{P}'(1, \dots, 1)}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots \rangle \right\} = \\ &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \left\{ \sum_{i=1}^N \langle i | \widehat{f}^{(1)} | i \rangle \right\} \times \\ &\times \left\{ \sum_{\text{alle } \mathcal{P}} \langle \underbrace{\mathcal{P}(1, \dots, 1)}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots | \underbrace{\mathcal{P}(1, \dots, 1)}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (20)$$

Bei der Bildung des obigen allgemeinen Matrixelements (18) stehen im Ket-Zustand $|N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ alle möglichen Permutationen der Quantenzahlen wie auch im Bra-Zustand $\langle N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots |$. Aus (19) sehen wir jedoch dass es nur dann Beiträge $\neq 0$ gibt, wenn zwei gleiche Permutationen aufeinandertreffen. Damit ist $\mathcal{P} = \mathcal{P}'$ für die verbleibenden $N - 1$ Quantenzahlen. Hier gibt es $(N - 1)!$ mögliche Permutationen, wobei durch $N_j!$ aller Quantenzahlen j dividiert werden muss, da diese Permutationen gleicher Quantenzahlen j physikalisch keinen neuen Zustand erzeugen. Bei den Quantenzahlen i fehlt eine, nämlich die, welche schon in $\langle i | \widehat{f}^{(1)} | i \rangle$ steht. Also gilt:

$$\begin{aligned} \langle N; N_1, N_2, \dots | f_{x_a}^{(1)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle &= \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \left\{ \sum_{i=1}^N \langle i | \widehat{f}^{(1)} | i \rangle \right\} \cdot \frac{(N - 1)!}{N_1! \dots (N_i - 1)! \dots} = \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{N_i}{N} \langle i | \widehat{f}^{(1)} | i \rangle. \end{aligned} \quad (21)$$

Nun ist noch über alle N Positionen a zu summieren und dies liefert N gleiche Beiträge. Also gilt:

$$\langle N; N_1, N_2, \dots | \widehat{F}^{(1)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle = \sum_{a=1}^N \sum_{i=1}^N \frac{N_i}{N} \langle i | \widehat{f}^{(1)} | i \rangle = \boxed{\sum_{i=1}^N N_i \langle i | \widehat{f}^{(1)} | i \rangle}. \quad (22)$$

Nichtdiagonale Matrixelemente für Bosonen

Wir berechnen wie angegeben die nichtdiagonalen Matrixelemente, bei denen sich im Bra- und Ket-Vektor jeweils zwei Quantenzahlen N_i und N_j um Eins unterscheiden, also:

$$\langle N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots | \hat{f}_{x_a}^{(1)} | N; N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots \rangle. \quad (23)$$

(Natürlich gibt es noch viele andere nichtdiagonale Matrixelemente, bei denen sich mehrere Quantenzahlen um mehr als Eins unterscheiden, aber um die wollen wir uns jetzt nicht kümmern.) Analog zu (19) sind wieder Matrixelemente zu bilden:

$$\begin{aligned} & \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \underbrace{2, \dots, 2}_{N_2}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots | \hat{f}^{(1)} | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \underbrace{2, \dots, 2}_{N_2}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots \rangle = \\ & \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{2, \dots, 2}_{N_2}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \underbrace{2, \dots, 2}_{N_2}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots \rangle \langle i | \hat{f}^{(1)} | j \rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

Aufgrund des Skalarprodukts auf der linken Seite tragen nur solche Matrixelemente bei, für die der Bra-Vektor ein Zustand der Quantenzahl i und der Ket-Vektor ein Zustand der Quantenzahl j ist. Alle anderen Möglichkeiten verschwinden. Ebenso müssen die beiden Permutationen wieder gleich sein, weil das Skalarprodukt dann auch verschwindet. Also gilt:

$$\begin{aligned} & \langle N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots | \hat{f}_{x_a}^{(1)} | N; N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots \rangle = \\ & = \frac{N_1! \dots N_{i-1}! N_{i+1}! \dots N_{j-1}! N_{j+1}! \dots}{N!} \sqrt{N_i!(N_i - 1)! N_j!(N_j - 1)!} \langle i | \hat{f}^{(1)} | j \rangle \times \\ & \times \left\{ \sum_{\text{alle } \mathcal{P}, \mathcal{P}'} \langle \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{2, \dots, 2}_{N_2}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots) | \mathcal{P}'(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{2, \dots, 2}_{N_2}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots) \rangle \right\} = \\ & = \frac{N_1! \dots N_{i-1}! N_{i+1}! \dots N_{j-1}! N_{j+1}! \dots}{N!} \sqrt{N_i!(N_i - 1)! N_j!(N_j - 1)!} \langle i | \hat{f}^{(1)} | j \rangle \times \\ & \times \left\{ \sum_{\text{alle } \mathcal{P}} \langle \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{2, \dots, 2}_{N_2}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots) | \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{2, \dots, 2}_{N_2}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots) \rangle \right\} \end{aligned} \quad (25)$$

Da es sich nur noch um $N - 1$ Quantenzahlen handelt, gibt es $(N - 1)!$ Möglichkeiten, diese anzuordnen. Es ist jedoch wieder durch die $N_k!$ Möglichkeiten der Anordnung von identischen Quantenzahlen k zu dividieren, die keinen neuen physikalischen Zustand erzeugen. Also erhalten wir:

$$\begin{aligned} & \langle N; N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots | \hat{f}_{x_a}^{(1)} | N; N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots \rangle = \\ & = \frac{N_1! \dots N_{i-1}! N_{i+1}! \dots N_{j-1}! N_{j+1}! \dots}{N!} \sqrt{N_i!(N_i - 1)! N_j!(N_j - 1)!} \langle i | \hat{f}^{(1)} | j \rangle \times \\ & \times \frac{(N - 1)!}{N_1! \dots (N_i - 1)! (N_j - 1)! \dots} = \frac{\sqrt{N_i N_j}}{N} \langle i | \hat{f}^{(1)} | j \rangle. \end{aligned} \quad (26)$$

und Summation über a liefert:

$$\langle N; N_1, \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots | \hat{F}^{(1)} | N; N_1, \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots \rangle = \sqrt{N_i N_j} \langle i | \hat{f}^{(1)} | j \rangle. \quad (27)$$

Zwei-Teilchen-Operatoren

Diese wirken nun auf zwei verschiedene Bosonen bzw. Fermionen und können wie folgt zerlegt werden:

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{a < b} \hat{f}_{x_a x_b}^{(2)}. \quad (28)$$

Diagonale Matrixelemente für Bosonen

Wir möchten Matrixelemente

$$\langle N; N_1, N_2, \dots | \hat{f}_{x_a x_b}^{(2)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle, \quad (29)$$

berechnen. Dazu benötigen wir wieder die Matrixelemente, wobei es jetzt zwei Möglichkeiten gibt. Zum ersten kann $\widehat{f}^{(2)}$ auf zwei Teilchen wirken, die denselben Zustand mit der Quantenzahl i besetzen:

$$\begin{aligned} \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots | \widehat{f}^{(2)} | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots \rangle = \\ = \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-2}, \dots | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-2}, \dots \rangle \langle i, i | \widehat{f}^{(2)} | i, i \rangle. \end{aligned} \quad (30)$$

Damit folgt dann analog zum Ein-Teilchen-Operator:

$$\begin{aligned} \langle N; N_1, N_2, \dots | f_{x_a x_b}^{(2)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \left\{ \sum_{i=1}^N \langle i, i | \widehat{f}^{(2)} | i, i \rangle \right\} \times \\ \times \left\{ \sum_{\text{alle } \mathcal{P}} \langle \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-2}, \dots) | \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-2}, \dots) \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Es gibt $(N-2)!$ Möglichkeiten der Anordnung der Quantenzahlen, da wir schon zwei Quantenzahlen in $\langle i, i | \widehat{f}^{(2)} | i, i \rangle$ stecken. Weiterhin ist auch hier durch die $N_k!$ Möglichkeiten der Anordnung von identischen Quantenzahlen k zu teilen. Im Falle der Quantenzahl i sind dies dann $(N_i-2)!$ Möglichkeiten. Also folgt zum einen:

$$\begin{aligned} \langle N; N_1, N_2, \dots | f_{x_a x_b}^{(2)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \left\{ \sum_{i=1}^N \langle i, i | \widehat{f}^{(2)} | i, i \rangle \right\} \frac{(N-2)!}{N_1! \dots (N_i-2)! \dots} = \\ = \frac{N_i(N_i-1)}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \langle i, i | \widehat{f}^{(2)} | i, i \rangle. \end{aligned} \quad (32)$$

Nun gibt es noch die Möglichkeit, dass der Zwei-Teilchen-Operator auf zwei Teilchen wirkt, denen unterschiedliche Quantenzahlen i und j zugeordnet sind. Dann gilt

$$\begin{aligned} \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots | \widehat{f}^{(2)} | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots \rangle = \\ = \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots \rangle (\langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | i, j \rangle + \langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | j, i \rangle), \end{aligned} \quad (33)$$

wobei man auch die Möglichkeit berücksichtigen muss, dass i und j im Ket-Zustand vertauscht sind. (Eine Vertauschung von i und j im Bra-Zustand muss nicht explizit hingeschrieben werden, da über i und j summiert wird und diese Möglichkeit dann automatisch schon drinsteckt.) Es ergibt sich also weiter:

$$\begin{aligned} \langle N; N_1, N_2, \dots | f_{x_a x_b}^{(2)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \left\{ \sum_{i,j=1}^N (\langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | i, j \rangle + \langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | j, i \rangle) \right\} \times \\ \times \left\{ \sum_{\text{alle } \mathcal{P}} \langle \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots) | \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots) \rangle \right\} = \\ = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \left\{ \sum_{i,j=1}^N (\langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | i, j \rangle + \langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | j, i \rangle) \right\} \cdot \frac{(N-2)!}{N_1! \dots (N_i-1)! \dots (N_j-1)! \dots} = \\ = \frac{N_i N_j}{N(N-1)} \left\{ \sum_{i,j=1}^N (\langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | i, j \rangle + \langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | j, i \rangle) \right\}. \end{aligned} \quad (34)$$

Führen wir jetzt noch die Summen über a und b aus (welche einen Faktor $N(N-1)/2$ liefern, folgt, wenn $\widehat{f}^{(2)}$ auf zwei Ein-Teilchen-Zustände mit derselben Quantenzahl i wirkt

$$\boxed{\langle N; N_1, N_2, \dots | \widehat{F}^{(2)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N N_i N_j \langle i, i | \widehat{f}^{(2)} | i, i \rangle,} \quad (35)$$

und falls $\hat{f}^{(2)}$ auf zwei Ein-Teilchen-Zustände mit unterschiedlichen Quantenzahlen i und j wirkt:

$$\langle N; N_1, N_2, \dots | \hat{F}^{(2)} | N; N_1, N_2, \dots \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N N_i N_j (\langle i, j | \hat{f}^{(2)} | i, j \rangle + \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | j, i \rangle). \quad (36)$$

Nichtdiagonale Matrixelemente für Bosonen

Wir möchten nun Matrixelemente der Form

$$\langle N; \dots, N_i, \dots, N_j, \dots, N_l - 1 | \hat{f}_{x_a x_b}^{(2)} | N; \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots, N_l \rangle, \quad (37)$$

berechnen. Dazu sind wieder wie schon zuvor folgende Matrixelemente zu berechnen:

$$\begin{aligned} & \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l} | \hat{f}^{(2)} | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l} \rangle = \\ & \langle \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l-1} | \underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l-1} \rangle \times \\ & \times (\langle i, j | \hat{f}^{(2)} | l, j \rangle + \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | j, l \rangle). \end{aligned} \quad (38)$$

