V Zweite Quantisierung (Fortsetzung)

V.2 Harmonischer Oszillator (Prototyp für die Zweite Quantisierung) (Wdh.)

Ensemble von ungekoppelten harmonischen Oszillatoren (Beispiel: Kernschwingungen)

Die Lagrange Funktion ist hier: (in Normalkoordinaten)

$$L = \sum_{\underset{\substack{\text{Multiindex}\\ i=(j,q)}}{\uparrow}} \left(\frac{1}{2}(\dot{Q}_i)^2 - \frac{1}{2}\omega_i^2 Q_i^2 \right)$$

Der kanonische Impuls P_i zu Q_i wird durch

$$P_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i} = \dot{Q}_i \qquad \text{bestimmt.}$$

Durch eine Legendre Transformation kann der Hamiltonoperator bestimmt werden als:

$$H = \frac{1}{2}\sum_i \left(P_i P_i + \omega_i^2 Q_i Q_i \right)$$

Übergang zur Quantenmechanik: (Postulat der Vertauschungsrelationen) (Vgl. Exp)

$$[Q_i, P_j]_- = i\hbar\,\delta_{ij} \quad , \quad [Q_i, Q_j]_- = 0$$

$$[P_i, P_j]_- = 0$$

Konstruktion Erzeugungs und Vernichtungsoperatoren

$$b_i^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_i}}\left(\omega_i Q_i - i P_i \right) \qquad \text{(Erzeuger)}$$

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_i}}\left(\omega_i Q_i + i P_i \right)$$

$$Q_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left(b_i^+ + b_i\right)$$

$$P_i = -i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \left(b_i - b_i^+\right)$$

$$H = \sum_i \hbar\omega_i \left(b_i^+ b_i + \frac{1}{2}\right)$$

$$[b_i, b_j^+]_- = \frac{1}{2\hbar\omega_i} [\omega_i Q_i + i P_i, \omega_j Q_j - i P_j]_-$$

$$= \frac{i\omega_i}{2\hbar\omega_i} \left(\underbrace{[P_i, Q_j]_-}_{-i\hbar\delta_{ij}} - \underbrace{[Q_i, P_j]_-}_{i\hbar\delta_{ij}} \right) = \delta_{ij}$$

$$\| \; [b_i, b_j^+] = \delta_{ij}, \quad [b_i, b_j]_- = 0, \quad [b_i^+, b_j^+]_- = 0 \; \|$$

Bosonische Vertauschrelationen

Es wäre schön, wenn es einen Grundzustand gäbe.

Dieser soll geringste Energie aller Zustände haben.

Annahme wir haben die niedrigste Energie E_0'

$$\sum_i \hbar\omega_i b_i^+ b_i |\phi_0\rangle = E_0' |\phi_0\rangle \qquad | \cdot b_j \text{ von links}$$

$$b_j \sum_i \hbar\omega_i b_i^+ b_i |\phi_0\rangle = E_0' b_j |\phi_0\rangle$$

$$\sum_i \hbar\omega_i (\delta_{ij} + b_i^+ b_i) b_j |\phi_0\rangle = E_0' b_j |\phi_0\rangle$$

$$\sum_i \hbar\omega_i b_i^+ b_i b_j |\phi_0\rangle = \underbrace{(E_0' - \hbar\omega)}_{\text{niedrigere Energie als die niedrigste Eigenenergie } \lightning} b_j |\phi_0\rangle$$

$$\| \; b_j |\phi_0\rangle = 0 \; \|$$

EW sind nicht negativ!

Sei $|\phi\rangle$ EV

$$\hbar\omega_j \langle\phi|\phi\rangle = \langle\phi|b_j^+ b_j|\phi\rangle = \| b_j|\phi\rangle\|^2 \geq 0$$

$\Rightarrow$ EW sind nicht negativ

Desweiteren $$\langle\phi_0|b_j^+ b_j|\phi_0\rangle = \|\underbrace{b_j|\phi_0\rangle}_{0}\|^2 = 0$$

Null ist der kleinste Eigenwert des Besetzungszahloperators.

