

Problemstellung:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i=1}^N \hat{H}_1^{(i)}}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)}_{\hat{H}_{12}}$$

Ausdrücken durch Erzeugnis- und Vernichtungsoperatoren
"2. Quantisierung"

Behandle \hat{H}_1

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

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

Einzelteilchenzustände

$$= \sum_{\lambda, \mu} |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i | \hat{H}_1^{(i)} | \mu_i\rangle \langle \mu_i|$$

$h_{\lambda, \mu}^{(i)}$ unabhängig von Teilchenindex i in einem System identischer Teilchen!

$h_{\lambda, \mu}$

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^N \hat{H}_1^{(i)} = \sum_{\lambda, \mu} h_{\lambda, \mu} \sum_{i=1}^N |\lambda_i\rangle \langle \mu_i|$$

Behandle Wirkung des Terms $\sum_{i=1}^N |\lambda_i\rangle \langle \mu_i|$ auf einem Fockzustand (Bosonen) (s. Skizze)

$$\sum_{i=1}^N |\lambda_i\rangle \langle \mu_i| \dots n_1 \dots n_\mu \dots$$

$$\frac{1}{\sqrt{\prod_j n_j!}} \sqrt{N!} \hat{S}_N^+ |\phi_{\lambda_1} \phi_{\lambda_2} \dots \phi_{\lambda_N}\rangle$$

symmetrisiertes Produkt

mit $\hat{S}_N^+ = \frac{1}{N!} \sum_P P(\dots)$

$$= \sqrt{N!} \hat{S}_N^+ \sum_{i=1}^N |\lambda_i\rangle \langle \mu_i| \underbrace{|\phi_{\lambda_1} \dots \phi_{\lambda_N}\rangle}_{\text{Produkt aus Einzelteilchenzuständen}} \frac{1}{\sqrt{\prod_j n_j!}} |\phi_{\lambda_1}\rangle |\phi_{\lambda_2}\rangle \dots |\phi_{\lambda_N}\rangle$$

$$\begin{aligned} & d_{\mu, \lambda_1} |\phi_{\lambda_2} \dots \phi_{\lambda_N}\rangle \\ & + d_{\mu, \lambda_2} |\phi_{\lambda_1} \phi_{\lambda_3} \dots \phi_{\lambda_N}\rangle \\ & \dots d_{\mu, \lambda_N} |\phi_{\lambda_1} \dots \phi_{\lambda_{N-1}}\rangle \end{aligned}$$

benutze ~~die~~ Orthogonalität der Einzelteilchenzustände

- Durch das Skalarprodukt entsteht also Terme, in denen jeweils die Besetzung des Zustands μ um eins erniedrigt wird

$$n_\mu \rightarrow n_\mu - 1$$

- Durch die Multiplikation mit $|\lambda_i\rangle$ wird andererseits die Besetzung des Zustands λ um eins erhöht

$$n_\lambda \rightarrow n_\lambda + 1$$

Das entspricht (bis auf Vorzeichen!) gerade der Wirkung des Operators

$$\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu$$

{ Vermischung des Zustands μ
 Erzeugung des Zustands λ

Insgesamt findet man die Zuordnung

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

analog für Fermionen!

Daraus folgt für Einteilchenoperatoren (z.B. Einteilchen-Hamiltonians)

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^N \hat{H}_1^{(i)} = \sum_{\lambda, \mu} h_{\lambda\mu} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu$$

1. Quantisierung 2. Quantisierung

mit

$$h_{\lambda\mu} = \langle \lambda | \hat{H}_1^{(i)} | \mu \rangle$$

unabhängig vom speziellen i

für Bosonen und Fermionen

Bemerkung:

- Gilt natürlich für andere Einteilchen-Operatoren

- Falls die Zustände $|\mu\rangle, |\lambda\rangle$ Eigenzustände sind

$$h_{\lambda\mu} = \epsilon_\lambda \delta_{\lambda\mu}$$

$$\begin{aligned} (\Rightarrow \hat{H}_1^{(i)} | \mu_i \rangle &= \epsilon_{\mu_i} | \mu_i \rangle \\ \langle \lambda_i | \hat{H}_1^{(i)} | \mu_i \rangle &= \epsilon_{\mu_i} \delta_{\mu_i \lambda_i} \\ &\leftarrow i \end{aligned}$$

in diesem Fall folgt

$$\hat{H}_1 = \sum_{\lambda} \epsilon_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda$$

Ebenso findet man für Zweiteilchenoperatoren

(\rightarrow Übung bzw. Literatur)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{12} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \hat{V}(\lambda_i, \lambda_j) \\ &\quad \text{1. Quantisierung} \\ &= \dots = \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu, \nu, \sigma} \underbrace{\langle \lambda, \mu | \hat{V} | \nu, \sigma \rangle}_{\text{Matrixelement}} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu \hat{a}_\sigma \\ &\quad \text{2. Quantisierung} \end{aligned}$$

nach Darstellungsunabhängigkeit!

Anwertung des Matrixelements in Ortsdarstellung:

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

$$\left(\begin{array}{l} \text{benutze } \int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| = \mathbb{1} \\ \text{und z.B. } \langle \underline{r} | \nu \rangle = \Phi_{\nu}(\underline{r}) \\ \langle \lambda | \underline{r} \rangle = \Phi_{\lambda}^*(\underline{r}) \end{array} \right)$$

Weitere Bemerkungen

• Sowohl für ^{die} Erzeuger, als auch für ^{die} Vernichter = Teilchen = Teilchen
die Erzeuger/Vernichter paarweise auf ~~Erzeuger~~ ~~Erzeuger~~

• Spezieller Erzeugeroperator:

$$\text{Besetzungszahloperator } \hat{n}_1 = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1$$

$$\text{(also z.B. } \hat{H}_1 = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k)$$

Anmutig in Eigenbasis

Es gilt: Fockzustände sind Eigenzustände von \hat{n}_1 zum Eigenwert n_1 Besetzungszahl

$$\begin{aligned} \hat{n}_1 |n_1 n_2 \dots\rangle^{(\pm)} &= \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 |n_1 n_2 \dots\rangle^{(\pm)} \\ &= (\pm 1)^{n_1} \sqrt{n_1} \hat{a}_1^\dagger |n_1 - 1 n_2 \dots\rangle^{(\pm)} \\ &= (\pm 1)^{n_1} (\pm 1)^{n_1} \sqrt{n_1} \sqrt{n_1 - 1 + 1} |n_1 n_2 \dots\rangle^{(\pm)} \\ &= n_1 |n_1 n_2 \dots\rangle^{(\pm)} \end{aligned}$$

Operatoren der Gesamtteilchenzahl

$$\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k$$

- Sogar Ein- und Zweiteiloperatoren können in anderer Darstellung geschrieben werden \rightarrow später

II.4. Feldoperatoren

allgemein: Basiswechsel

Behauptung: ^{bedeutet} Einteilchenzustand $|\lambda\rangle$

Entwickle diesen nach einem Einteilchen-Basisystem

$$\textcircled{*} |\lambda\rangle = \hat{T}|\lambda\rangle = \sum_{\mu} |\mu\rangle \langle\mu|\lambda\rangle = \sum_{\mu} \langle\mu|\lambda\rangle |\mu\rangle$$

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

$$|\lambda\rangle = \hat{a}_{\lambda}^+ |0\rangle$$

mit $\textcircled{*}$: $\hat{a}_{\lambda}^+ |0\rangle = \sum_{\mu} \langle\mu|\lambda\rangle \hat{a}_{\mu}^+ |0\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{a}_{\lambda}^+ = \sum_{\mu} \langle\mu|\lambda\rangle \hat{a}_{\mu}^+} \textcircled{1}$$

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

Spezialfall: benutzte Ortszustände $|\underline{n}\rangle$ als $|\lambda\rangle$

z.B. $\langle\underline{n}|\mu\rangle = \varphi_{\mu}^*(\underline{n})$ (Einteilchen-Wellenfunktion)

