

# Kapitel 3

## Vielteilchentheorie in zweiter Quantisierung

### 3.1 Identische Teilchen und Symmetrisierungspostulat

Zwei Teilchen heißen **identisch**, wenn sie grundsätzlich **ununterscheidbar** sind. Soll heißen, dass jedes der beiden Teilchen in jedem gegebenen Präparations-Mess Aufbau zu den jeweils gleichen statistischen Verteilungen Anlass gibt wie das andere Teilchen. Für das aus  $N$  Teilchen zusammengesetzte System erfordert die Quantenmechanik, daran sei erinnert, im Falle identische Teilchen ein zusätzliches Postulat – genannt das **Symmetrisierungspostulat** – das der klassischen Mechanik fremd ist. Demnach gibt es zwei Typen identischer Teilchen – **Bosonen** und **Fermionen**. Die Wellenfunktion eines zusammengesetzten Systems identischer Boso-

nen ist vollständig symmetrisch, die Wellenfunktion eines zusammengesetzten Systems identischer Fermionen ist vollständig antisymmetrisch unter Permutation der (willkürlichen vergebenen) Teilchennamen. Ausgedrückt mittels Transposition  $i \leftrightarrow j$

$$\psi_{\eta}(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) = \eta \psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (3.1)$$

wobei  $\eta = +1$  für Bosonen, und  $\eta = -1$  für Fermionen. Das Argument  $\xi$  bezeichnet einen vollständigen Satz von ein-Teilchen Quantenzahlen, beispielsweise  $\xi = (\vec{x}, m_s)$ , wobei  $\vec{x}$  Ortscoordinate und  $m_s$  magnetische Quantenzahl,  $m_s = -s, s + 1, \dots, +s$ . Das Spin-Statistik Theorem besagt, dass die Spinquantenzahl  $s$  – auch genannt “der Spin” – für Fermionen notwendig halbzahlig, für Bosonen hingegen notwendig ganzzahlig.

Vollständig symmetrische bzw. vollständig antisymmetrische Zustände bilden Unterräume die “viel kleiner” sind als der allgemeine  $N$ -Teilchen Hilbertraum. Es ist daher ein Gebot der Ökonomie, die theoretische Beschreibung von Systemen identischer Teilchen so vorzunehmen, dass der Permutationssymmetrie automatisch entsprochen wird. Eine solche Beschreibung fungiert in der Literatur unter dem Begriff **zweite Quantisierung**.

Der Terminus “Zweite Quantisierung” ist allerdings grob irreführend: die Quantenmechanik wird nicht noch einmal quantisiert. Vielmehr handelt es sich bei der zweiten Quantisierung lediglich um eine Art Buchhaltung die sich für die Beschreibung von Systemen identischer Teilchen als besonders nützlich erweist.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Nomologisch geht der Begriff der “zweiten Quantisierung” auf die kanonische Quantisierung einer klassischen Feldtheorie zurück, deren Euler-Lagrangegleichung die Schrödingergleichung der Wellenmechanik ist.

## 3.2 Symmetrische und Antisymmetrische Zustände

Wir betrachten ein System  $N$  gleichartiger (zunächst nicht unbedingt identischer) Teilchen. Gleichartigkeit bedeutet, dass die Hilberträume der einzelnen Teilchen isomorph, der generische Einteilchenhilbertraum hier notiert  $\mathcal{H}^{(1)}$ . Der Hilbertraum eines Systems  $N$  gleichartiger Teilchen ist dann das  $N$ -fache Tensorprodukt

$$\mathcal{H}^{(N)} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}^{(1)}. \quad (3.2)$$

wobei der  $i$ -te Faktor der Einteilchenhilbertraum von Teilchen  $i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ .

Hat man nun einer beliebige Kollektion von Einteilchenzuständen  $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ , nicht notwendig normiert und paarweise orthogonal, dann ist mit

$$|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle := |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle \quad (3.3)$$

ein Vektor im  $N$ -Teilchen Hilbertraum gegeben, zu lesen: Teilchen 1 im Zustand  $\alpha_1$ , Teilchen 2 im Zustand  $\alpha_2$  usw. Achtung: Teilchennummer und Index an  $\alpha$  bitte nicht identifiziere. So lese man beispielsweise den Zustand  $|\alpha_2 \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle$  "Teilchen 1 im Zustand  $\alpha_2 \dots$ ". Kurz: die Teilchennummer ist durch die Position in  $|\dots\rangle$  gegeben; die Indices an  $\alpha$  nummerieren lediglich die Elemente einer Kollektion von  $N$  Einteilchenzuständen. Im übrigen notieren wir hier die Zustände mit runden Klammern – die gewohnten Spitzklammern heben wir uns für später auf.<sup>2</sup>

