Fock-Zustände (diskrete Systeme!)

$$|n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots n_{\alpha_i} \dots n_{\alpha_j} \dots \rangle^{(\pm)}$$

$+$: Bosonen (symmetr. Zustände)
$-$: Fermionen (antisymmetr. ")

n_{α_i} : Besetzungszahl von Zustand $|\phi_{\alpha_i}\rangle$
(Häufigkeit, mit der dieser Zustand im N-Teilchensystem vorkommt)

Nebenbedingung

$$\underbrace{\sum_i}_{\text{Summe über alle möglichen Quantenzahl}} n_{\alpha_i} = N \quad \text{— Gesamtteilchenzahl}$$

Fermionen: $n_{\alpha_i} = 0,1$ Pauli-Prinzip

Bosonen: $n_{\alpha_i} = 0,1,2,\dots,N$

Zusammenhang zw. Fockzustände und den bisher betrachteten (anti-)symmetrisierten Zuständen $|\phi_N^{(\pm)}\rangle$

$$|\phi_N^{(\pm)}\rangle = \sqrt{N!}\; \hat{S}_N^{(\pm)} \underbrace{|\phi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle}$$

direktes Produkt von Einteilchenzustände, noch nicht (anti-) symmetrisiert

Reihenfolge im Prinzip beliebig!

Sortiere jetzt so, dass erst die n_{α_1} Zustände $|\phi_{\alpha_1}\rangle$, dann die n_{α_2} Zustände $|\phi_{\alpha_2}\rangle \dots$ vorkommen

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (\pm 1)^p P \Big(\underbrace{|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle |\phi_{\alpha_1}^{(2)}\rangle \dots}_{n_{\alpha_1}} \; \underbrace{|\phi_{\alpha_i}^{(k)}\rangle |\phi_{\alpha_i}^{(k+1)}\rangle}_{n_{\alpha_i}} \dots \Big)$$

$$=: \left(f^{(\pm)}\right)^{-1} |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2} \dots n_{\alpha_i} \dots \rangle^{(\pm)}$$

$$\text{mit} \quad f^{(\pm)} = \sqrt{\frac{1}{\underbrace{\prod_i n_{\alpha_i}!}_{\text{Produkt über Quantenzustände}}}}$$

Fermionen: $n_\alpha = 0,1 \Rightarrow \prod_i n_{\alpha_i}! = 1$

Vollständigkeit:

$$\boxed{\sum_{n_{\alpha_1}}\sum_{n_{\alpha_2}}\dots\sum_{n_{\alpha_i}}\dots\,|n_{\alpha_1}\dots n_{\alpha_i}\dots\rangle^{(\pm)(\pm)}\langle n_{\alpha_1}\dots n_{\alpha_i}\dots| = 1}$$

Beachte nochmal: Wir sind hier ausgegangen von diskreten (Einteilchen-) Basen

Summe über alle erlaubten Besetzungszahlen mit der Nebenbedingung $\sum_i n_{\alpha_i} = N$

2) Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Idee:
Betrachte ein Teilchen, das seinen Quantenzustand ändert, z.B. Änderung der Position von α_i nach α_j

Neue Auffassung: Es wird ein Teilchen bei α_i vernichtet
und ein anderes wird am Ort α_j erzeugt

Definiere folgende Operatoren:

$\hat{a}_{\alpha_i} : \mathcal{H}_N^{(\pm)} \to \mathcal{H}_{N-1}^{(\pm)}$ Vernichtungsoperator

"Vernichter" zum Quantenzustand α_i

$\hat{a}^+_{\alpha_i} : \mathcal{H}_{N-1}^{(\pm)} \to \mathcal{H}_N^{(\pm)}$ Erzeugungsoperator

Abbildung zwischen Hilberträumen mit unterschiedl. Teilchenzahl!

Wirkung Erzeugungsoperator

hier zunächst mal für allg. Systeme (kontinuierlich oder diskret),
d.h. noch ohne Besetzungszahldarstellung

mit Zuständen $|\phi_{\alpha_1}\phi_{\alpha_2}\dots\phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}$

Ausgangspunkt:
$|0\rangle$: "Vakuumzustand" (kein Quantenzustand besetzt ≙ kein Teilchen)

$$\hat{a}^+_{\alpha_1}|0\rangle = \sqrt{1}\,|\phi_{\alpha_1}\rangle \in \mathcal{H}_1^{(\pm)}$$ Einteilchen-Hilbertraum

$$\hat{a}^+_{\alpha_2} |\phi_{\alpha_1}\rangle = \sqrt{2}\, |\phi_{\alpha_2} \phi_{\alpha_1}\rangle^{(\pm)}$$

Vereinbarung: Neuer Zustand wird immer an die erste Stelle gesetzt!

