Feldoperatoren

Amplitude Basis

1. Quantisierung: $\psi(r)$ „klassisches" Wellenfeld
Zerlegung in Basisfunktionen $\psi(r) = \sum_\mu a_\mu \varphi_\mu(x)$

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

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

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.

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

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

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

- Bsp.: 4-er Produkt

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

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

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

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

$(-1)^P$

(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

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

$q = n$
$p = m$

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

$\overset{i=j}{=} n_i$

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

- 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.:

$\hat{=} {}^-\langle \psi | a_{\mu}^+ a_{\mu} | \psi \rangle^-$

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

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

<u>Ansatz</u>. 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.

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

• bekannt seien Eigenfunktionen von $\hat{h}|\xi_a\rangle = \varepsilon_a|\xi_a\rangle$ (neue Erzeuger (mit WW))

$\Rightarrow |\phi_\lambda\rangle$ kann nach $|\xi_a\rangle$ entwickelt werden (ohne WW) alte Erzeuger

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

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

<u>Variation des Erwartungswertes</u> (um bestmögliche Wellenfunktion $\langle\phi|$ zu finden)

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

alle besetzten Zustände

Vertauschung 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:

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

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

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

$$= \sum_{l}\sum_{m} x_{\lambda l}^{*} x_{\lambda m}\, \underbrace{a_m^{+} a_l}_{\delta_{ml}}$$

$\Rightarrow$

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

Lagrange Parameter

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

$$0 = \sum_{j}^{\infty}\langle\xi_p|h|\xi_j\rangle\, x_{kj} + \frac{1}{2}\sum_{\mu=1}^{Z}\sum_{jlm}^{\infty}\langle\xi_p\xi_l|V|\xi_j\xi_m\rangle_{-}\, x_{\mu l}^{*}\, x_{kj}\, x_{\mu m}$$

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

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

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

Bestimmungsgleichung für x_{kp}

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

$\sum_p a_p^+$

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

Basiswechsel

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

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

$\sum_p a_p^+$

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

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

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

garantiert das nur besetzten Zustände gezählt werden

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

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

Korrektur (renormierte Energie) berücksichtigt WW mit möglichst geringem Fehler