Wh: Besetzungszahldarstellung

$$|\phi_N\rangle^{(\pm)} = \sqrt{N!}\,\hat{S}_N^{(\pm)}\,|\phi_{\alpha_1}^{(1)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$ (anti-)symmetrische Produktzustände

$$\longrightarrow \quad |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \ldots, n_{\alpha_l} \ldots\rangle^{(\pm)}$$

$$\text{mit } n_{\alpha_i} = 0,1 \quad \text{Pauli-Prinzip}$$
$$n_{\alpha_i} = 0,1,\ldots,N$$

Genaue Relation (Korrektur zur letzten VL):

$$|\phi_N\rangle^{(\pm)} =: \left(f^{(\pm)}\right)^{-1} \underbrace{|n_{\alpha_1}, \ldots, n_{\alpha_l} \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\text{Fockzustände}}$$

$$f^{(\pm)} = \sqrt{\frac{1}{\prod_{i=1}^{N} n_{\alpha_i}!}}$$

Fermionen: $n_{\alpha_i} = 0,1 \quad \Rightarrow n_{\alpha_i}! = 1 \quad$ (denn $0! = 1$, $1! = 1$)

$$\Rightarrow f^{(-)} = 1$$

Bosonen: $f^{(+)}$ kann ungleich 1 sein

Erzeuger/Vernichter: Wirkung auf Fockzustände

$$\hat{a}_{\alpha_k}^{+} \underbrace{|\ldots n_{\alpha_k} \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_N^{(\pm)}} = (\pm 1)^{N_k} \sqrt{n_{\alpha_k}+1}\, \underbrace{|\ldots n_{\alpha_k}+1 \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N+1}^{(\pm)}}$$

$$N_k = \sum_{j=1}^{k-1} n_{\alpha_j}$$

Speziell Fermionen: $\hat{a}_{\alpha_k}^{+} |\ldots n_{\alpha_k} \ldots\rangle^{(-)} = (-1)^{N_k}\, \delta_{n_{\alpha_k},0}\, |\ldots n_{\alpha_k}+1 \ldots\rangle^{(-)}$

Vernichter: $\hat{a}_{\alpha_k} \underbrace{|\ldots n_{\alpha_k} \ldots \rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_N^{(\pm)}} = (\pm 1)^{N_k} \sqrt{n_{\alpha_k}}\, |\ldots n_{\alpha_k}-1 \ldots\rangle^{(\pm)}$

falls $n_{\alpha_k} \neq 0$

Vertauschungsrelation

$$[\hat{a}_{\alpha_k}, \hat{a}_{\alpha_l}]_{\mp} = 0$$

$$[\hat{A},\hat{B}]_- = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$ Kommutator (Bosonen)

$$[\hat{A},\hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$ Antikommutator (Fermionen)

Weiterhin gilt

$$[\hat{a}^+_{\alpha_k}, \hat{a}^+_{\alpha_l}]_{\mp} = 0 \Rightarrow \text{Übung}$$

$$[\hat{a}_{\alpha_k}, \hat{a}^+_{\alpha_l}]_{\mp} = \delta_{\alpha_k,\alpha_l} \Rightarrow \text{Übung}$$

Man sieht:
Die Eigenschaften der (Anti-)Symmetrisierung und damit die Eigenschaften des Vielteilchensystems stecken in den Vertauschungsrelation.

Beachte schließlich:
Aufbau eines N-Teilchenzustands aus dem Vakuum

$$|n_{\alpha_1} \ldots n_{\alpha_k} \ldots \rangle^{(\pm)} = \prod_k \frac{\hat{a}^+_{\alpha_k}}{\sqrt{n_{\alpha_k}!}} (\pm 1)^{N_k} |0\rangle$$

3. Operatoren in zweiter Quantisierung

Typisches "Problem"

Man betrachtet einen Hamiltonoperator der Form

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12}$$
$$= \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1^{(i)} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} V(\underline{r}_i, \underline{r}_j)$$

Wechselwirkung zweier Teilchen (z.B. Coulombwechselwirkung)

kinetische Energie, äußeres Potential

Solche Ein- und Zweiteilchenoperatoren sollen nun durch Erzeuger und Vernichter ausgedrückt werden!

