Systeme mit diskreter Einteilchenbasis:

Fockzustände

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

$+$: Bosonen
$-$: Fermionen

Besetzungszahlen: Zahl der (identische) Teilchen im Zustand α_1

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

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

in beiden Fällen: $\sum n_{\alpha_i} = N$

Summe über alle mögl. Quantenzahl

Zusammenhang mit den vorher eingeführten Vielteilchenzustand

$$|n_{\alpha_1} n_{\alpha_2} \dots \rangle^{(\pm)} = f^{(\pm)} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (\pm 1)^p P(\phi^{(1)}_{\alpha_1} \dots \phi^{(N)}_{\alpha_N})}_{|\phi_N^{(\pm)}\rangle}$$

normiert!
spannen eine Basis auf (Vollständigkeitsrelation)

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

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

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

Wirkung Erzeugungsoperator

zunächst noch ohne Fockzustände

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

Vakuumzustand (kein Teilchen!)

$\hat{a}^+_{\alpha_2} |\phi_{\alpha_1}\rangle = \sqrt{2}\, |\phi_{\alpha_2} \phi_{\alpha_1}\rangle^{(\pm)} \in \mathcal{H}^{(\pm)}_2$

neuer Zustand wird immer an die erste Stelle geschrieben!

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

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

Vertauschungsrelationen:

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

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

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

Bosonen

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

Fermionen

also Vorzeichenwechsel für Fermionen!

denn Slaterdeterminante:

$$|\phi_N>^{(-)} = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \phi^{(1)}_{\alpha_1} & \dots & \phi^{(N)}_{\alpha_1} \\ \phi^{(1)}_{\alpha_N} & \dots & \phi^{(N)}_{\alpha_N} \end{vmatrix}$$

also:
Vertauschung zweier Einteilchenzustände ϕ_{α_i} entspricht Vertauschung zweier Zeile!

$\longrightarrow$ Vorzeichenwechsel!

Kombiniere ① und ②

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

oberes Vorzeichen: Bosonen
unteres " : Fermionen

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

(manchmal schreibt man auch $[\hat{a}^+_{\alpha_k}, \hat{a}^+_{\alpha_l}]_- = 0$

Fermionen: $\underbrace{[\hat{a}^+_{\alpha_k}, \hat{a}^+_{\alpha_l}]_+}_{\text{Antikommutator}} = 0$ Antikommutator verschwindet

Vernichtungsoperatoren

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

Folgerung für "bra"-Zustände

Wirkung des Erzeugers

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

Wirkung auf ket-Zustände?

Betrachte dazu Matrixelement der Form $\;{}^{(\pm)}\langle \underbrace{\phi_{\beta_2}\dots\phi_{\beta_N}}_{\mathcal{H}^{(\pm)}_{N-1}}|\,\hat{a}_{\alpha_K}\,|\underbrace{\phi_{\alpha_1}\dots\phi_{\alpha_N}}_{\mathcal{H}^{(\pm)}_{N}}\rangle^{(\pm)}$

Benutze dann (*) und werte Skalarprodukte aus

genaue Rechnung siehe z.B. Nolting

Es ergibt sich:

– $\hat{a}_{\alpha_K}|\phi_{\alpha_1}\dots\phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)} = 0$, falls $\alpha_K \notin \{\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_N\}$

"nicht Element"

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

– Falls $\alpha_K \in \{\alpha_1,\dots,\alpha_N\}$:

$$\hat{a}_{\alpha_K}|\phi_{\alpha_1}\dots\phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{N}}\Big(\delta_{\alpha_K,\alpha_1}|\phi_{\alpha_2}\dots\phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)} + (\pm)^{1}\,\delta_{\alpha_K,\alpha_2}|\phi_{\alpha_1}\phi_{\alpha_3}\dots\phi_{\alpha_N}\rangle^{(\pm)} + \dots + (\pm)^{N-1}\,\delta_{\alpha_K,\alpha_N}|\phi_{\alpha_1}\phi_{\alpha_2}\dots\phi_{\alpha_{N-1}}\rangle^{(\pm)}\Big) \qquad (*)$$

Bemerkungen zu (*)

- Durch Wirkung von $\hat{a}$ auf einen N-Teilchenzustand ergibt sich ein Zustand in $\mathcal{H}_{N-1}$

- Für Fermionen:

  Es ergeben sich Vorzeichenwechsel, denn:

  vertausche Zeilen in der zugehörigen Slaterdeterminante, so lange bis ϕ_{α_k} in der ersten Zeile steht!

  Außerdem: Auf der rechten Seite von (*) ist de facto immer (höchstens) nur ein Summand relevant, denn im Ausgangszustand $|\phi_{\alpha_1} \ldots \phi_{\alpha_N}\rangle$ kann α_k höchstens einmal vorkommen!! (Pauli-Prinzip)

- Für Bosonen: Keine Vorzeichenwechsel und es können mehrere Summanden vorkommen, da α_k im Ausgangszustand mehrfach vorkommen kann!

- Der Ausdruck in (*) wird automatisch Null, falls α_k gar nicht vorkommt.

Vertauschungsrelationen für Vernichtungsoperatoren?

Benutze hierfür Fockzustände

Betrachte zunächst nochmal Wirkung des Erzeugers

man drückt den Fockzustand zunächst wieder durch die ϕ_{α_i} aus, dann permutieren!

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

wobei N_k: Zahl der paarweisen Vertauschungen, die notwendig sind, um den zunächst an erster Stelle erzeugten Zustand $|\phi_{\alpha_k}\rangle$ an die richtige Stelle zu permutieren

es gilt: $N_k = \sum_{j=1}^{k-1} n_{\alpha_j}$ (s. Nolting)

Verschiedene Konsequenzen für Fermionen / Bosonen!