Fock Zustände

Erinnerung an die QM

|| Wenn $|\phi\rangle$ EV von H ist, so ist auch $b_j|\phi\rangle$ und $b_i^+|\phi\rangle$ EV! ||

<u>Denn</u>: für $H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$

ist auch $H_0\, b_j|\phi\rangle = (E-\hbar\omega_j) b_j|\phi\rangle$ ein EV.

Analog kann man zeigen:

$$\| \quad H_0\, b_i^+|\phi\rangle = (E+\hbar\omega_i)\, b_i^+|\phi\rangle \quad \|$$

Wir können jetzt jeden EV aus dem Grundzustand konstruieren:

$$|n_1, \ldots, n_i, \ldots, n_{max}\rangle = \frac{1}{N(n_1,\ldots,n_i)} \prod_i (b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle$$

Es bleibt den Normierungsfaktor zu bestimmen:

<u>Behauptung</u>: $$|n_1\rangle = \frac{1}{N(n_1)}\, b_1^{+n}|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}}\, b_1^{+n}|\phi_0\rangle$$

<u>Beweis über Induktion</u>: $(n_1=1)$ (i) $$|b_1^+|\phi_0\rangle|^2 = \langle\phi_0|b_i b_i^+|\phi_0\rangle$$
$$= \langle\phi_0|(\underbrace{b_i^+ b_i}_{0} + 1)|\phi_0\rangle = \langle\phi_0|\phi_0\rangle = 1$$

(ii) $$b_1^+ b_1\, b_1^+|\phi_0\rangle = b_1^+|\phi_0\rangle + \underbrace{b_1^+ b_1^+ b_1|\phi_0\rangle}_{0}$$
$$= b_1^+|\phi_0\rangle$$

Induktionsschritt: $(n_1 \to n_1+1)$

<u>Voraus</u>: $\| (b_i^+)^{n_i}|\phi_0\rangle\| = n_1!$ und $b_i^+ b_i\, (b_i^+)^{n_1}|\phi_0\rangle = n_1\,(b_1^+)^{n_1}|\phi_0\rangle$

Beweis:

(i) $$\|(b_i^+)^{n_i+1}|\phi_0\rangle\|^2 = \langle\phi_0| b_i^{n_i} b_i b_i^+ b_i^{+n_i} |\phi_0\rangle$$

$$= \langle\phi_0| b_i^{n_i} b_i^{+n_i} |\phi_0\rangle + \langle\phi_0| b_i^{n_i} b_i^+ b_i b_i^{+n_i} |\phi_0\rangle$$

$$n_i b_i^{+n_i} |\phi_0\rangle$$

$$= n_i! + n_i \underbrace{\langle\phi_0| b_i^{n_i} b_i^{+n_i} |\phi_0\rangle}_{n_i!} = n_i!(1+n_i) = (n_i+1)!$$ ✓

(ii) $$b_i^+ b_i (b_i^+)^{n_i+1} |\phi_0\rangle = b_i^+ b_i b_i^+ (b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle$$

$$= b_i^+ \underbrace{b_i^+ b_i (b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle}_{n_i (b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle} + b_i^+ (b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle$$

Ergo: $$= (n_i+1)(b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle$$

$$|n_1, \ldots, n_i, \ldots, n_{k+1}\rangle = \frac{1}{\prod_i \sqrt{n_i!}} \prod_i (b_i^+)^{n_i} |\phi_0\rangle$$

Die Eigenzustände ergeben sich konstruktiv aus dem Grundzustand! Diese Form der Darstellung nennt man Fock darstellung!

$$b_j |n_1, \ldots, n_{max}\rangle = \sqrt{n_j} |n_1, \ldots, n_j - 1, \ldots, n_{max}\rangle$$

$$b_j^+ |n_1, \ldots, n_{max}\rangle = \sqrt{n_j+1} |n_1, \ldots, n_j + 1, \ldots, n_{max}\rangle$$

$$b_j^+ b_j |n_1, \ldots, n_{max}\rangle = n_j |n_1, \ldots, n_{max}\rangle$$

Interpretation Hamiltonoperator

$$H = \sum_i \hbar \omega_i \underbrace{b_i^+ b_i}$$

Anzahl der Teilchen im Zustand i multipliziert mit der Energie eines Teilchens.

