English Summary:

3. Second quantization

3.1 Creation and annihilation operators

$$a^+_\beta |n_1 \dots n_\beta \dots\rangle = (-1)^{N_\beta} \underbrace{\sqrt{n_\beta+1}}_{\text{fermions: } \delta_{n_\beta,0}} |n_1 \dots n_\beta + 1 \dots\rangle$$

occupation number representation

$$N_\beta := \sum_{\alpha=1}^{\beta-1} n_\alpha$$

Fock space $\mathcal{H}^{\text{Fock}} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_N \oplus \dots$

fermions:	bosons:
$\{a_k^+, a_\ell^+\} = \{a_k, a_\ell\} = 0$	$[a_k^+, a_\ell^+] = [a_k, a_\ell] = 0$
$\{a_k, a_\ell^+\} = \delta_{k\ell}$	$[a_k, a_\ell^+] = \delta_{k\ell}$
anti-commutator	commutator
$\|n_1 \dots n_k \dots\rangle = \prod_\beta (a_\beta^+)^{n_\beta} (-1)^{N_\beta} \|0\rangle$	$\|n_1 \dots n_k \dots\rangle = \prod_\beta \frac{1}{\sqrt{n_\beta!}} (a_\beta^+)^{n_\beta} \|0\rangle$
$(n_\beta = 0, 1)$	$(n_\beta = 0, 1, 2, \dots)$

Operatoren in Zweiter Quantisierung:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \hat{V}_{12}(r_i, r_j)$$

$$\hat{H}_1 |n_1 \dots n_\lambda \dots\rangle^+ = \sum_{i=1}^N \sum_{\lambda'} \langle \lambda' | \hat{h}_i | \lambda \rangle \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \dots}} \sum_\varrho \hat{P}_{(\varrho)} \left(|\alpha\rangle_1 \dots |\lambda'\rangle_i \dots\right)$$

$$= \sum_{i=1}^N \sum_{\lambda'} \langle \lambda' | \hat{h}_i | \lambda \rangle \sqrt{\frac{n_{\lambda'}+1}{n_\lambda}} \frac{1}{\sqrt{N! \dots (n_\lambda - 1)! \dots (n_{\lambda'}+1)! \dots}} \sum_\varrho \hat{P}_{(\varrho)} \left(\dots |\lambda'\rangle_i \dots\right)$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^N}_{} \sum_{\lambda'} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \sqrt{\frac{n_{\lambda'}+1}{n_\lambda}} \, |n_1 \dots (n_\lambda - 1) \dots (n_{\lambda'}+1) \dots\rangle$$

$$= \overbrace{\sum_\lambda n_\lambda} \sum_{\lambda'} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \sqrt{\frac{n_{\lambda'}+1}{n_\lambda}} \, |n_1 \dots (n_\lambda - 1) \dots (n_{\lambda'}+1) \dots\rangle$$

$$= \sum_{\lambda}\sum_{\lambda'} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \underbrace{\sqrt{n_{\lambda'}+1}\sqrt{n_\lambda}\, | n_1 \ldots (n_\lambda - 1) \ldots (n_{\lambda'}+1) \ldots \rangle}_{a^+_{\lambda'} a_\lambda | n_1 \ldots n_\lambda \ldots n_{\lambda'} \ldots \rangle}$$

$$\boxed{\hat{H}_1 = \sum_i \hat{h}(\underline{r}_i) = \sum_{\lambda\lambda'} \underbrace{\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle}\, a^+_{\lambda'} a_\lambda}$$

Matrixelement $\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle = \int \varphi^*_{\lambda'}(\underline{r}) \hat{h}(\underline{r}) \varphi_\lambda(\underline{r}) d^3r$

Speziell, falls $|\lambda\rangle$ Eigenzustände zu $\hat{h}(\underline{r}_i)$:

$$\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle = \varepsilon_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$\boxed{\hat{H}_1 = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda a^+_\lambda a_\lambda}$$ freier 1-Teilchen-Ham.op (ohne WW)