Eine Permutation – also der "Teilhaustausch" – wird durch ihre Wirkung auf Produktvektoren dargestellt,

$$\hat{P}|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = |\alpha_{P(1)} \alpha_{P(2)} \cdots \alpha_{P(N)}\rangle. \quad (3.4)$$

<sup>2</sup>Die hier verwendete Klammer-Typographie ist entlehnt: Negele, Orland "Quantum Many-Particle Systems", Frontiers in Physics Series, Addison Wesley (1988), [ISBN 0-201-12593-5]

Permutationen bilden eine Gruppe. Jede Permutation  $\hat{P}$  kann durch endliche Anzahl von Transpositionen dargestellt werden. Die Darstellung ist nicht eindeutig, aber die Anzahl der Transpositionen hat wohlbestimmte Parität (ist entweder gerade oder ungerade), im Folgenden bezeichnet  $(-1)^P$ . Für  $\hat{P} = \hat{P}_1 \hat{P}_2$  ist  $(-1)^P = (-1)^{P_1} (-1)^{P_2}$ .

Die beiden Operatoren

$$\hat{S}_\eta := \frac{1}{N!} \sum_P \eta^P \hat{P}, \quad \eta = \pm 1 \quad (3.5)$$

sind jeweils Projektor auf den Unterraum der vollständig symmetrischen Zustände (für  $\eta = 1$ ) bzw. vollständig antisymmetrischen Zustände (für  $\eta = -1$ ).

Nimmt man sich nun irgendeinen Produktvektor des  $\mathcal{H}^{(N)}$ , ist der Vektor

$$|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N \rangle_\eta := \sqrt{N!} \hat{S}_\eta |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N \rangle \quad (3.6)$$

für  $\eta = +1$  vollständig symmetrisch, für  $\eta = -1$  antisymmetrisch. Gemäß Symmetrisierungspostulat ist dann der Hilbertraum  $\mathcal{H}_\eta^{(N)}$  eines Systems  $N$  identischer Teilchen die lineare Hülle aller Geschweiften zu festem  $\eta$ ,

$$\mathcal{H}_\eta^{(N)} = \hat{S}_\eta \mathcal{H}^{(N)}, \quad (3.7)$$

für  $N$  identische Bosonen  $\eta = 1$ , für  $N$  identische Fermionen  $\eta = -1$ .

Wirkt eine Permutation  $\hat{P}$  auf einen geschweiften Vektors, so fängt man sich einen Faktor  $\eta^P$  ein. Für Bosonen, wo  $\eta = 1$ , kommt es also auf die Reihenfolge der Einträge in der geschweiften Klammer nicht an. Für Fermionen, wo  $\eta = -1$ , kommt es zu einem Vorzeichenwechsel falls die Permutation von ungerader Parität, unter der Transposition  $1 \leftrightarrow 2$  etwa  $|\alpha_2 \alpha_1 \cdots \alpha_N \rangle = -|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N \rangle$  (eine Transposition hat ungerade Parität). Dem **Pauliprinzip** ist hier automatisch genüge getan: Sie nämlich beispielsweise  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ , dann ist nach dem gerade Gesagten

$|\alpha\alpha\alpha\cdots\alpha_N\rangle = -|\alpha\alpha\alpha\cdots\alpha_N\rangle$  und also  $|\alpha\alpha\alpha\cdots\alpha_N\rangle = 0$  (mit  $o$  der Nullvektor im Hilbertraum). Kurz: zwei identische Fermionen können unmöglich ein- und denselben Zustand einnehmen.

