II Zweite Quantisierung

2.1. Fock-Raum

Hilbert Raum für (idealisierte) N-Teilchen System

$$\mathcal{H}(N) \equiv L_2^{(\pm)}(\mathbb{R}^{3N})$$

Fock-Raum

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}(0) \oplus \mathcal{H}(1) \oplus \mathcal{H}^{(2)} \oplus \dots$$
$$= \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}(n)$$

Vektoren im Fock-Raum

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} \chi \\ \phi_{\alpha_1}(x_1) \\ \Phi_{\alpha_1\alpha_2}(x_1 x_2) \\ \Phi_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3}(x_1 x_2 x_3) \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad |0\rangle = \begin{array}{cl} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} & \begin{array}{l} \leftarrow 0 \text{ Teilchen} \\ \leftarrow 1 \text{ Teilchen} \\ \leftarrow 2 \text{ Teilchen} \\ \leftarrow 3 \text{ "} \\ \vdots \end{array} \end{array}$$

2.2 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\left.\begin{array}{l} a_{\alpha_1} : \mathcal{H}(N) \to \mathcal{H}(N-1) \\ a^+_{\alpha_1} : \mathcal{H}(N-1) \to \mathcal{H}(N) \end{array}\right\}$$

Lineare Abbildung zwischen Hilberträumen mit unterschiedlicher Teilchenzahl

Definition für Fermionen

$$a_{\alpha_j}\,\Phi^{(-)}_{\alpha_1\ldots\alpha_N}(x_1\ldots x_N) \equiv 0 \quad \text{falls } \alpha_j \notin \{\alpha_1\ldots\alpha_N\}$$

$$a_{\alpha_j}\,\Phi^{(-)}_{\alpha_1\ldots\alpha_N}(x_1\ldots x_N) = (-1)^{j-1}\,\Phi_{\alpha_1\ldots\alpha_{j-1},\alpha_{j+1}\ldots\alpha_N}(x_1\ldots x_N)$$

$$= \frac{(-1)^{j-1}}{\sqrt{(N-1)!}} \sum_{P\in S_{N-1}} (-1)^{(P)}\, P\, \phi_{\alpha_1}(x_1)\ldots\phi_{\alpha_{j-1}}(x_{j-1})\,\phi_{\alpha_{j+1}}(x_{j+1})\ldots$$

$$a_{\alpha_j}\,\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(x_1) & \cdots & \varphi_{\alpha_1}(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\alpha_j}(x_1) & \cdots & \varphi_{\alpha_j}(x_N) \\ \varphi_{\alpha_N}(x_1) & \cdots & \varphi_{\alpha_N}(x_N) \end{vmatrix} -$$

1) Vertauschen von Zeilen mit α_j bis Einteilchenfkt. in der ersten Zeile steht $\rightarrow$ führt zu $(-1)^{j-1}$
2) Entfernen von erster Zeile und Spalte
3) Normierung $\rightarrow \frac{1}{\sqrt{N!}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}}$

Wirkung des Vernichtungsoperators auf beliebige WF definiert durch die Wirkung auf Determinanten / Permanenten (s. Vorlesung #1)

$$a_{\alpha_1}\,\Psi = a_{\alpha_1}\Big(\sum_c f_c\,\Phi_c\Big) = \sum_c f_c\, a_{\alpha_1}\Phi_c$$

Definition Erzeugungsoperator: adjungierter Operator zu a_{α_1}

$$\langle \Phi_c | a_{\alpha_1} | \Phi_s \rangle = \langle a^+_{\alpha_1}\Phi_c | \Phi_s \rangle$$

