5.2. Operatoren in 2. Quantisierung

Operatoren besteht aus 1 & 2 Teilchen Anteil in den meisten physikalisch relevanten Fällen.

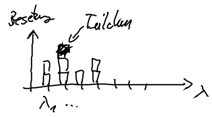
$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^{N} \hat{V}_{12}(r_i, r_j)$$

Transformation in Besetzungszahl-Basis

Ziel: $\underbrace{\sum_{i=1}^{N}}_{\text{Teilchen}} \longrightarrow \underbrace{\sum_{\lambda}}_{\text{Quantenzahlen}} n_\lambda$

Ein-Teilchen zustand



$$\hat{h}(r_i)\,\varphi_\lambda(r_i) = \overbrace{\langle r_i | \hat{h} | \lambda \rangle}^{\text{Ortsdarstellung}} = \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle r_i | \lambda' \rangle}_{\varphi_{\lambda'}(r_i)} \overset{\text{„Eins"}}{\vphantom{x}} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \qquad (*)$$

Vielteilchen zustand

$$\hat{H}_1 \, \underbrace{| n_1 \dots n_\lambda \dots \rangle}_{\in \mathcal{H}^{\text{Fock}}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N! \, n_1! \, n_2! \dots}} \overbrace{\sum_{\varsigma} \hat{P}_\varsigma}^{\text{Anti-Symmetrisierung}} \left(|\alpha\rangle_1 \dots \hat{h}(r_i)|\lambda\rangle_i \dots \right)$$

$$\overset{(*)}{=} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\lambda'} \frac{\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle}{\sqrt{N! \, n_1! \dots}} \sum_{\varsigma} \hat{P}_\varsigma \left(|\alpha\rangle_1 \dots |\lambda'\rangle_i \dots \right)$$

Fallunterscheidung

$\lambda = \lambda'$: $\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} \langle \lambda | \hat{h} | \lambda \rangle | n_1 \dots n_\lambda \dots \rangle$ (Summand kommt n_λ Mal unverändert vor)

$$= \sum_{\lambda} \underbrace{n_\lambda}_{(a^+_\lambda a_\lambda | n_1 \dots n_\lambda \dots \rangle)} \langle \lambda | \hat{h} | \lambda \rangle | n_1 \dots n_\lambda \dots \rangle$$

$\lambda' \neq \lambda$: $\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{\lambda' \\ \lambda' \neq \lambda}} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \sqrt{\frac{n_{\lambda'} + 1}{n_\lambda}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N! \dots (n_\lambda - 1)! \dots (n_{\lambda'} + 1)! \dots}} \cdot \sum_{\varsigma} \hat{P}_\varsigma \left(|\alpha\rangle_1 \dots |\lambda'\rangle_i \dots \right)}$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{\lambda' \neq \lambda} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \sqrt{\frac{n_{\lambda'} + 1}{n_\lambda}} \, | n_1 \dots (n_\lambda - 1) \dots (n_{\lambda'} + 1) \dots \rangle$$

Teilchen vorher in $|\lambda\rangle$
nachher in $|\lambda'\rangle$

$$= \sum_{\lambda} n_\lambda \sum_{\lambda' \neq \lambda} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \sqrt{\frac{n_{\lambda'} + 1}{n_\lambda}} \, | n_1 \dots (n_\lambda - 1) \dots (n_{\lambda'} + 1) \dots \rangle$$

$$= \sum_{\lambda} \sum_{\lambda' \neq \lambda} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \, a^+_{\lambda'} a_\lambda \, | n_1 \dots n_\lambda \dots n_{\lambda'} \dots \rangle$$

