

### 3. Operatoren in zweiter Quantisierung

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^N \hat{H}_1^{(i)}}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{I=1}^N \sum_{j \neq i} V(N_i, N_j)}_{\hat{H}_2} \quad \text{Wechselwirkung (z.B. Coulomb)}$$

Ziel: Ausdrücken durch Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren

#### Einteilchen-Hamiltonian

es sei  $|\lambda_i\rangle$  ein Basis-Vekt-Zustand zum Hilbertraum von Teilchen  $c$

Einteilchen-Hamiltonian zu Teilchen  $c$

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

$$= \sum_{\mu} |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i | \underbrace{H_1^{(i)} | \mu_i \rangle \langle \mu_i |}_{\substack{\text{Matrixelement} \\ h_{\mu}^{(i)}}}$$

$$\sum_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i | = \hat{1}$$

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

$\Rightarrow$  die Matrixelemente  $h_{\mu}^{(i)}$  sind unabhängig von  $i$

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

Strategie: Betrachte Wirkung des Operators  $\sum_{i=1}^N |\lambda_i\rangle \langle \mu_i |$  auf einen  $N$ -Teilchen Zustand (hier: Fockzustand)

allgemeine Herleitung (des Umschreibens mit Erzeugern/Vernichtern)

$\leftarrow$  Bücher von Heitler, Schwabl, Ciftci

Hier: Skizze die Herleitung für Bosonen

$$\sum_{i=1}^N |h_i\rangle \langle h_i| \dots n_1 \dots n_\mu \dots \quad (*)$$

$$\frac{1}{\sqrt{\prod_{\alpha} n_{\alpha}!}} \sqrt{N!} \sum_N^{(*)} |\phi_{\lambda_1} \phi_{\lambda_2} \dots \phi_{\lambda_N}\rangle \quad \text{mit } \sum_N^{(*)} = \frac{1}{N!} \sum_P \dots$$

direktes Produkt aus Einzelteilchenzuständen  
 $|\phi_{\lambda_1}\rangle |\phi_{\lambda_2}\rangle \dots |\phi_{\lambda_N}\rangle$

$$= \sqrt{N!} \sum_N^{(*)} \sum_{i=1}^N |h_i\rangle \langle \mu, i | \underbrace{\phi_{\lambda_1} \dots \phi_{\lambda_N}}_{\in \mathcal{H}^N} \rangle \frac{1}{\sqrt{n_{\lambda_1}! n_{\lambda_2}! \dots}}$$

z.B.  
 $\langle h_i | \phi_{\lambda_1} \rangle = \delta_{\mu, \lambda_1}$

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

es kann mehrere Terme geben je nach Besetzung des Zustands  $\mu$ !  
 ('Bosonen!')

Durch das Skalarprodukt entstehen Terme, in denen jeweils die Besetzung des Zustands  $\mu$  um Eins erniedrigt wird!

$$\hat{=} \text{Wirkung des Vernichtungsoperators } \hat{a}_{\mu}$$

(ein Teilchen im Zustand  $\mu$  wird vernichtet)

Durch Anwendung von  $\hat{a}_{\mu}$  entstehen daraus wieder Spinnwebstruktur Zustände bzw. Tochterzustände

Durch die Multiplikation mit  $|h_i\rangle$  wird andererseits die Besetzung des Zustands  $i$  (Zahl der Teilchen im Zustand  $i$ ) um Eins erhöht

$$\text{Schematisch: } \sum_{i=1}^N |h_i\rangle \langle \mu, i | \longrightarrow \hat{a}_{\mu}^{\dagger} \hat{a}_{\mu}$$

Insgesamt folgt für Einzelteilchenoperatoren (gilt für Bosonen als auch für Fermionen)

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

(\*)

$$= \sum_{\lambda, \mu} h_{\lambda, \mu} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\mu}$$

$$\text{mit } h_{\lambda, \mu} = \langle h_i | \hat{H}_1^{(i)} | h_j \rangle \quad \text{unabhängig von } i!$$