Aufgrund der Summe über alle Permutationen ergibt sich eine Summe über j , die irgendeine Quantenzahl $\neq i$ und $\neq l$ ist. Über i und l wird wie schon bei den nichtdiagonalen Matrixelementen des Ein-Teilchen-Operators nicht summiert, da diese festliegen:

$$\begin{aligned} & \langle N; \dots, N_i, \dots, N_j, \dots, N_l - 1 | \hat{f}_{x_a x_b}^{(2)} | N; \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots, N_l \rangle = \\ & = \frac{N_1! \dots N_j! \dots}{N!} \sqrt{N_i! (N_i - 1)! N_l! (N_l - 1)!} \left\{ \sum_j \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | l, j \rangle + \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | j, l \rangle \right\} \times \\ & \times \sum_{\text{alle } \mathcal{P}} \langle \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l-1}) | \mathcal{P}(\underbrace{1, \dots, 1}_{N_1}, \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l-1}) \rangle = \\ & = \frac{N_1! \dots N_j! \dots}{N!} \sqrt{N_i! (N_i - 1)! N_l! (N_l - 1)!} \left\{ \sum_j \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | l, j \rangle + \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | j, l \rangle \right\} \times \\ & \times \frac{(N - 2)!}{N_1! \dots (N_i - 1)! (N_j - 1)! (N_l - 1)! \dots} = \\ & = \frac{1}{2N(N - 1)} \sum_j N_j \sqrt{N_i N_l} (\langle i, j | \hat{f}^{(2)} | l, j \rangle + \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | j, l \rangle). \end{aligned} \quad (39)$$

Summation über a und b liefert wieder:

$$\begin{aligned} & \langle N; \dots, N_i, \dots, N_j, \dots, N_l - 1 | \hat{F}^{(2)} | N; \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots, N_l \rangle = \\ & = \frac{1}{2} \sum_j N_j \sqrt{N_i N_l} (\langle i, j | \hat{f}^{(2)} | l, j \rangle + \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | j, l \rangle). \end{aligned}$$

Nun gibt es auch noch Matrixelemente der Form

$$\langle N; N_1, \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots, N_l, \dots, N_m - 1, \dots | \hat{f}_{x_a x_b}^{(2)} | N; N_1, \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots, N_l - 1, \dots, N_m, \dots \rangle, \quad (40)$$

berechnen. Dazu benötigen wir

$$\begin{aligned} & \langle \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l}, \dots, \underbrace{m, \dots, m}_{N_m-1} | \hat{f}^{(2)} | \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l-1}, \dots, \underbrace{m, \dots, m}_{N_m} \rangle = \\ & = \langle \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l-1}, \dots, \underbrace{m, \dots, m}_{N_m-1} | \dots, \underbrace{i, \dots, i}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots, j}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots, l}_{N_l-1}, \dots, \underbrace{m, \dots, m}_{N_m-1} \rangle \times \\ & \times (\langle i, l | \hat{f}^{(2)} | j, m \rangle + \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | m, l \rangle). \end{aligned} \quad (41)$$

Also gilt

$$\begin{aligned}
& \langle N; N_1, \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots, N_l, \dots, N_m - 1, \dots | \widehat{f}_{x_a x_b}^{(2)} | N; N_1, \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots, N_l - 1, \dots, N_m, \dots \rangle = \\
& = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sqrt{N_i! (N_i - 1)! N_j! (N_j - 1)! N_l! (N_l - 1)! N_m! (N_m - 1)!} (\langle i, l | \widehat{f}^{(2)} | j, m \rangle + \langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | m, l \rangle) \times \\
& \times \sum_{\text{alle } \mathcal{P}} \langle \mathcal{P}(\dots, \underbrace{i, \dots}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots}_{N_l-1}, \dots, \underbrace{m, \dots}_{N_m-1}, \dots) | \mathcal{P}(\dots, \underbrace{i, \dots}_{N_i-1}, \dots, \underbrace{j, \dots}_{N_j-1}, \dots, \underbrace{l, \dots}_{N_l-1}, \dots, \underbrace{m, \dots}_{N_m-1}, \dots) \rangle = \\
& = \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \sqrt{N_i! (N_i - 1)! N_j! (N_j - 1)! N_l! (N_l - 1)! N_m! (N_m - 1)!} (\langle i, l | \widehat{f}^{(2)} | j, m \rangle + \langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | m, l \rangle) \times \\
& \times \frac{(N - 2)!}{N_1! \dots (N_i - 1)! (N_j - 1)! (N_l - 1)! (N_m - 1)! \dots} = \\
& = \frac{\sqrt{N_i N_j N_l N_m}}{N(N - 1)} (\langle i, l | \widehat{f}^{(2)} | j, m \rangle + \langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | m, l \rangle), \tag{42}
\end{aligned}$$

