Problemstellung:

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

Wechselwirkung

Ausdrücken durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren „2. Quantisierung"

Betrachte $\hat{H}_1$

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

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

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

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

$h_{\lambda\mu}$

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N} H_1^{(i)} = \sum_{\lambda\mu} h_{\lambda\mu} \sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i|$$

Betrachte Wirkung des Terms $\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i|$ auf einen Fockzustands (Bosonen) (s. Schwabl)

$$\sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle\langle\mu_i| \underbrace{\ldots\ldots n_\lambda \ldots n_\mu \ldots\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{\prod_j n_{\lambda_j}!}} \sqrt{N!}\, \hat{S}_N^+ |\phi_{\lambda_1} \phi_{\lambda_2} \ldots \phi_{\lambda_N}\rangle}$$

symmetrisiertes Produkt

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

$$= \sqrt{N!}\, \hat{S}_N^+ \sum_{i=1}^{N} |\lambda_i\rangle \underbrace{\langle\mu_i| \underbrace{\phi_{\lambda_1} \ldots \phi_{\lambda_N}\rangle}_{\text{Produkt aus Einteilchenzuständen}}}_{\delta_{\mu,\lambda_1} |\phi_{\lambda_2} \ldots \phi_{\lambda_N}\rangle + \delta_{\mu,\lambda_2} |\phi_{\lambda_1} \phi_{\lambda_3} \ldots \phi_{\lambda_N}\rangle \ldots \delta_{\mu,\lambda_N} |\phi_{\lambda_1} \ldots \phi_{\lambda_{N-1}}\rangle} \frac{1}{\sqrt{\prod_j n_{\lambda_j}!}}$$

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

benutze ~~No~~ Orthonormierung der Einteilchenzustände

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

$$n_\mu \to n_\mu - 1$$

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

$$n_\lambda \to n_\lambda + 1$$

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

$$\underbrace{\hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu}$$

Vernichtung des Zustands μ

Erzeugung des Zustands λ

Insgesamt findet man die Zuordnung:

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

analog für Fermionen!

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

$$\boxed{\underbrace{\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1^{(i)}}_{\text{erste Quantisierung}} = \underbrace{\sum_{\lambda,\mu} h_{\lambda\mu}\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu}_{\text{2. Quantisierung}}}$$

mit

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

unabhängig vom speziellen i

für Bosonen und Fermionen

Bemerkung:

- Gilt natürlich für andere Einteilchen-Operatoren
- Falls die Zustände $|\mu\rangle, |\lambda\rangle$ Eigenzustände sind.

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

$$\left(\Rightarrow \hat{H}_1^{(i)}|\mu_i\rangle = \varepsilon_{\mu_i}|\mu_i\rangle\right.$$

$$\left.\langle\lambda_i|\hat{H}_1^{(i)}|\mu_i\rangle = \varepsilon_{\mu_i}\delta_{\mu_i\lambda_i} \quad \forall i\right)$$

in diesem Fall folgt:

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

Ebenso findet man für Zweiteilchenoperatoren (→ Übung bzw. Literatur)

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

noch darstellungsunabhängig!

Auswertung des Matrixelements in Ortsdarstellung:

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

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

und z.B. $\langle \underline{r}|\nu\rangle = \phi_\nu(\underline{r})$

$\langle\lambda|\underline{r}\rangle = \phi^*_\lambda(\underline{r})$)

Weitere Bemerkungen

- Sowohl für die Einteilchen, als auch für die Zweiteilchen-Terme treten die Erzeuger/Vernichter paarweise auf ~~Kakao images~~

- Spezieller Einteilchenoperator:

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

(also z.B. $\hat{H}_1 = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda \hat{a}^+_\lambda a_\lambda = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda \hat{n}_\lambda$

Auswertung in Eigenbasis

Es gilt: Fockzustände sind Eigenzustände von $\hat{n}_\lambda$ zum Eigenwert n_λ Besetzungszahl

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

Operator der Gesamtteilchenzahl

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

- Sowohl Ein- und Zweiteilchenoperatoren können in anderen Darstellungen geschrieben werden → später

II.4. Feldoperatoren

allgemein: Basiswechsel

Betrachte beliebigen Einteilchenzustand $|\lambda\rangle$

Entwickle diesen nach einem Einteilchen-Basissystem

$$(*) \quad |\lambda\rangle = \hat{1}|\lambda\rangle = \underbrace{\sum_\mu |\mu\rangle\langle\mu|}_{\hat{1}}\lambda\rangle = \sum_\mu \langle\mu|\lambda\rangle|\mu\rangle$$

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

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

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

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

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

Spezialfall: benutze Ortseigenzustände $|\underline{r}\rangle$ als $|\lambda\rangle$

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

Die entsprechenden Erzeuger und Vernichter heißen Feldoperatoren

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

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

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

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

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

z.B. für Bosonen:

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

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

$$= \sum_{\mu} \langle \underline{r}|\mu\rangle\langle\mu|\underline{r}'\rangle \qquad \boxed{\sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu| = 1}$$

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

Beispiele für Ausdrücke mit Feldoperatoren:

- Einteilchen-Operator

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^{N} \hat{V}(\underline{r}_i) \longrightarrow \sum_{\lambda\mu} \langle\lambda|\hat{V}|\mu\rangle\, \hat{a}^+_{\lambda} a_{\mu}$$