Das Skalarprodukt geschweiften Vektoren ist schnell bestimmt

$$\begin{aligned} \eta\{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N|\beta_1\beta_2\cdots\beta_N\}_\eta &= N!(\alpha_1\cdots\alpha_N|\underbrace{\hat{S}_\eta^\dagger\hat{S}_\eta}_{=\hat{S}_\eta^2=\hat{1}_\eta}|\beta_1\cdots\beta_N) \\ &= \sum_P \eta^P (\alpha_1|\beta_{P(1)})(\alpha_2|\beta_{P(2)})\cdots(\alpha_N|\beta_{P(N)}) \\ &:= \begin{vmatrix} (\alpha_1|\beta_1) & \cdots & (\alpha_1|\beta_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\alpha_N|\beta_1) & \cdots & (\alpha_N|\beta_N) \end{vmatrix}_\eta \end{aligned} \quad (3.8)$$

wobei letztere Gleichung für Fermionen ( $\eta = -1$ ) die sog. **Slaterdeterminante**, und für Bosonen ( $\eta = +1$ ) die sog. **Permanente**. Die Permanente erhält man aus der Determinante, indem man aller negativen Vorzeichen in der Determinantenformel durch “+” ersetzt.

### 3.3 Leiteroperatoren

Sei nun  $|\beta\rangle$  irgendein Einteilchen-Zustand. Dann sind **Erzeugungsgeneratoren** erklärt

$$\hat{a}_\beta^\dagger|\beta_1\cdots\beta_N\rangle_\eta := |\beta\beta_1\cdots\beta_N\rangle_\eta \quad (3.9)$$

Der Erzeuger  $\hat{a}_\beta^\dagger$  fügt dem  $N$ -Teilchensystem ein weiteres Teilchen im Zustand  $\beta$  hinzu. Offensichtlich verknüpft er Hilberträume zu verschiedener Teilchenzahl. Seine Bühne ist der **Fockraum**, d.i. die direkte Summe entsprechend symmetrisierter

## Vielteilchenhilberträumen

$$\mathcal{F}_\eta := \mathcal{H}_\eta^{(0)} \oplus \mathcal{H}_\eta^{(1)} \oplus \mathcal{H}_\eta^{(2)} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_\eta^{(N)} \oplus \mathcal{H}_\eta^{(N+1)} \oplus \dots \quad (3.10)$$

Neu ist hier der “0-Teilchen Hilbertraum  $\mathcal{H}_\eta^{(0)}$ ”. Er ist eindimensional, der eine Basisvektor notiert  $|0\rangle$ , genannt der **Vakuumzustand**. Ein Erzeuger  $\hat{a}_\beta^\dagger$ , wirkend auf das Vakuum, erzeugt den Einzelchenzustand  $|\beta\rangle = \hat{a}_\beta^\dagger|0\rangle$ .

Der dem Einzelchenzustand  $|\beta\rangle$  zugeordnete **Vernichtungsoperator** ist durch Adjunktion erklärt,  $\hat{a}_\beta = (\hat{a}_\beta^\dagger)^\dagger$ , ergänzt um die Feststellung  $\hat{a}_\beta|0\rangle = 0$  wo  $0$  der Nullvektor im Fockraum (nicht zu verwechseln mit dem Vakuum!). Mit ein wenig Fummelerei findet man die Wirkung eines Vernichters auf einen Geschweiften

$$\hat{a}_\beta|\beta_1 \cdots \beta_N\rangle_\eta = \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta|\beta_i)|\beta_1 \cdots \beta_{i-1} \mathbb{X}_i \beta_{i+1} \cdots \beta_N\rangle_\eta \quad (3.11)$$

wobei  $\mathbb{X}_i$  zu lesen ist “ $\beta_i$  weglassen”. Zum Beweis von (3.11) rufe man sich in Erinnerung, dass ein Operator über alle seine Matrixelemente vollständig charakterisiert

werden kann. Entsprechend

$$\begin{aligned}
\{\alpha_1 \cdots \alpha_{N-1} | \hat{a}_\beta | \beta_1 \cdots \beta_N\} &= \{\beta_1 \cdots \beta_n | \hat{a}_\beta^\dagger | \alpha_1 \cdots \alpha_{N-1}\}^* \\
&= \{\beta_1 \cdots \beta_n | \beta \alpha_1 \cdots \alpha_{N-1}\}^* \\
&= \begin{vmatrix} (\beta_1 | \beta) & (\beta_1 | \alpha_1) & \cdots & (\beta_1 | \alpha_{N-1}) \\ (\beta_2 | \beta) & (\beta_2 | \alpha_1) & \cdots & (\beta_2 | \alpha_{N-1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\beta_N | \beta) & (\beta_N | \alpha_1) & \cdots & (\beta_N | \alpha_{N-1}) \end{vmatrix}_\eta^* \\
&= \left\{ \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta_i | \beta) \{\beta_1 \cdots \cancel{\beta}_i \cdots \beta_N | \alpha_1 \cdots \alpha_n\} \right\}^* \\
&= \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta | \beta_i) \{\alpha_1 \cdots \alpha_{N-1} | \beta_1 \cdots \cancel{\beta}_i \cdots \beta_N\} \quad (3.12)
\end{aligned}$$

und da hier die geschweiften  $\alpha$ -Kets ganz beliebig, folgt die Behauptung (3.11).