Einteilchen - Hamiltonian

genaue Rechnung s. Übung, hier nur "angerissen" (s. Buch Schwabl)

es sei $|\lambda_i\rangle$ ein Basis-Ket zum Einteilchen-Hilbertraum von Teilchen i

$$\Rightarrow \sum_{\lambda} |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| = \hat{1}$$

Einteilchenzerlegung der Eins

$$\hat{H}_1^{(i)} = \hat{1}\, \hat{H}_1^{(i)}\, \hat{1}$$
$$= \sum_{\lambda\mu} |\lambda_i\rangle \underbrace{\langle\lambda_i|\hat{H}_1^{(i)}|\mu_i\rangle}_{\text{Matrixelement } h_{\lambda\mu}^{(i)}} \langle\mu_i|$$

Beachte: $\hat{H}_1^{(i)}$ ist für alle Teilchen gleich (identische Teilchen!)

$\Rightarrow h_{\lambda\mu}^{(i)}$ ist unabhängig von i

$$\Rightarrow \hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1^{(i)} = \sum_{\lambda\mu} h_{\lambda\mu} \sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i| \quad (*)$$

Betrachte Wirkung des Terms $\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i|$ auf Fock-Zustand. Spezialisiere Bosonen

$$\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i| \underbrace{\dots n_\lambda \dots n_\mu \dots\rangle^{(+)}}_{\frac{1}{\sqrt{\prod_\alpha n_{\lambda_\alpha}!}} \sqrt{N!}\, \hat{S}_N^+ \underline{|\phi_{\lambda_1}\phi_{\lambda_2}\dots\phi_{\lambda_N}\rangle}}$$

hier kommen alle $i=1,\dots,N$ vor und alle Quantenzustände

$$= \sqrt{N!}\, \hat{S}_N^+ \sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i| \underline{\phi_{\lambda_1}\dots\phi_{\lambda_N}\rangle} \cdot \frac{1}{\sqrt{n_{\lambda_1}! n_{\lambda_2}! \dots}}$$

nicht-symmetrisiertes Produkt von Einteilchenzuständen!

$$\overbrace{\begin{aligned} &\delta_{\mu_i,\lambda_1} |\phi_{\lambda_2}\dots\phi_{\lambda_N}\rangle \\ &+ \delta_{\mu_i,\lambda_2} |\phi_{\lambda_1}\phi_{\lambda_3}\dots\phi_{\lambda_N}\rangle \\ &+ \dots + \delta_{\mu_i,\lambda_N} |\phi_{\lambda_1}\dots\phi_{\lambda_{N-1}}\rangle \end{aligned}}$$

Durch das Skalarprodukt entstehen offensichtlich Terme, in denen die Besetzung des Zustands μ um Eins erniedrigt wird und gleichzeitig die Besetzung von λ um ~~ein~~ Eins erhöht wird.

Das entspricht gerade der Wirkung von $\hat{a}^+_\lambda \hat{a}_\mu$

Vernichtung des Zustands μ

Erzeugung des Zustands λ

Insgesamt findet man:

$$\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i| \Rightarrow \hat{a}^+_\lambda \hat{a}_\mu$$

Kombiniere das mit (*)

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned}\hat{H}_1 &= \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1^{(i)} \\ &= \sum_{\lambda,\mu} h_{\lambda\mu} \hat{a}^+_\lambda a_\mu\end{aligned}}$$

mit $h_{\lambda\mu} = \langle\lambda_i|\hat{H}_1^{(i)}|\mu_i\rangle$ unabhängig von i

Einteilchenoperator in zweiter Quantisierung!

Im Spezialfall, dass die $|\mu\rangle, |\lambda\rangle$ Eigenzustände von $\hat{H}_1^{(i)}$ sind, folgt: $h_{\lambda\mu} = \varepsilon_\lambda \delta_{\lambda\mu}$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H}_1 = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda \hat{a}^+_\lambda a_\lambda}$$

Analog findet man für Zweiteilchenoperatoren
(für Bosonen und Fermionen)

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{H}_{12} &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} V(\underline{r}_i, \underline{r}_j) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mu\nu\sigma} \langle \lambda,\mu | V | \nu,\sigma\rangle\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\sigma\end{aligned}}$$