Zusammengefasst:

$$\hat{H}_1 |n_1 \dots n_\lambda \dots\rangle = \sum_{\lambda\lambda'} \overbrace{\langle \lambda' | h | \lambda \rangle}^{\text{Matrixelement bezgl. der Basis } |\lambda_i\rangle} a_{\lambda'}^+ a_\lambda |n_1 \dots n_\lambda \dots n_{\lambda'} \dots\rangle$$

$$\boxed{\hat{H}_1 = \left(\sum_i h(r_i) \right) = \sum_{\lambda\lambda'} \langle \lambda' | h | \lambda \rangle a_{\lambda'}^+ a_\lambda}$$

Matrixelement:

$$\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle = \int \varphi_{\lambda'}^*(r)\, \hat{h}(r)\, \varphi_\lambda(r)\, d^3r$$

Speziell, falls $|\lambda\rangle$ Eigenzustände zu $\hat{h}(r_i)$ $\quad \langle \lambda' | h | \lambda \rangle = \varepsilon_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}$

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

freier 1-Teilchen Hamiltonian (ohne WW)

Analog für 2-Teilchen Operator:

$$\hat{H}_{12} = \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} \hat{V}_{12}(r_i, r_j) \right) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ \mu\mu'}} \langle \underset{\text{1.Teilchen}}{\lambda'} \underset{\text{2.Teilchen}}{\mu'} | V_{12} | \underset{\text{1.Teilchen}}{\lambda} \underset{\text{2.Teilchen}}{\mu} \rangle a_{\lambda'}^+ a_{\mu'}^+ a_\mu a_\lambda$$

λ', μ' Zustände der 2 Teilchen nach WW
λ, μ " " vor WW

wobei

$$\langle \lambda' \mu' | V_{12} | \lambda \mu \rangle = \int \varphi_{\lambda'}^*(r_1)\, \varphi_{\mu'}^*(r_2)\, V_{12}(r_1, r_2)\, \varphi_\lambda(r_1)\, \varphi_\mu(r_2)\, d^3r_1 d^3r_2$$

5.3. Feldoperatoren

1. Quantisierung: $\psi(r)$ "klassisches" Wellenfeld (Lösung der Schrödingergleichung)
Zerlegung nach Basisfunktionen $\psi(r) = \sum_\mu \underset{\text{Amplitude}}{a_\mu} \underset{\text{Basis}}{\varphi_\mu(x)}$

2. Quantisierung: Vertauschungsrelationen von Erzeuger und Vernichter Op. $\hat{a}_\mu^+, \hat{a}_\mu$
→ Korpuskular-charakter des Wellenfeldes

$$\psi(r) = \langle r | \psi \rangle = \sum_\lambda \underbrace{\langle r | \lambda \rangle}_{\varphi_\lambda(r)} \underbrace{\langle \lambda | \psi \rangle}_{\text{Besetzungszahldarstellung}}$$

Erzeugungsoperator $\quad \hat{\psi}^+(r) := \sum_\lambda \varphi_\lambda^*(r)\, \hat{a}_\lambda^+$

Vernichtungsoperator $\quad \hat{\psi}(r) := \sum_\lambda \varphi_\lambda(r)\, \hat{a}_\lambda$

Teilchenzahloperator $\quad \hat{N} := \int \hat{\psi}^+(r)\, \hat{\psi}(r)\, d^3r$

Teilchendichteoperator $\quad \hat{n}(r) := \hat{\psi}^+(r)\, \hat{\psi}(r)$

Besetzungszahloperator $\quad \hat{n}_\lambda := a_\lambda^+ a_\lambda$

- Vertauschungsrelationen übertragen sich von Erzeuger + Vernichter a_λ^+, a_λ auf Feldoperatoren

Bosonen: $$[\hat\psi(\underline{r}), \hat\psi^+(\underline{r}')] = \sum_{\lambda\lambda'} \varphi_\lambda(\underline{r})\varphi_{\lambda'}^*(\underline{r}') \underbrace{[\hat a_\lambda, \hat a_{\lambda'}^+]}_{\delta_{\lambda\lambda'}}$$
$$= \sum_\lambda \varphi_\lambda(\underline{r})\varphi_\lambda^*(\underline{r}')$$
$$= \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

