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

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

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 $|\phi_N^{(\pm)}\rangle$

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

direktes Produkt von Einteilchenzuständen, 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

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

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

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

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

Vollständigkeit:

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

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 $|\phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_2} \ldots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}$

Ausgangspunkt:

$|0\rangle$: "Vakuumzustand" (kein Quantenzustand besetzt $\hat{=}$ 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

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

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

Bosonen

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

Fermionen

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

Anti-Kommutator

Erzeugungsoperatoren für Bosonen (Fermionen) kommutieren (antikommutieren)

Vernichtungsoperatoren

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

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

Wirkung:

betrachte ~~...~~ bra-Zustand

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

Wirkung auf ket-Zustände?

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

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

Es ergibt sich:

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

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

Andernfalls:

$$\hat{a}_{\alpha_K} \underbrace{|\phi_{\alpha_1} \ldots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\mathcal{H}_N^{(\pm)}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \Big(\overset{\text{Kronecker-Delta}}{\delta_{\alpha_K,\alpha_1}} \underbrace{|\phi_{\alpha_2} \ldots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N-1}^{(\pm)}}$$
$$+ (\pm)^1 \delta_{\alpha_K,\alpha_2} \underbrace{|\phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_3} \ldots \phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N-1}^{(\pm)}}$$
$$+ \ldots$$
$$+ (\pm)^{(N-1)} \delta_{\alpha_K,\alpha_N} \underbrace{|\phi_{\alpha_1} \phi_{\alpha_2} \ldots \phi_{\alpha_{N-1}}\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N-1}^{(\pm)}} \Big)$$

Bemerkungen:

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

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

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

  $\Rightarrow$ 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

$$\boxed{\hat{a}^+_{\alpha_\mu} \underbrace{|\ldots n_{\alpha_\mu} \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_N^{(\pm)}} = (\pm 1)^{N_\mu} \sqrt{n_{\alpha_\mu}+1}\; \underbrace{|\ldots n_{\alpha_\mu}+1 \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\in \mathcal{H}_{N+1}^{(\pm)}}}$$

Boson

Fermion

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

Betrachte die unterschiedlichen Auswirkungen für Fermionen und Bosonen

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

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

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

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

Vernichter

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

Um etwas von Null verschiedenes zu erhalten, muß (für Fermionen und Bosonen) n_{α_μ} 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

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

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