Zweimaliges Einschieben der 1 in der Ortsbasis

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

(Funktion)

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

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

$$\boxed{\hat{V} = \int d\underline{r}\, \hat{\varphi}^+(\underline{r})\, \underbrace{V(\underline{r})}_{\text{Funktion}}\, \hat{\varphi}(\underline{r})}$$

$$\left(= \int d\underline{r}\, \hat{\varphi}^+(\underline{r})\hat{\varphi}(\underline{r})V(\underline{r})\right)$$

Dieser Ausdruck für den Einteilchenoperator hat <u>formal</u> die Gestalt eines Erwartungswertes (hier für $\hat{V}$), wenn man die Wellenfunktion durch Feldoperatoren ersetzt.

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

- Teilchendichte

man definiert $\hat{n}(\underline{r}) = \hat{\psi}^+(\underline{r})\,\hat{\psi}(\underline{r})$ Teilchendichteoperator

Gesamtteilchenzahloperator $\hat{N} = \int d\underline{r}\ \hat{n}(\underline{r}) = \int d\underline{r}\ \hat{\psi}^+(\underline{r})\,\hat{\psi}(\underline{r})$

Konsistent mit unserer früheren Definition von $\hat{N}$!

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

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

$$= \sum_{\lambda,\mu} \langle\lambda| \underbrace{\int d\underline{r}\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|}_{1} \mu\rangle\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu$$
$$= \sum_{\lambda,\mu} \underbrace{\langle\lambda|\mu\rangle}_{\delta_{\lambda\mu}}\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\lambda$$
$$= \sum_\lambda \hat{n}_\lambda \quad !$$

- Zweiteilchenoperator

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} \hat{V}(\underline{r}_i,\underline{r}_j) \longrightarrow \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mu\nu\delta} \langle\lambda,\mu|\hat{V}|\nu,\delta\rangle\, \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\delta$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mu\nu\delta} \int d\underline{r} \int d\underline{r}'\ \varphi_\lambda^*(\underline{r})\,\varphi_\mu^*(\underline{r}')\,V(\underline{r},\underline{r}')\,\varphi_\nu(\underline{r})\,\varphi_\delta(\underline{r}')\,\hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\mu^+ \hat{a}_\nu \hat{a}_\delta$$

$$\Longrightarrow \hat{V} = \frac{1}{2}\int d\underline{r}\int d\underline{r}'\ \hat{\psi}^+(\underline{r})\,\hat{\psi}^+(\underline{r}')\,V(\underline{r},\underline{r}')\,\hat{\psi}(\underline{r})\,\hat{\psi}(\underline{r}')$$

Berücksichtigung des Spins

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

Manchmal braucht man den Spin explizit!

Vorgehen auf der Ebene der Feldoperatoren

z.B. $\hat{\psi}(\underline{r}) \longrightarrow \hat{\psi}_\sigma(\underline{r})$ mit $\hat{\psi}_\sigma(\underline{r}) = \sum_\mu \varphi_{\mu\sigma}(\underline{r})\,\hat{a}_{\mu,\sigma}$

Summiere dann zusätzlich über den Spin.

z.B. $\hat{n}(\underline{r}) = \sum_\sigma \underbrace{\hat{\psi}_\sigma^+(\underline{r})}_{\text{Erzeugung eines Teilchens am Ort } \underline{r} \text{ mit Spin } \sigma} \hat{\psi}_\sigma(\underline{r})$ Teilchendichte am Ort $\underline{r}$

Vertauschungsrelation

$$\left[\hat{\psi}_\sigma(\underline{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^+(\underline{r}')\right]_{\mp} = \delta_{\sigma\sigma'}\,\delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

$-$: Bosonen, $+$: Fermionen

Allgemeine Operatoren in 2. Quantisierung mit Spin

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^N \hat{H}_1^{(i)} = \sum_{\lambda\mu}\sum_{\sigma\sigma'} \langle \lambda\sigma | \hat{H}_1^{(i)} | \underbrace{\mu\sigma'}_{\text{Einteilchenzustand mit 2 Quantenzahlen}} \rangle\, \hat{a}^+_{\lambda\sigma}\hat{a}_{\mu\sigma'}$$

falls $\hat{H}_1^{(i)}$ spinunabhängig:

$$\langle \lambda\sigma | \hat{H}_1^{(i)} | \mu\sigma' \rangle = \langle \lambda | \hat{H}_1^{(i)} | \mu \rangle \underbrace{\langle \sigma | \sigma' \rangle}_{\delta_{\sigma\sigma'}}$$

II.5. Impulsdarstellung

besonders wichtige Darstellung für translationsinvariante Systeme

z.B. unendlich ausgedehnte Festkörper

Wechselwirkungspotential

Translationsinvarianz impliziert insbesondere $\hat{V}(\underline{r}_i, \underline{r}_j) \rightarrow \hat{V}(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$

$\hat{V}^{extern}(\underline{r}_i) = V_0$ konstant!

externe Potential

Für solche Systeme ist es bequem, die Matrixelemente, die in der 2. Quantisierung auftauchen, durch Impulseigenzustände (ebene Wellen) auszuwerten!