2.3 Besetzungszahlen Darstellung (Fermionen)

Slater-Determinante in der Einteilchenfunktionen $\phi_1(x_1), \phi_4(x_2), \phi_5(x_3)$ besetzt sind $\rightarrow$ Konfiguration $c = (1,4,5)$

$$|c\rangle \equiv |n_1 n_2 n_3 \dots\rangle$$

$$|1,4,5\rangle = |1_1, 0_2, 0_3, 1_4, 1_5, 0_6, \dots\rangle$$

$\hookrightarrow$ festgelegte Konvention für Index-Reihenfolge

Def.: Vernichtungsoperator

$$\underline{a}_k |n_1 \dots 1_k \dots\rangle = (-1)^{\left(\sum_{j<k} n_j\right)} |n_1 \dots 0_k \dots\rangle$$

$$\underline{a}_k |n_1 \dots 0_k \dots\rangle = 0$$

kombinierte Schreibweise

$$\underline{a}_k |n_1 \dots n_k \dots\rangle = \Theta_k n_k |n_1 \dots 0_k \dots\rangle$$

$$\Theta_k = (-1)^{\left(\sum_{j<k} n_j\right)}$$

Def.: Erzeugungsoperator

$$\underline{a}_k^+ |n_1 \dots 0_k \dots\rangle = \Theta_k |n_1 \dots 1_k \dots\rangle$$

$$a_k^+ |n_1 \dots 1_k \dots\rangle = 0 \qquad \leftarrow \text{Ausdruck des Pauli Prinzips}$$

kombinierte Schreibweise

$$\underline{a}_k^+ |n_1 \dots n_k \dots\rangle = \Theta_k \underbrace{(1-n_k)}_{\text{Pauli-Blocking Faktor}} |n_1 \dots 1_k \dots\rangle$$

Vakuum-Zustand

$$\underline{a}_k |0_1 \dots 0_{k-1} 1_k 0_{k+1} \dots\rangle \equiv |vac\rangle = |0\rangle$$

$$a_k |0\rangle = 0 \qquad \forall k$$

Jede beliebige Konfiguration (Determinante) kann durch Anwendung von Erzeugern auf den Vakuum-Zustand generiert werden

$$|c\rangle = |c_1 c_2 \dots c_n \dots\rangle = a_{c_1}^+ a_{c_2}^+ \dots a_{c_k}^+ \dots |0\rangle = \prod_{k=1}^{\infty} (a_k^+)^{c_k} |0\rangle$$

Anti-Vertauschungsregeln für Fermionen

$\underline{a}_j \underline{a}_k + \underline{a}_k \underline{a}_j$ $\qquad \{a_j, a_k\} = 0 \qquad [a_j, a_k]_+ = 0$

$$\{a_j^+, a_k^+\} = 0$$

$$\{a_j^+, a_k\} = \delta_{jk}$$

Beweis

$$\underline{a}_k \underline{a}_j |n_1 \dots n_k \dots n_j \dots\rangle = \Theta_j n_j \, \underline{a}_k |n_1 \dots n_k \dots 0_j \dots\rangle$$
$$= \Theta_j n_j \Theta_k n_k |n_1 \dots 0_k \dots 0_j \dots\rangle$$

$$\underline{a}_j \underline{a}_k |n_1 \dots n_k \dots n_j \dots\rangle = \Theta_k n_k \, a_j |n_1 \dots 0_k \dots n_j \dots\rangle$$
$$= \Theta_k n_k \tilde{\Theta}_j n_j |n_1 \dots 0_k \dots 0_j \dots\rangle$$
$$= -\Theta_k \Theta_j n_k n_j |n_1 \dots 0_k \dots 0_j \dots\rangle \qquad \tilde{\Theta}_j = -\Theta_j$$

Addition

$$(\underline{a}_k \underline{a}_j + a_j \underline{a}_k) |n_1 \dots n_k \dots n_j \dots\rangle = 0$$

↳ Gültig für beliebige Zustände (Determinanten, Linearkombinationen von Determinanten)

$\underline{a}_k \underline{a}_j + \underline{a}_j \underline{a}_k = 0 \qquad \{a_k, a_j\} = 0$

Andere Relationen analog

2.4. Besetzungszahl Darstellung (Bosonen)

Konfiguration einer Permanenten mit Einteilchenzustand.

$$|c\rangle = |c_1 \dots c_N\rangle \equiv |n_1 n_2 \dots\rangle$$

Bosonen: <u>keine</u> Beschränkung der n_j: $n_j > 1$ möglich

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$b_k | \ldots n_k \ldots \rangle = \sqrt{n_k}\, | \ldots (n_k - 1) \ldots \rangle$$

$$b_k^+ | \ldots n_k \ldots \rangle = \sqrt{n_k + 1}\, | \ldots (n_k + 1) \ldots \rangle$$

