5.2. Operatoren in 2. Quantisierung

Operatoren bestehen aus 1 & 2 Teilchen Anteil in den meisten physikalisch relevanten Fällen.

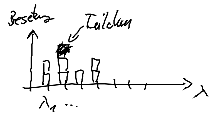
$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12}$$

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

Transformation in Besetzungszahl-Basis

Ziel: $\underset{\text{Teilchen}}{\sum_{i=1}^{N}} \longrightarrow \underset{\text{Quantenzahlen}}{\sum_{\lambda} n_\lambda}$

Ein-Teilchen zustand



$$\hat{h}(r_i)\,\varphi_\lambda(r_i) = \overbrace{\langle r_i | \hat{h} | \lambda \rangle}^{\text{Ortsdarstellung}} = \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle r_i | \lambda' \rangle}_{\varphi_{\lambda'}(r_i)} \overset{\text{„Eins“}}{} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \qquad (*)$$

Vielteilchen zustand

$$\hat{H}_1 \underset{\in \mathcal{H}^{\text{Fock}}}{| n_1 \ldots n_\lambda \ldots \rangle} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N!\, n_1!\, n_2! \ldots}} \sum_{\varsigma} \hat{P}_\varsigma \underbrace{\left(|\alpha\rangle_1 \ldots \hat{h}(r_i) |\lambda\rangle_i \ldots \right)}_{\text{Anti-Symmetrisierung}}$$

$$\overset{(*)}{=} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\lambda'} \frac{\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle}{\sqrt{N!\, n_1! \ldots}} \sum_{\varsigma} \hat{P}_\varsigma \left(|\alpha\rangle_1 \ldots |\lambda'\rangle_i \ldots \right)$$

Fallunterscheidung

$\lambda = \lambda'$: $\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} \langle \lambda | \hat{h} | \lambda \rangle | n_1 \ldots n_\lambda \ldots \rangle$

(Summand kommt n_λ Mal unverändert vor)

$$= \sum_{\lambda} n_\lambda \langle \lambda | \hat{h} | \lambda \rangle | n_1 \ldots n_\lambda \ldots \rangle$$

$(a^+_\lambda a_\lambda | n_1 \ldots n_\lambda \ldots \rangle)$

$\lambda' \neq \lambda$: $\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{\lambda' \\ \lambda' \neq \lambda}} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \sqrt{\frac{n_{\lambda'}+1}{n_\lambda}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N! \ldots (n_\lambda - 1)! \ldots (n_{\lambda'}+1)! \ldots}} \cdot \sum_{\varsigma} \hat{P}_\varsigma \left(|\alpha\rangle_1 \ldots |\lambda'\rangle_i \ldots \right)}$

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

Teilchen vorher in $|\lambda\rangle$
nachher in $|\lambda'\rangle$

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

$$= \sum_{\lambda} \sum_{\lambda' \neq \lambda} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \, a^+_{\lambda'} a_\lambda \, | n_1 \ldots n_\lambda \ldots n_{\lambda'} \ldots \rangle$$

Zusammengefasst:

$$\hat{H}_1 |n_1 \dots n_\lambda \dots\rangle = \sum_{\lambda\lambda'} \overbrace{\langle \lambda' | h | \lambda \rangle}^{\text{Matrixelement bezgl. der Basis } |\lambda_i\rangle} a_{\lambda'}^+ a_\lambda |n_1 \dots n_\lambda \dots n_{\lambda'} \dots\rangle$$

$$\boxed{\hat{H}_1 = \left(\sum_i h(r_i)\right) = \sum_{\lambda\lambda'} \langle \lambda' | h | \lambda \rangle a_{\lambda'}^+ a_\lambda}$$

Matrixelement:

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

Speziell, falls $|\lambda\rangle$ Eigenzustände zu $\hat{h}(r_i)$ $\qquad \langle \lambda' | h | \lambda \rangle = \varepsilon_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}$

$$\boxed{\hat{H}_1 = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda}$$

freier 1-Teilchen Hamiltonian (ohne WW)

Analog für 2-Teilchen Operator:

$$\hat{H}_{12} = \left(\frac{1}{2}\sum_{i,j} \hat{V}_{12}(r_i, r_j)\right) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ \mu\mu'}} \langle \lambda' \mu' | V_{12} | \lambda \mu \rangle a_{\lambda'}^+ a_{\mu'}^+ a_\mu a_\lambda$$

(Im Bra und Ket: erster Index 1. Teilchen, zweiter Index 2. Teilchen)

λ', μ' Zustände der 2 Teilchen nach WW
λ, μ " " vor WW

wobei

$$\langle \lambda' \mu' | V_{12} | \lambda \mu \rangle = \int \varphi_{\lambda'}^*(\underline{r}_1)\, \varphi_{\mu'}^*(\underline{r}_2)\, V_{12}(\underline{r}_1, \underline{r}_2)\, \varphi_\lambda(\underline{r}_1)\, \varphi_\mu(\underline{r}_2)\, d^3r_1\, d^3r_2$$