Fermionen: $$\{\hat\psi(\underline{r}), \hat\psi^+(\underline{r}')\} = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

Anti-Vertauschungsrelation

Operator der e-e-WW:

$$\hat V_{ee} = \int d^3r' d^3r \frac{\hat\psi^+(\underline{r})\hat\psi^+(\underline{r}')\hat\psi(\underline{r}')\hat\psi(\underline{r})}{4\pi\varepsilon_0|\underline{r}-\underline{r}'|}$$

5.4. Erwartungswerte in 2. Quantisierung

Erwartungswert im Vielteilchenzustand $|\psi\rangle_-$ ← Anti-Symm. Zustand

1. Teilchen Op

$$\langle\psi|\hat H_1|\psi\rangle_- = \sum_{\lambda\lambda'} \langle\lambda'|\hat h|\lambda\rangle \; \langle\psi|a_{\lambda'}^+ a_\lambda \underbrace{|\psi\rangle_-}$$

kann aus Vakuumzustand mit Erzeuger-Op. generiert werden

$$= \sum_{\lambda\lambda'} \langle\lambda'|\hat h|\lambda\rangle \langle 0| a_k \dots a_j a_i \dots | a_{\lambda'}^+ a_\lambda | a_i^+ a_j^+ \dots a_k^+ |0\rangle$$

↑ läuft hinaus auf Berechnung eines Produktes von Erzeugern + Vernichtern unter Benutzung der Vertauschungsrelation:

$$\{a_l^+ a_k\} = \delta_{lk}$$
$$a_l^+ a_k = \delta_{lk} - a_k a_l^+$$

Bsp.: 4-er Produkt

(I) $$a_i a_j^+ a_k a_l^+ = -a_i a_j^+ a_l^+ a_k + \delta_{lk}\, a_i a_j^+$$

$$= a_j^+ a_i\, a_l^+ a_k - \delta_{ij}\, a_l^+ a_k + \delta_{lk} a_i a_j^+$$

$$= -a_j^+ a_l^+ a_i a_k + \delta_{li}\, a_j^+ a_k - \delta_{ij} a_l^+ a_k + \delta_{lk} a_i a_j^+$$

$$= -a_j^+ a_l^+ a_i a_k + \delta_{li}\, a_j^+ a_k - \delta_{ij} a_l^+ a_k + \delta_{lk}\delta_{ij} - \delta_{lk}\, a_j^+ a_i$$

"alle Erzeuger links, Vernichter rechts" ↗

nun gilt $\langle 0|a_i^+ a_j|0\rangle = 0$ im Vakuumzustand kann nicht vernichtet werden

$$\Rightarrow \langle 0|a_i a_j^+ a_k a_l^+|0\rangle \overset{\text{mit (I)}}{=} 0 + 0 + 0 + 0 + \delta_{lk}\delta_{ij}$$

für $i = l$: $\langle i | a_j^+ a_k | \underset{\sim}{i} \rangle = \delta_{kj} \delta_{ki}$

$\Rightarrow$ Für 2 Teilchen Op:

$$\boxed{{}^-\langle \psi | a_{\lambda'}^+ a_{\mu'}^+ a_\mu a_\lambda | \psi \rangle^- = \underbrace{\langle a_{\mu'}^+ a_\mu \rangle}_{{}^-\langle \psi | a_{\mu'}^+ a_\mu | \psi \rangle^-} \delta_{\mu' \mu} \langle a_{\lambda'}^+ a_\lambda \rangle \delta_{\lambda' \lambda} - \langle a_{\mu'}^+ a_\lambda \rangle \delta_{\mu' \lambda} \langle a_{\lambda'}^+ a_\mu \rangle \delta_{\lambda' \mu}}$$

- <u>exakt</u> falls ${}^-\langle \psi |$ anti-symm. Produktzustand
- 2-Teilchen Erwartungswerte zerfallen in Produkte von 1-Teilchen Erwartungswerten.