# V Zweite Quantisierung (Fortsetzung)

## V.2 Harmonischer Oszillator (Prototyp für die Zweite Quantisierung) (Wdh.)

Ensemble von ungekoppelten harmonischen Oszillatoren (Beispiel Kernschwingungen)

Die Lagrange Funktion ist hier: (in Normalkoordinaten)

$$L = \sum_i \left( \frac{1}{2} (\dot{Q}_i)^2 - \frac{1}{2} \omega_i^2 \, Q_i^2 \right)$$

Multiindex $i = (j, q)$

Der kanonische Impuls $P_i$ zu $Q_i$ wird durch

$$P_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i} = \dot{Q}_i$$

bestimmt.

Durch eine Legendre Transformation kann der Hamiltonoperator bestimmt werden als:

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \left( P_i P_i + \omega_i^2 Q_i Q_i \right)$$

Übergang zur Quantenmechanik: (Postulat der Vertauschungsrelationen) (Vgl. Exp)

$$[Q_i, P_j]_- = i\hbar \delta_{ij} , \qquad [Q_i, Q_j]_- = 0$$

$$[P_i, P_j]_- = 0$$

Konstruktion Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$b_i^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_i}} \left( \omega_i \, Q_i - i \, P_i \right) \qquad \text{(Erzeuger)}$$

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_i}} \left( \omega_i Q_i + i P_i \right)$$

$$Q_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\,(b_i^+ + b_i)$$
$$P_i = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\,(b_i - b_i^+)$$
$$H = \sum_i \hbar\omega_i\left(b_i^+ b_i + \frac{1}{2}\right)$$
$$[b_i, b_j^+]_- = \frac{1}{2\hbar\omega_i}[\omega_i Q_i + iP_i, \omega_j Q_j - iP_j]_-$$
$$= \frac{i\omega_i}{2\hbar\omega_i}\Big(\underbrace{[P_i, Q_j]_-}_{-i\hbar\delta_{ij}} - \underbrace{[Q_i, P_j]_-}_{i\hbar\delta_{ij}}\Big) = \delta_{ij}$$
$$\boxed{[b_i, b_j^+] = \delta_{ij},\quad [b_i, b_j]_- = 0,\quad [b_i^+, b_j^+]_- = 0}$$

Bosonische Vertauschungsrelationen

Es wäre schön, wenn es einen Grundzustand gäbe.
Dieser soll geringste Energie aller Zustände haben.

Annahme wir kennen die niedrigste Energie $E_0'$

$$\sum_i \hbar\omega_i b_i^+ b_i\,|\phi_0\rangle = E_0'\,|\phi_0\rangle \qquad |\cdot b_j \text{ von links}$$
$$b_j \sum_i \hbar\omega_i b_i^+ b_i\,|\phi_0\rangle = E_0'\,b_j\,|\phi_0\rangle$$
$$\sum_i \hbar\omega_i(\delta_{ij} + b_i^+ b_i)\,b_j\,|\phi_0\rangle = E_0'\,b_j\,|\phi_0\rangle$$
$$\sum_i \hbar\omega_i\, b_i^+ b_i\, b_j\,|\phi_0\rangle = \underbrace{(E_0' - \hbar\omega)}_{\text{niedrigere Energie als die niedrigste Eigenenergie}}b_j\,|\phi_0\rangle$$

$$\boxed{b_j\,|\phi_0\rangle = 0}$$

EW sind nicht negativ:

Sei $|\phi\rangle$ EV

$\hbar\omega_j \langle\phi|\phi\rangle = \langle\phi| b_j^+ b_j |\phi\rangle = \| b_j |\phi\rangle \|^2 \geq 0$

$\Rightarrow$ EW sind nicht negativ

Des weiteren $\langle\phi_0| b_j^+ b_j |\phi_0\rangle = \| \underbrace{b_j |\phi_0\rangle}_{=0} \|^2 = 0$

Null ist der kleinste Eigenwert des Besetzungszahloperators.