Die entsprechenden Erzeuger und Vernichter heißen Feldoperatoren

aus $\textcircled{1}$: $\hat{a}_{\underline{n}}^+ \rightarrow \hat{\psi}^+(\underline{n}) = \sum_{\mu} \langle\mu|\underline{n}\rangle \hat{a}_{\mu}^+$

$$\boxed{\hat{\psi}^+(\underline{n}) = \sum_{\mu} \varphi_{\mu}^*(\underline{n}) \hat{a}_{\mu}^+}$$

Interpretation:
erzeugt ein Teilchen
an der Stelle \underline{n}

aus (2) $\hat{a}_{\underline{r}} \rightarrow \boxed{\hat{\varphi}(\underline{r}) = \sum_{\mu} \varphi_{\mu}(\underline{r}) \hat{a}_{\mu}}$ Vermischt ein Teilchen
an der Stelle \underline{r}

Voraussetzungen: : Ergeben sich aus dem für $\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}$

z.B. für Bosonen

$$\begin{aligned} [\hat{\varphi}(\underline{r}), \hat{\varphi}^{\dagger}(\underline{r}')] &= \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \varphi_{\mu}(\underline{r}) \varphi_{\mu'}^*(\underline{r}') \underbrace{[\hat{a}_{\mu}, \hat{a}_{\mu'}^{\dagger}]}_{\delta_{\mu, \mu'}} \\ &= \sum_{\mu} \varphi_{\mu}(\underline{r}) \varphi_{\mu}^*(\underline{r}') \\ &= \sum_{\mu} \langle \underline{r} | \mu \rangle \langle \mu | \underline{r}' \rangle \quad \left[\sum_{\mu} |\mu\rangle \langle \mu| = \mathbb{1} \right] \\ &= \langle \underline{r} | \underline{r}' \rangle = \delta(\underline{r} - \underline{r}') \end{aligned}$$

Beispiel für
Ausdrücke mit Feldoperatoren:

• Einbildung-Operatoren

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \sum_{i=1}^N \hat{V}(\underline{r}_i) \rightarrow \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | \hat{V} | \mu \rangle \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu} \\ &= \sum_{\lambda, \mu} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \underbrace{\langle \lambda | \underline{r} \rangle}_{\varphi_{\lambda}^*(\underline{r})} \underbrace{\langle \underline{r} | \hat{V} | \underline{r}' \rangle}_{V(\underline{r})} \underbrace{\langle \underline{r}' | \mu \rangle}_{\varphi_{\mu}(\underline{r}')} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu} \\ &\quad \text{Zusammenfassen Ersetze da ? in der Abkürzung} \quad \text{Funktion} \quad \delta(\underline{r} - \underline{r}') \\ &= \sum_{\lambda, \mu} \int d\underline{r} \varphi_{\lambda}^*(\underline{r}) V(\underline{r}) \varphi_{\mu}(\underline{r}) \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\mu} \\ &= \int d\underline{r} \sum_{\lambda} \varphi_{\lambda}^*(\underline{r}) \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} V(\underline{r}) \sum_{\mu} \varphi_{\mu}(\underline{r}) a_{\mu} \\ &= \boxed{\hat{V} = \int d\underline{r} \hat{\varphi}^{\dagger}(\underline{r}) \underbrace{V(\underline{r})}_{\text{Funktion}} \hat{\varphi}(\underline{r})} \\ &\quad (= \int d\underline{r} \hat{\varphi}^{\dagger}(\underline{r}) \hat{\varphi}(\underline{r}) V(\underline{r})) \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck für den Einbildungoperator hat formal die Gestalt eines Erwartungswertes (hier für \hat{V}), wenn man die Wellenfunktion durch Feldoperatoren ersetzt.

