(weiter) **3. Zweite Quantisierung**

Neuer Raum: Fock Raum

$$\mathcal{H}^{Fock} = \mathcal{H}_0 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{N-1} \oplus \mathcal{H}_N \oplus \dots$$

Besetzungszahldarstellung

$$|\varphi_\alpha^1 \dots \varphi_{k_i}^N\rangle \longrightarrow |n_1 \dots n_\lambda \dots\rangle$$

1-Teilchen Zustand

n_λ gibt an wie oft φ_λ im Produkt Zustand vorkommt

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

alle 1-Teilchen Zustände

Wirkung von a^+ (Erzeuger) auf Fock Zustände:

$$\tilde{a}^+_\beta |\varphi_1^1 \dots \varphi_\alpha^N\rangle^- = \sqrt{N+1}\,|\varphi_\beta \varphi_1 \dots \varphi_\beta \dots\rangle^-$$

$$= (-1)^{N_\beta}\sqrt{N+1}\,|\varphi_1 \dots \varphi_\beta \varphi_\beta \dots\rangle^-$$

Symmetrieeigenschaften

N_β: Anzahl der Permutationen, um Zustand neben den identischen 1-Teilchen Zustand zu bringen (wieviele Zustände vorher besetzt sind)

$$a^+_\beta |n_1 \dots n_\beta \dots\rangle = (-1)^{N_\beta}\underbrace{\sqrt{n_\beta+1}\,|n_1, \dots, n_\beta+1, \dots\rangle}_{\in \mathcal{H}^{Fock}}$$

$$N_\beta = \sum_{i=1}^{\beta-1} n_i$$

__Fermionen__ $n_\beta = 0, 1$

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

Behauptung

$$\{a_\beta^+ a_\alpha^+\} = 0$$

<u>Beweis</u>: $\beta = \alpha$: $\quad a_\beta^+ a_\beta^+ = 0$

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

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

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

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

<u>Vernichtungsoperator</u> $\quad a = (a^+)^+$

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

Behauptung $\quad \{a_\alpha, a_\beta^+\} = \delta_{\alpha\beta}$

Beweis:

<u>$\alpha = \beta$</u>: $\quad a_\alpha a_\alpha^+ |\dots n_\alpha \dots\rangle = a_\alpha (-1)^{N_\alpha} \delta_{n_\alpha,0} |\dots n_\alpha + 1 \dots\rangle$
$$= (-1)^{2N_\alpha} \delta_{n_\alpha,0} \delta_{n_\alpha+1,1} |\dots n_\alpha \dots\rangle$$

$$a_\alpha^+ a_\alpha |\dots n_\alpha \dots\rangle = a_\alpha^+ (-1)^{N_\alpha} \delta_{n_\alpha,1} |\dots n_\alpha - 1 \dots\rangle$$
$$= (-1)^{2N_\alpha} \delta_{n_\alpha,1} \delta_{n_\alpha-1,0} |\dots n_\alpha \dots\rangle$$
$$= n_\alpha |\dots n_\alpha \dots\rangle$$

Teilchenzahl-operator

Besetzung im Zustand α

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

Zusammenfassung

Fermionen	Bosonen
$\{a_k^+ a_l^+\} = 0$	$[a_k^+ a_l^+] = 0$
$\{a_k a_l\} = 0$	$[a_k a_l] = 0$
$\{a_k a_l^+\} = \delta_{kl}$	$[a_k a_l^+] = \delta_{kl}$
$\lvert n_1 \dots n_k \dots\rangle = \prod_\beta (a_\beta^+)^{n_\beta} (-1)^{N_\beta} \lvert 0\rangle$	$\lvert n_1 \dots n_k\rangle = \prod_\beta \frac{1}{\sqrt{n_\beta!}} (a_\beta^+)^{n_\beta} \lvert 0\rangle$

- Eigenschaft der (Anti) Symmetrisierung steckt in den Vertauschungsrelationen (einfache Algebra)

noch zu tun: Operatoren durch a_i^+ und a_i formulieren

z.B. ($\hat{N} = \sum_\beta a_\beta^+ a_\beta$ Teilchenzahloperator)

3.2. Operatoren in Zweiter Quantisierung

Operator besteht aus 1 & 2 Teilchen Anteil in den meisten physikalisch relevanten Fällen.