<u>Bemerkungen</u>

- Ortsdarstellung des Zweiteilchenhamiltonian
  (durch Einschieben von $\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}| = \hat{1}$)

$$\Rightarrow \underbrace{\langle \lambda,\mu | \hat{V} | \nu,\sigma\rangle}_{\text{Matrixelement}} = \int d\underline{r} \int d\underline{r}'\, \phi_\lambda^*(\underline{r})\, \phi_\mu^*(\underline{r}') \cdot V(\underline{r},\underline{r}')\, \phi_\nu(\underline{r})\, \phi_\sigma(\underline{r}')$$

- Sowohl bei $\hat{H}_1$ als auch bei $\hat{H}_{12}$ sieht man:
  Erzeuger / Vernichter tauchen paarweise auf
  (also insgesamt gerade Anzahl von $\hat{a}, \hat{a}^+$)
  $\Rightarrow$ typisch für Systeme mit <u>Teilchenzahlerhaltung</u>

- Spezieller Einteilchenoperator:
  Besetzungszahloperator (für diskrete Einteilchenzustände)

$$\hat{n}_\lambda = \hat{a}_\lambda^+ a_\lambda$$

es gilt: Die Fockzustände sind Eigenzustände von $\hat{n}_\lambda$ zum Eigenwert n_λ

denn: $\hat{n}_\lambda |n_1 n_2 \ldots\rangle^{(\pm)}$

$= \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\lambda |n_1 n_2 \ldots\rangle^{(\pm)}$

$= (\pm 1)^{N_K} \sqrt{n_\lambda}\, \hat{a}_\lambda^+ |n_1 \ldots n_\lambda - 1 \ldots\rangle^{(\pm)}$

$= \underbrace{(\pm 1)^{N_K} (\pm 1)^{N_K}}_{1} \underbrace{\sqrt{n_\lambda}\sqrt{n_\lambda - 1 + 1}}_{n_\lambda} |n_1 n_2 \ldots\rangle^{(\pm)}$

$= n_\lambda |n_1 n_2 \ldots\rangle^{(\pm)}$ q.e.d.

Operator zur Gesamtteilchenzahl

$$\hat{N} = \sum_\lambda \hat{n}_\lambda$$

4) Feldoperatoren

allgemein: Transformation zw. verschiedenen Basissystemen — was passiert dann mit Erzeugern/Vernichtern?

Ausgangspunkt: Entwickle einen Einteilchenzustand $|\lambda\rangle$ nach einem Einteilchen-Basissystem

$$|\lambda\rangle = \hat{1} |\lambda\rangle \qquad \text{mit } \hat{1} = \sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|$$

$$= \sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|\lambda\rangle$$

$$= \sum_\mu \langle\mu|\lambda\rangle |\mu\rangle \quad (*)$$

benutze: $|\mu\rangle = \hat{a}_\mu^+ |0\rangle$

$|\lambda\rangle = \hat{a}_\lambda^+ |0\rangle$

$$\Rightarrow \hat{a}_\lambda^+ |0\rangle = |\lambda\rangle \underset{(*)}{=} \sum_\mu \langle\mu|\lambda\rangle \, \hat{a}_\mu^+ |0\rangle$$

Vergleiche linke und rechte Seite

$$\Rightarrow \boxed{\hat{a}_\lambda^+ = \sum_\mu \langle\mu|\lambda\rangle \, \hat{a}_\mu^+}$$

(trivial umschreiben: $\hat{a}_\mu^+ = \sum_\lambda \langle\lambda|\mu\rangle \hat{a}_\lambda^+$)

adjungierte Relation: $\boxed{\hat{a}_\lambda = \sum_\mu \langle\lambda|\mu\rangle \, \hat{a}_\mu}$

Spezialfall:

Basis $\hat{=}$ Basis von Ortseigenzuständen $|\underline{r}\rangle$

$\langle\underline{r}|\lambda\rangle = \varphi_\lambda(\underline{r})$ Einteilchenwellenfunktion

ersetze also $\mu \Rightarrow \underline{r}$

$$\Rightarrow \underbrace{\hat{\psi}^+(\underline{r})}_{\hat{a}_{\underline{r}}^+} := \sum_\lambda \underbrace{\varphi_\lambda^*(\underline{r})}_{\langle\lambda|\underline{r}\rangle} \hat{a}_\lambda^+$$

Feldoperator (Erzeuger!)

erzeugt ein Teilchen an der Stelle $\underline{r}$

analog Vernichter:

$$\underbrace{\hat{\psi}(\underline{r})}_{\hat{a}_{\underline{r}}} := \sum_{\lambda} \underbrace{\varphi_\lambda(\underline{r})}_{\langle \underline{r}|\lambda\rangle} \hat{a}_\lambda$$ vernichtet ein Teilchen an der Stelle $\underline{r}$

