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
stets zwei Wochen Bearbeitungszeit.

Quantisierung freier Wellenfelder

1.) Motivation

a) Quantentheorie der em-Felder

b) Welle-Teilchen Dualismus
einer konsistenten math. Beschr. unterbringen

c) relativistische Effekte

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

Allg. Vorgehen zur Quantisierung von Wellenfeldern

Schema:

(a) Lagrangetheorie → klassisches Feld
$\psi_i(\vec r, t)$ (i-Teilchen)

(b) Definition eines Feldimpuls $\Pi_{\psi_i}(\vec r, t)$

(c) Übergang zu Operatoren $\underline{\psi}_i$, $\underline{\Pi}_{\psi_i}$
($\hat{\psi}_i$, $\hat{\Pi}_{\psi_i}$)

(d) Vertauschungsrelationen einführen
$[\underline{\psi}_i, \underline{\Pi}_j] \overset{(?)}{=}$

(e) Hamilton-Operator hinschreiben

(f) Bewegungsgl. für Operatoren $\dot{\underline{\psi}}_i = \ldots$

(g) Entwicklung von $\underline{\psi}_i$ und seiner Feldmoden bekannt

(h) dynamische Operatorgl. lösen und mit exp. Daten vergleichen

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

$$\langle \underline{O} \rangle \longleftarrow \dot{\underline{O}} = \frac{\underline{i}}{\hbar}[\underline{H}, \underline{O}] \longleftarrow \underline{H} = H(\hat{\vec r}, \hat{\vec p}) \longleftarrow$$

($\underline{i}$ ≡ imaginäre Einheit)

Jetzt nun am Schrödingerfeld

a) Lagrangefunktion

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

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} - \sum_\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{i/x^\mu}} = 0 \qquad (x^\mu = t, x, y, z)$$

$$\left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \qquad \text{(Teilchen)} \right]$$

(bekannt aus Mechanik)

$$X_{/x^\mu} = \frac{\partial}{\partial x^\mu} X$$

<u>Beispiel</u>: $\psi(\vec{r}, t)$, $\psi^*(\vec{r}, t)$

$\mathcal{L} = ?$ „raten"

$$= \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l=1}^{3} \psi^*_{/x^l} \psi_{/x^l} - U(\underline{r}, t) \psi^* \psi$$

(„$T - V$")

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

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

$$\sum_\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*_{/x^\mu}} = -\frac{i\hbar}{2} \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x^k} \sum_{l=1}^{3} \delta_{lk} \psi_{/x^l}$$

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

Schrödingergl.

b) Impuls $\Pi_{\psi_i} := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_i}$ $\left(p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)$

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

offensichtlich bilden ψ, ψ^* analog zu x, p_x kanonisch konjugierte Variablen

c) Feldoperatoren einführen

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

d) Vertauschungsrelationen

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

verallgemeinern

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

gleichzeitiger Kommutator

$\vec{r}$ ist kontinuierlich

Herumbasteln

$$[A,B]_\pm = AB \pm BA$$

$+$: halbzahliger Spin

$-$: ~~ganzza~~ ganzzahliger Spin

e) Hamilton-Operator

$$H = \int d^3r\, \mathcal{H} = \int d^3r \left(\sum_i \dot{\psi}_i \Pi_i - \mathcal{L} \right)$$

[Teilchen: $H = \sum_i \dot{q}_i p_i - L(q, \dot{q}(p), t)$]

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

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

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

Zweitquantisierte Schrödingerfeld Hamilton-Operator

$$\underline{\psi}_i(\vec{r},t) = \sum_\mu \underline{a}_{i\mu}(t)\, u_{i\mu}(\vec{r})$$

zeitabhängige Koeffizienten

vollständiges System f. das i-te Feld Quantenzahl μ

Maxwellfeld $\longrightarrow$ Photonen

Schrödingerfeld $\longrightarrow$ elektronische Anregungen

Schallfeld $\longrightarrow$ Phononen

<u>Bsp</u>: Schrödingerfeld (frei)

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

hat die Eigenfunktionen

$$\vec{u}_{k, m_s}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \vec{k}\cdot\vec{r}} \chi^{k}_{m_s}$$

$(= \pm\frac{1}{2})$

stellt ein vollständiges System dar

$$H_0^{(2)} = \sum_{i\mu}\sum_{j\mu'} \int d^3r\, u^*_{i\mu}(\vec{r})\, \underline{H}_0^{(1)}\, u_{j\mu'}(\vec{r})\, a^+_{i\mu} a_{j\mu'}$$

$$\underline{H}_0^{(1)} u_{j\mu'}(\vec{r}) = \varepsilon_{j\mu'} u_{j\mu'}(\vec{r})$$

$$\underline{H}_0^{(2)} = \sum_{i\mu} \varepsilon_{i\mu}\, a^+_{i\mu}(t)\, a_{i\mu}(t)$$

(Die zweitquantisierte Version von $\underline{H}$ sieht aus wie harmonisches Oszillatorproblem).

$$[a_{i\mu}(t), a^+_{j\mu'}(t)]_\pm = \delta_{ij}\delta_{\mu\mu'}$$

$a^+(t) = ?$

(Heisenbergbild)

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

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

$$= \hbar\omega\left(a^+a^+a - a^+\underbrace{a a^+}\right)$$

$$= \hbar\omega\left[a^+a^+a - a^+(1 \mp a^+a)\right] \qquad a a^+ \pm a^+a = 1$$

$$a a^+ = 1 \mp a^+ a$$

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

Bosonen $a^+a^+(t) = 0$

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

$$\dot{a}^{+} = i\omega a^{+} \longrightarrow a^{+}(t) = e^{i\omega(t-t_0)}\, a^{+}(t_0)$$

Besetzungsdarstellung

$$a_\lambda^{+} a_\lambda |n_\lambda\rangle = \underbrace{n_\lambda}_{\text{Besetzungszahl}} \underbrace{|n_\lambda\rangle}_{\text{Besetzungszahlzustand}}$$

Bosonen: $n_\lambda = 0, 1, 2, \ldots, 101, \ldots$

$\underbrace{|0\rangle}_{\text{Vakuum}}, |1\rangle, \ldots |n_\lambda\rangle = (n_\lambda!)^{-1/2} (a_\lambda^{+})^{n} |0\rangle$

Fermionen: $n_\lambda = 0, 1 \qquad |1\rangle = a_\lambda^{+} |0\rangle$

viele Moden: $H = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda a_\lambda^{+} a_\lambda$

$a_1|n_1\rangle = \sqrt{n_1}\,|n_1 - 1\rangle$

$|n_1, n_2 \ldots\rangle = \prod_\lambda |n_\lambda\rangle$ ist Eigenzustand von H

$$\varepsilon_1 \overbrace{a_1^{+} a_1}^{\hat{n}_1} |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle \ldots = \varepsilon_1 n_1 |n_1\rangle \otimes \ldots$$

Eigenfunktionen in Produktzuständen müssen symmetrisiert werden