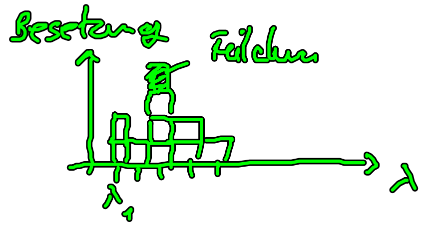
$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12}$$

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

z.B. $\hat{h}(r_i) = \frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + \hat{V}(\underline{r}_i)$

Transformation des 1 Teilchen Operator

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



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

$$\hat{H}\,\underbrace{|n_1 \dots n_\lambda \dots\rangle}_{\in \mathcal{H}^{Fock}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N!\, n_1! n_2! \dots}} \sum_{\wp} \hat{P}_\wp \left(|\alpha\rangle_1 \dots h(r_i)|\lambda\rangle_i \dots\right)$$

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

Def. Besetzungszahldarstellung

Fallunterscheidung

$\lambda' = \lambda$

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

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

(Summand kommt n_λ Mal unverändert vor)

$\lambda' \neq \lambda$

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

$$\dots \sum_{\wp} \hat{P}_\wp \left(|\alpha\rangle_1 \dots |\lambda'\rangle_i \dots\right)$$

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

Teilchen vorher in $|\lambda\rangle$
jetzt nacheinander in $|\lambda'\rangle$

$\vdots$

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

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

Zusammengefasst:

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

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

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 $\hat{h}(r_i)$: $\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle = \varepsilon_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}$

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

freier 1-Teilchen Hamiltonian
(ohne WW)

Analog für 2-Teilchen Operator:

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

mit $\langle \lambda'_{\mu'} | \hat{V}_{12} | \lambda_\mu \rangle = \int \varphi^*_{\lambda'}(r_1)\, \varphi^*_{\mu'}(r_2)\, V_{12}(r_1, r_2)\, \varphi_\lambda(r_1)\, \varphi_\mu(r_2)\, d^3r_1\, d^3r_2$

z.B. Coulomb WW $\quad V_{12} = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r_1 - r_2|}$

- Wenn Teilchenzahlerhaltung gilt, führen die "Fock" Operatoren nicht aus dem N-Teilchen Hilbertraum raus $\Rightarrow$ geradzahlige Anzahl von Erzeugern + Vernichtern und Erzeuger = Vernichter

- Beweisskizze für 2-Teilchenoperator

$$\hat{V}_{12} = \hat{V}(r_1, r_2) \quad \overset{\text{2 Teilchen}}{\downarrow} \qquad = \sum_{\text{alle Paare}} \hat{V}(r_i, r_j) \quad \overset{N \text{ Teilchen}}{\downarrow}$$

$$= \frac{1}{2}\big(V(r_1, r_2) + V(r_2, r_1)\big) \qquad = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{N} V(r_i, r_j)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{abcd} \underbrace{|ab\rangle \langle ab|}_{\mathbb{1} \text{ im 2-Teilchen Raum}} \hat{V}(r_1 r_2) + V(r_2 r_1) \quad |cd\rangle\langle cd|$$

mit symm. WW

$$\int \varphi^*_a(1)\, \varphi^*_b(2) \big(\hat{V}(r_1 r_2) + \hat{V}(r_2 r_1)\big)\, \varphi_c(1)\, \varphi_d(2)\, d^3r_1\, d^3r_2$$

$$= 2 \langle ab | \hat{V}(r_1 r_2) | cd \rangle$$

Antisymm. Op.

$$\hat{A}\hat{V}\hat{A} = \frac{1}{2} \sum_{abcd} \hat{A}\, \underbrace{|ab\rangle}\, \langle ab | \hat{V}(r_1 r_2) + \hat{V}(r_2 r_1) | cd \rangle \quad \langle cd | \hat{A}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2!}} |ab\rangle^-$$

$$= \frac{1}{2}\, 2\, \frac{1}{\sqrt{2!}^2} \sum_{abcd} \underbrace{|ab\rangle^-}_{a_a^+ a_b^+ |0\rangle} \langle ab| V(r_1 r_2)| cd\rangle \underbrace{{}^-\langle cd|}_{\substack{= (a_c^+ a_d^+ |0\rangle)^+ \\ = \langle 0| a_d a_c}}$$

$$\boxed{= \frac{1}{2} \sum_{abcd} \langle ab| V_{r_{12}} | cd\rangle\, a_a^+ a_b^+ a_d a_c}$$

Symm. WW $\longrightarrow$

$$= \frac{1}{4} \sum_{abcd} \Big(\langle ab|\hat{V}(r_1 r_2)|cd\rangle\, a_a^+ a_b^+ a_d a_c$$

$$+ \langle ab|\hat{V}(r_2 r_1)|dc\rangle\, a_a^+ a_b^+ a_c a_d$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{abcd} \Big(\underbrace{\langle ab| V(r_1 r_2)| cd\rangle - \langle ab| V(r_2 r_1)| dc\rangle}_{=:\, {}^-\langle ab|\hat{V}|cd\rangle^-} \Big)\, a_a^+ a_b^+ a_d a_c$$