3. Systeme identischer Teilchen und zweite Quantisierung

3.1 Konstruktion eines Vielteilchen-Hilbertraums identischer Teilchen

Im letzten Kapitel sind wir von einer Feldtheorie (der Maxwellschen Theorie des elektromagnetischen Feldes) ausgegangen. Wir haben gesehen, dass sich das freie elektromagnetische Feld als System unendlich vieler ungekoppelter Oszillatoren (entsprechend den möglichen Schwingungsmoden des elm. Feldes) interpretieren ließ. Die Quantisierung dieses Systems führte dann zu Zuständen, die einem oder mehreren Teilchen (den Photonen) entsprachen. Der sich ergebende Zustandsraum war also ein Vielteilchen-Hilbertraum (Fockraum) aufgebaut aus Zuständen mit beliebiger Teilchenzahl. Ein allgemeiner (reiner) Zustand war dann eine Superposition von Zustandsvektoren mit i.a. verschiedener Teilchenzahl (z.B. kohärenter Zustand).

In diesem Kapitel will ich einen ganz anderen Zugang wählen. Ausgangspunkt ist diesmal ein Einteilchen-Hilbertraum $\mathcal{H}^{(1)}$ von Bosonen oder Fermionen. Nach dem Spin-Statistik-Theorem (Wolfgang Pauli, 1940), das aus der relativistischen Quantenfeldtheorie folgt, sind Teilchen mit ganzzahligem Spin Bosonen, Teilchen mit halbzahligem Spin dagegen Fermionen.

Für den Fall der Bosonen werden wir sehen, dass sich Zustände ergeben, die genau denjenigen eines Systems harmonischer Oszillatoren entsprechen. In einem Aufwaschen werden wir auch einen Formalismus für die Behandlung fermionischer Systeme entwickeln.

Bose- und Fermisysteme werden gleichzeitig behandelt, unterschieden durch Parameter ε:

$$\varepsilon = \begin{cases} +1 & \text{Bosonen} \\ -1 & \text{Fermionen} \end{cases}$$

$$\sigma \in \mathcal{S}_n : \qquad \varepsilon^\sigma := \begin{cases} 1 & \text{Bose} \\ \operatorname{sgn}\sigma & \text{Fermi} \end{cases}$$

$$\operatorname{sgn}\sigma = \begin{cases} +1, & \text{falls } \sigma \text{ gerade Perm. von } 1,\dots,n \\ -1, & \text{falls } \sigma \text{ ungerade Perm.} \end{cases}$$

<u>unterscheidbare</u> Teilchen:

Einteilchenzustände $\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Teilchen } 1,\dots}}{\psi_1}, \dots, \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Teilchen } n}}{\psi_n}$

$$\psi = \psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \dots \otimes \psi_n \qquad (\text{Tensor, Rang } n)$$

verwende im folgenden Diracschreibweise:

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle\,|\psi_2\rangle \dots |\psi_n\rangle$$

n-Teilchen-Hilbertraum aufgespannt durch Linearkomb. solcher Vektoren

Skalarprodukt des Vektors $|\psi\rangle$ mit einem zweiten Vektor $|\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle\,|\varphi_2\rangle \dots |\varphi_n\rangle$:

$$\langle \varphi | \psi \rangle := \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle \langle \varphi_2 | \psi_2 \rangle \dots \langle \varphi_n | \psi_n \rangle$$

<u>identische Teilchen:</u>

Bose - Statistik $\longrightarrow$ symmetrisieren
Fermi - —"— $\longrightarrow$ anti —"—

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle := \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_n} \varepsilon^{\sigma}\, |\psi_{\sigma(1)}\rangle \dots |\psi_{\sigma(n)}\rangle$$

Bose: total symmetrisch

Fermi: total antisymmetrisch

n - Teilchen - Hilbertraum $\mathcal{H}^{(n)}$ aufgespannt durch Linearkombinationen aller Vektoren obiger Form:

$$\mathcal{H}^{(n)} = \mathcal{H}^{(1)} \underset{\varepsilon}{\otimes} \mathcal{H}^{(1)} \underset{\varepsilon}{\otimes} \dots \otimes \mathcal{H}^{(1)}$$