Dies illustriert den "Teilchendichte" des Wellenfeldes ("2. Quantisierung")

• Teilchendichte

man definiert $\hat{n}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x)$ Teilchendichtegenerator

Gesamtteilchenoperator $\hat{N} = \int dx \hat{n}(x) = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x)$

Konsistent mit unserer friheren Definition von \hat{N} !

denn $\hat{N} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x)$

$$= \int dx \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | x \rangle \langle x | \mu \rangle \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu$$

Einsetzen der Def. für $\hat{\psi}^\dagger, \hat{\psi}$

$$= \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | \underbrace{\int dx |x\rangle \langle x|}_{\hat{1}} | \mu \rangle \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu$$

$$= \sum_{\lambda, \mu} \underbrace{\langle \lambda | \mu \rangle}_{\delta_{\lambda\mu}} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu = \sum_{\lambda} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda = \sum_{\lambda} \hat{n}_\lambda \quad !$$

• Zweiteilchenoperator

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \hat{V}(x_i, x_j) \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu, \nu, \sigma} \langle \lambda, \mu | \hat{V} | \nu, \sigma \rangle \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu \hat{a}_\sigma$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu, \nu, \sigma} \left(\int dx \int dx' \varphi_\lambda^*(x) \varphi_\mu^*(x') V(x, x') \varphi_\nu(x) \varphi_\sigma(x') \right) \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\nu \hat{a}_\sigma$$

$$\Rightarrow \hat{V} = \frac{1}{2} \int dx \int dx' \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') V(x, x') \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x')$$

Berücksichtigung des Spins

Bisher hatten wir den Spin weglassen (man kann ihn sich als eingebettet in die Ortsvariable denken)

Manchmal braucht man den Spin explizit!

Vorgehen
auf der Ebene der Feldoperatoren

$$\text{z.B. } \hat{\Psi}(\underline{r}) \longrightarrow \hat{\Psi}_{\sigma}^{\uparrow}(\underline{r}) \quad \text{mit} \quad \hat{\Psi}_{\sigma}^{\uparrow}(\underline{r}) = \sum_{\mu} \varphi_{\mu\sigma}(\underline{r}) \hat{a}_{\mu\sigma}^{\uparrow}$$

Summiere dann zusätzlich über den Spin.

$$\text{z.B. } \hat{n}(\underline{r}) = \sum_{\sigma} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\underline{r}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\underline{r}) \quad \text{Teilchen dichte am Ort } \underline{r}$$

Erzeugnis eines Teilchens am Ort \underline{r} mit Spin σ

Vertauschungsrelation

$$[\hat{\Psi}_{\sigma}(\underline{r}), \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\underline{r}')] = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\underline{r} - \underline{r}')$$

$\left. \begin{array}{l} + \\ \text{Fermion} \\ \text{Bosone} \end{array} \right\}$

Allgemeine Operatoren in 2. Quantisierung und Spin

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^N \hat{H}_1^{(i)} = \sum_{\mu} \sum_{\sigma\sigma'} \langle \mu\sigma | \hat{H}_1^{(i)} | \mu\sigma' \rangle \hat{a}_{\mu\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mu\sigma'}$$

Einteilchenzustand
mit 2 Quantenzahlen

Falls $\hat{H}_1^{(i)}$ spinunabhängig.

$$\langle \mu\sigma | \hat{H}_1^{(i)} | \mu\sigma' \rangle = \langle \mu | \hat{H}_1^{(i)} | \mu \rangle \frac{\langle \sigma | \sigma' \rangle}{d_{\sigma\sigma'}}$$

II.5. Impulsdarstellung

besonders wichtige Darstellung für translationsinvariant Systeme

z.B. unendlich ausgedehnte Festkörper

Translationsinvarianz impliziert insbesondere $\overset{\text{Wechselwirkungspotential}}{\hat{V}}(r_i, r_j) \rightarrow \hat{V}(r_i - r_j)$

$\overset{\text{externe Potentiale}}{\hat{V}}(r_i) = V_a$ Konstanz!

Für solche Systeme ist es bequem, die Matrixelemente, die in der
Z. Quantisierung auftauchen, durch Impulsregelnzustände (ebene Wellen) auszuwerten!