Man sieht: Summe über alle Teilchen wird hier wieder  
 durch Summe über alle Quatzahlen ersetzt  
 (gilt nur für identische Teilchen)

Bemerkung:

- Im Spezialfall  $h_{\lambda\mu} = \epsilon_{\lambda} \delta_{\lambda\mu}$  (falls also die Zustände  $|\lambda_i\rangle, |\mu_i\rangle$  Eigenzustände von  $\hat{H}_i^{(e)}$  sind)

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

- Auch andere Erstellungsoperatoren können in der obigen Form (\*) ausgedrückt werden

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^N \hat{A}^{(i)} = \sum_{\lambda\mu} A_{\lambda\mu} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\mu} \quad \langle \lambda_i | \hat{A}^{(i)} | \mu_i \rangle$$

- Spezieller Erstellungsoperator

Besetzungszahloperator (wieder für diskrete Einzelteilchenzustände)

$$\hat{n}_{\lambda} = \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\lambda}$$

Fockzustände sind Eigenzustände von  $\hat{n}_{\lambda}$  zum Eigenwert  $n_{\lambda}$

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

$$\left( \begin{array}{l} \text{z.B.} \\ \Rightarrow \hat{H}_1 = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} \hat{n}_{\lambda} \quad \text{in Ergebnis} \end{array} \right)$$

Operator der Gesamtteilchenzahl

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

### Zweitteilchenoperatoren

Beispiel Zweitteilchen-Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i}^N \hat{V}(r_i, r_j)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu, \nu, d} \langle \lambda, \mu | \hat{V} | \nu, d \rangle \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} \hat{a}_{\mu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} \hat{a}_d$$

Für Fermionen  
und Bosonen!

Darstellungsmatrix Form!

Ortsdarstellung:

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

$$\int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| = \mathbb{1}, \quad \phi_{\lambda}^*(\underline{r}) = \langle \lambda | \underline{r} \rangle$$

Sonderfall für den Einkörper- als auch für den Zweitkörper-Vermittler:  
haben wir gesehen:

Erzeuger/Annihilator treten paarweise auf  
(also insgesamt gerade Anzahl an  $\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}$ )

→ typisch für Systeme mit Teilchenzahlerhaltung!

### 4) Feldoperatoren

Ausgangspunkt: Transformation zwischen verschiedenen Basissystemen

entwickle z.B. ein Zustand  $|\lambda\rangle$  nach einem Einheitschen basissystem  
 (Einheitschen)

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

benutze jetzt:

$$|\lambda\rangle = \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} |0\rangle, \quad |\mu\rangle = \hat{a}_{\mu}^{\dagger} |0\rangle$$

$$\hat{a}_{\lambda}^{\dagger} |0\rangle = \sum_{\mu} \langle \mu | \lambda \rangle \hat{a}_{\mu}^{\dagger} |0\rangle \Rightarrow$$

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

adjungiert Relation:

$$\hat{a}_{\lambda} = \sum_{\mu} \langle \lambda | \mu \rangle \hat{a}_{\mu} \quad (*2)$$

Spezialfall: Wähle für  $|\lambda\rangle$  Orthonormalzustand  $|\underline{\mu}\rangle$

$$\text{damit } \langle \mu | \lambda \rangle \rightarrow \langle \underline{\mu} | \underline{\mu} \rangle = \varphi_{\mu}^*(\underline{\mu})$$

$$\langle \lambda | \mu \rangle \rightarrow \langle \underline{\mu} | \mu \rangle = \varphi_{\mu}(\underline{\mu})$$

Wellenfunktion.