Die Algebra der Leiteroperatoren ist nun schnell bestimmt,

$$\hat{a}_{\beta_1}^\dagger \hat{a}_{\beta_2}^\dagger - \eta \hat{a}_{\beta_2}^\dagger \hat{a}_{\beta_1}^\dagger = 0, \quad (3.13)$$

$$\hat{a}_{\beta_1} \hat{a}_{\beta_2} - \eta \hat{a}_{\beta_2} \hat{a}_{\beta_1} = 0, \quad (3.14)$$

$$\hat{a}_{\beta_1} \hat{a}_{\beta_2}^\dagger - \eta \hat{a}_{\beta_2}^\dagger \hat{a}_{\beta_1} = (\beta_1 | \beta_2). \quad (3.15)$$

Relation (3.13) resultiert aus der Symmetrie der Geschweiften unter Transposition, Relation (3.14) ist die adjungierte Version von (3.13), und zum Beweis von (3.15) betrachte man zunächst

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\beta_1} \hat{a}_{\beta_2}^\dagger | \alpha_1 \cdots \alpha_N \rangle_\eta &= \hat{a}_{\beta_1} | \beta_2 \alpha_1 \cdots \alpha_N \rangle_\eta \\
&= (\beta_1 | \beta_2) + \sum_{i=1}^N \eta^i (\beta_1 | \alpha_i) | \beta_2 \alpha_1 \cdots \cancel{\alpha}_i \cdots \alpha_N \rangle_\eta, \quad (3.16)
\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\beta_2}^\dagger \hat{a}_{\beta_1} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle_\eta &= \hat{a}_{\beta_2}^\dagger \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta_1 | \alpha_i) |\alpha_1 \cdots \mathbb{X}_i \cdots \alpha_N\rangle_\eta \\ &= \sum_{i=1}^N \eta^{i-1} (\beta_1 | \alpha_i) |\beta_2 \alpha_1 \cdots \mathbb{X}_i \cdots \alpha_N\rangle_\eta, \end{aligned} \quad (3.17)$$

multipliziere dies mit  $\eta$ , bilde die Differenz zu (3.16), und bestätige abschließend Relation (3.15).

Im Einteilchenhilbertraum  $\mathcal{H}^{(1)}$  wählen wir nun eine Orthonormalbasis  $\varphi_\nu$ ,

$$\sum_{\nu \in \mathbb{I}} |\varphi_\nu\rangle \langle \varphi_\nu| = \hat{1}^{(1)}, \quad \langle \varphi_{\nu'} | \varphi_\nu \rangle = \delta_{\nu\nu'}. \quad (3.18)$$

wobei  $\nu$  für einen vollständigen Satz von Quantenzahlen steht. Im Falle von Wasserstoffeigenfunktionen beispielsweise  $\mathbb{I} = \{n\ell m\sigma \mid n = 1, 2, \dots; \ell = 0, 1, \dots, n-1; m = -\ell, \ell+1, \dots, \ell; \sigma = \pm 1\}$ ,<sup>3</sup>

Orthonormalität der Einteilchenzustände bedeutet, dass Faktoren vom Typ  $(\nu_i | \nu_j)$  entweder gleich eins (nämlich genau dann, wenn  $\nu_i = \nu_j$ ), oder gleich Null (in allen anderen Fällen). In Konsequenz

- nimmt die Algebra der Leiteroperatoren, Gl. (3.13)–(3.15), die Form an

$$\begin{aligned} [\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}^\dagger] &= \delta_{\nu\nu'}, & [\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}] &= [\hat{a}_\nu^\dagger, \hat{a}_{\nu'}^\dagger] = 0 & \text{BOSONEN} & (3.19) \\ \{\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}^\dagger\} &= \delta_{\nu\nu'}, & \{\hat{a}_\nu, \hat{a}_{\nu'}\} &= \{\hat{a}_\nu^\dagger, \hat{a}_{\nu'}^\dagger\} = 0 & \text{FERMIONEN} & (3.20) \end{aligned}$$

wobei wir hier auch die in der Literatur zuweilen verwendeten Notation für den Fermionischen **Antikommutator** eingeführt haben,  $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ ,