$\Rightarrow$ Ergo Energie ist gequantelt!

Desweiteren: b_j vernichtet Phonon in Zustand j und b_j^+ erzeugt Phonon im Zustand j.

Man kann in einem Zustand beliebig viele Teilchen stehen.

V.3 Quantisierung des Materiefeldes

Ziel: Wieder Elektronenz. aus einem Grundzustand mit Erzeugen und Vernichten darstellen

Auch WW mit Erzeugen und Vernichten formulieren.

Startpunkt Lagrangefkt für klassische Wellenfeld:

$$L = \int \psi^*(x')\left(i\hbar \dot\psi(x') - V(x')\psi(x') + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta' \psi \right) d^3x' \quad (\text{! nicht hermitisch})$$

ψ, ψ^* sind von einander unabhängig. (Alternativ: Re und Im)

Feldvariablen $L(\psi, \psi^*, \dot\psi, \dot\psi^*)$

Bildung der Lagrangegl.:

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta \dot\psi^*(x)} - \frac{\delta L}{\delta \psi^*(x)} = -\left\{ i\hbar\dot\psi - V(x)\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi \right\} = 0$$

Der kanonische Impuls ist:

$$\| \quad \Pi = \frac{\delta L}{\delta \dot\psi} = -\frac{\hbar}{i}\psi^* \quad \|$$

Die Hamiltonfkt, kann mit Hilfe einer Legendre transformation erzeugt werden!

$$H = \int (\Pi\dot\psi - \mathcal{L})\, d^3x = \int \left\{ i\hbar\dot\psi\psi^* - i\hbar\psi^*\dot\psi - \psi^*\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \psi^* V\psi \right\} d^3x$$

$$\| \quad H = \int \psi^*(x)\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(t) \right\} \psi(x)\, d^3x \quad \|$$

Wichtig, hier muß zwischen Hamiltonfkt und Hamiltonoperator unterschieden werden.

Wir können natürlich das Schrödingerfeld nach EV zu EW E_ν entwickeln:

$$\psi(x) = \sum_\nu a_\nu \varphi_\nu(x) \qquad \text{mit } a_\nu(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_\nu t}$$

$$\psi^\times(x) = \sum_\nu a_\nu^\times \varphi_\nu^\times(x)$$

$a_\nu, a_\nu^\times$ sind Entwicklungskoeffizienten! Also Zahlen!

Wir postulieren jetzt Vertauschungsrelationen:

Bosonen

$$[\Pi(\underline{x}), \psi^+(x')]_- = \frac{\hbar}{i}\delta(x-x') \qquad \text{sowie} \qquad [\psi(x), \psi(x')]_- = 0$$

$$\Downarrow \qquad\qquad\qquad \text{und}$$

$$[\psi(\underline{x}), \psi^+(\underline{x}')]_- = \delta(x-x') \qquad\qquad [\psi^\times(x), \psi^\times(x')]_- = 0$$

$\psi^+(x)$, $\psi(x)$ sind Heisenbergsche Feldoperatoren. Erzeugen ein Teilchen am Ort x.

Wir sehen jetzt welche Vertauschungsrelationen, dann für die Amplituden gilt:

$$\psi(x) = \sum_\nu a_\nu \varphi_\nu(x) \qquad \Big|\, \varphi_{\nu'}^\times(x) \quad \Big| \int d\underline{r}$$

$$\int d^3r\, \varphi_{\nu'}^\times(\underline{x})\,\psi(\underline{x}) = \sum_\nu a_\nu \underbrace{\int d^3r\, \varphi_\nu(\underline{r})\,\varphi_{\nu'}^\times(\underline{r})}_{\delta_{\nu\nu'}} = a_{\nu'}$$

$$\Rightarrow \qquad a_{\nu'} = \int dr^3\, \varphi_{\nu'}^\times(\underline{r})\,\psi(\underline{r})$$

$$\text{analog} \qquad a_{\nu'}^+ = \int dr^3\, \varphi_{\nu'}(\underline{r})\,\psi^+(\underline{r})$$

