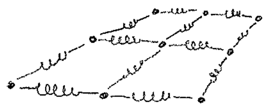
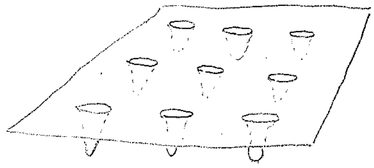
# 5. Viele Teilchen

Zum Beispiel: zweidimensionaler Kristall.

Gesichtspunkt von Kernen:



Gesichtspunkt von Elektronen:



Das Ziel wird sein, es zu verstehen, dass solche Vielteilchensysteme anstelle vieler Operatoren $(\hat{\vec{x}}_1, \dots, \hat{\vec{x}}_N)$ auch durch Felder $(\hat{\phi}(\vec{x},t),\ \vec{x}$ kein Operator$)$ beschrieben werden können. (Vgl. mit klassischer Hydrodynamik: $\{\vec{x}_i\},\ i=1,\dots,N \Rightarrow \rho(\vec{x},t) = \sum_{i=1}^{N} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_i(t))$).

Wir tun dies in beiden Richtungen:

(i) ein Feld (bestehend aus sehr vielen Gitterschwingungen)

mittels Pfadintegralquantisierung $\Rightarrow$

einzelne Teilchen („Phononen")

(ii) einzelne Teilchen im „Fock-Raum"

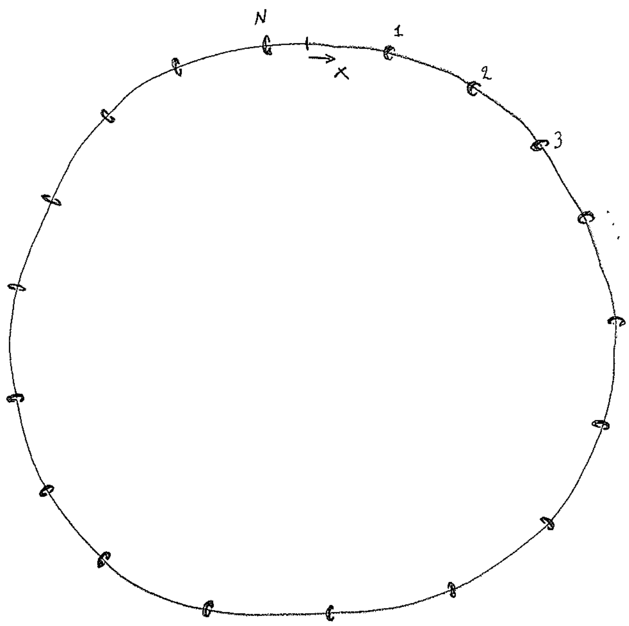
mittels kanonischer Quantisierung $\Rightarrow$

ein quantisiertes Feld („zweite Quantisierung")

Pfadintegralquantisierung von Feldoperatoren

## 5.1 Phononen [Feynman-Hibbs 8.2-4]

Betrachte eine „Perlenkette":




Koordinaten: $x_1, \dots, x_N$; $x_{N+1} := x_1$.

Auslenkung aus Gleichgewichtslage:

$$q_i := \sqrt{m_i}\,(x_i - x_{i,0}).$$

Warum geht es um ein „Feld"?

Freiheitsgrade:

$$\{q_1, q_2, q_3, \dots, q_N\}$$

Index ist wie eine Koordinate

Auslenkung ist wie der Wert eines Feldes bei gegebener Koordinate:

$$\{q_i\} \leftrightarrow q(i).$$

„Normalkoordinaten":

Kinetische Energie: $T = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m_i \left( \frac{d(x_i - x_{i,0})}{dt} \right)^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} \dot{q}_i^2$ .

Potentielle Energie: Entwickle in Taylor-Reihe in kleinen Auslenkungen:

$$V(q_1, q_2, \ldots, q_N) = V(0,0,\ldots,0) + \sum_{i=1}^{N} q_i V_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} q_i q_j V_{ij} + \mathcal{O}(q^3),$$

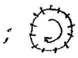
wobei $V_i := \frac{\partial V(0,0,\ldots,0)}{\partial q_i} \stackrel{!}{=} 0$ ( $q_i = 0$ ist Gleichgewicht!)

$$V_{ij} := \frac{\partial^2 V(0,0,\ldots,0)}{\partial q_i \partial q_j} .$$

Eigenschaften der $N \times N$-Matrix $V_{ij}$ :

(i) $V_{ij} \in \mathbb{R} \quad \forall\, i,j$.

(ii) $V_{ji} = V_{ij} \quad \forall\, i,j$, d.h. symmetrisch.

(iii) falls das System translationsinvariant ist (bzw. „rotationsinvariant" ;  ) gilt auch:

$$0 = \frac{\partial V(0,0,\ldots,0)}{\partial q_i} = \frac{\partial V(\varepsilon,\varepsilon,\ldots,\varepsilon)}{\partial q_i}$$

$$\stackrel{\text{Taylor}}{\Rightarrow} \sum_{j=1}^{N} \varepsilon \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \vdots \\ \varepsilon \end{pmatrix}$$ ist ein Eigenvektor von $V_{ij}$ mit Eigenwert $= 0$.

