Feldoperatoren

1. Quantisierung: $\psi(r)$ „klassisches" Wellenfeld

Zerlegung in Basisfunktionen $\psi(r) = \sum_\mu \overset{\text{Amplitude}}{\downarrow}{a_\mu}\, \overset{\text{Basis}}{\swarrow}\varphi_\mu(x)$

2. Quantisierung: → Vertauschungsrelation von Erzeuger + Vernichter Operatoren $\hat{a}_\mu, \hat{a}_\mu^+$

⇒ Korpuskular-character des Wellenfeldes

Transformation auf Ortsdarstellung $\langle r|\psi\rangle = \sum_\lambda \underbrace{\langle \underline{r}|\lambda\rangle}\langle\lambda|\psi\rangle$

$\psi_\lambda(r)$

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

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

Teilchen<u>dichte</u>op. $\hat{n}(\underline{r}) := \hat{\psi}^+(\underline{r})\, \hat{\psi}(\underline{r})$

Teilchen<u>zahl</u>op. $\hat{N} := \int \hat{\psi}^+(\underline{r})\, \hat{\psi}(\underline{r})\, d^3r$

Bosonen:
$$[\psi^+(\underline{r}), \hat{\psi}^+(\underline{r}')] = \sum_{\lambda\lambda'} \psi_\lambda(\underline{r})\psi^*_{\lambda'}(r')\, \underbrace{[\hat{a}_\lambda, \hat{a}_{\lambda'}]^+}_{\delta_{\lambda\lambda'}}$$
$$= \sum_\lambda \psi_\lambda(\underline{r})\psi^*_\lambda(\underline{r}')$$
$$= \sum_\lambda \langle \underline{r}|\lambda\rangle\langle\lambda|\underline{r}'\rangle = \langle\underline{r}|\underline{r}'\rangle$$
$$= \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

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

3.3. Erwartungswerte in 2. Quantisierung

Erwartungswert von Operatoren im antisym. Vielteilchenzustand $|\psi\rangle_-$

1.Teilchen Op.

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

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

$\downarrow$

läuft hinaus auf Berechnung von Erwartungswert eines Produktes von Erzeugern + Vernichtern im Vakuumzustand

- Bsp.: 4-er Produkt

weg.: $\{a_l^+ a_k\} = \delta_{lk}$

$$(1) \qquad a_i a_j^+ a_k a_l^+ = -a_i a_j^+ a_l^+ a_k + \delta_{lk} a_i a_j^+$$

$$\overset{a_i \leftrightarrow a_j^+}{=} a_j^+ a_i a_l^+ a_k - \delta_{ij} a_l^+ a_k + \delta_{lk} a_i a_j^+$$

$$\overset{a_l^+ \leftrightarrow a_i}{=} - a_j^+ a_l^+ a_i a_k + \delta_{li} a_j^+ a_k - \delta_{ij} a_l^+ a_k - \delta_{lk} a_j^+ a_i + \delta_{ji}\delta_{lk}$$

$(-1)^P$

(läuft hinaus auf Kombinatorik + Vertauschungsrelation [Wick'sches Theorem])

nun gilt:

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

$$\overset{(1)}{\Rightarrow} \langle 0| a_i a_j^+ a_k a_l^+ |0\rangle = 0 + 0 - 0 - 0 + \delta_{lk}\delta_{ji}$$

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

(Zustand $\langle 0| a_i a_l$ ist orthogonal zu $a_k^+ a_j |0\rangle$ außer wenn $l = k$ und $i = j$)

Bsp.: 6 er Produkt

$$\langle 0| a_q a_p \underline{a_i^+ a_j} a_m^+ a_n^+ |0\rangle = \delta_{ip}\delta_{jm}\delta_{nq} + \delta_{iq}\delta_{jn}\delta_{mp} - \delta_{iq}\delta_{jm}\delta_{pn} - \delta_{ip}\delta_{jn}\delta_{mq}$$

$q = n$
$p = m$

$$= \delta_{ip}\delta_{jm} + \delta_{iq}\delta_{jn}$$

$i=j$

$$= n_i$$

$$\Rightarrow {}^{-}\langle \psi | a_i^{+} a_j | \psi \rangle^{-} = \delta_{ij}\, n_i$$

- Erwartungswert ist stets eine Summe von δ_{ik} Produkten über alle möglichen Kombinationen von 1. Erz und 1 Vernichter
- Vorzeichen durch Permutation gegeben

2 Teilchen Op.: $\hat{=}\, {}^{-}\langle \psi | a_\mu^{+} a_\mu | \psi \rangle^{-}$

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

Achtung: - gilt nur für Erwartungswerte bezgl. einer Antisym. WF
- mit WW ist $|\psi\rangle^{-}$ im allg. kein Eigenzustand mehr

3.4. Hartree Fock in 2 Quantisierung

Ziel: WW Hamilton Operator $\hat{H}_{full}$ ersetzen durch möglichst guten 1-Teilchen Operatoren.

