

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

Quantisierung = Aufstellung von Vertauschungsrelationen
phys. Observable \rightarrow herm. Operator

1. Quantisierung • führt auf Schrödingergleichung (für 1 Teilchen)
• Vertauschungsrelation aus Poisson-Klammer

2. Quantisierung • Vertauschungsrelation aus
symmetrie eigenschaften von Vielteilchenzuständen

4.8.1. Erzeuger + Vernichter Operatoren

• Beschreibung von Vielteilchensystemen ist
mühselig durch aufwendige Summen zur Symmetrisierung

jetzt: Vereinfachung durch Umformulierung
d.h. Einführen von Erzeuger + Vernichter Operatoren



Erzeugungsoperator a_k^+ für Teilchen im Zustand k

$$a_k^+ | \psi_1^1 \dots \psi_a^N \rangle^- = a_k^+ \frac{1}{\sqrt{N!}} | \text{state-Def.} \rangle =$$

$$= \sqrt{N+1} | \psi_k^{N+1}, \psi_1^1 \dots \psi_a^N \rangle^-$$

↑
Zustand

• Neue Wellenfkt. im Produktzustand der ersten Stelle

$$= \sqrt{N+1} (-1)^{N_k} | \psi_1^1 \dots \psi_k^{N+1} \dots \psi_a^N \rangle$$

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

≙ Zahl der Vertauschungen aus Zustand neben identischen Teilchen Zustand zu bringen

es gilt

$$a_k^+ a_l^+ | \psi_1^1 \dots \psi_a^N \rangle^- = \sqrt{N+1} \sqrt{N+2} | \psi_k \psi_l \psi_1^1 \dots \psi_a^N \rangle^-$$

$$a_l^+ a_k^+ | \psi_1^1 \dots \psi_a^N \rangle^- = -a_k^+ a_l^+ | \psi_1^1 \dots \psi_a^N \rangle^-$$

↑ Symmetrie eigenschaft

$$\boxed{\rightarrow \{ a_k^+ a_l^+ \} = 0}$$

Vernichtungsoperator $a_k = (a^+)^{\#}$ entfernt ein Teilchen im Zustand k

$$a_k | \psi_1^1 \dots \psi_a^N \rangle^- = \sqrt{N} | \psi_1^1 \dots \cancel{\psi_k} \dots \psi_a^N \rangle^-$$

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

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

Idee: Neuer Raum: Fock Raum

$\hat{=}$ Summe aller U -Teilchen Hilberträume

$$\mathcal{H}^{\text{Fock}} = \mathcal{H}^0 \oplus \mathcal{H}^1 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}^U \oplus \dots$$

Besetzungszahlendarstellung

$$|q_1^1 \dots q_d^U\rangle$$

$$\longrightarrow |n_1 \dots n_\lambda \dots\rangle$$

Fock Zustand

\uparrow
 i -Teilchen Zustand ist
 n_λ -Mal besetzt
 (wie oft q_λ vorkommt im
 Produkt)

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

Wirkung von a_k^\dagger auf Fock Zustand

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

\uparrow Symmetrie eigenschaft
 (Pauli-Prinzip)

Vertauschungsrelationen:

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

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

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

$$\Rightarrow a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger + a_\beta^\dagger a_\alpha^\dagger = 0 \quad \square$$

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

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

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

↑
Besetzung in Zustand α

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

Feldanzahloperator

$$\hat{n}_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha$$

Vertauschungsrelationen

$$\{a_k^\dagger a_\ell^\dagger\} = 0 = \{a_k a_\ell\}$$

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

Erzeugung eines Fock-Zustandes:

$$| n_1 \dots n_b \dots \rangle$$

$$= (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots (a_b^\dagger)^{n_b} | 0 \rangle$$

↑
Vakuum

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

$$\text{Gesamt-Feldanzahloperator} \quad \hat{N} = \sum_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha$$

5.8.2. Operatoren in zweiter Quantisierung

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

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

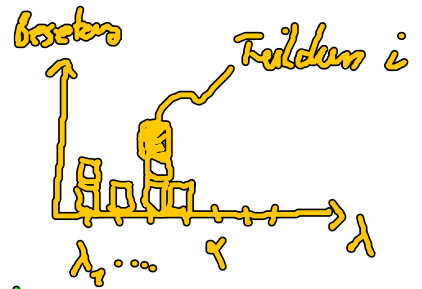
$$= \sum_{i=1}^N h_i(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{i \neq j} \hat{V}_{12}(r_i, r_j)$$

Transformation des 1-Teilchen Operator

Ziel: $\sum_{i=1}^N \longrightarrow \sum_{\lambda} n_{\lambda}$

↑
Teilchen

↑
Quantenzahlen
(Index im Fock-Zustand)



$$\hat{h}(r_i) \psi_{\lambda}(r_i) = \langle r_i | \hat{h} | \lambda \rangle = \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle r_i | \lambda' \rangle}_{\psi_{\lambda'}(r_i)} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle$$

↑
1-Teilchen Wellenfunktion

$$\hat{H} | \underbrace{n_1 \dots n_{\lambda} \dots}_{\in \mathcal{F}^{\text{Fock}}} \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P} \dots \text{Permutationen}} \hat{P}_{\mathcal{P}} (| a_{\lambda_1} \dots h(r_i) | \lambda_{\lambda_2} \dots \rangle)$$

↙ Slater Determinante

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

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

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 konstant
 n_{λ} Mal unverändert

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

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

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

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

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

Zusammengefasst:

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

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

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

$$\hat{H}_1 = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda}$$

↑
Eigenwert von \hat{h}

freier
Hamiltonian (ohne U)

Analog für Operator mit 2 Teilchen (U):

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

$$\text{mit } \langle \lambda' \mu' | V_{12} | \lambda \mu \rangle = \int \psi_{\lambda'}^{\dagger}(r_1) \psi_{\mu'}^{\dagger}(r_2) V_{12} \psi_{\lambda}(r_1) \psi_{\mu}(r_2)$$

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

Feldoperatoren :

1. Quantisierung $\psi(r) = \sum_\mu \overset{\text{Amplitude}}{\downarrow} \overset{\text{basis}}{\downarrow} \psi_\mu(x)$

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

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

Feldzahloperator

$$\hat{n}(r) = \hat{\psi}^\dagger(r) \hat{\psi}(r)$$

• Vertauschungsrelation

$$\{ \hat{\psi}(r), \hat{\psi}^\dagger(r') \} = \delta(r - r')$$