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

Im Ausgangszustand muß $n_{\alpha_N} = 0$ gelten! $\Rightarrow \sqrt{n_{\alpha_N}+1} = 1$

$$\hat{a}^+_{\alpha_N} |\ldots n_{\alpha_N} \ldots\rangle^{(-)} = (-1)^{N_N} \delta_{n_{\alpha_N},0} |\ldots n_{\alpha_N}+1 \ldots\rangle^{(-)}$$

Falls also α_N schon besetzt ist, verschwindet der Zustand!

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

Wirkung der Vernichtungsoperatoren

$$\hat{a}_{\alpha_N} \underbrace{|\ldots n_{\alpha_N} \ldots\rangle^{(\pm)}}_{\mathcal{H}_N^{(\pm)}} = (\pm 1)^{N_N} \sqrt{n_{\alpha_N}} \, |\ldots n_{\alpha_N}-1 \ldots\rangle^{(\pm)}$$

Fermionen: Im Ausgangszustand kann n_{α_N} höchstens 1 sein! $\sqrt{n_{\alpha_N}} = 1$

$$\hat{a}_{\alpha_N} |\ldots n_{\alpha_N} \ldots\rangle^{(-)} = (-1)^{N_N} \delta_{n_{\alpha_N},1} |\ldots n_{\alpha_N}-1 \ldots\rangle^{(-)}$$

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

falls $n_{\alpha_N} \geq 1$

falls $n_{\alpha_N} = 0$ dann ergibt sich auf der rechten Seite Null!

Nun: Vertauschungsrelation für Vernichtungsoperatoren

Kontrolle für Fermionen:

$$\hat{a}_{\alpha_k} \hat{a}_{\alpha_l} | n_{\alpha_1} \ldots n_{\alpha_k} \ldots n_{\alpha_l} \ldots >^{(-)}$$

Notation für $n_{\alpha_l} = 0$

$$= (-1)^{N_l} \delta_{n_{\alpha_l},1} \; \hat{a}_{\alpha_k} | n_{\alpha_1} \ldots n_{\alpha_k} \ldots 0_l \ldots >^{(-)}$$

$$= (-1)^{N_l} (-1)^{N_k} \delta_{n_{\alpha_l},1} \delta_{n_{\alpha_k},1} | n_{\alpha_1} \ldots 0_k \ldots 0_l \ldots >^{(-)}$$

$$\hat{a}_{\alpha_l} \hat{a}_{\alpha_k} | n_{\alpha_1} \ldots n_{\alpha_k} \ldots n_{\alpha_l} \ldots >^{(-)}$$

$$= (-1)^{N_k} \delta_{n_{\alpha_k},1} \; \hat{a}_{\alpha_l} | n_{\alpha_1} \ldots 0_k \ldots n_{\alpha_l} \ldots >$$

Erinnerung an unsere Überlegung zur Wirkung von $\hat{a}$ auf Slaterdeterminante:
Der zu vernichtende Zustand wird erst "nach drau" permutiert.
Da in diesem Fall α_k schon vernichtet wurde, muß man α_l einmal weniger permutieren $\Rightarrow$ Vorfaktor $-(-1)^{N_l}$!!

$$= -(-1)^{N_k} (-1)^{N_l} \delta_{n_{\alpha_k},1} \delta_{n_{\alpha_l},1} | n_{\alpha_1} \ldots 0_k \ldots 0_l \ldots >$$

Folgerung:

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{a}_{\alpha_k} \hat{a}_{\alpha_l} + \hat{a}_{\alpha_l} \hat{a}_{\alpha_k} = 0 \quad \text{für Fermionen} \\ [\hat{a}_{\alpha_k}, \hat{a}_{\alpha_l}]_+ = 0 \quad \text{Antikommutator verschwindet} \end{array}}$$

analog zur Vertauschungsrelation für Erzeuger!

Dagegen für Bosonen (hier ohne Beweis)

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

Weitere Vertauschungsrelationen

$$[\hat{a}_{\alpha_k}, \hat{a}^+_{\alpha_l}]_+ = 0 \quad \text{Fermionen}$$

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

Die Eigenschaften des Vielteilchensystems, inklusive der (anti-)symmetrische Charakter der zugehörigen Zustände, steckt in den Vertauschungsregeln für die Erzeuger bzw. Vernichter !!

Schließlich:

Aufbau eines N-Teilchenzustands aus dem Vakuum

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

II.3. Operatoren in Zweiter Quantisierung

Typischerweise betrachtet man Hamiltonoperator für Vielteilchensysteme aus identische Teilchen der Form

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\hat{H}^{(i)}}_{\text{Einteilchen-Hamiltonian zu Teilchen } i} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} \underbrace{\hat{V}(\underline{r}_i, \underline{r}_j)}_{\text{Wechselwirkung}}$$

Solche Ein- und Zweiteilchenoperatoren sollen nun durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt werden

$\Rightarrow$ man erhält dann $\hat{H}$ „in zweiter Quantisierung“

Zunächst zum

Einteilchenhamiltonian

es sei $|\lambda_i\rangle$ ein „Basis-ket“ zum Hilbertraum von Teilchen i

$$\left(\sum_\lambda |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| = 1 \right)$$

Dann kann man schreiben:

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

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

$\Longrightarrow$ die Matrixelemente $h_{\lambda\mu}^{(i)}$ sind unabhängig von i

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

$$= \sum_{\lambda\mu} h_{\lambda\mu} \sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i|$$

Betrachte nun die Wirkung des Terms $\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i|$ auf einen beliebigen Fock-Zustand

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