also für diesen Fall

$$\boxed{
\begin{aligned}
& \langle N; N_1, \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots, N_l, \dots, N_m - 1, \dots | \widehat{F}^{(2)} | \\
& \quad | N; N_1, \dots, N_i - 1, \dots, N_j, \dots, N_l - 1, \dots, N_m, \dots \rangle = \\
& = \frac{1}{2} \sqrt{N_i N_j N_l N_m} (\langle i, l | \widehat{f}^{(2)} | j, m \rangle + \langle i, j | \widehat{f}^{(2)} | m, l \rangle).
\end{aligned}
}$$

Zu guter Letzt wollen wir noch Matrixelemente der Gestalt

$$\langle N_1, \dots, N_i, \dots, N_l - 2, \dots | \widehat{f}_{x_a x_b}^{(2)} | N_1, \dots, N_i - 2, \dots, N_l, \dots \rangle, \tag{43}$$

berechnen. Dazu verwenden wir

$$\begin{aligned}
& \langle \dots, \underbrace{i, \dots}_{N_i}, \dots, \underbrace{l, \dots}_{N_l-2}, \dots | \widehat{f}^{(2)} | \dots, \underbrace{i, \dots}_{N_i-2}, \dots, \underbrace{l, \dots}_{N_l}, \dots \rangle = \\
& = \langle \dots, \underbrace{i, \dots}_{N_i-2}, \dots, \underbrace{l, \dots}_{N_l-2}, \dots | \dots, \underbrace{i, \dots}_{N_i-2}, \dots, \underbrace{l, \dots}_{N_l-2}, \dots \rangle \langle i, i | \widehat{f}^{(2)} | l, l \rangle. \tag{44}
\end{aligned}$$

Die Rechnung funktioniert wieder analog und es folgt dann

$$\boxed{
\langle N; N_1, \dots, N_i, \dots, N_l - 2, \dots | \widehat{F}^{(2)} | N; \dots, N_i - 2, \dots, N_l, \dots \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{N_i (N_i - 1) N_l (N_l - 1)} \langle i, i | \widehat{f}^{(2)} | l, l \rangle. \tag{45}
}$$

Bei Bosonen wird es meistens so sein, dass sich jeweils eine gewisse Anzahl in unterschiedlichen Zuständen aufhält.

Matrixelemente für Fermionen

Nach diesen sehr ausführlichen Betrachtungen solltet ihr diese selbst bestimmen können ;-). Es sind hier die zusätzlichen Minuszeichen bei ungeraden Permutationen zu beachten. Betrachten wir als kleines Beispiel ein nichtdiagonales Matrixelement des Ein-Teilchen-Operators und zwar:

$$\langle N; \dots, 1_i, \dots, 0_j, \dots | \widehat{f}_{x_a}^{(1)} | N; \dots, 0_i, \dots, 1_j, \dots \rangle. \tag{46}$$

Wir bilden wieder (\square steht hierbei für eine unbesetzte Quantenzahl):

$$\begin{aligned}
& \langle \dots, i, \dots, \square, \dots | \widehat{f}^{(1)} | \dots, \square, \dots, j, \dots \rangle = \\
& \langle \dots, \square, \dots, \square, \dots | \widehat{f}^{(1)} | \dots, \square, \dots, \square, \dots \rangle (-1)^{\theta_{ij}} \langle i | \widehat{f}^{(1)} | j \rangle. \tag{47}
\end{aligned}$$