$$\hat{a}^+_{\alpha_k} \underbrace{|\phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_N^{(\pm)}} = \sqrt{N+1}\, \underbrace{|\phi_{\alpha_k} \phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N+1}^{(\pm)}}$$

Umkehrung: $|\phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{N!}}\, \hat{a}^+_{\alpha_1} \hat{a}^+_{\alpha_2} \dots \hat{a}^+_{\alpha_N} |0\rangle$

Vertauschungsrelationen

$$\hat{a}^+_{\alpha_1} \hat{a}^+_{\alpha_2} \underbrace{|\phi_{\alpha_3} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N-2}^{(\pm)}} = \sqrt{N(N-1)}\, |\phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_2} \phi_{\alpha_3} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}$$

$$\hat{a}^+_{\alpha_2} \hat{a}^+_{\alpha_1} |\phi_{\alpha_3} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)} = \sqrt{N(N-1)}\, |\phi_{\alpha_2} \phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_3} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}$$

$$= \underset{\text{Fermionen}}{\overset{\text{Bosonen}}{\pm}} \sqrt{N(N-1)}\, |\phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_2} \phi_{\alpha_3} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}$$

also Vorzeichenwechsel für Fermionen!

denn für Fermionen

$$|\phi_N\rangle^{(-)} \sim \begin{vmatrix} \phi^{(1)}_{\alpha_1} & \dots & \phi^{(N)}_{\alpha_1} \\ \vdots & & \\ \phi^{(1)}_{\alpha_N} & \dots & \phi^{(N)}_{\alpha_N} \end{vmatrix}$$

Vertauschung zweier Einteilchenzustände ϕ_{α_i} im Vielteilchenzustand entspricht der Vertauschung zweier Zeilen $\longrightarrow$ Vorzeichenwechsel!

Zusammenfassung

$$\hat{a}^+_{\alpha_k} \hat{a}^+_{\alpha_l} \mp \hat{a}^+_{\alpha_l} \hat{a}^+_{\alpha_k} = 0$$

Häufige Notation

Bosonen $[\hat{a}^+_{\alpha_k}, \hat{a}^+_{\alpha_l}]_- = 0$

oberes Vorzeichen: Bosonen
unteres Vorzeichen: Fermionen

(normaler) Kommutator

Fermionen: $\left[\hat{a}^+_{\alpha_N}, \hat{a}^+_{\alpha_L} \right]_+ = 0$

Anti-Kommutator

Erzeugungsoperatoren für Bosonen (Fermionen) kommutieren (antikommutieren)

Vernichtungsoperatoren

Es gilt: $\hat{a}_{\alpha_N} = \left(\hat{a}^+_{\alpha_N} \right)^+$ adjungierter Operator zum Erzeugungsoperator

($\hat{a}, \hat{a}^+$ sind nicht hermitesch)

Wirkung:

betrachte ~~..~~ bra-Zustände

$$^{(\pm)}\langle \phi_{\alpha_1} \dots \phi_N | \hat{a}_{\alpha_N} = {}^{(\pm)}\langle \hat{a}^+_{\alpha_N} \phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N} | = \sqrt{N+1}\, {}^{(\pm)}\langle \phi_{\alpha_N} \phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N} |$$

Wirkung auf ket-Zustände?

betrachte dazu Matrixelemente (s. z.B. Nolting) der Form

$$\underbrace{^{(\pm)}\langle \phi_{\beta_2} \dots \phi_{\beta_N}|}_{\in \mathcal{H}^{(\pm)}_{N-1}} \hat{a}_{\alpha_N} \underbrace{| \phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N} \rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}^{(\pm)}_{N}}$$

Es ergibt sich:

$$\hat{a}_{\alpha_N} \underbrace{| \phi_{\alpha_1} \dots \phi_N \rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}^{(\pm)}_N} = 0 \quad \text{falls } \alpha_N \notin \alpha_1, \dots, \alpha_N$$

(insbesondere auch $\hat{a}_{\alpha_N} |0\rangle = 0$!)

Andernfalls:

$$\hat{a}_{\alpha_K} \underbrace{|\phi_{\alpha_1} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\mathcal{H}_N^{(\pm)}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \Big(\overset{\text{Kronecker-Delta}}{\delta_{\alpha_K,\alpha_1}} \underbrace{|\phi_{\alpha_2} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N-1}^{(\pm)}}$$

$$+ (\pm)^1 \delta_{\alpha_K,\alpha_2} \underbrace{|\phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_3} \dots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N-1}^{(\pm)}}$$

$$+ \dots$$

$$+ (\pm)^{(N-1)} \delta_{\alpha_K,\alpha_N} \underbrace{|\phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_2} \dots \phi_{\alpha_{N-1}}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N-1}^{(\pm)}} \Big)$$