## Fock Zustände

Erinnerung an die QM

|| Wenn $|\phi\rangle$ EV von $H$ ist, so ist auch $b_j|\phi\rangle$ und $b_i^+|\phi\rangle$ EV! ||

Denn: für $H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$

ist auch $H_0\, b_j|\phi\rangle = (E - \hbar\omega_j) b_j|\phi\rangle$ ein EV.

Analog kann man zeigen:

$$\| \quad H_0\, b_i^+|\phi\rangle = (E + \hbar\omega_i)\, b_i^+|\phi\rangle \quad \|$$

Wir können jetzt jeden EV aus dem Grundzustand konstruieren:

$$|n_1, \ldots, n_i, \ldots, n_{max}\rangle = \frac{1}{N(n_1, \ldots, n_i)} \prod_i (b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle$$

Es bleibt der Normierungsfaktor zu bestimmen:

Behauptung: $|n_1\rangle = \frac{1}{N(n_1)} b_1^{+n_1}|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} b_1^{+n_1}|\phi_0\rangle$

Beweis über Induktion: $(n_1 = 1)$ (i) $|b_1^+|\phi_0\rangle|^2 = \langle\phi_0| b_i b_i^+ |\phi_0\rangle$

$= \langle\phi_0| (\underbrace{b_i^+ b_i}_{0} + 1) |\phi_0\rangle = \langle\phi_0|\phi_0\rangle = 1$

(ii) $b_1^+ b_1\, b_1^+ |\phi_0\rangle = b_1^+|\phi_0\rangle + \underbrace{b_1^+ b_1^+ b_1 |\phi_0\rangle}_{0}$

$= b_1^+|\phi_0\rangle$

Induktionsschritt: $(n_1 \to n_1 + 1)$

Voraus: $\| (b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle \| = n_1!$ und $b_i^+ b_i (b_1^+)^{n_1} |\phi_0\rangle = n_1 (b_1^+)^{n_1} |\phi_0\rangle$

**Beweis:**

(i) $$\|(b_i^+)^{n_i+1}|\phi_0\rangle\|^2 = \langle\phi_0|\, b_i^{n_i} b_i b_i^+ b_i^{+n_i}\,|\phi_0\rangle$$

$$= \langle\phi_0|\, b_i^{n_i} b_i^{+n_i}\,|\phi_0\rangle + \langle\phi_0|\, b_i^{n_i} \underbrace{b_i^+ b_i b_i^{+n_i}|\phi_0\rangle}_{n_i b_i^{+n_i}|\phi_0\rangle}$$

$$= n_i! + n_i \underbrace{\langle\phi_0|\, b_i^{n_i} b_i^{+n_i}\,|\phi_0\rangle}_{n_i!} = n_i!\,(1+n_i) = (n_i+1)! \quad ✓$$

(ii) $$b_i^+ b_i (b_i^+)^{n_i+1}|\phi_0\rangle = b_i^+ b_i b_i^+ (b_i^+)^{n_i}|\phi_0\rangle$$

$$= b_i^+ \underbrace{b_i^+ b_i (b_i^+)^{n_i}|\phi_0\rangle}_{n_i (b_i^+)^{n_i}|\phi_0\rangle} + b_i^+ (b_i^+)^{n_i}|\phi_0\rangle$$

**Ergebnis:**

$$= (n_i+1)(b_i^+)^{n_i}|\phi_0\rangle$$

$$|n_1,\dots,n_i,\dots,n_{k+1}\rangle = \frac{1}{\prod_i \sqrt{n_i!}} \prod_i (b_i^+)^{n_i}|\phi_0\rangle$$

Die Eigenzustände ergeben sich konstruktiv aus dem Grundzustand! Diese Form der Darstellung nennt man Fock-Darstellung.

$$b_j\,|n_1,\dots,n_{max}\rangle = \sqrt{n_j}\,|n_1,\dots,n_j-1,\dots,n_{max}\rangle$$

$$b_j^+\,|n_1,\dots,n_{max}\rangle = \sqrt{n_j+1}\,|n_1,\dots,n_j+1,\dots,n_{max}\rangle$$

$$b_j^+ b_j\,|n_1,\dots,n_{max}\rangle = n_j\,|n_1,\dots,n_{max}\rangle$$

Interpretation Hamiltonoperator

$$H = \sum_i \hbar\omega_i \underbrace{b_i^+ b_i}$$

Anzahl der Teilchen im Zustand i multipliziert mit der Energie eines Teilchens

$\Rightarrow$ Ergo Energie ist gequantelt!