Bose: total <u>symmetrisches</u> n-faches Tensorprodukt von $\mathcal{H}^{(1)}$

Fermi: —"— <u>anti</u> —"— —"— —"— —"— —"—

<u>Beispiele:</u> $|\alpha\rangle, \ |\beta\rangle \in \mathcal{H}^{(1)}$

1) $\varepsilon = +1$: $\quad |\alpha, \beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle \right)$

$$|\alpha, \alpha\rangle = \sqrt{2}\, |\alpha\rangle |\alpha\rangle$$

2) $\varepsilon = -1$: $\quad |\alpha, \beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\alpha\rangle |\beta\rangle - |\beta\rangle |\alpha\rangle \right)$

$$|\alpha, \alpha\rangle = 0$$

wie erwartet: zwei Fermionen können nicht im gleichen Einteilchenzustand sitzen

<u>Skalarprodukt</u>:

Beh.:

$$\langle \varphi_1, \dots, \varphi_n | \psi_1, \dots, \psi_n \rangle = \begin{vmatrix} \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \psi_n \rangle \\ & & \\ \langle \varphi_n | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_n | \psi_n \rangle \end{vmatrix}_\varepsilon$$

$n \times n$ - Matrix $A = (A_{ij})$

$$|A|_\varepsilon := \sum_{\sigma \in S_n} \varepsilon^\sigma A_{1\sigma(1)} \dots A_{n\sigma(n)}$$

$$|A|_- = \det A \quad , \quad |A|_+ = \underbrace{\operatorname{perm} A}_{\text{Permanente von } A}$$

Bew.: $\rightarrow$ UE

$\{ |\alpha\rangle \}_{\alpha = 1,2,\dots}$ sei ein <u>vollständiges Orthonormalsystem</u> von $\mathcal{H}^{(1)}$ (Abk. VONS), d. h. $\langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$, $\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}^{(1)}$

→ Basis von $\mathcal{H}^{(n)}$:

$$|\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n\rangle \quad \begin{cases} \alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \ldots \leq \alpha_n & \text{Bose} \\ \alpha_1 < \alpha_2 < \ldots < \alpha_n & \text{Fermi} \end{cases}$$

Bem.: verschiedene Basisvektoren zwar orthogonal aufeinander, aber nicht immer auf 1 normiert!

VONS von $\mathcal{H}^{(n)}$:

$$\frac{|\alpha_1, \ldots, \alpha_n\rangle}{\sqrt{\prod_{\alpha=1}^{\infty} (n_\alpha!)}}, \qquad \alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \ldots \leq \alpha_n \quad \text{für Bosonen}$$

$$|\alpha_1, \ldots, \alpha_n\rangle, \qquad \alpha_1 < \alpha_2 < \ldots < \alpha_n \quad \text{für Fermionen}$$

n_α gibt an, wie oft α in $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ vorkommt

Bew.: → UE

Vollständigkeitsrelation in $\mathcal{H}^{(n)}$:

$$\frac{1}{n!} \sum_{\alpha_1} \ldots \sum_{\alpha_n} |\alpha_1, \ldots, \alpha_n\rangle\langle\alpha_1, \ldots, \alpha_n| = \underbrace{\mathbb{1}^{(n)}}_{\text{Einheitsoperator in } \mathcal{H}^{(n)}}$$

(Bose und Fermi!)

Bem.: Bereich der α_i unterliegt keinen Einschränkungen; mehrfaches Vorkommen von Vektoren durch Faktor $1/n!$ und Normierung berücksichtigt; Bew.: → UE

Fockraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}^{(2)} \oplus \ldots$

$$= \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}^{(n)}$$

$$\mathcal{H}^{(0)} = \{ |0\rangle \} \cong \mathbb{C} \quad (\text{eindim.})$$

$$\underbrace{|\psi\rangle}_{\in \mathcal{H}} = \underbrace{|\psi^{(0)}\rangle}_{\in \mathcal{H}^{(0)}} + \underbrace{|\psi^{(1)}\rangle}_{\in \mathcal{H}^{(1)}} + \underbrace{|\psi^{(2)}\rangle}_{\in \mathcal{H}^{(2)}} + \ldots + \underbrace{|\psi^{(n)}\rangle}_{\in \mathcal{H}^{(n)}} + \ldots$$

$$\langle \varphi | \psi \rangle := \langle \varphi^{(0)} | \psi^{(0)} \rangle + \langle \varphi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle + \ldots$$

$$\mathcal{H}^{(n)} \perp \mathcal{H}^{(m)} \text{ für } n \neq m$$

Für die aus unserem Einteilchen-VONS $\{ |\alpha\rangle \}$ konstruierten Basiszustände von $\mathcal{H}$ lässt sich die Orthogonalitätsrelation folgendermaßen schreiben:

$$\langle \alpha_1, \ldots, \alpha_n | \beta_1, \ldots, \beta_m \rangle = \delta_{nm} \begin{vmatrix} \delta_{\alpha_1 \beta_1} & \ldots & \delta_{\alpha_1 \beta_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \delta_{\alpha_n \beta_1} & \ldots & \delta_{\alpha_n \beta_n} \end{vmatrix}_{\varepsilon}$$

