

## Übung: Zweite Quantisierung

immer auf die Vorlesungs-Homepage  
Schauen!

Sprechzeiten: fast am Freitag EW 704  
10-11

(ansonsten einfach versuchen)

Übungsblätter jede Woche, insgesamt 9-10  
Stk zwei Wochen Bearbeitungszeit.

## Quantisierung freier Wellenfelder

### 1.) Motivation

- Quantentheorie der em-Felder
- Welle-Teilchen Dualismus  
eines konsistenten math. Betr.  
unterbringen
- relativistische Effekte

Beispiele:  $\vec{A}(\vec{r}, t)$ ,  $\phi(\vec{r}, t)$ ,  $\vec{u}(\vec{r}, t)$ ,  $\psi(\vec{r}, t)$   
werden zweitquantisiert  
(Basenzahldarstellung)  
günstig für Vielteilchensysteme

Allg. Vorgehen zur Quantisierung  
von Wellenfeldern

Schema:

- (a) Lagrangentheorie - klassisches Feld  
 $\varphi_i(\vec{r}, t)$  ( $i$ -Teilchen)
- (b) Definition eines Feldimpuls  $\pi_{\varphi_i}(\vec{r}, t)$
- (c) Übergang zu Operatoren  $\underline{\varphi}_i, \underline{\pi}_{\varphi_i}$   
 $(\hat{\varphi}_i, \hat{\pi}_{\varphi_i})$
- (d) Vertauschungsrelationen einführen  
 $[\underline{\varphi}_i, \underline{\pi}_j] \stackrel{(\pm)}{=} \delta_{ij}$
- (e) Hamilton-Operator hinschreiben
- (f) Bewegungsgl. für Operatoren  $\dot{\underline{\varphi}}_i = \dots$
- (g) Entwicklung von  $\underline{\varphi}_i$  und seiner Feldmoden berechnen
- (h) dynamische Operatorgl. lösen und mit exp. Daten vergleichen

$$\vec{r}, \vec{p} \rightarrow \underline{r}, \underline{p} \rightarrow [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

$$\langle \underline{0} \rangle \leftarrow \underline{\hat{O}} = \frac{\hat{H}}{\hbar} [\underline{H}, \underline{0}] \leftarrow H = H(\underline{\hat{r}}, \underline{\hat{p}}) \leftarrow$$

( $\hat{H} \equiv$  hamiltonische Energie)

führt nun am Schrödingerfeld

a) Lagrangefunktion

$$L = \int d^3r \mathcal{L} \quad (\text{Lagrangendichte})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \sum_M \frac{\partial}{\partial x^M} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{i/x^M}} = 0 \quad (x^M = t, x, y, z)$$

$$\left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad \begin{array}{l} \text{(Teilchen)} \\ \text{(bekannt aus Mechanik)} \end{array} \right]$$

$$\dot{q}_{i/x^M} = \frac{\partial}{\partial x^M} \dot{q}_i$$

Beispiel:  $\psi(\vec{r}, t)$ ,  $\psi^*(\vec{r}, t)$

$\mathcal{L} = ?$  "raten"

$$= \frac{i\hbar}{2} (\dot{\psi}^* \psi - \dot{\psi} \psi^*) - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\ell=1}^3 \psi_{/x^\ell}^* \psi_{/x^\ell} - U(\vec{r}, t) \psi^* \psi$$

$$(\text{"T" - V})$$

zeigen, dass aus Euler-Lagrange die Schrödingergl. resultiert  $\{\psi_i\} = (\psi, \psi^*)$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = \frac{i\hbar}{2} \dot{\psi} - U \psi$$

$$\sum_M \frac{\partial}{\partial x^M} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{/x^M}^*} = -\frac{i\hbar}{2} \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\ell=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^\ell} \sum_{\ell=1}^3 \delta_{\ell\ell} \psi_{/x^\ell}$$

$$i\hbar \dot{\psi}(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\sum_{\vec{r}} \frac{\partial^2}{\partial x^{\vec{r}^2}}}_{=\Delta} \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Schrödingergl.

b) Impuls  $\Pi_{\psi_i} := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_i} \quad (\vec{p}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{q}}_i})$

$$\Pi_{\psi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = \frac{i\hbar}{2} \psi^*$$

offensichtlich bilden  $\psi, \psi^*$

analog zu  $x, \vec{p}$  kanonische konjugierte Variablen

c) Feldoperatoren einführen

$$\psi_i \rightarrow \underline{\psi}_i, \quad \Pi_{\psi_i} = \underline{\Pi}_{\psi_i}$$

d) Vertauschungsrelationen

Erinnerung  $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$

verallgemeinern

$$[\underline{\psi}_i(\vec{r}, t), \underline{\Pi}_j(\vec{r}', t)] = i\hbar \delta_{ij} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

gleichzeitiger Kommutator<sup>±</sup>

$\vec{r}$  ist kontinuierlich

Herumbasteln

$$[A, B]_{\pm} = AB \begin{matrix} \leftarrow \text{Halbzahliges Spin} \\ \oplus \\ \ominus \\ \text{ganzzahliges Spin} \end{matrix} BA$$

e) Hamilton-Operator

$$H = \int d^3r \mathcal{H} = \int d^3r \left( \sum_i \psi_i^\dagger \pi_i - \mathcal{L} \right)$$