Es tragen nur die Matrixelemente bei, für die der Bra-Vektor der Zustand der Quantenzahl i und der Ket-Vektor der Zustand der Quantenzahl j ist. Es sind jedoch beide Quantenzahlen i und j jeweils zur Position a zu bringen. Das erfordert bei i und j jeweils bei jeder Vertauschung mit einer Quantenzahl einen Faktor -1 , bis die Position a erreicht ist. Der Nettoeffekt ist die Anzahl der Quantenzahlen zwischen i und j , also

$$\theta_{ij} = (-1)^{\sum_{k=i+1}^{j-1} N_k}, \tag{48}$$

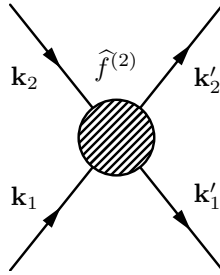
wobei $N_k \in \{0; 1\}$. (Befindet sich kein Teilchen in einem Zustand, so ist die Besetzungszahl 0 und das führt dann auch zu keinem Minuszeichen.) Anschließend ist noch über die $(N - 1)!$ verbleibenden Permutationen zu summieren:

$$\begin{aligned} \langle N; \dots, 1_i, \dots, 0_j, \dots | \hat{f}_{x_a}^{(1)} | N; \dots, 0_i, \dots, 1_j, \dots \rangle &= \\ = \frac{1}{N!} \sum_{\varphi} \langle \dots, \square, \dots, \square, \dots | \hat{f}^{(1)} | \dots, \square, \dots, \square, \dots \rangle (-1)^{\theta_{ij}} \langle i | \hat{f}^{(1)} | j \rangle &= \frac{1}{N} (-1)^{\theta_{ij}} \langle i | \hat{f}^{(1)} | j \rangle. \end{aligned} \quad (49)$$

So, das muss reichen, hab auch keine Lust mehr ;-)

Aufgabe 2

Im Prinzip beschreiben Matrixelemente $\mathcal{M} = \langle \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 | \hat{f}^{(2)} | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle$ die Streuung von zwei Teilchen mit den Impulsen $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ im Anfangszustand nach zwei Teilchen mit den Impulsen \mathbf{k}'_1 und \mathbf{k}'_2 im Endzustand. Der Operator $\hat{f}^{(2)}$ wirkt auf den Anfangszustand $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle$ und dreht diesen im Zustandsraum. Danach wirkt $\langle \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 |$ auf diesen gedrehten Vektor; das Matrixelement gibt also die Wahrscheinlichkeit an, die beiden Teilchen im Endzustand $|\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2\rangle$ zu finden, sofern der Anfangszustand $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle$ war. Im Zwei-Teilchen-Operator steckt $\hat{f}^{(2)}$ steckt die ganze Information über das, was während der Streuung abläuft (beispielsweise der Austausch von virtuellen Teilchen usw.)



Betrachten wir die Orthogonalitätsrelation $\langle \mathbf{k}, \mathbf{k}' \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, ergibt sich, indem wir die vollständige Orts-eigenbasis $|\mathbf{x}\rangle$ einschieben:

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \int d\mathbf{x} \langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}' \rangle \stackrel{!}{=} \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (50)$$

Die Bedingung erfüllen wir, wenn wir an die Exponentialdarstellung der δ -Funktion denken:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \equiv \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}, \quad \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}' \rangle^* = \phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) = \frac{\exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x})}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}. \quad (51)$$

Die $|\phi\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ beschreiben einlaufende bzw. auslaufende Teilchen, sind also im Wesentlichen ebene Wellen. (Es handelt sich dabei außerdem um die Eigenzustände des Impulsoperators.) Ebene Wellen sind nur auf ein endliches Volumen V normierbar. Sei A die Normierungskonstante:

$$\int_V d^3x |A\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|^2 = \frac{|A|^2}{(2\pi)^3} \cdot V \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow |A| = \frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{V}}. \quad (52)$$