5.3. Feldoperatoren

1. Quantisierung: $\psi(r)$ "klassisches" Wellenfeld (Lösung der Schrödingergleichung)
   Zerlegung nach Basisfunktionen $\psi(r) = \sum_\mu \underset{\text{Amplitude}}{a_\mu} \underset{\text{Basis}}{\varphi_\mu(x)}$

2. Quantisierung: Vertauschungsrelationen von Erzeuger und Vernichter Op. $\hat{a}_\mu^+, \hat{a}_\mu$
   → Korpuskular-Charakter des Wellenfeldes

$$\psi(\underline{r}) = \langle r | \psi \rangle = \sum_\lambda \underbrace{\langle r | \lambda \rangle}_{\varphi_\lambda(r)} \underbrace{\langle \lambda | \psi \rangle}_{\text{Besetzungszahldarstellung}}$$

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

Vernichtungsoperator $\quad \hat{\psi}(\underline{r}) := \sum_\lambda \varphi_\lambda(\underline{r})\, \hat{a}_\lambda$

Teilchenzahloperator $\quad \hat{N} := \int \hat{\psi}^+(\underline{r})\, \hat{\psi}(\underline{r})\, d^3r$

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

Besetzungszahloperator $\quad \hat{n}_\lambda := a_\lambda^+ a_\lambda$

- Vertauschungsrelationen übertragen sich von Erzeuger + Vernichter a_λ^+, a_λ auf Feldoperatoren

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

$= \sum_\lambda \varphi_\lambda(\underline{r}) \varphi_\lambda^*(\underline{r}')$

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

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

Anti-Vertauschungsrelation

Operator der e-e-WW:

$$\hat{V}_{ee} = \int d^3r' d^3r \frac{\hat{\psi}^+(\underline{r}) \hat{\psi}^+(\underline{r}') \hat{\psi}(\underline{r}') \hat{\psi}(\underline{r})}{4\pi\varepsilon_0 |\underline{r} - \underline{r}'|}$$

5.4. Erwartungswerte in 2. Quantisierung

Erwartungswert im Vielteilchenzustand $|\psi\rangle_-$ ← Anti-Symm. Zustand

1. Teilchen Op

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

kann aus Vakuumzustand mit Erzeuger-Op. generiert werden

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

läuft hinaus auf Berechnung eines Produkts von Erzeugern + Vernichtern unter Benutzung der Vertauschungsrelation:

$\{a_\ell^+ a_k\} = \delta_{\ell k}$

$a_\ell^+ a_k = \delta_{\ell k} - a_k a_\ell^+$

Bsp.: 4-er Produkt

(I) $a_i a_j^+ a_k a_\ell^+ = -a_i a_j^+ a_\ell^+ a_k + \delta_{\ell k} a_i a_j^+$

$= a_j^+ a_i a_\ell^+ a_k - \delta_{ij} a_\ell^+ a_k + \delta_{\ell k} a_i a_j^+$

$= -a_j^+ a_\ell^+ a_i a_k + \delta_{\ell i} a_j^+ a_k - \delta_{ij} a_\ell^+ a_k + \delta_{\ell k} a_i a_j^+$

$= -a_j^+ a_\ell^+ a_i a_k + \delta_{\ell i} a_j^+ a_k - \delta_{ij} a_\ell^+ a_k + \delta_{\ell k} \delta_{ij} - \delta_{\ell k} a_j^+ a_i$

"alle Erzeuger links, Vernichter rechts"

nun gilt $\langle 0 | a_i^+ a_j | 0 \rangle = 0$ im Vakuumzustand kann nichts vernichtet werden

$\Rightarrow \langle 0 | a_i a_j^+ a_k a_\ell^+ | 0 \rangle \overset{\text{mit (I)}}{=} 0 + 0 + 0 + 0 + \delta_{\ell k} \delta_{ij}$

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

$\Rightarrow$ Für 2 Teilchen Op:

$$\boxed{\begin{aligned} {}^{-}\langle \psi | a_{\lambda'}^+ a_{\mu'}^+ a_\mu a_\lambda | \psi \rangle^{-} &= \overbrace{\langle a_{\mu'}^+ a_\mu \rangle}^{{}_{-}\langle \psi | a_{\mu'}^+ a_\mu | \psi \rangle_{-}} \delta_{\mu'\mu} \langle a_{\lambda'}^+ a_\lambda \rangle \delta_{\lambda'\lambda} \\ &\quad - \langle a_{\mu'}^+ a_\lambda \rangle \delta_{\mu'\lambda} \langle a_{\lambda'}^+ a_\mu \rangle \delta_{\lambda'\mu} \end{aligned}}$$

- exakt falls ${}^{-}\langle \psi |$ anti-symm. Produktzustand
- 2-Teilchen Erwartungswerte zerfallen in Produkte von 1-Teilchen Erwartungswerten.