<sup>3</sup>In der ‘‘Ortsdarstellung’’  $|\vec{x}\sigma\rangle$  ist  $\mathbb{I}$  überabzählbar; Vollständigkeit und Orthogonalität wird notiert  $\sum_\sigma \int d^3x |\vec{x}\sigma\rangle \langle \vec{x}\sigma| = \hat{1}^{(1)}$ ,  $\langle \vec{x}'\sigma' | \vec{x}\sigma \rangle = \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \delta_{\sigma'\sigma}$ .



- und das in (3.8) berechnete Skalarprodukt geschweifter ist genau dann verschieden von Null, wenn es eine Permutation  $\hat{P}$  gibt, die die Bra-Liste  $\nu'_1 \cdots \nu'_N$ , wo  $\nu'_i \in \mathbb{I}$ , auf die Ket-Liste  $\nu_1 \cdots \nu_N$  abbildet. In diesem Falle

$$\eta \{ \nu'_1 \nu'_2 \cdots \nu'_N | \nu_1 \nu_2 \cdots \nu_N \}_\eta = \eta^P \prod_\nu n_\nu! \quad (3.21)$$

mit Konvention  $0! = 1$ , wobei  $n_\nu = 0, 1, \dots$  angibt, wie oft der Index  $\nu$  in der Liste  $\nu_1 \cdots \nu_N$  erscheint, bzw. wie häufig der Einteilchenzustand  $\varphi_\nu$  im geschweiften Zustand  $|\nu_1 \cdots \nu_N\rangle$  besetzt ist.

Da nach (3.21) ein Geschweifter vollständig durch Besetzungszahlen  $n_\nu$  parametrisierbar ist, verwendet man gerne die sog. **Besetzungszahldarstellung** um Basiszustände im Fockraum zu beschreiben. Dazu gibt man sich eine willkürliche Ordnung der Indexmenge  $\mathbb{I}$  vor, meist diktiert von der Vorschrift wachsender Einteilchenenergien, nummeriert die Einteilchenzustände entsprechend durch, und notiert Basiszustände dann in der Form  $|n_1 n_2 \cdots n_\nu \cdots\rangle$ , wobei  $n_i$  die Zahl der Teilchen im Einteilchenzustand  $\varphi_i$ ,  $n_2$  die Zahl der Teilchen im Einteilchenzustand  $\varphi_2$  usw. In dieser Darstellung ist die Wirkung der Leiteroperatoren besonders transparent,

$$\hat{a}_\nu |n_1 n_2 \cdots n_\nu \cdots\rangle = \sqrt{n_\nu} |n_1 n_2 \cdots n_\nu - 1 \cdots\rangle, \quad (3.22)$$

$$\hat{a}_\nu^\dagger |n_1 n_2 \cdots n_\nu \cdots\rangle = \sqrt{n_\nu + 1} |n_1 n_2 \cdots n_\nu + 1 \cdots\rangle. \quad (3.23)$$

Als Korollar erhalten wir hier

$$\hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu |n_1 n_2 \cdots n_\nu \cdots\rangle = n_\nu |n_1 n_2 \cdots n_\nu \cdots\rangle. \quad (3.24)$$

und taufen

$$\hat{n}_\nu := \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu \quad (3.25)$$

den **Besetzungszahloperator**. Diese Notation ist insbesondere in der Quantenoptik gebräuchlich, wo Moden des Strahlungsfeldes die Rolle der Einteilchenzustände übernehmen, und  $n_\nu$  also die Zahl der Photonen in der Mode  $\varphi_\nu$ . Moden sind übrigens (normierte) Lösungen der Helmholtzgleichung – aber das haben Sie ja schon der Elektrodynamik-Vorlesung gelernt . . . .

