English Summary:

3. Second quantization

3.1 creation and annihilation operators

$$a_\beta^+ |n_1 \cdots n_\beta \cdots\rangle = (-1)^{N_\beta} \underbrace{\sqrt{n_\beta+1}}_{\text{fermions: } \delta_{n_\beta,0}} |n_1, \dots, n_\beta+1, \dots\rangle$$

occupation number representation

$$N_\beta := \sum_{\alpha=1}^{\beta-1} n_\alpha$$

Fock space $\mathcal{H}^{\text{Fock}} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_N \oplus \dots$

fermions:	bosons:
$\{a_k^+, a_\ell^+\} = \{a_k, a_\ell\} = 0$	$[a_k^+, a_\ell^+] = [a_k, a_\ell] = 0$
$\{a_k, a_\ell^+\} = \delta_{k\ell}$	$[a_k, a_\ell^+] = \delta_{k\ell}$
anti-commutator	commutator
$\lvert n_1 \dots n_k \dots\rangle = \prod_\beta (a_\beta^+)^{n_\beta} (-1)^{N_\beta} \lvert 0\rangle$	$\lvert n_1 \dots n_k \dots\rangle = \prod_\beta \frac{1}{\sqrt{n_\beta!}} (a_\beta^+)^{n_\beta} \lvert 0\rangle$
$(n_\beta = 0, 1)$	$(n_\beta = 0, 1, 2, \dots)$

Operatoren in Zweiter Quantisierung:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_{12} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \hat{V}_{12}(r_i, r_j)$$

$$\hat{H}_1 |n_1 \cdots n_\lambda \cdots\rangle = \sum_{i=1}^{N} \sum_{\lambda'} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \dots}} \sum_{\wp} \hat{P}_{(\wp)} \left(|\alpha\rangle_1 \dots |\lambda'\rangle_i \dots \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{\lambda'} \langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle \sqrt{\frac{n_{\lambda'}+1}{n_\lambda}} \frac{1}{\sqrt{N! \dots (n_\lambda - 1)! \dots (n_{\lambda'}+1)! \dots}} \sum_{\wp} \hat{P}_{(\wp)} (\dots |\lambda'\rangle_i \dots)$$

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

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

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

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

Matrixelement $\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle = \int \varphi^*_{\lambda'}(\underline{r}) \hat{h}(\underline{r}) \varphi_\lambda(\underline{r}) d^3r$

Speziell, falls $|\lambda\rangle$ Eigenzustände zu $\hat{h}(\underline{r}_i)$:

$$\langle \lambda' | \hat{h} | \lambda \rangle = \varepsilon_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}$$

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

freier 1-Teilchen-Ham.op. (ohne WW)

Analog für 2-Teilchen-Op.:

$$\boxed{\hat{H}_{12} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} \hat{V}_{12}(\underline{r}_i, \underline{r}_j) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ \mu\mu'}} \langle \lambda'\mu' | \hat{V}_{12} | \lambda\mu \rangle a^+_{\lambda'} a^+_{\mu'} a_\mu a_\lambda}$$

Beweis s. Ü

mit $\langle \lambda'\mu' | \hat{V}_{12} | \lambda\mu \rangle = \int \varphi^*_{\lambda'}(\underline{r}_1) \varphi^*_{\mu'}(\underline{r}_2) \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|}}_{\text{Coulomb-WW}} \varphi_\lambda(\underline{r}_1) \varphi_\mu(\underline{r}_2) d^3r_1 d^3r_2$

- Wenn Teilchenzahlerhaltung gilt, führen die Fock-Operatoren (Erzeuger, Vernichter) nicht aus dem N-Teilchen-Hilbertraum heraus $\Longrightarrow$ geradzahlige Anzahl von Erzeugern und Vernichtern