Analog für 2-Teilchen-Op.:

$$\boxed{\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} \hat{V}_{12}(\underline{r}_i, \underline{r}_j) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ \mu\mu'}} \langle \lambda'\mu' | \hat{V}_{12} | \lambda\mu \rangle\, a^+_{\lambda'} a^+_{\mu'} a_\mu a_\lambda}$$ Beweis s. Ü

mit $\langle \lambda'\mu' | \hat{V}_{12} | \lambda\mu \rangle = \int \varphi^*_{\lambda'}(\underline{r}_1) \varphi^*_{\mu'}(\underline{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|} \varphi_\lambda(\underline{r}_1) \varphi_\mu(\underline{r}_2) d^3r_1 d^3r_2$

Coulomb-WW

- Wenn Teilchenzahlerhaltung gilt, führen die Fock-Operatoren (Erzeuger, Vernichter) <u>nicht</u> aus dem N-Teilchen-Hilbertraum heraus
  $\Rightarrow$ geradzahlige Anzahl von Erzeugern und Vernichtern

Feldoperatoren

1. Quantisierung: $\psi(\underline{r})$ „klassisches" Materiewellenfeld

Zerlegung in Basisfkt.en $\psi(\underline{r}) = \sum_\mu a_\mu \varphi_\mu(x)$

Amplitude Basis

2. Quantisierung $\Rightarrow$ (Anti-) Vertauschungsrelationen für Erzeuger + Vernichter:

Operatoren $\hat{a}_\mu$, $\hat{a}^+_\mu$

$\Rightarrow$ Teilchencharakter des Wellenfeldes

Transformation auf Ortsdarstellung

$$\langle \underline{r}|\psi\rangle = \sum_\lambda \underbrace{\langle \underline{r}|\lambda\rangle}_{\psi_\lambda(\underline{r})} \underbrace{\langle\lambda|\psi\rangle}_{a_\lambda}$$

Erzeugungsop. $\hat{\psi}^+(\underline{r}) := \sum_\lambda \psi^*_\lambda(\underline{r})\, \hat{a}^+_\lambda$

Vernichtungsop. $\hat{\psi}(\underline{r}) := \sum_\lambda \psi_\lambda(\underline{r})\, \hat{a}_\lambda$

$\Big\}$ Feldoperatoren

Teilchen<u>dichte</u>op. $\hat{n}(\underline{r}) := \hat{\psi}^+(\underline{r})\hat{\psi}(\underline{r})$

Teilchen<u>zahl</u>op. $\hat{N} := \int \hat{\psi}^+(\underline{r})\hat{\psi}(\underline{r})\, d^3r$

Bosonen:

$$[\hat{\psi}(\underline{r}), \hat{\psi}^+(\underline{r}')] = \sum_{\lambda\lambda'} \psi_\lambda(\underline{r})\psi^*_{\lambda'}(\underline{r}') \underbrace{[\hat{a}_\lambda, \hat{a}^+_{\lambda'}]}_{\delta_{\lambda\lambda'}}$$

$$= \sum_\lambda \psi_\lambda(\underline{r})\psi^*_\lambda(\underline{r}')$$

$$= \sum_\lambda \langle\underline{r}|\lambda\rangle\langle\lambda|\underline{r}'\rangle = \langle\underline{r}|\underline{r}'\rangle$$

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

Fermionen: $\{\hat{\psi}(\underline{r}), \hat{\psi}^+(\underline{r}')\} = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$ Anti-Vertauschungs-Rel.

• nichtrelativist. Quantenfeldtheorie (lokale Feldop.)