### 3.4 Feldoperatoren

Ein Wechsel der Einteilchenbasis  $\varphi_\nu \rightarrow \chi_\mu$  wird beschrieben

$$|\chi_\mu\rangle = \sum_\nu u_{\mu\nu}^* |\varphi_\nu\rangle \quad (3.26)$$

worin  $u_{\mu\nu} = (\chi_\mu | \varphi_\nu)$  bzgl. der Indizes eine unitäre  $\dim \mathcal{H}^{(1)} \times \dim \mathcal{H}^{(1)}$  Matrix. Unter dem Basiswechsel transformieren Leiteroperatoren gemäß

$$\hat{\Psi}_\mu^\dagger = \sum_\nu u_{\mu\nu}^* \hat{a}_\nu^\dagger, \quad \hat{\Psi}_\mu = \sum_\nu u_{\mu\nu} \hat{a}_\nu, \quad (3.27)$$

wobei zur besseren Kenntlichmachung die Leiteroperatoren der  $\chi$ -Basis mit dem Buchstaben  $\hat{\Psi}$  benannt werden. Vergleich von (3.26) und (3.27) fördert zu Tage, dass Erzeuger wie Basiskets transformieren, Verrichter wie Basisbras.

Ein wichtiger Spezialfall ist die Transformation auf die “Ortsbasis”,  $|x\rangle = \sum_\nu |\varphi_\nu\rangle (\varphi_\nu | x)$ . In Erinnerung an  $(x | \varphi_\nu) = \varphi_\nu(x)$  (der Einteilchenzustand  $\varphi_\nu$  in der Ortsdarstellung), und unter expliziter Berücksichtigung der Spinfreiheitsgrade (für Fermionen bezeichnet man die magnetische Quantenzahl gerne  $\sigma = -2s, -2s+, \dots, 2s -$  also  $\sigma = \pm 1$  für Elektronen – um Bruchzahlen zu vermeiden),

$$\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x) = \sum_\nu \varphi_{\nu\sigma}^*(x) \hat{a}_{\nu\sigma}^\dagger, \quad \hat{\Psi}_\sigma(x) = \sum_\nu \varphi_{\nu\sigma}(x) \hat{a}_{\nu\sigma} \quad (3.28)$$

Die hier eingeführten **Feldoperatoren** genügen den Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}_\sigma(x), \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(x')] &= \sum_\nu \sum_{\nu'} \varphi_{\nu\sigma}(x) \varphi_{\nu'\sigma'}(x')^* \underbrace{[\hat{a}_{\nu\sigma}, \hat{a}_{\nu'\sigma'}^\dagger]}_{\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\nu\nu'}} \Big|_\eta \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$= \delta_{\sigma\sigma'} \sum_\nu \varphi_{\nu\sigma}(x) \varphi_{\nu\sigma}(x') = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(x-x'), \quad (3.30)$$

alle anderen Kommutatoren bzw Antikommutatoren gleich Null.

Die Feldoperatoren spielen in der Festkörperphysik und der Elementarteilchenphysik eine wichtige Rolle. Ihre physikalische Bedeutung erschließt sich aus der Wirkung auf das Vakuum,

$$\langle 0 | \hat{\Psi}_\sigma(x') \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x) | 0 \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(x-x') \quad (3.31)$$

gelesen “der Operator  $\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x)$  erzeugt eine Teilchen mit Spinpolarisation  $\sigma$  am Ort  $x$ ”, kryptisch notiert  $\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x)|0\rangle = |1_{\sigma\sigma}\{0\}\rangle$ , wobei  $\{0\}$  die Bedeutung “alle Einteilchenzustände außer dem (oder den) Genannten unbesetzt”.

### 3.5 Observable in Fockdarstellung

Observable eines Systems identischer Teilchen sind notwendig invariant unter Permutationen – schließlich ist in einem solchen System kein Teilchen vor den anderen ausgezeichnet. Ein gutes Beispiel ist der Hamiltonoperator eines  $N$ -Teilchensystems. In der Notation der QM-I

$$\hat{H}^{(N)} = \underbrace{\sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m}}_{:=\hat{H}_0^{(N)}} + \sum_{i=1}^N V(\hat{q}_i) + \underbrace{\sum_{\langle i,j \rangle} V(\hat{q}_i, \hat{q}_j)}_{:=\hat{V}^{(N)}} \quad (3.32)$$

wobei  $\hat{q}_i$ ,  $\hat{p}_i$  Orts- und Impulsoperatoren von Teilchen  $i$ , und die Summe  $\sum_{(i,j)}$  eine Summe über alle Paare. Permutationsinvarianz von  $\hat{H}^{(N)}$  bedeutet, dass jedes Teilchen – wäre es isoliert – der gleich Dynamik unterliegt wie jedes andere Teilchen, und jedes Paar genauso wechselwirkt wie jedes andere Paar.