(wechselwirkende El. im konstanten Potenzial)

$$\hat{H}_{full} = \sum_{\lambda} \varepsilon_\lambda a_\lambda^{+} a_\lambda + \frac{1}{4} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ \mu\mu'}} \langle \lambda'\mu' | \hat{V} | \lambda\mu \rangle_{-}\, a_{\lambda'}^{+} a_{\mu'}^{+} a_\mu a_\lambda$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^{Z} \hat{h}(i) + \Delta\hat{u}(i)}_{:= \hat{H}_{eff} \doteq \sum_{\lambda'} \tilde{\varepsilon}_{\lambda} \tilde{a}^{+}_{\lambda'} \tilde{a}_{\lambda}} + \underbrace{\sum_{i \neq j} \hat{V}(i,j) - \Delta\hat{u}(i)}_{\text{Zweiteilchen Op.} \to 0}$$

effektiver 1 Teilchen Op

Ansatz. Suche Wellenfunktion die Eigenwertgleichung $\hat{H}_{eff}|\phi_\lambda\rangle = \varepsilon_\lambda^{eff}|\phi_\lambda\rangle$ erfüllen und $\langle\phi|\hat{H}_{full}|\phi\rangle$ minimieren.

$$|\phi_\lambda\rangle = \tilde{a}_\lambda^{+}|0\rangle$$

$\uparrow$ neue Erzeuger (mit WW)

- bekannt seien Eigenfunktionen von $\hat{h}|\xi_a\rangle = \varepsilon_a|\xi_a\rangle$

$\Rightarrow |\phi_\lambda\rangle$ kann nach $|\xi_a\rangle$ entwickelt werden

(ohne WW) alte Erzeuger $\downarrow$

$$|\phi_\lambda\rangle = \sum_a |\xi_a\rangle\langle\xi_a|\phi_\lambda\rangle = \sum_a x_{ia}|\xi_a\rangle = \sum_a x_{ia}\, a_a^{+}|0\rangle$$

$$\Rightarrow \tilde{a}_\lambda^{+} = \sum_a \underbrace{x_{\lambda a}}_{\text{gesucht!}} a_a^{+}$$

Variation des Erwartungswertes

(um bestmögliche Wellenfunktion $\langle\phi|$ zu finden)

$$\langle\phi|\hat{H}_{full}|\phi\rangle \overset{(*_{EW})}{=} \sum_{\lambda=1}^{Z} \langle\phi_\lambda|h|\phi_\lambda\rangle + \frac{1}{4}\left(\sum_{\lambda\mu}^{Z} \langle\phi_\lambda\phi_\mu|\hat{V}|\phi_\lambda\phi_\mu\rangle_{-} - \langle\phi_\lambda\phi_\mu|\hat{V}|\phi_\mu\phi_\lambda\rangle_{-}\right)$$

alle besetzen Zustände

Vertauschg liefert Vorzeichen

$$= \sum_{\lambda=1}^{Z} \langle\phi_\lambda|h|\phi_\lambda\rangle + \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mu} \langle\phi_\lambda\phi_\mu|\hat{V}|\phi_\lambda\phi_\mu\rangle_{-}$$

Frage: Wie ist $|\phi_\lambda\rangle$ aus $|\xi_\alpha\rangle$ zusammengesetzt?

Antwort: Minimieren des Energiefunktionals liefert $x_{\lambda\alpha}$

Basiswechsel:

$$\langle \phi|\hat{H}_{full}|\phi\rangle = \sum_{\lambda=1}^{Z} \sum_{ij}^{\infty} \langle \xi_i|h|\xi_j\rangle \, x^*_{\lambda i} x_{\lambda j}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu}^{Z} \sum_{ijlm}^{\infty} \langle \xi_i \xi_l|\hat{V}|\xi_j \xi_m\rangle \cdot x^*_{\lambda i} x^*_{\mu l} x_{\lambda j} x_{\mu m}$$

Nebenbedingung (Normierung) $\sum_l x^*_{\lambda l} x_{\lambda l} = 1$ wegen $\langle \phi_\lambda|\phi_\lambda\rangle = 1$

$$= \sum_l \sum_m x^*_{\lambda l} x_{\lambda m} \underbrace{a_m^+ a_l}_{\delta_{ml}}$$

