4.8. Exkurs: Teilchenzahlformalismus für Fermionen (2. Quantisierung)

Quantisierung = Aufstellung von Vertauschungsrelationen

phys. Observable → herm. Operator

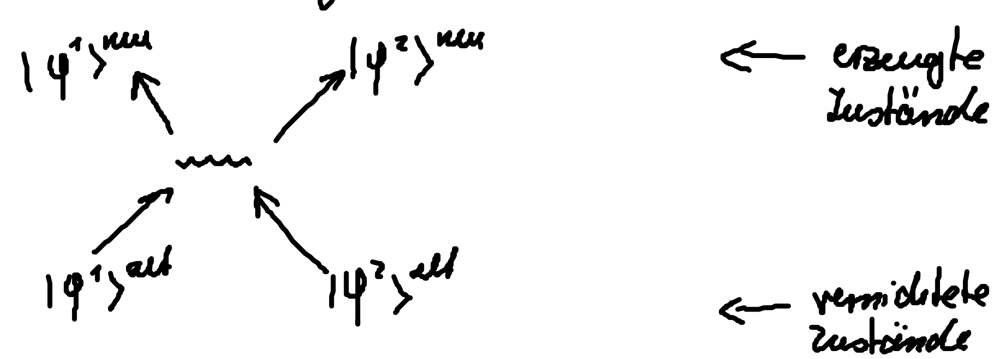
1. Quantisierung
- führt auf Schrödingergleichung (für 1 Teilchen)
- Vertauschungsrelation aus Poissonklammer

2. Quantisierung
- Vertauschungsrelation aus Symmetrieeigenschaften von Vielteilchenzuständen

4.8.1. Erzeuger + Vernichter Operatoren

- Beschreibung von Vielteilchensystemen ist mühselig durch aufwendige Summen zur Symmetrisierung

<u>jetzt</u>: Vereinfachung durch Umformulierung
d.h. Einführen von Erzeuger + Vernichter Operatoren



Erzeugungsoperator a_k^+ für Teilchen im Zustand k

$$a_k^+ \,|\, \varphi_1^1 \dots \underset{\text{Zustand}}{\varphi_\alpha^{\overset{\text{Teilchen}}{N}}} \rangle^- = a_k^+ \frac{1}{\sqrt{N!}} \,|\, \text{Slater-Det.} \,| =$$

$$= \sqrt{N+1} \,|\, \varphi_k^{N+1}, \varphi_1^1 \dots \varphi_\alpha^N \rangle^-$$

- Neue Wellenfkt. im Produktzustand an erster Stelle

$$= \sqrt{N+1} \,(-1)^{N_k} \,|\, \varphi_1^1 \dots \varphi_k^{N+1} \varphi_k^i \dots \varphi_\alpha^N \rangle$$

$$N_k = \sum_{i=1}^{k-1} n_i$$

$\hat{=}$ Zahl der Vertauschungen um Zustand neben identischen Teilchen Zustand zu bringen

es gilt

$$a_k^+ a_\ell^+ \,|\, \varphi_1^1 \dots \varphi_\alpha^N \rangle^- = \sqrt{N+1}\,\sqrt{N+2} \,|\, \varphi_k^{N+2} \varphi_\ell^{N+1}, \varphi_1^1 \dots \varphi_\alpha^N \rangle^-$$

$$a_\ell^+ a_k^+ \,|\, \varphi_1^1 \dots \varphi_\alpha^N \rangle^- = \underset{\text{Symmetrieeigenschaft}}{-}\, a_k^+ a_\ell^+ \,|\, \varphi_1^1 \dots \varphi_\alpha^N \rangle^-$$

$$\boxed{\longrightarrow \{ a_k^+ a_\ell^+ \} = 0}$$

Vernichtungsoperator $a_k = (a^+)^*$ vernichtet ein Teilchen im Zustand k

$$a_k \,|\, \varphi_1^1 \dots \varphi_\alpha^N \rangle^- = \sqrt{N} \,|\, \varphi_1^1 \dots \cancel{\varphi_k^i} \dots \varphi_\alpha^N \rangle^-$$

