3. Operatoren in zweiter Quantisierung

$$\hat H = \hat H_1 + \hat H_{12}$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \hat H_1^{(i)}}_{\hat H_1} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} V(\underline{r}_i, \underline{r}_j)}_{\hat H_{12}}$$

Wechselwirkung (z.B. Coulomb)

Ziel: Ausdrücken durch Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren

Einteilchen-Hamiltonian

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

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

Einteilchen-Hamiltonian zu Teilchen i

$$\hat H_1^{(i)} = \hat 1 \, \hat H_1^{(i)} \, \hat 1$$

$$= \sum_{\lambda\mu} |\lambda_i\rangle \underbrace{\langle\lambda_i| H_1^{(i)} |\mu_i\rangle}_{\substack{\text{Matrixelement} \\ h^{(i)}_{\lambda\mu}}} \langle\mu_i|$$

Beachte: identische Teilchen! $\Rightarrow$ $\hat H_1^{(i)}$ ist für alle Teilchen gleich

$\Rightarrow$ die Matrixelemente $h^{(i)}_{\lambda\mu}$ sind unabhängig von i

Damit $\hat H_1 = \sum_{i=1}^{N} H_1^{(i)} = \sum_{\lambda\mu} h_{\lambda\mu} \sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i|$

Strategie: Betrachte Wirkung des Operators $\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i|$ auf einen N-Teilchen-Zustand (hier: Fockzustand)

allgemeine Herleitung (des Umschreibens mit Erzeugern / Vernichtern)

s. Bücher von Nolting, Schwabl, Übungen!

Hier: Skizziere die Herleitung für Bosonen

$$\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i| \underbrace{\ldots n_\lambda \ldots n_\mu \ldots \rangle^{(+)}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{\prod_\alpha n_\alpha!}} \sqrt{N!}\, \hat{S}_N^{(+)} \underbrace{|\phi_{\lambda_1}\phi_{\lambda_2}\ldots\phi_{\lambda_N}\rangle}_{\text{direktes Produkt aus Einteilchenzuständen}} \qquad \text{mit } \hat{S}_N^{(+)} = \frac{1}{N!}\sum_P P \ldots$$

$$|\phi_{\lambda_1}\rangle|\phi_{\lambda_2}\rangle\ldots|\phi_{\lambda_N}\rangle$$

$$= \sqrt{N!}\,\hat{S}_N^{(+)} \sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle \underbrace{\langle\mu_i| \overbrace{\phi_{\lambda_1}\ldots\phi_{\lambda_N}\rangle}^{\in \mathcal{H}_N}} \frac{1}{\sqrt{n_{\lambda_1}!\,n_{\lambda_2}!\ldots}}$$

$$\boxed{\text{z.B. } \langle\mu_i|\phi_{\lambda_1}\rangle = \delta_{\mu_i,\lambda_1}}$$

$$\delta_{\mu_i,\lambda_1} |\underbrace{\phi_{\lambda_2}\ldots\phi_{\lambda_N}}_{\in\mathcal{H}_{N-1}}\rangle$$
$$+\delta_{\mu_i,\lambda_2} |\phi_{\lambda_1}\phi_{\lambda_3}\ldots\phi_{\lambda_N}\rangle$$
$$+ \ldots + \delta_{\mu_i,\lambda_N} |\phi_{\lambda_1}\ldots\phi_{\lambda_{N-1}}\rangle$$

es kann mehrere Terme geben je nach Besetzung des Zustands μ! (Bosonen!)

Durch das Skalarprodukt entstehen Terme, in denen jeweils die Besetzung des Zustands μ um Eins erniedrigt wird!

$\hat{=}$ Wirkung des Vernichtungsoperators $\hat{a}_\mu$

(ein Teilchen im Zustand μ wird vernichtet)

Durch Anwendung von $\hat{S}_N^{+}$ entstehen dann wieder symmetrisierte Zustände bzw. Fockzustände

Durch die Multiplikation mit $|\lambda_i\rangle$ wird andererseits die Besetzung des Zustands λ (Zahl der Teilchen im Zustand λ) um Eins erhöht

schematisch: $\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i| \longrightarrow \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu$

Insgesamt folgt für Einteilchenoperatoren (gilt für Bosonen als auch für Fermionen)

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1^{(i)}$$

$$(*) \qquad = \sum_{\lambda,\mu} h_{\lambda\mu}\, \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu \qquad \text{mit } h_{\lambda\mu} = \langle\lambda_i|\hat{H}_1^{(i)}|\mu_i\rangle$$

unabhängig von i!