Vertauschungsrelation: ergeben sich aus denen für $\hat{a}, \hat{a}^+$

z.B. $[\hat{\psi}(\underline{r}), \hat{\psi}^+(\underline{r}')]_\mp$

$$= \sum_{\lambda}\sum_{\lambda'} \varphi_\lambda(\underline{r})\varphi^*_{\lambda'}(\underline{r}') \underbrace{[\hat{a}_\lambda, \hat{a}^+_{\lambda'}]_\mp}_{\delta_{\lambda,\lambda'}}$$

$$= \sum_{\lambda}\sum_{\lambda'} \varphi_\lambda(\underline{r})\varphi^*_{\lambda'}(\underline{r}') \delta_{\lambda,\lambda'}$$

$$= \sum_{\lambda} \langle \underline{r}|\lambda\rangle\langle\lambda|\underline{r}'\rangle \underset{\sum_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda| = 1}{=} \langle \underline{r}|\underline{r}'\rangle = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

Beispiele für Ausdrücke mit Feldoperatoren

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^{N} \hat{V}(\underline{r}_i) \overset{\text{2. Quantisierung}}{=} \sum_{\lambda\mu} \langle\lambda|\hat{V}|\mu\rangle \hat{a}^+_\lambda a_\mu$$

z.B. externes Potential

Einschieben einer $1 = \int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|$

$$= \sum_{\lambda,\mu} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \langle \lambda | \underline{r} \rangle \underbrace{\langle \underline{r} | \hat{V} | \underline{r}' \rangle}_{V(\underline{r}) \underbrace{\langle \underline{r} | \underline{r}' \rangle}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}')}} \langle \underline{r}' | \mu \rangle \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu$$

$$= \sum_{\lambda,\mu} \int d\underline{r} \; \varphi_\lambda^*(\underline{r}) V(\underline{r}) \varphi_\mu(\underline{r}) \hat{a}_\lambda^+ a_\mu$$

$$\hat{V} = \int d\underline{r} \; \hat{\psi}^+(\underline{r}) \hat{\psi}(\underline{r}) V(\underline{r})$$

benutze Def. Feldoperatoren

Dieser Ausdruck für den Einteilchenoperator $\hat{V}$ hat formal die Gestalt eines Erwartungswertes (von V)
wenn man die Wellenfunktionen durch die Feldoperatoren ersetzt!

$\langle \hat{V} \rangle = \langle \lambda | \hat{V} | \mu \rangle \to \int d\underline{r} \; \varphi_\lambda^*(\underline{r}) V(\underline{r}) \varphi_\mu(\underline{r})$ Erwartungswert

Operator $\hat{V}$: $\int d\underline{r} \; \hat{\psi}^+(\underline{r}) V \psi(\underline{r})$

"Quantisierung der Wellenfunktionen"

Weiteres Beispiel:

- Teilchendichte in einem klassischen System

$$\hat{n}(\underline{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)$$

$$= \sum_{\lambda,\mu} \int d\underline{r}' \, \varphi_\lambda^*(\underline{r}') \, \delta(\underline{r}-\underline{r}') \, \varphi_\mu(\underline{r}') \, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu$$

2. Quantisierung Ortsdarstellung

$$= \sum_{\lambda,\mu} \varphi_\lambda^*(\underline{r}) \varphi_\mu(\underline{r}) \, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu$$

$$\Rightarrow \quad \hat{n}(\underline{r}) = \hat{\Psi}^+(\underline{r}) \hat{\Psi}(\underline{r})$$

(man sieht wieder Analogie zur Aufenthaltswahrsch., hier aber Operatoren)

- Gesamtteilchenzahl: $\hat{N} = \int d\underline{r} \, \hat{\Psi}^+(\underline{r}) \hat{\Psi}(\underline{r})$

- Analog Zweiteilchenoperator: (hier ohne Beweis)

$$\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} V(\underline{r}_i, \underline{r}_j)$$

$$= \frac{1}{2} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \, \hat{\Psi}^+(\underline{r}) \hat{\Psi}^+(\underline{r}') V(\underline{r}, \underline{r}') \hat{\Psi}(\underline{r}) \hat{\Psi}(\underline{r}')$$