Damit können wir die Kommutatoren bestimmen:

$$[a_\nu, a_{\nu'}^+]_- = \int d^3r \int d^3r'\, \varphi_{\nu'}(\underline{r})\,\varphi_\nu^\times(\underline{r}')\, \underbrace{[\psi(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_-}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}')}$$

$$= \int d^3r\, \varphi_\nu(\underline{r})\,\varphi_{\nu'}^\times(\underline{r}) = \delta_{\nu\nu'}$$

Analog $[a_\mu, a_{\mu'}]_- = [a^+_{\mu'}, a^+_\mu]_- = 0$

Grund: Im Prinzip $\psi(\underline{r}), \psi^+(\underline{r})$ sind Erzeuger und Vernichter der Ortsbasis und a_μ, a^+_μ zu Energieeigenvektoren

$\Rightarrow$ Basiswechsel (unitäre Transformation)

Das sind Bosonische Vertauschungsrel. $\Rightarrow$ gleiche Eigenschaften wie harmonischer Oszillator.

Problem bei Fermionen insbes. Elektronen!

$a^+_\mu a^+_\mu |\phi_0\rangle \neq 0$ man kann beliebig viele Teilchen in gleichen Zustand erzeugen.

Elektronen sind Fermionen, hier gilt das Pauli-Prinzip, man darf nur ein Elektron pro Quantenzustand besetzen, also

$a^+_\mu a^+_\mu |\phi_0\rangle = 0$, eigentlich für jeden Zustand muss

$$a^+_\mu a^+_\mu |\phi\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad a^+_\mu a^+_\mu = 0 \qquad (*)$$

Bei Fermionen muß dann gelten: $[a_\mu, a^+_{\mu'}]_+ = \delta_{\mu\mu'}$

$([A,B]_+ = AB + BA)$

$[a_\mu, a_{\mu'}]_+ = [a^+_\mu, a^+_{\mu'}]_+ = 0$ (enthält $*$ als Spezialfall)

Also bei Fermionen gelten + Kommutatoren!

Wegen der unitären Transformation gilt dann auch: (für Fermionen)

$$\boxed{\begin{aligned}[][\psi(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_+ &= \delta(\underline{r}-\underline{r}') \\ [\psi(\underline{r}), \psi(\underline{r}')]_+ = [\psi^+(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_+ &= 0\end{aligned}}$$

Umformulierung des Hamiltonoperators:

$$H = \int \psi^+(\underline{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})\right) \underbrace{\psi(\underline{r})}_{\substack{\shortparallel \\ \sum_\nu \varphi_\nu(\underline{r}) a_\nu}} d^3\underline{r}$$

$$= \sum_{\nu\nu'} a^+_\nu a_{\nu'} \int dr^3 \, \varphi^*_\nu(\underline{r}) \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})\right)\varphi_{\nu'}(\underline{r})}_{E_{\nu'} \varphi_{\nu'}(\underline{r})}$$

$$H = \sum_\nu E_\nu \, a^+_\nu a_\nu$$

Postulat Existenz des Grundzustands

$$a_\nu |\phi_0\rangle = 0 \quad \text{für alle } \nu$$

<u>Fock Zustände:</u>

$$|\{n\}\rangle = \prod_\nu \frac{1}{\sqrt{n_\nu!}} (a^+_\nu)^{n_\nu} |\phi_0\rangle \quad \text{(Bosonen)}$$

Mit $n_\nu = 0, 1, 2, \ldots \infty$

$$|\{n\}\rangle = \prod_\nu (a^+_\nu)^{n_\nu} |\phi_0\rangle \quad \text{(Fermionen)}$$

Hier mit $n_\nu = 0, 1$

Wichtig bei Fermionen:

?

$$a_j |n_1, \ldots, n_{max}\rangle = \sqrt{n_j} \, (-1)^{n_1 + \ldots + n_{j-1}} |n_1, \ldots, n_j - 1, \ldots, n_{max}\rangle$$