Lineare Algebra: $V_{ij}$ ist symmetrisch $\Rightarrow$

(i) Eigenwerte sind reell; bezeichne sie mit $+\omega_i^2$.

(ii) Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal zueinander.

(iii) $V_{ij}$ kann diagonalisiert werden, mit orthogonaler Matrix $\mathcal{O}$ („Hauptachsentransformation"):

$$q^T V q = \underbrace{(\mathcal{O}^T q)^T}_{=: Q^T} \underbrace{\mathcal{O}^T V \mathcal{O}}_{\begin{pmatrix} \omega_1^2 & & \\ & \omega_2^2 & \\ & & \ddots \; \omega_N^2 \end{pmatrix}} \underbrace{\mathcal{O}^T q}_{=: Q} = \sum_{i=1}^{N} \omega_i^2 Q_i^2$$

Bemerkung: $\exists\, \mathcal{O}$ auch wenn $\nexists\, V^{-1}$ !

Es folgt:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} q_i V_{ij} q_j = \frac{1}{2} \dot{q}^T \underset{\mathcal{O}\mathcal{O}^T}{,} \dot{q} - \frac{1}{2} q^T V q$$

$$= \frac{1}{2} \dot{Q}^T \dot{Q} - \frac{1}{2} Q^T \begin{pmatrix} \omega_1^2 & & \\ & \omega_2^2 & \\ & & \ddots \; \omega_N^2 \end{pmatrix} Q = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} \left( \dot{Q}_i^2 - \omega_i^2 Q_i^2 \right) .$$

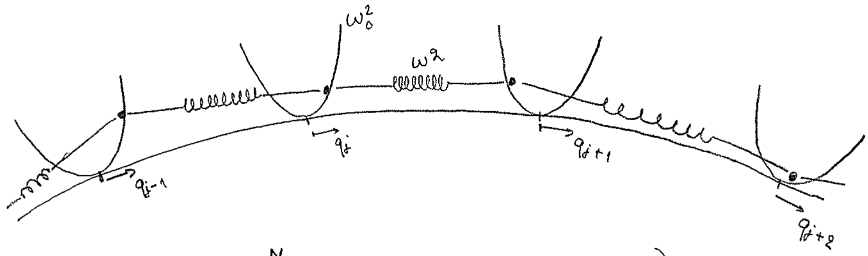
D.h. ein System von $N$ abgekoppelten harmonischen Oszillatoren! Die $Q_i$ heißen „Normalkoordinaten".

Integrationsmaß: $\int \mathcal{D}q_1 \mathcal{D}q_2 \cdots \mathcal{D}q_N = |\det \mathcal{O}| \int \mathcal{D}Q_1 \mathcal{D}Q_2 \cdots \mathcal{D}Q_N$

$\mathcal{O}^T \mathcal{O} = \mathbb{1} \Rightarrow |\det \mathcal{O}| = 1 \Rightarrow$ das Ganze funktioniert sowohl klassisch als auch quantenmechanisch!

**Beispiel:**

(Index: $i \to j$)




$$V := \sum_{j=1}^{N} \left\{ \frac{1}{2}\omega_0^2 q_j^2 + \frac{1}{2}\omega^2 (q_{j+1}-q_j)^2 \right\}_{q_{N+1}:=q_1} .$$

Wie findet man die Normalkoordinaten in der Praxis?

Wieder einmal: durch Fourier-Analyse!

Ansatz: $\quad q_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^{N} e^{ijkr} Q_k \quad$ ; $i =$ Imaginäreinheit, $r \in \mathbb{R}$

Bestimmung von $r$: $\quad q_{N+1} = q_1 \Rightarrow e^{i(N+1)kr} = e^{ikr} \quad \forall k$

$\Rightarrow Nkr = 2\pi \cdot n, \; n \in \mathbb{Z} \quad \forall k$

Wähle $\boxed{r := \frac{2\pi}{N}}$ .

Behauptung: $$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} e^{\frac{2\pi i (j-j')k}{N}} = \begin{cases} 1, & j = j' \mod N \\ 0, & \text{sonst} . \end{cases}$$

Beweis: $\quad z := e^{\frac{2\pi i (j-j')}{N}} \neq 1$

$$\Rightarrow \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} z^k = \frac{1}{N}(z+z^2+\dots+z^N) = \frac{z(1-\overbrace{z^N}^{1})}{N(1-z)} = 0 \quad ■ .$$