Feldoperatoren

1. Quantisierung : $\psi(\underline{r})$ „klassisches" Materiewellenfeld

Zerlegung in Basisfkt.en $\psi(\underline{r}) = \sum_\mu a_\mu \varphi_\mu(x)$

Amplitude Basis

2. Quantisierung $\Rightarrow$ (Anti-)Vertauschungsrelationen für Erzeuger + Vernichter : Operatoren $\hat{a}_\mu$, $\hat{a}^+_\mu$

$\Rightarrow$ Teilchencharakter des Wellenfeldes

Transformation auf Ortsdarstellung

$$\langle r|\psi\rangle = \sum_\lambda \underbrace{\langle \underline{r}|\lambda\rangle}_{\psi_\lambda(\underline{r})} \underbrace{\langle \lambda|\psi\rangle}_{a_\lambda}$$

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

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

} Feldoperatoren

Teilchendichteop. $\hat{n}(\underline{r}) := \hat{\psi}^+(\underline{r})\hat{\psi}(\underline{r})$

Teilchenzahlop. $\hat{N} := \int \hat{\psi}^+(\underline{r})\hat{\psi}(\underline{r})\, d^3r$

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

$$= \sum_\lambda \psi_\lambda(\underline{r})\psi^*_\lambda(\underline{r}')$$

$$= \sum_\lambda \langle \underline{r}|\lambda\rangle\langle\lambda|\underline{r}'\rangle = \langle \underline{r}|\underline{r}'\rangle$$

$$= \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

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

- nichtrelativist. Quantenfeldtheorie (lokale Feldop.)

3.3 Erwartungswerte in 2. Quantisierung

Erwart.wert von Op. in antisymm. Vielteilchenzust. $|\psi\rangle^-$

1-Teilchen-Op.

$$\langle\psi|\hat{H}_1|\psi\rangle = \sum_{xx'} \langle x'|\hat{h}|x\rangle \langle\psi|a^+_{x'}a_x|\psi\rangle$$

$$= \sum_{xx'} \langle x'|\hat{h}|x\rangle \langle 0|a_k \cdots a_j a_i \cdots a^+_{x'} a_x \cdots a^+_i a^+_j \cdots a^+_k|0\rangle$$

Strategie: alle Vernichter nach rechts!

z.B.: 4-er Produkt $\{a_l, a^+_k\} = \delta_{lk}$

(1) $$a_i a^+_j a_k a^+_l = -a_i a^+_j a^+_l a_k + \delta_{lk} a_i a^+_j$$

$$= +a^+_j a_i a^+_l a_k - \delta_{ij} a^+_l a_k + \delta_{lk} a_i a^+_j$$

$$= -a^+_j a^+_l a_i a_k + \delta_{li} a^+_j a_k - \delta_{ij} a^+_l a_k - \delta_{lk} a^+_j a_i + \delta_{lk}\delta_{ij}$$

(Kombinatorik + Antivertauschungs-Relationen)
[Wick'sches Theorem]

Nun gilt: $\langle 0|a^+_i a_j|0\rangle = 0$ im Vakuumzustand kann nichts vernichtet werden

$\overset{(1)}{\Longrightarrow}$ $$\underbrace{\langle 0|a_i}_{\langle i|} a^+_j a_k \underbrace{a^+_l|0\rangle}_{|l\rangle} = -0 + 0 - 0 - 0 + \delta_{lk}\delta_{ij}$$

für $i = l$: $\langle i|a^+_j a_k|i\rangle = \delta_{ki}\delta_{kj}$

z.B. 6-er Produkt

$$\underbrace{\langle 0|a_q a_p}_{\langle qp|} a^+_i a_j \underbrace{a^+_m a^+_n|0\rangle}_{|mn\rangle} = \delta_{ip}\delta_{jm}\delta_{nq} + \delta_{iq}\delta_{jn}\delta_{mp} - \delta_{iq}\delta_{jm}\delta_{pn} - \delta_{ip}\delta_{jn}\delta_{mq}$$