[Teilchen:  $H = \sum_i \varphi_i^\dagger p_i - \mathcal{L}(\varphi_i, \dot{\varphi}_i(p), t)$ ]

$$\mathcal{H} = \cancel{\psi^\dagger \frac{i\hbar}{2} \dot{\psi}^*} - \cancel{\psi^* \frac{i\hbar}{2} \dot{\psi}} - \cancel{\frac{i\hbar}{2} (\dot{\psi}^* \psi - \psi^* \dot{\psi})}$$

$$+ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_x \frac{\partial \psi^*}{\partial x^x} \frac{\partial \psi}{\partial x^x} + U \psi^* \psi$$

$$H = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}, t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

Zweitquantisierte Schrödingerfeld  
Hamilton-Operator

$$\psi_i(\vec{r}, t) = \sum_m a_{im}(t) u_{im}(\vec{r})$$

↑  
zeitabhängige  
Koeffizienten

↑  
vollständiges  
System f. des  
i-te Feld  
Quantenzahl m

Maxwellfeld → Photonen

Schrödingerfeld → elektronische Anregungen

Schallfeld → Phononen

Bsp: Schrödingerfeld (frei)

$$\underline{H}_0^{(1)} = \frac{\vec{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

hat die Eigenfunktionen  
 $\vec{u}_{\vec{k}, m_s}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\chi}_{m_s}$   
 stellt ein vollständiges System dar ( $= \pm \frac{1}{2}$ )

$$H_0^{(2)} = \sum_{i\mu} \sum_{j\mu'} \int d^3r u_{i\mu}^*(\vec{r}) H_0^{(1)} u_{j\mu'}(\vec{r}) a_{i\mu}^\dagger a_{j\mu'}$$

$$H_0^{(1)} u_{j\mu'}(\vec{r}) = \epsilon_{j\mu'} u_{j\mu'}(\vec{r})$$

$$H_0^{(2)} = \sum_{i\mu} \epsilon_{i\mu} a_{i\mu}^\dagger a_{i\mu}$$

(Die zweitquantisierte Version von  $H$  sieht aus wie harmonisches Oszillatorproblem).  $[a_{i\mu}(t), a_{j\mu'}^\dagger(t)]_{\pm} = \delta_{ij} \delta_{\mu\mu'}$

$$a^\dagger(t) = ?$$

(Heisenbergbild)

$$i\hbar \dot{a}^\dagger = [a^\dagger, H] + \left( \frac{\partial a^\dagger}{\partial t} \right)_{\text{explizit}}$$

$$= [a^\dagger, \hbar\omega a^\dagger a]$$

$$= \hbar\omega (a^\dagger a^\dagger a - a^\dagger a a^\dagger)$$

$$= \hbar\omega [a^\dagger a^\dagger a - a^\dagger (1 + a^\dagger a)] \quad a a^\dagger \pm a^\dagger a = 1$$

$$= -\hbar\omega a^\dagger + \hbar\omega (a^\dagger a^\dagger a - a^\dagger a^\dagger a)$$

$$= -\hbar\omega a^\dagger$$

Basen  $a^\dagger a^\dagger(t) = 0$

$$\dot{a}^\dagger = i\omega a^\dagger \rightarrow a^\dagger(t) = e^{i\omega(t-t_0)} a^\dagger(t_0)$$

Besetzungsdarstellung  $\leftarrow$  Besetzungszahl  
 $a_\chi^\dagger a_\chi |n_\chi\rangle = n_\chi |n_\chi\rangle$   
 Besetzungszahlzustand

Bosoni:  $n_\chi = 0, 1, 2, \dots, \infty$

$$|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n_\chi\rangle = \frac{(a_\chi^\dagger)^{n_\chi}}{\sqrt{n_\chi!}} |0\rangle$$

Vakuum

Fermionen:  $n_\chi = 0, 1$      $|1\rangle = a_\chi^\dagger |0\rangle$

viele Moden:  $H = \sum_\chi \epsilon_\chi a_\chi^\dagger a_\chi$

$$\frac{a_1 |n_1\rangle}{\sqrt{n_1!}} \frac{|n_2\rangle}{\sqrt{n_2!}} \dots = \prod_\chi |n_\chi\rangle \text{ ist Eigenzustand von } H$$

$$\epsilon_1 \widehat{a_1^\dagger a_1} |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle \dots = \epsilon_1 n_1 |n_1\rangle \otimes \dots$$

Eigenfunktionen in Produktzuständen müssen symmetrisiert werden