Erzeugung von beliebigen Permanenten

$$| n_1 n_2 \ldots \rangle = \prod_{k=1}^{\infty} \frac{(b_k^+)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} | 0 \rangle$$

Vertauschungsrelationen für Bosonen

$$b_j b_k - b_k b_j = 0 \,, \quad [b_j, b_k] = 0$$

$$[b_j^+, b_k^+] = 0$$

$$[b_j, b_k^+] = \delta_{jk}$$

Beweis analog zu Fermionen

2.5. Unitäre Transformationen und Feldoperatoren

Basis-Wechsel von Einteilchenfunktionen

$$\varphi_k(x) = \sum_j D_{kj}\, \chi_j(x) \qquad x = (\vec{r}, \sigma)$$

Matrix mit Koeffizienten

Für orthonormale Basis ist die Matrix D unitär

$$D^+ D = \mathbb{1} = D \cdot D^+$$

Einheitsmatrix

$$\chi_k(x) = \sum_j (D^+)_{kj}\, \varphi_j(x) = \sum_j D^*_{jk}\, \varphi_j(x)$$

Ortsdarstellung

$$\langle x | \underline{a}_k^+ | 0 \rangle = \varphi_k(x) = \sum_j D_{kj} \, \chi_j(x)$$

$$= \sum_j D_{kj} \, \langle x | \tilde{a}_j^+ | 0 \rangle$$

$$= \langle x | \sum_j D_{kj} \tilde{a}_j^+ | 0 \rangle$$

$$\rightsquigarrow \quad \underline{a}_k^+ = \sum_j D_{kj} \tilde{a}_j^+ \quad , \quad \tilde{\underline{a}}_k^+ = \sum_j D_{jk}^* a_j^+$$

Vertauschungsrelationen bleiben bei Basiswechsel erhalten

$$[\tilde{\underline{a}}_j, \tilde{\underline{a}}_k^+] = \sum_p \sum_q D_{pj} D_{qk}^* \underbrace{[a_p, a_q^+]}_{\delta_{pq}} = \sum_q D_{qj} D_{qk}^* = \delta_{jk}$$

Wechsel von α-Basis Ortsbasis

α-Basis $\quad \phi_\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle$

$$\underline{\psi}^+(x) = \underline{a}_x^+ = \sum_\alpha \phi_\alpha^*(x) \, \underline{a}_\alpha^+$$

$$\underline{\psi}(x) = \underline{a}_x = \sum_\alpha \phi_\alpha(x) \, \underline{a}_\alpha$$

Feld Operatoren

Vertauschungsrelation für Feldoperatoren

Fermionen	Bosonen
$\{ \psi(x), \psi(x') \} = 0$	$[\psi(x), \psi(x')] = 0$
$\{ \psi^+(x), \psi^+(x') \} = 0$	$[\psi^+(x), \psi^+(x')] = 0$
$\{ \psi(x), \psi^+(x') \} = \delta(x-x')$	$[\psi(x), \psi^+(x')] = \delta(x-x')$

2.6. Operatoren in zweiter Quantisierung

Teilchenzahl Op. : $\quad \underline{N} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k^+ \underline{a}_k$

Einteilchen Op. : $\underline{H_0} = \sum_{ij=1}^{\infty} \langle i|\underline{h}|j\rangle\, \underline{a}_i^+ \underline{a}_j$

$\hookrightarrow \langle i|h|j\rangle = \int \phi_i^*(x)\,\underline{h}(x)\,\phi_j(x)\,dx$

Zweiteilchen Op : $V = \frac{1}{2} \sum_{ijkl=1}^{\infty} \langle ij|v|kl\rangle\, \underline{a}_i^+ \underline{a}_j^+ \underline{a}_l a_k$

$$\langle ij|v|kl\rangle = \iint \phi_i^*(x)\,\phi_j^*(x')\,v(x,x')\,\phi_k(x')\,\phi_l(x)\,dx\,dx'$$

ohne Beweis → Einteilchen Op in Übung