Der Operator  $\hat{H}_0^{(N)}$  ist vom Typ **single-body**, soll heißen er ist eine Summe von Operatoren die jeweils nur in dem Hilbertraum eines Teilchen wirken. Der Operator  $\hat{V}^{(N)}$  ist vom Typ **two-body** – jeder Summand in der Paarsumme wirkt nur im Produktraum zweier Teilchen.

Um einen gegebenen single-body  $\hat{O}^{(N)} = \sum_{i=1}^N \hat{O}^{(1)}(i)$  im Fockraum darzustellen wählen wir als Einteilchenbasis  $\varphi_\nu$  die Eigenvektoren von  $\hat{O}^{(1)}$ ,

$$\hat{O}^{(1)}|\varphi_\nu\rangle = \lambda_\nu|\varphi_\nu\rangle. \quad (3.33)$$

Dann sind alle Produktvektoren  $|\nu_1 \dots \nu_N\rangle$  Eigenvektoren von  $\hat{O}^{(N)}$ ,

$$\hat{O}^{(N)}|\nu_1 \dots \nu_N\rangle = \left( \sum_\nu n_\nu \lambda_\nu \right) |\nu_1 \dots \nu_N\rangle \quad (3.34)$$

wo  $n_\nu$  die Zahl der Vorkommisse von  $\varphi_\nu$  in  $|\nu_1 \dots \nu_N\rangle$ . Da  $\hat{O}^{(N)}$  mit  $\hat{S}_\eta$  kommutiert lässt sich aus () die Wirkung von  $\hat{O}^{(N)}$  auf die Basiszustände  $|n_1 \dots n_\nu \dots\rangle$  im Fockraum ablesen,  $\hat{O}^{(N)}|n_1 \dots n_\nu \dots\rangle = (\sum_\nu n_\nu \lambda_\nu) |n_1 \dots n_\nu \dots\rangle$ , und da ein Operator vollständig durch seine Wirkung auf eine Basis charakterisiert ist, lautet die Darstellung von  $\hat{O}^{(N)}$  im Fockraum  $\hat{O} = \sum_\nu \lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu$ . Um uns hier von der speziellen

Wahl der Eigenbasis zu befreien, vollziehen wir einen Basiswechsel  $\varphi_\nu \rightarrow \chi_\mu$ ,

$$\hat{O} = \sum_\nu \lambda_\nu \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu \quad (3.35)$$

$$= \sum_{\nu'\nu} (\varphi_{\nu'} | \hat{O}^{(1)} | \varphi_\nu) \hat{a}_{\nu'}^\dagger \hat{a}_\nu \quad (3.36)$$

$$= \sum_{\mu'\mu} \sum_{\nu'\nu} (\varphi_{\nu'} | \chi_{\mu'})(\chi_\mu | \hat{O}^{(1)} | \chi_\mu)(\chi_{\mu'} | \varphi_{\nu'}) \hat{a}_{\mu'}^\dagger \hat{a}_\nu \quad (3.37)$$

$$= \sum_{\mu'\mu} (\chi_{\mu'} | \hat{O}^{(1)} | \chi_\mu) \hat{\Psi}_{\mu'}^\dagger \hat{\Psi}_\mu \quad (3.38)$$

Die **Teilchendichte**, beispielsweise, ist single-body. In der Notation der QM-I  $\hat{\rho}^{(N)}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{x} - \hat{q}_i)$ ; dargestellt mittels Feldoperatoren (man wähle für  $\chi$  die Ortsbasis – vgl. (3.28)),

$$\hat{\rho}(\vec{x}) = \sum_\sigma \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}). \quad (3.39)$$

Mittels Teilchendichte bestimmt sich die Zahl der Teilchen im Raumgebiet  $G$  gemäß  $\hat{N}_G = \int_G \hat{\rho}(\vec{x}) d^3x$ . Im Gegensatz zum Feldoperator  $\hat{\Psi}$  ist  $\hat{N}_G$  eine Messgröße. Insbesondere ist die **Gesamtteilchenzahl**

$$\hat{N} = \int \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}) d^3x \quad (3.40)$$

nun eine Observable, und nicht länger – wie noch in (3.32) – ein Parameter.