3.3 Erwartungswerte in 2. Quantisierung

Erwart. wert von Op. im antisymm. Vielteilchenzust. $|\psi\rangle^-$

1-Teilchen-Op.

$$ {}^-\langle\psi|\hat{H}_1|\psi\rangle^- = \sum_{\lambda\lambda'} \langle\lambda'|\hat{h}|\lambda\rangle \; {}^-\langle\psi|a^+_{\lambda'} a_\lambda|\psi\rangle^- $$

$$ = \sum_{\lambda\lambda'} \langle\lambda'|\hat{h}|\lambda\rangle \langle 0|a_k \ldots a_j \ldots a_i \ldots a^+_{\lambda'} a_\lambda \ldots a^+_i \ldots a^+_j \ldots a^+_k|0\rangle $$

<u>Strategie</u>: alle Vernichter nach rechts!

z.B.: <u>4-er Produkt</u>

$$ (1) \quad a_i a^+_j a_k a^+_l \overset{\{a^+_l, a_k\} = \delta_{lk}}{=} -a_i a^+_j a^+_l a_k + \delta_{lk} a_i a^+_j $$

$$ = +a^+_j a_i a^+_l a_k - \delta_{ij} a^+_l a_k + \delta_{lk} a_i a^+_j $$

$$ = -a^+_j a^+_l a_i a_k + \delta_{il} a^+_j a_k - \delta_{ij} a^+_l a_k - \delta_{lk} a^+_j a_i + \delta_{lk}\delta_{ij} $$

(Kombinatorik + Antivertauschungs-Relationen)

[Wick'sches Theorem]

Nun gilt: $\langle 0|a^+_i a_j|0\rangle = 0$ im Vakuumzustand kann nichts vernichtet werden

$$ \overset{(1)}{\Longrightarrow} \underbrace{\langle 0|a_i}_{\langle i|} a^+_j a_k \underbrace{a^+_l|0\rangle}_{|l\rangle} = -0+0-0-0+\delta_{lk}\delta_{ij} $$

für $i=l$: $\langle i|a^+_j a_k|i\rangle = \delta_{ki}\delta_{kj}$

z.B. <u>6-er Produkt</u>

$$\underbrace{\langle 0|a_q a_p}_{\langle q p|} a_i^+ a_j \underbrace{a_m^+ a_n^+|0\rangle}_{|m n\rangle} = \delta_{ip}\delta_{jm}\delta_{nq} + \delta_{iq}\delta_{jn}\delta_{mp} - \delta_{iq}\delta_{jm}\delta_{pn} - \delta_{ip}\delta_{jn}\delta_{mq}$$

Speziell: $q=n$, $p=m$, $n \neq m$

$$\ldots = \delta_{\underset{=m}{ip}}\delta_{jm} + \delta_{\underset{=n}{iq}}\delta_{jn}$$

$i=j$:

$$= \delta_{im}\delta_{im} + \delta_{in}\delta_{in}$$

$$= n_i \quad \begin{pmatrix} 1 & \text{falls } i=n=q \vee i=m=p \\ 0 & \text{sonst} \end{pmatrix}$$

$i \neq j$:

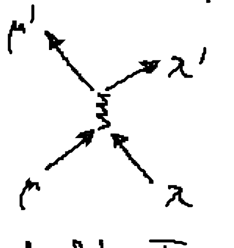
$$= 0$$

$$\Rightarrow \overline{\langle\psi|a_i^+ a_j \underbrace{|\psi\rangle}_{a_m^+ a_n^+|0\rangle}} = \delta_{ij}\, n_i = \langle a_i^+ a_j\rangle\, \delta_{ij}$$

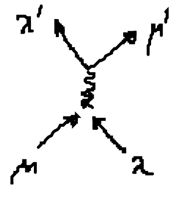
- Erwart. = Summe von δ_{ik}-Produkten über alle möglichen Permutationen von Erz. u. Vern. (Vorzeichen durch Permut.)

2-Teilchen-Op.

$$\overline{\langle\psi|a_{\lambda'}^+ a_{\mu'}^+ a_\mu a_\lambda|\psi\rangle} = \langle a_{\mu'}^+ a_\mu\rangle\,\delta_{\mu'\mu}\,\langle a_{\lambda'}^+ a_\lambda\rangle\,\delta_{\lambda'\lambda} - \langle a_{\mu'}^+ a_\lambda\rangle\,\delta_{\mu'\lambda}\,\langle a_{\lambda'}^+ a_\mu\rangle\,\delta_{\lambda'\mu}$$



direkter Term



Austausch-term