Bemerkung: Erzeuger und Vernichter-Operatoren führen aus dem Hilbertraum $\mathcal{H}^N$ hinaus

$a^+ : \mathcal{H}^N \rightarrow \mathcal{H}^{N+1}$

<u>Idee</u> : Neuer Raum: Fock Raum

$\hat{=}$ Summe aller N-Teilchen Hilbertväume

$\mathcal{H}^{Fock} = \mathcal{H}^0 \oplus \mathcal{H}^1 \cdots\cdot \oplus \mathcal{H}^N \cdots\cdots$

Besetzungszahldarstellung

$|\varphi_1^{\,1} \cdots \varphi_\alpha^{\,N}\rangle \longrightarrow |n_1 \cdots\cdots n_\lambda \cdots\cdots\rangle$

Fock Zustand

λ-Teilchen Zustand ist n_λ-Mal besetzt (wie oft φ_λ vorkommt im Produkt)

$$\sum_{\lambda=1}^{\infty} n_\lambda = N$$

Wirkung von a_k^+ auf Fock Zustand

$$\boxed{a_k^+ |n_1 \cdots n_k \cdots\rangle = (-1)^{N_k} \delta_{n_k,0} |n_1 \cdots, n_k+1, \cdots\rangle}$$

Symmetrieeigenschaft (Pauli - Prinzip)

Vertauschungsrelationen :

o.B.d.A $\beta > \alpha$

$$\begin{aligned} a_\beta^+ a_\alpha^+ |\cdots n_\alpha \cdots n_\beta \cdots\rangle &= a_\beta^+ (-1)^{N_\alpha} \delta_{n_\alpha,0} |n_1 \cdots n_\alpha+1 \cdots n_\beta \cdots\rangle \\ &= (-1)^{N_\alpha} (-1)^{N_\beta+1} \delta_{n_\alpha,0}\delta_{n_\beta,0} \\ &\quad |n_1 \cdots n_\alpha+1 \cdots n_\beta+1 \cdots\rangle \end{aligned}$$

$$a_\alpha^+ a_\beta^+ |\dots n_\alpha \dots n_\beta \dots\rangle = (-1)^{N_\alpha} (-1)^{N_\beta} \delta_{n_\alpha,0}\, \delta_{n_\beta,0}$$
$$|n_1 \dots n_\alpha+1 \dots n_\beta+1 \dots\rangle$$

$$\Rightarrow \quad a_\alpha^+ a_\beta^+ + a_\beta^+ a_\alpha^+ = 0 \qquad \blacksquare$$

Vernichtungsoperator: $a_\alpha |n_1 \dots n_\alpha \dots\rangle = (-1)^{N_\alpha} \delta_{n_\alpha,1} |n_1 \dots n_\alpha - 1 \dots\rangle$

$$a_\alpha a_\alpha^+ |\dots n_\alpha \dots\rangle = (-1)^{N_\alpha} \delta_{n_\alpha,0}\, \delta_{n_\alpha+1,1} (-1)^{N_\alpha} |\dots n_\alpha \dots\rangle$$

$$a_\alpha^+ a_\alpha |\dots n_\alpha \dots\rangle = (-1)^{N_\alpha} \overbrace{\delta_{n_\alpha,1}\, \delta_{n_\alpha-1,0}}^{n_\alpha} (-1)^{N_\alpha} |\dots n_\alpha \dots\rangle$$
$$= n_\alpha |\dots n_\alpha \dots\rangle$$

Besetzung im Zustand α

$$\{a_\alpha^+ a_\alpha\} = 1$$

Teilchenzahloperator
$$\hat{n}_\alpha = a_\alpha^+ a_\alpha$$

Vertauschungsrelationen
$$\boxed{\{a_k^+ a_l^+\} = 0 = \{a_k a_l\} \qquad \{a_k^+ a_l\} = \delta_{kl}}$$