Auch ein wichtiger single-body ist der **Gesamtimpuls**, in Ortsdarstellung der QM-I  $\hat{P}^{(N)} = \frac{\hbar}{i} \sum_{i=1}^N \vec{\nabla}_i$ . Dargestellt mittels Feldoperatoren

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \sum_\sigma \int \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}) \vec{\nabla}_x \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}) d^3x. \quad (3.41)$$

Analog konstruiert man die Darstellung eines two-body  $\hat{O}^{(N)} = \sum_{(i,j)} \hat{O}^{(2)}(i, j)$  im Fockraum

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mu\mu'} \hat{\Psi}_{\lambda'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mu'}^{\dagger} (\chi_{\lambda'} \chi_{\mu'}) |\hat{O}^{(2)}| \chi_{\lambda} \chi_{\mu} \hat{\Psi}_{\mu} \hat{\Psi}_{\lambda} \quad (3.42)$$

wobei hier die Reihenfolge der Operatoren zu beachten ist. Der Beweis ist ist etwas fummelig. Motiviert wird (3.42) durch die Feststellung, dass  $\sum_{(i,j)} \hat{O}^{(2)}(i, j) = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \hat{O}^{(2)}(i, j)$ , und  $\sum_{j \neq i} \hat{O}^{(2)}(i, j)$  für festes  $i$  single body, also wie in (3.38) darzustellen. Das Zwischenergebn ist dann wiederum single-body, erneut wie in (3.38) darzustellen. Fertig ist die Laube (und insbesondere auch die 'Merkregel' für die Reihenfolge der Indices in (3.42).

Für den Hamilton (3.32) ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\sigma} \int \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{x}) d^3x \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \iint \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{x}') V(\vec{x}, \vec{x}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{x}') \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{x}) d^3x' d^3x \end{aligned} \quad (3.43)$$

wobei hier eine spin-unabhängige Wechselwirkung vorausgesetzt wurde.

### 3.6 Dynamik

Dynamik in Systemen identischer Teilchen beschreibt man zweckmäßigerweise im Heisenbergbild. Da letztlich alle Observable lediglich gewisse Funktionale des Feldoperators  $\hat{\Psi}$  und seines Adjungierten, lautet das grundlegende dynamische Gesetz

$$\dot{\hat{\Psi}}_{\sigma}(\vec{x}, t) = \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}, \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{x}, t) \right], \quad (3.44)$$

worin  $\hat{H}$  der Hamiltonoperator des Systems.

Für ein System ohne Paarwechselwirkung, beschrieben durch den Hamiltonoperator  $\hat{H}_0$  (die erste Zeile in Gl. (3.43)) ergibt sich hier,

$$i\hbar\dot{\Psi}_\sigma(\vec{x}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}, t) \right) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}, t) \quad (3.45)$$

Kurz: die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion der “Ein-Teilchen Quantenmechanik” ist die Heisenberggleichung für den Feldoperator einer Quantenfeldtheorie  $N$  nicht wechselwirkender identischer Teilchen!

Für das System mit Paarwechselwirkung, also Hamilton wie in (3.43) ergibt sich

$$i\hbar\dot{\Psi}_\sigma(\vec{x}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}, t) \right) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}, t) + \left( \sum_{\sigma'} \int V(\vec{x}, \vec{x}') \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{x}') d^3x' \right) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{x}). \quad (3.46)$$

Der hier gegenüber (3.45) neu hinzugekommene Term beschreibt die am Ort wirkende potentieller Energie der Paarwechselwirkung: die “woanders” (am Ort  $\vec{x}'$ ) vorliegende Teilchendichte  $\hat{\rho}(\vec{x}')$  wichtet die WW-Energie zwischen hier ( $= \vec{x}$ ) und woanders ( $= \vec{x}'$ ), die gesamte potentielle Energie der Wechselwirkung dann gegeben durch die Summe ( $= \int d^3x$ ) über alle “woanders”.

Gl. (3.46) ist eine nichtlineare Integro-Differentialgleichung. Schon der Typ verrät, dass sie i.A. nicht exakt lösbar ist. Man ist – wie so häufig – auf Näherungsverfahren angewiesen. Die Entwicklung solcher Verfahren, insbesondere ihre Anwendungen müssen wir den Spezialvorlesungen überlassen. Hier ist keine Zeit dafür. Tempus fugit ...