Man sieht: Summe über alle Teilchen wird hier wieder durch Summe über alle Quantenzahlen ersetzt

(geht nur für identische Teilchen)

Bemerkungen:

- Im Spezialfall $h_{\lambda\mu} = \varepsilon_\lambda \delta_{\lambda\mu}$ (falls also die Zustände $|\lambda_i\rangle, |\mu_i\rangle$ Eigenzustände von $\hat{H}_1^{(i)}$ sind)

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

- Auch andere Einteilchenoperatoren können in der obigen Form ⊛ ausgedrückt werden

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^{N} \hat{A}^{(i)} = \sum_{\lambda\mu} \underbrace{A_{\lambda\mu}}_{\langle \lambda_i | \hat{A}^{(i)} | \mu_i \rangle} \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu$$

- Spezieller Einteilchenoperator:

Besetzungszahloperator (wieder für diskrete Einteilchenzustände)

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

Fockzustände sind Eigenzustände von $\hat{n}_\lambda$ zum Eigenwert n_λ

denn
$$\hat{n}_\lambda |n_1 n_2 \ldots n_\lambda \ldots\rangle^{(\pm)} = \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\lambda |n_1 \ldots n_\lambda \ldots\rangle^{(\pm)}$$
$$= (\pm 1)^{N_\lambda} \sqrt{n_\lambda}\, \hat{a}_\lambda^+ |n_1 \ldots n_\lambda - 1 \ldots\rangle^{(\pm)}$$
$$= (\pm 1)^{N_\lambda} (\pm 1)^{N_\lambda} \sqrt{n_\lambda} \underbrace{\sqrt{n_\lambda - 1 + 1}}_{\sqrt{n_\lambda}} |n_1 \ldots\rangle^{(\pm)}$$
$$= n_\lambda |n_1 \ldots\rangle^{(\pm)}$$

(z.B. $\Rightarrow \hat{H}_1 = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda \hat{n}_\lambda$ in Eigenbasis)

Operator der Gesamtteilchenzahl

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

Zweiteilchenoperatoren

Beispiel Zweiteilchen-Hamiltonoperator

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

Für Fermionen und Bosonen!

Darstellungsunabhängige Form!

Ortsdarstellung:

$$\langle \lambda,\mu | \hat{V} | \nu,\delta \rangle = \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \, \phi_\lambda^*(\underline{r}) \phi_\mu^*(\underline{r}') \, V(\underline{r},\underline{r}') \, \phi_\nu(\underline{r}) \phi_\delta(\underline{r}')$$

$$\int d\underline{r} \, |\underline{r}\rangle\langle \underline{r}| = 1 \quad , \quad \phi_\lambda^*(\underline{r}) = \langle \lambda | \underline{r} \rangle$$

Sowohl für den Einteilchen- als auch für den Zweiteilchen-Hamiltonian haben wir gesehen:

Erzeuger/Vernichter treten paarweise auf (also insgesamt gerade Anzahl von $\hat{a}, \hat{a}^+$)

$\rightarrow$ typisch für Systeme mit Teilchenzahlerhaltung!

4) Feldoperatoren

Ausgangspunkt: Transformation zwischen verschiedenen Basissystemen

entwickle z.B. einen Zustand $|\lambda\rangle$ nach einem Einteilchenbasissystem
(Einteilchen)

$$|\lambda\rangle = \hat{1}|\lambda\rangle = \underbrace{\sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|}_{\hat{1}}\lambda\rangle = \sum_\mu \langle\mu|\lambda\rangle\,|\mu\rangle$$

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

$$\hat{a}_\lambda^+|0\rangle = \sum_\mu \langle\mu|\lambda\rangle\,\hat{a}_\mu^+|0\rangle \implies \boxed{\hat{a}_\lambda^+ = \sum_\mu \langle\mu|\lambda\rangle\,\hat{a}_\mu^+} \quad *1$$

adjungierte Relation: $\boxed{\hat{a}_\lambda = \sum_\mu \langle\lambda|\mu\rangle\,\hat{a}_\mu} \quad *2$

Spezialfall: Wähle für $|\lambda\rangle$ Ortseigenzustände $|\underline{r}\rangle$

damit $\langle\mu|\lambda\rangle \longrightarrow \langle\mu|\underline{r}\rangle = \varphi_\mu^*(\underline{r})$

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

Wellenfunktion.