**Desweiteren:** $b_j$ vernichtet Phonon in Zustand $j$

und $b_{\vec{k}}^+$ erzeugt Phonon im Zustand $j$.

Man kann in einen Zustand beliebig viele Teilchen stecken.

## V.3 Quantisierung des Materiefeldes

**Ziel:** Wieder Elektronenz... aus einem Grundzustand mit Erzeugen und Vernichten darstellen

Auch WW mit Erzeugen und Vernichten formulieren.

Startpunkt Lagrangefkt für klassische Wellenfeld:

$$L = \int \psi^*(x') \left( i\hbar \dot{\psi}(x') - V(x') \psi(x') + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right) d^3x' \quad (\text{! nicht hermitesch})$$

$\psi, \psi^*$ sind voneinander unabhängig. (Alternativ: Re und Im)

Feldvariablen $L(\psi, \psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi})$

Bildung der Lagrangegl.:

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}^*(x)} - \frac{\delta L}{\delta \psi^*(x)} = - \left( i\hbar \dot{\psi} - V(x) \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right) = 0$$

Der kanonische Impuls ist:

$$\boxed{\Pi = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}} = -\frac{\hbar}{i} \psi^*}$$

Die Hamiltonfkt. kann mit Hilfe einer Legendretransformation erzeugt werden:

$$H = \int \left( \Pi \dot{\psi} - \mathcal{L} \right) d^3x = \int i\hbar \dot{\psi} \psi^* - i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \psi^* \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \psi^* V \psi \, d^3x$$

$$\boxed{H = \int \psi^*(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \psi(x) \, d^3x}$$

Wichtig, hier muß zwischen Hamiltonfkt. und Hamiltonoperator unterschieden werden.

Wir können natürlich den Schrödingerfeld nach EV zu EW $E_\mu$ entwickeln!

$$\psi(x) = \sum_\mu a_\mu \varphi_\mu(x) \qquad \text{mit } a_\mu(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_\mu t}$$

$$\psi^\times(x) = \sum_\mu a_\mu^\times \varphi_\mu^\times(x)$$

$a_\mu, a_\mu^\times$ sind Entwicklungskoeffizienten! Also Zahlen!

Wir postulieren jetzt Vertauschrelationen:

Bosonen

$$[\Pi(\underline{x}), \psi^+(x')]_- = \frac{\hbar}{i}\delta(x-x') \qquad \text{sowie} \qquad [\psi(x), \psi(x')]_- = 0$$

$$\Downarrow \qquad\qquad \text{und}$$

$$[\psi(\underline{x}), \psi^+(\underline{x}')]_- = \delta(x-x') \qquad [\psi^\times(x), \psi^\times(x')]_- = 0$$

$\psi^\dagger(x), \psi(x)$ sind Heisenbergschen Feldoperatoren. Erzeugen ein Teilchen am Ort x.

Wir sehen jetzt welche Vertauschrelationen, dann für die Amplituden gilt:

$$\psi(x) = \sum_\mu a_\mu \varphi_\mu(x) \qquad | \varphi_{\mu'}^\times(x) \; | \int dx$$

$$\int d^3r \; \varphi_{\mu'}^\times(x)\psi(x) = \sum_\mu a_\mu \underbrace{\int d^3r\, \varphi_\mu(x)\varphi_{\mu'}^\times(x)}_{\delta_{\mu\mu'}} = a_{\mu'}$$