Wir wählen A reell und erhalten damit die aus der Übungsaufgabe angegebenen Funktionen:

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}). \quad (53)$$

(Die Spinquantenzahl ignorieren wir, da sie in der Aufgabe keine Rolle spielt.) Nun können wir das Matrixelement berechnen:

$$\mathcal{M} = \langle \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 | \hat{f}^{(2)} | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle = \int d^3x_1 \int d^3x_2 \langle \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \hat{f}^{(2)} | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle. \quad (54)$$

Analog zu Ein-Teilchen-Zuständen gilt für Zwei-Teilchen-Zustände:

$$\langle \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle = \phi_{\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2}^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{V} \exp(-i[\mathbf{k}'_1 \cdot \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}'_2 \cdot \mathbf{x}_2]). \quad (55)$$

$\widehat{f}^{(2)}$ hängt als Operator selbst von Ortsoperatoren \widehat{x}_1 und \widehat{x}_2 ab. Wir lassen $\widehat{f}^{(2)}$ also nach links wirken und erhalten dann:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \widehat{f}^{(2)} | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle &= \widehat{f}^{(2)} \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle = \widehat{f}^{(2)} \phi_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \phi_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \\ &= U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \frac{1}{V} \exp(i[\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}_2]),\end{aligned}\quad (56)$$

Damit ergibt sich weiter:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{V^2} \int d^3x_1 \int d^3x_2 \exp(i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) \cdot \mathbf{x}_1 + i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2) \cdot \mathbf{x}_2) U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \quad (57)$$

Bemerkung: Die in der Aufgabe vorgegebenen Betragsstriche bei der Differenz $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ werden wir weglassen, da sie nicht maßgeblich für die Translationsinvarianz sind. Translationsinvarianz bedeutet Invarianz unter Verschiebungen (beispielsweise um einen konstanten Vektor \mathbf{a}) und genau das ist die Differenz

$$\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}'_2 = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}) - (\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}) = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, \quad (58)$$

auch ohne Betragsstriche. Die Integration über \mathbf{x}_1 und \mathbf{x}_2 ist noch nicht möglich, da wir nicht wissen, wie die Funktion $U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$ aussieht. Wir führen damit die Fouriertransformierte $U(\mathbf{k})$ ein über

$$U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = \frac{1}{V} \int d^3k \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)) U(\mathbf{k}), \quad (59)$$

womit sich ergibt, wenn wir die Integrale umsortieren:

$$\begin{aligned}\mathcal{M} &= \frac{1}{V^3} \int d^3k \int d^3x_1 \int d^3x_2 \exp(i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}_1 + i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}_2) = \\ &= \frac{1}{V^3} \int d^3k \int d^3x_1 \exp(i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}_1) \int d^3x_2 \exp(i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}_2).\end{aligned}\quad (60)$$

Verwenden wir nun erneut die Exponentialdarstellung der Exponentialfunktion, resultiert:

$$\mathcal{M} = \frac{(2\pi)^6}{V^3} \int d^3k \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}). \quad (61)$$

Bemerkung: Die δ -Funktion ist eine Distribution (verallgemeinerte Funktion) und eigentlich ist mathematisch nur die Wirkung auf eine andere Funktion, die selbst keine Distribution ist, wohldefiniert. Sprich, das Produkt zweier δ -Funktionen ist mathematisch nicht wohldefiniert. Hier bereitet das Ganze jedoch keine Probleme und wir führen das letzte Integral über \mathbf{k} aus. Dies führt dazu, dass eine δ -Funktion übrig bleibt, welche die Impulse auf die Bedingung

$$\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2 = 0, \quad \boxed{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2}, \quad (62)$$

reduziert, was nichts anderes ist als die Erhaltung des Impulses! Aufgrund der Translationsinvarianz steckt Impulserhaltung in jeden Matrixelement von vorn herein drin.