Die entsprechenden Erzeugnis- und Vernichtungsoperatoren nennt man Feldoperatoren

$$\hat{\varphi}(\underline{r}) \stackrel{(*2)}{=} \sum_{\mu} \langle \underline{\mu} | \mu \rangle \hat{a}_{\mu} = \sum_{\mu} \varphi_{\mu}(\underline{r}) \hat{a}_{\mu}$$

$$\hat{\varphi}^{\dagger}(\underline{r}) \stackrel{(*1)}{=} \sum_{\mu} \langle \mu | \underline{\mu} \rangle \hat{a}_{\mu}^{\dagger} = \sum_{\mu} \varphi_{\mu}^*(\underline{r}) \hat{a}_{\mu}^{\dagger}$$

Interpretation:

$\hat{\varphi}^{\dagger}(\underline{r})$ : erzeugt ein Teilchen an der Stelle  $\underline{r}$

$\hat{\varphi}(\underline{r})$ : vernichtet " " " " " "

Vertauschungsrelationen: ergeben sich aus denen für  $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ !

z.B. Bosonen: 
$$[\hat{\varphi}(x), \hat{\varphi}^\dagger(x')] = \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \varphi_{\mu}(x) \varphi_{\mu'}^{\dagger}(x') \underbrace{[\hat{a}_{\mu}, \hat{a}_{\mu'}^{\dagger}]}_{\text{Kommutator}}$$

$$= \sum_{\mu} \varphi_{\mu}(x) \varphi_{\mu}^{\dagger}(x')$$

$$= \sum_{\mu} \langle \mu | \mu \rangle \langle \mu | \mu \rangle = \langle \mu | \mu \rangle = \delta(x-x')$$

analog für Fermionen: 
$$[\hat{\varphi}, \hat{\varphi}^\dagger]_{+} = \delta(x-x')$$

$$\sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu| = \mathbb{1}$$
*Antikommutator*

Beispiele für Ausdrücke mit Feldoperatoren

- Einteilchenoperatoren, z.B. externes Potential

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

$\uparrow$   $\uparrow$   
*Z. Quantisierung*  
*Orthonormalität*  $\int dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}$

$$= \sum_{\lambda, \mu} \int dx \int dx' \underbrace{\langle \lambda | x \rangle}_{\varphi_{\lambda}^{\dagger}(x)} \underbrace{\langle x | \hat{V}_i | x' \rangle}_{V_i(x)} \underbrace{\langle x' | \mu \rangle}_{\varphi_{\mu}(x')} \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu}$$

$\hat{V}_i$  wirkt multiplizativ in der Ortsdarstellung!

$$= \sum_{\lambda, \mu} \int dx \varphi_{\lambda}^{\dagger}(x) V_i(x) \varphi_{\mu}(x) \hat{a}_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu}$$

brauere Del. von Feldoperatoren

$$= \int dx \hat{\varphi}^{\dagger}(x) V_i(x) \hat{\varphi}(x)$$

Man sieht:

Der letzte Ausdruck für den Erhaltungsgenerator  $\hat{V}$  hat formal die Gestalt eines Erwartungswerts (von  $V_1$ ), wenn man die üblicherweise auftretende Wellenfunktion durch die Feldoperatoren ersetzt!

Interpretation: Die Wellenfunktion werden "qualifiziert". Das illustriert den Teilchencharakter des Wellenfeldes!

$\Rightarrow$  Berechnung Zweite Quantisierung

Weitere Beispiele für Ausdrücke mit Feldoperatoren.

Teilchendichteoperator:  $\hat{n}(\underline{r}) = \hat{\psi}^+(\underline{r}) \hat{\psi}(\underline{r})$

sieht aus wie eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit, ist aber ein Operator!

Gesamtteilchenzahloperator:

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

Verständ mit unserer vorherigen Definition:

$$\hat{N} = \int d\underline{r} \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | \hat{n} | \mu \rangle \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu$$

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

$$\hat{N} = \int d\underline{r} \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | \hat{n} | \mu \rangle \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\mu$$

$$= \sum_{\lambda} \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda = \sum_{\lambda} \hat{n}_\lambda \quad 1$$

Zweitteilchenoperator ausgedrückt durch Feldoperatoren:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} V(\underline{r}_i, \underline{r}_j) = \dots = \frac{1}{2} \int d\underline{r} \int d\underline{r}' \hat{\psi}^+(\underline{r}) \hat{\psi}^+(\underline{r}') V(\underline{r}, \underline{r}') \hat{\psi}(\underline{r}) \hat{\psi}(\underline{r}') \quad \hat{\psi}(\underline{r})$$