$$\Rightarrow \qquad a_{\mu'} = \int dx^3 \varphi_{\mu'}^\times(x)\,\psi(x)$$

$$\text{analog} \qquad a_{\mu'}^+ = \int dr^3 \varphi_{\mu'}(x)\psi^+(x)$$

Damit können wir die Kommutatoren berechnen:

$$[a_\mu, a_{\mu'}^+]_- = \int d^3r \int d^3r'\, \varphi_{\mu'}(x)\varphi_\mu^\times(x') \underbrace{[\psi(x), \psi^+(x')]_-}_{\delta(x-x')}$$

$$= \int d^3r \; \varphi_\mu(x)\,\varphi_{\mu'}^\times(x) = \delta_{\mu\mu'}$$

Analog $[a_\mu, a_{\mu'}]_- = [a_{\mu'}^+, a_\mu^+]_- = 0$

Grund: Im Prinzip $\psi(x), \psi^+(x)$ sind Erzeuger und Vernichter der Ortsbasis und $a_\mu, a_\mu^+$ zu Energieeigenvektoren
$\Rightarrow$ Basiswechsel (unitäre Transformation)

Das sind Bosonische Vertauschungsrel. $\Rightarrow$ gleiche Eigenschaften wie harmonischer Oszillator.

---

Problem bei Fermionen insb. Elektronen!

$a_\mu^+ a_\mu^+ |\phi_0\rangle \neq 0$ man kann beliebig viele Teilchen im gleichen Zustand erzeugen.

Elektronen sind Fermionen, hier gilt das Pauli-Prinzip, man darf nur ein Elektron pro Quantenzustand besetzen, also

$a_\mu^+ a_\mu^+ |\phi_0\rangle = 0$, eigentlich für jeden Zustand, muss

$$a_\mu^+ a_\mu^+ |\phi\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad a_\mu^+ a_\mu^+ = 0 \qquad (*)$$

Bei Fermionen muß dann gelten: $[a_\mu, a_{\mu'}^+]_+ = \delta_{\mu\mu'}$

$([A,B]_+ = AB + BA)$

$[a_\mu, a_{\mu'}]_+ = [a_\mu^+, a_{\mu'}^+]_+ = 0$ (enthält $*$ als Spezialfall)

Also bei Fermionen gelten + Kommutatoren!

Wegen der unitären Transformation gilt dann auch: (für Fermionen)

$$[\psi(x), \psi^+(x')]_+ = \delta(x-x')$$
$$[\psi(x), \psi(x')]_+ = [\psi^+(x), \psi^+(x')]_+ = 0$$

Umformulierung des Hamiltonoperators:

$$H = \int \Psi^{+}(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right) \underbrace{\Psi(x)}_{\sum_\nu \varphi_\nu(x) a_\nu} d^3x$$

$$= \sum_{\nu \nu'} a^{+}_{\nu} a_{\nu'} \int dr^3 \, \varphi^{*}_{\nu}(x) \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right) \varphi_{\nu'}(x)}_{E_{\nu'} \varphi_{\nu'}(x)}$$

$$H = \sum_\nu E_\nu \, a^{+}_{\nu} a_\nu$$

Postulat Existenz des Grundzustands

$$a_\nu |\phi_0\rangle = 0 \quad \text{für alle } \nu$$

__Fock Zustände:__

$$|\{n\}\rangle = \prod_\nu \frac{1}{\sqrt{n_\nu !}} (a^{+}_{\nu})^{n_\nu} |\phi_0\rangle \quad \text{(Bosonen)}$$

Mit $n_\nu = 0, 1, 2, \dots \infty$

$$|\{n\}\rangle = \prod_\nu (a^{+}_{\nu})^{n_\nu} |\phi_0\rangle \qquad \text{(Fermionen)}$$

Hier mit $n_\nu = 0, 1$

?

Wichtig bei Fermionen:

$$a_j |n_1, \dots, n_{max}\rangle = \sqrt{n_j} (-1)^{n_1 + \dots + n_{j-1}} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots, n_{max}\rangle$$