Speziell: $q = n$, $p = m$, $n \neq m$

$$\ldots = \delta_{ip}\delta_{jm} + \delta_{iq}\delta_{jn}$$ ($p \hat{=} m$, $q \hat{=} n$; $i = j$)

$$= \delta_{im}\delta_{im} + \delta_{in}\delta_{in}$$

$$= n_i \quad \begin{cases} 1 & \text{falls } i=n=q \vee i=m=p \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(i \neq j) = 0$$

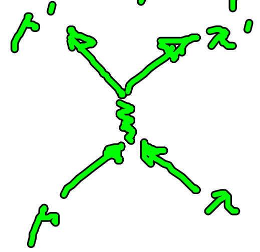
$$\Rightarrow \quad \overline{\langle \psi | a_i^+ a_j \underbrace{|\psi\rangle}_{a_m^+ a_n^+ |0\rangle}} = \delta_{ij}\, n_i = \langle a_i^+ a_j \rangle\, \delta_{ij}$$

- Erwart. = Summe von δ_{ik}-Produkte über alle möglichen Permutationen von Erz. u. Vern. (Vorzeichen durch Perm.)

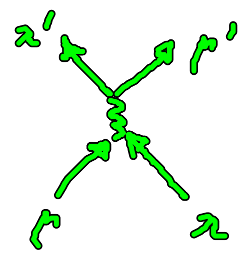
2-Teilchen-Op.:

$$\overline{\langle \psi | a^+_{\lambda'} a^+_{\rho'} a_{\rho} a_{\lambda} | \psi \rangle} = \langle a^+_{\rho'} a_{\rho} \rangle\, \delta_{\rho'\rho}\, \langle a^+_{\lambda'} a_{\lambda} \rangle\, \delta_{\lambda'\lambda}$$

$$- \langle a^+_{\rho'} a_{\lambda} \rangle\, \delta_{\rho'\lambda}\, \langle a^+_{\lambda'} a_{\rho} \rangle\, \delta_{\lambda'\rho}$$



direkter Term



Austausch-term

3.4 Hartree-Fock-Näherung in 2. Quantisierung

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

$$\hat{H}_{full} = \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} a^+_{\lambda} a_{\lambda} + \frac{1}{4} \sum_{\lambda\lambda'} \langle \lambda'\rho' | \hat{V} | \lambda\rho \rangle\, a^+_{\lambda'} a^+_{\rho'} a_{\rho} a_{\lambda}$$

$$= \underbrace{\sum_{i=1}^{Z} \hat{h}(i) + \Delta\hat{U}(i)}_{=: \hat{H}_{eff} = \sum_{\lambda'} \tilde{\varepsilon}_{\lambda'} \tilde{a}^+_{\lambda'} \tilde{a}_{\lambda'}} + \underbrace{\sum_{i \neq j} \hat{V}(i,j) - \Delta\hat{U}(i)}_{\approx 0}$$

effektive Feldop. $\tilde{a}^+_{\lambda'}, \tilde{a}_{\lambda'}$

Ansatz: Suche 1-Teilchen-Zustände, die Eigenwertgl. $\hat{H}_{eff} |\phi_\lambda\rangle = \tilde{\varepsilon}_\lambda |\phi_\lambda\rangle$ erfüllen und $\langle\phi| \hat{H}_{full} |\phi\rangle$ minimieren!

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

- bekannt seien Eigenfkt.en von $\hat{h} |\xi_a\rangle = \varepsilon_a |\xi_a\rangle$

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

$$|\phi_\lambda\rangle = \sum_a |\xi_a\rangle \underbrace{\langle\xi_a|\phi_\lambda\rangle}_{x_{ia}} = \sum_a x_{ia} |\xi_a\rangle = \sum_a x_{ia}\, a^+_a |0\rangle$$

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

$\Rightarrow$ Variation des Erwartungswertes $\langle\phi| \hat{H}_{full} |\phi\rangle$