Die entsprechenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren nennt man Feldoperatoren

$$\hat{\varphi}(\underline{r}) \overset{*2}{=} \sum_\mu \langle\underline{r}|\mu\rangle\,\hat{a}_\mu = \sum_\mu \varphi_\mu(\underline{r})\,\hat{a}_\mu$$

$$\hat{\varphi}^+(\underline{r}) \overset{*1}{=} \sum_\mu \langle\mu|\underline{r}\rangle\,\hat{a}_\mu^+ = \sum_\mu \varphi_\mu^*(\underline{r})\,\hat{a}_\mu^+$$

Interpretation:

$\hat{\varphi}^+(\underline{r})$: erzeugt ein Teilchen an der Stelle $\underline{r}$

$\hat{\varphi}(\underline{r})$: vernichtet " " " "

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

z.B. Bosonen:

$$\underbrace{[\hat{\psi}(\underline{r}), \hat{\psi}^+(\underline{r}')]}_{\text{Kommutator}} = \sum_\mu \sum_{\mu'} \varphi_\mu(\underline{r}) \varphi_{\mu'}^*(\underline{r}') \underbrace{[\hat{a}_\mu, \hat{a}_{\mu'}^+]}_{\delta_{\mu,\mu'}}$$

$$= \sum_\mu \varphi_\mu(\underline{r}) \varphi_\mu^*(\underline{r}')$$

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

$\sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu| = \hat{1}$

analog für Fermionen: $\underbrace{[\hat{\psi}, \hat{\psi}^+]_+}_{\text{Antikommutator}} = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$

Beispiele für Ausdrücke mit Feldoperatoren

- Einteilchenoperatoren, z.B. externes Potential

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^N \hat{V}_1(\underline{r}_i) \overset{\text{2. Quantisierung}}{=} \sum_{\lambda,\mu} \langle\lambda|\hat{V}_1|\mu\rangle\, \hat{a}_\lambda^+ a_\mu$$

$\hat{1}$ $\hat{1}$ Ortsbasis $\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}| = \hat{1}$

$\hat{V}_1$ wirkt multiplikativ in der Ortsdarstellung!

$$= \sum_{\lambda,\mu} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \underbrace{\langle\lambda|\underline{r}\rangle}_{\varphi_\lambda^*(\underline{r})} \underbrace{\langle\underline{r}|\hat{V}_1|\underline{r}'\rangle}_{V_1(\underline{r}')\underbrace{\langle\underline{r}|\underline{r}'\rangle}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}')}} \underbrace{\langle\underline{r}'|\mu\rangle}_{\varphi_\mu(\underline{r}')} \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu \quad \varphi_\mu(\underline{r}')\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu$$

$$= \sum_{\lambda,\mu} \int d\underline{r}\; \varphi_\lambda^*(\underline{r}) V_1(\underline{r}) \varphi_\mu(\underline{r})\, \hat{a}_\lambda^+ a_\mu$$

benutze Def. von Feldoperatoren

$$= \int d\underline{r}\; \hat{\psi}^+(\underline{r})\, V_1(\underline{r})\, \hat{\psi}(\underline{r})$$

Man sieht:

Der letzte Ausdruck für den Einteilchenoperator $\hat{V}$ hat formal die Gestalt eines Erwartungswerts (von V_1), wenn man die üblicherweise auftauchenden Wellenfunktion durch die Feldoperatoren ersetzt!

Interpretation: Die Wellenfunktion werden "quantisiert". Dies illustriert den Teilchencharakter des Wellenfeldes!

$\Longrightarrow$ Bezeichnung Zweite Quantisierung

Weiteres Beispiel für Ausdruck mit Feldoperatoren:

Teilchendichteoperator: $\hat{n}(\underline{r}) = \hat{\varphi}^+(\underline{r})\,\hat{\varphi}(\underline{r})$

sieht aus wie eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit, ist aber ein Operator!

Gesamtteilchenzahloperator:

$$\hat{N} = \int d\underline{r}\; \hat{\varphi}^+(\underline{r})\,\varphi(\underline{r})$$

Konsistent mit unseren vorherigen Definition:

$$\hat{N} = \int d\underline{r} \sum_{\lambda,\mu} \langle\lambda|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\mu\rangle\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu$$

Einsetzen der Def. von $\hat{\varphi}^+, \hat{\varphi}$

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

$$= \sum_{\lambda,\mu} \underbrace{\langle\lambda|\hat{1}|\mu\rangle}_{\delta_{\lambda,\mu}}\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu$$

$$= \sum_\lambda \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\lambda = \sum_\lambda \hat{n}_\lambda \qquad !$$

Zweiteilchenoperator ausgedrückt durch Feldoperatoren:

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} V(\underline{r}_i, \underline{r}_j) = \ldots = \frac{1}{2}\int d\underline{r}\int d\underline{r}'\; \hat{\varphi}^+(\underline{r})\,\hat{\varphi}^+(\underline{r}')\, V(\underline{r},\underline{r}')\,\hat{\varphi}(\underline{r}')\,\hat{\varphi}(\underline{r})$$