Erzeugung eines Fock-Zustandes:
$$|n_1 \dots n_k \dots\rangle$$
$$= (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots (a_k^+)^{n_k} |0\rangle$$

Vakuum

noch zu tun: Operatoren (z.B. $\hat{H}$) durch a_α^+ und a_α formulieren

Gesamt-Teilchenzahloperator $\hat{N} = \sum_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha$

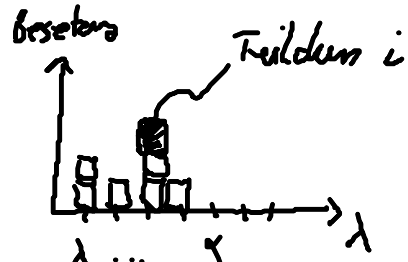
5.8.2. Operatoren in zweiter Quantisierung

Operator besteht aus 1 und 2 Teilchen Anteil in den meisten physikalisch relevanten Fällen:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12}$$
$$= \sum_{i=1}^{N} h_i(\underline{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{i \neq j} \hat{V}_{12}(\underline{r}_i, \underline{r}_j)$$

Transformation des 1-Teilchen Operator

Ziel: $\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Teilchen}}}{\sum_{i=1}^{N}} \longrightarrow \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Quantenzahlen} \\ \text{(Index im Fock-Zustand)}}}{\sum_{\lambda}} n_\lambda$



$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{1 Teilchen} \\ \text{Wellenfunktion}}}{\hat{h}(r_i)\,\varphi_\lambda(r_i)} = \langle r_i | \hat{h} | \lambda \rangle = \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle r_i | \lambda' \rangle}_{\varphi_{\lambda'}(r_i)} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle$$

Slater Determinante

$$\underbrace{\hat{H}_1 | n_1 \dots n_\lambda \dots \rangle}_{N}^{\in \mathcal{H}^{Fock}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \hat{P}_{\mathcal{P}} \left(|\alpha\rangle_1 \dots h(r_i) |\lambda\rangle_i \dots \right)$$

$\mathcal{P}$ .... Permutationen

$= \sum_{i=1} h(r_i)$

$$= \sum_{i=1} \sum_{\lambda'} \frac{\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle}{\sqrt{N! \, n_1! \, n_2! \dots}} \sum_{\rho} \hat{P}_{\rho} \left(|\alpha\rangle_1 \dots |\lambda'\rangle_i \dots \right)$$

Fallunterscheidung in der $\sum_{\lambda'}$

Def. Besetzungszahldarstellung

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

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

Summand kommt n_λ Mal unverändert vor)

$\lambda' \neq \lambda$
$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{\lambda' \\ \lambda' \neq \lambda}} \langle \lambda' | h | \lambda \rangle \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho} \hat{P}_{\rho} \left(|\alpha\rangle_1 \dots |\lambda'\rangle_i \dots \right)$$

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

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

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

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

Zusammengefasst:

$$\hat{H}_1 | n_1 \dots n_\lambda \dots \rangle = \sum_{\lambda\lambda'} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle a_{\lambda'}^+ a_\lambda \; | n_1 \dots n_\lambda \dots n_{\lambda'} \dots \rangle$$

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

Speziell falls $|\lambda\rangle$ Eigenzustände zu $\hat{h}(r_i)$:

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

freier Hamiltonian (ohne WW)

$\uparrow$ Eigenwert von $\hat{h}$

Analog für Operator mit 2 Teilchen WW:

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

mit $\langle \lambda' \mu' V_{12} | \lambda \mu \rangle = \int \varphi_{\lambda'}^*(r_1) \varphi_{\mu'}^*(r_2) V_{12} \cdot$

$\cdot \varphi_\lambda(r_1)\varphi_\mu(r_2)\,d^3r_1\,d^3r_2$

Feldoperatoren:

Amplitude Basis

1. Quantisierung $\psi(r) = \sum_\mu a_\mu \varphi_\mu(x)$

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

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

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

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