Systeme mit diskreter Einteilchenbasis:

Fockzustände

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

$+$ : Bosonen
$-$ : Fermionen

Besetzungszahlen: Zahl der (identische) Teilchen im Zustand $\alpha_1$

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

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

in beide Fällen: $\sum n_{\alpha_i} = N$ Summe über alle mögl. Quantenzahl

Zusammenhang mit den vorher eingeführten Vielteilchenzustand

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

normiert!

spannen eine Basis auf (Vollständigkeitsrelation)

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

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

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!

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

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

Vertauschungsrelationen:

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

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

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

Bosonen

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

Fermionen

also Vorzeichenwechsel für Fermionen!

denn Slaterdeterminante:

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

also: Vertauschung zweier Einteilchenzustände $\phi_{\alpha_i}$ 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: $\hat{a}_{\alpha_K} = \left(\hat{a}^{+}_{\alpha_K}\right)^{+}$ adjungierter Operator zum Erzeugungsoperator!

Folgerung für "bra"-Zustände

Wirkung des Erzeugers

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

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

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

(*)

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 $\phi_{\alpha_k}$ in der ersten Zeile steht!

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

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

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

Vertauschungsrelationen für Vernichtungsoperatoren?

Benutze hierfür <u>Fockzustände</u>

Betrachte zunächst nochmal Wirkung des Erzeugers

man drückt den Fockzustand zunächst wieder durch die $\phi_{\alpha_i}$ aus, dann permutieren!

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

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 $n_{\alpha_k} = 0$ gelten! $\Rightarrow \sqrt{n_{\alpha_k}+1} = 1$

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

Falls also $\alpha_k$ schon besetzt ist, verschwindet der Zustand!

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

Wirkung der Vernichtungsoperatoren

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

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

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

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

falls $n_{\alpha_k} \geq 1$

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

Nun: Vertauschungsrelation für Vernichtungsoperatoren

Kalkül für Fermionen:

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

Notation für $n_{\alpha_l}=0$

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

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

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

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

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

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

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-Teilchen-Zustands aus dem Vakuum

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

## II.3. Operatoren in Zweiter Quantisierung

Typischerweise betrachtet man Hamiltonoperatoren für Vielteilchensysteme aus identischen Teilchen der Form

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

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

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

Zunächst zum

Einteilchen-Hamiltonian

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:

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

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

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

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

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

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

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