Folgen:

$$* \quad \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-\frac{2\pi i jk}{N}} q_j = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k'=1}^{N} e^{\frac{2\pi i j(k'-k)}{N}} Q_{k'}$$

$$= \sum_{k'=1}^{N} \delta_{k', k \bmod N} Q_{k'} = Q_k \quad \text{„Inverse"}$$

$$* \quad \sum_{j=1}^{N} q_j^2 = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\sum_{k'=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} e^{\frac{2\pi i j(k+k')}{N}} Q_k Q_{k'} = \sum_{k=1}^{N} Q_k Q_{N-k}$$

$$* \quad \sum_{j=1}^{N} \dot{q}_j^2 = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\sum_{k'=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} e^{\frac{2\pi i j(k+k')}{N}} \dot{Q}_k \dot{Q}_{k'} = \sum_{k=1}^{N} \dot{Q}_k \dot{Q}_{N-k}$$

$$* \quad \sum_{j=1}^{N} (q_{j+1}-q_j)^2 = 2\sum_{j=1}^{N} q_j (q_j - q_{j+1})$$

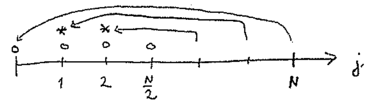
$$= \frac{2}{N}\sum_{k=1}^{N}\sum_{k'=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} e^{\frac{2\pi i j(k+k')}{N}} Q_k Q_{k'} \left(1 - e^{\frac{2\pi i k'}{N}}\right)$$

$$\overset{k'=N-k}{=} 2\sum_{k=1}^{N} Q_k Q_{N-k} \left(1 - e^{-\frac{2\pi i k}{N}}\right)$$

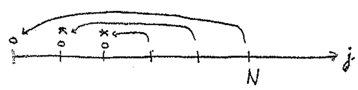
Unabhängige Normalkoordinaten:

$$q_j \in \mathbb{R} \Rightarrow q_j^* = q_j \Rightarrow Q_k^* = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{\frac{2\pi i jk}{N}} q_j \overset{!}{=} Q_{N-k}$$

$N$ gerade:




$N$ ungerade:



Außerdem gilt $\left( 2\sum_{k=1}^{N-1} f(k) = \sum_{k=1}^{N-1} f(k) + \sum_{k=1}^{N-1} f(N-k) \right)$:

$$1 - e^{-\frac{2\pi i k}{N}} + 1 - e^{-\frac{2\pi i (N-k)}{N}} = 2 - e^{\frac{2\pi i k}{N}} - e^{-\frac{2\pi i k}{N}}$$

$$= 2\left(1 - \cos\left(\frac{2\pi k}{N}\right)\right) = 4 \sin^2\left(\frac{\pi k}{N}\right).$$

Endergebnis:

nur für gerades N

$$L = \frac{1}{2}\left(\dot{Q}_0^2 - \omega_0^2 Q_0^2\right) + \frac{1}{2}\left(\dot{Q}_{N/2}^2 - \left[\omega_0^2 + 4\omega^2\right] Q_{N/2}^2\right)$$

$$+ \sum_{0<k<\frac{N}{2}} \left\{ \dot{Q}_k^* \dot{Q}_k - \underbrace{\left[\omega_0^2 + \omega^2\left(2\sin\frac{\pi k}{N}\right)^2\right]}_{=:\,\omega_k^2} Q_k^* Q_k \right\}.$$

$\Rightarrow$ N abgekoppelte harmonische Oszillatoren mit Kreisfrequenzen $\omega_k^2$ (die komplexen zählen zweimal: $Q_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_k + i b_k)$, $Q_k^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_k - i b_k)$).

## Interpretation:

* klassisch:

Die Normalkoordinaten stellen „kollektive" Schwingungen dar: viele (bzw. alle) $q_j$'s bewegen sich „kohärent". Anders ausgedrückt, die Bewegung eines gegebenen Massenpunkts $q_j$ ist eine Linearkombination von abgekoppelten „Normalschwingungen":

$$q_j(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \left\{ Q_0(t) + \sum_{0<k<\frac{N}{2}} \left[ Q_k(t)\, e^{\frac{2\pi i j k}{N}} + Q_k^*(t)\, e^{-\frac{2\pi i j k}{N}} \right] + Q_{\frac{N}{2}}(t)\,(-1)^j \right\}.$$

ursprünglich $k=N$; $k \to N-k$ ursprünglich $k>\frac{N}{2}$; $k \to N-k$ nur für gerades N

Die Amplituden der unterschiedlichen Normalschwingungen werden durch Anfangsbedingungen $(\{q_j(0), \dot{q}_j(0)\})$ bestimmt.

* quantenmechanisch:

Die Normalkoordinaten entsprechen abgekoppelten harmonischen Oszillatoren. Jeder Oszillator hat einen „Wellenvektor" $\left(\frac{2\pi k}{N}\right)$ und eine Kreisfrequenz $\left(\omega_k^2 = \omega_0^2 + \omega^2\left(2\sin\frac{\pi k}{N}\right)^2\right)$ sowie eine „Besatzungszahl", $n_k = 0, 1, 2, \ldots$.

Gesamtenergie des Systems: $E = \sum_k \hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right)$.

Die Anregungszustände $(n_k = 1, 2, \ldots)$ werden „Quasiteilchen" bzw. „Phononen"* mit einer bestimmten Impuls $\left(\sim \hbar \cdot \frac{2\pi k}{N}\right)$ und Energie $(\hbar\omega_k)$ genannt. Die Phononen sind „Bosonen", weil beliebig viele mit derselben Energie auftauchen können.

---

* oder „Schallquanten"