Bemerkungen:

- Der Ausdruck wird sofort Null, wenn ϕ_{α_K} gar nicht im Ausgangszustand auftaucht.
- Vorzeichen: $+$: Bosonen
  $-$: Fermionen

  Vorzeichenwechsel bei Fermionen, ~~wenn~~ weil Zustände (Zeilen) in der Slaterdeterminante vertauscht werden

- Fermionen: Jeder Quantenzustand ist höchstens einmal besetzt (im Ausgangszustand)

  $\Rightarrow$ nur einer der Terme in der Summe kann ungleich Null sein

- Bosonen: Jeder Quantenzustand kann mehrfach besetzt sein
  $\rightarrow$ es können sich mehrere Terme ergeben!

<u>Vertauschungsrelation</u>

$$\hat{a}_{\alpha_K} \hat{a}_{\alpha_L} \mp \hat{a}_{\alpha_L} \hat{a}_{\alpha_K} = 0 \qquad \begin{array}{ll} \text{"}-\text{"} & \text{Bosonen} \\ \text{"}+\text{"} & \text{Fermionen} \end{array}$$

analog zu den Erzeugern!

Spezialisiere jetzt auf diskrete Einteilchenzustände

betrachte die Wirkung der Erzeuger und Vernichter auf Fockzustände

Erzeuger

$$\boxed{\hat{a}^+_{\alpha_K} \underbrace{|\ldots n_{\alpha_K} \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}^{(\pm)}_N} = \big(\underbrace{\pm}_{\text{Boson}/\text{Fermion}} 1\big)^{N_K} \sqrt{n_{\alpha_K}+1}\; \underbrace{|\ldots n_{\alpha_K}+1 \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}^{(\pm)}_{N+1}}}$$

wobei N_K: Zahl der paarweisen Vertauschungen, die notwendig sind, um den Zustand an erster Stelle erzeugten Zustand $|\phi_{\alpha_K}\rangle$ an die richtige Stelle (zu den schon vorhandenen Zuständen gleicher Art zu permutieren

Betrachte die unterschiedlichen Auswirkungen für Fermionen und Bosonen

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

  Wegen Pauli-Prinzip muß im Ausgangszustand $n_{\alpha_K}=0$ gelten
  ($\Rightarrow \sqrt{n_{\alpha_K}+1} = 1$)

  Falls α_K schon besetzt ist, verschwindet der Zustand (Pauli-„Blocking")

- Bosonen: $\hat{a}^+_{\alpha_K} |\ldots n_{\alpha_K} \ldots\rangle^{(+)} = \sqrt{n_{\alpha_K}+1}\; |\ldots n_{\alpha_K}+1 \ldots\rangle^{(+)}$

Vernichter

$$\boxed{\hat{a}_{\alpha_K} \underbrace{|\ldots n_{\alpha_K} \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}^{(\pm)}_N} = (\pm 1)^{N_K} \sqrt{n_{\alpha_K}}\; \underbrace{|\ldots n_{\alpha_K}-1 \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\mathcal{H}^{(\pm)}_{N-1}}}$$

Um etwas von Null verschiedenes zu erhalten, muß (für Fermionen und Bosonen) n_{α_K} mind. 1 sein

∘ Fermionen: n_{α_k} kann höchstens 1 sein

$$\hat{a}_{\alpha_k} | \ldots n_{\alpha_k} \ldots \rangle^{(-)} = (-1)^{N_k} \delta_{n_{\alpha_k},1} \underbrace{| \ldots \underbrace{n_{\alpha_k}-1}_{0} \ldots \rangle^{(-)}}_{| \ldots 0_k \ldots \rangle^{(-)}}$$

∘ Bosonen $\hat{a}_{\alpha_k} | \ldots n_{\alpha_k} \ldots \rangle^{(+)} = \sqrt{n_{\alpha_k}} | \ldots n_{\alpha_k}-1 \ldots \rangle^{(+)}$

mit $n_{\alpha_k} \geq 1$

Es ergibt sich als
Vertauschungsrelation sofort:

$$\hat{a}_{\alpha_k} \hat{a}_{\alpha_l} \mp \hat{a}_{\alpha_l} \hat{a}_{\alpha_k} = 0 \qquad \text{(wie schon erwartet)}$$

Weitere Vertauschungsrelationen

$$\boxed{\hat{a}_{\alpha_k} \hat{a}_{\alpha_l}^{+} \mp \hat{a}_{\alpha_l}^{+} \hat{a}_{\alpha_k} = \delta_{\alpha_k,\alpha_l}}$$

Beachte schließlich
Aufbau eines Vielteilchenzustands aus dem Vakuum

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

3. Operatoren in Zweiter Quantisierung

Typisches Problem. Man betrachtet Hamiltonoperator der Form

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

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