$\Rightarrow$

$$0 = \frac{d}{dx^*_{kp}} \left(\langle \phi|\hat{H}_{full}|\phi\rangle - \sum_{\lambda=1}^{Z} \tilde{\varepsilon}_\lambda^{eff} \sum_l^{\infty} x^*_{\lambda l} x_{\lambda l} \right)$$

↖ Lagrange Parameter

- beim Ableiten bleibt nur k-te Komponente übrig
- gemischte Summen: Produktregel

$$0 = \sum_j^{\infty} \langle \xi_p|h|\xi_j\rangle x_{kj} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{Z} \sum_{jlm}^{\infty} \langle \xi_p \xi_l|V|\xi_i \xi_m\rangle \cdot x^*_{\mu l} x_{kj} x_{\mu m}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\underset{\mu}{\lambda=1}}^{Z} \sum_{\underset{lmj}{ijm}}^{\infty} \langle \underset{l}{\xi_i} \xi_p|V|\underset{m}{\xi_j} \underset{j}{\xi_m}\rangle \underset{\mu l}{x^*_{\lambda i}} \underset{\mu m}{x_{\lambda j}} \underset{j}{x_{km}}$$

$$+ \varepsilon_k^{eff} x_{kp}$$

$$\Rightarrow \varepsilon_k^{eff} \underline{x_{kp}} = \sum_{j}^{\infty} \underbrace{\left(\langle \xi_p | h | \xi_j \rangle + \sum_{\mu=1}^{Z} \sum_{lm}^{\infty} \langle \xi_p \xi_l | \hat{V} | \xi_i \xi_m \rangle_- \underline{x_{\mu l}^* x_{\mu m}} \right)}_{\hat{H}_{eff}} \cdot x_{kj}$$

Bestimmungsgleichung für x_{kp}

Problem: $x_{\mu j}$ werden schon im Matrixelement benötigt

$\sum_p a_p^+$

$$\Rightarrow \varepsilon_k^{eff} | \phi_k \rangle = \hat{\mathcal{H}}_{eff} | \phi_k \rangle$$ da $| \phi_k \rangle = \sum_l x_{kl} a_l^+ | 0 \rangle$

Basiswechsel

$$\varepsilon_\lambda^{eff} x_{xp} = \sum_{j}^{\infty} \left[\langle \xi_p | h | \xi_j \rangle + \sum_{\mu=1}^{Z} \langle \xi_p \phi_\mu | \hat{V} | \xi_j \phi_\mu \rangle_- \right] x_{kj}$$

$$= \langle \xi_p | h | \phi_k \rangle + \sum_{\mu=1}^{Z} \langle \xi_p \phi_\mu | \hat{V} | \phi_k \phi_\mu \rangle_-$$

$\sum_p a_p^+$

$$\Rightarrow \varepsilon_\lambda^{eff} = \langle \phi_k | h | \phi_k \rangle + \sum_{\mu=1}^{Z} \langle \phi_k \phi_\mu | \hat{V} | \phi_k \phi_\mu \rangle_-$$

ε_k^{eff} sind Eigenwerte von $\hat{\mathcal{H}}_{eff}$ also $\hat{H}_{eff} = \sum_k \tilde{a}_k^+ \tilde{a}_k \varepsilon_k^{eff}$

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\lambda} \tilde{a}_\lambda^+ \tilde{a}_\lambda \left(\underbrace{\langle \phi_\lambda | h | \phi_\lambda \rangle}_{\varepsilon_k} + \sum_{\mu=1}^{\infty} \langle \phi_\lambda \phi_\mu | \hat{V} | \phi_\lambda \phi_\mu \rangle_- \langle \tilde{a}_\mu^+ \tilde{a}_\mu \rangle \right)$$

garantiert das nur besetzten Zustände gezählt werden

$$\boxed{\hat{H}_{eff} = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \left(\varepsilon_\lambda + \underbrace{\sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\underbrace{\langle \lambda\mu | \hat{V} | \lambda\mu \rangle}_{\text{Hartree}} - \underbrace{\langle \lambda\mu | V | \mu\lambda \rangle}_{\text{Fock}} \right) \langle a_\mu^+ a_\mu \rangle}_{\Delta U_\lambda} \right) a_\lambda^+ a_\lambda}$$

1-Teilchen
Energie im
neuen Zustand $|\lambda\rangle$

Korrektur (renormierte Energie)
berücksichtigt WW mit möglichst
geringem Fehler