Vollständigkeitsrelation:

$$\underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\alpha_1, \ldots, \alpha_n} |\alpha_1, \ldots, \alpha_n\rangle \langle \alpha_1, \ldots, \alpha_n|}_{P^{(n)} \equiv \mathbb{1}^{(n)}} = \mathbb{1}$$

↑ Einheitsoperator in $\mathcal{H}$

$P^{(n)}$ ... Projektor auf $\mathcal{H}^{(n)}$

Bsp.: Zustände in der Impulsraumdarstellung (wie wir sie für Photonen im letzten Kapitel hatten)

„Basis" von $\mathcal{H}^{(1)}$: $\{|\vec{p}\rangle\}$, $\langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle = \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')$

$$\int d^3p\, |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \mathbb{1}^{(1)}$$

Bem.: Weitere Quantenzahlen (Spin) unterdrückt

i.a.: $|\vec{p},\sigma\rangle$

$\rightarrow$ Fockraum $\mathcal{H}$ durch „Vektoren" $|\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_n\rangle$ aufgespannt

$$\langle\vec{q}_1,\dots,\vec{q}_n|\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_m\rangle = \delta_{nm} \begin{vmatrix} \delta^{(3)}(\vec{q}_1-\vec{p}_1) & \dots & \delta^{(3)}(\vec{q}_1-\vec{p}_n) \\ & & \\ \delta^{(3)}(\vec{q}_n-\vec{p}_1) & \dots & \delta^{(3)}(\vec{q}_n-\vec{p}_n) \end{vmatrix}_{\varepsilon}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^3p_1 \dots d^3p_n\, |\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_n\rangle\langle\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_n| = \mathbb{1}$$

$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^3p_1 \dots d^3p_n\, |\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_n\rangle\, \psi^{(n)}(\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_n)$$

$$\psi^{(n)}(\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_n) = \langle\vec{p}_1,\dots,\vec{p}_n|\psi\rangle$$

speziell: $|\Phi\rangle = |\phi_1, \dots, \phi_n\rangle \in \mathcal{H}^{(n)}$

$$\Phi^{(m)}(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_m) = \begin{cases} 0 & \text{für } m \neq n \\ \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{p}_1) & \cdots & \phi_n(\vec{p}_1) \\ \vdots & & \\ \phi_1(\vec{p}_n) & \cdots & \phi_n(\vec{p}_n) \end{vmatrix}_\varepsilon \end{cases}$$

mit $\phi_i(\vec{p}_j) = \langle \vec{p}_j | \phi_i \rangle$

$\varepsilon = -1$: Slater-Determinante

3.2 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$|\varphi\rangle \in \mathcal{H}^{(1)}$ (beliebig)

$a^\dagger(\varphi)$ sei jener lineare Operator auf $\mathcal{H}$, der durch

$$a^\dagger(\varphi)\, |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle := |\varphi, \psi_1, \dots, \psi_n\rangle \,, \qquad n = 1, 2, \dots$$

(für beliebige n-Teilchen-Zustände $|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle$)

definiert ist.

$n = 0$: $\quad a^\dagger(\varphi)\, |0\rangle := |\varphi\rangle$

$a^\dagger(\varphi)$ ... Erzeugungsoperator für den Zustand $|\varphi\rangle$

Der dazu <u>adjungierte</u> Operator $a(\varphi)$ heißt

<u>Vernichtungsoperator</u> (für den Zustand $|\varphi\rangle$)

$$\begin{tikzcd} \mathcal{H}^{(n)} \arrow[r, bend right, "a^\dagger(\varphi)"'] & \mathcal{H}^{(n+1)} \arrow[l, bend right, "a(\varphi)"'] \end{tikzcd}$$

<u>Beh.:</u> $$\boxed{a(\varphi)\,|0\rangle = 0}$$

Bew.: $$\langle \underset{\substack{\in \mathcal{H}^{(n)} \\ n=0,1,\dots}}{\psi^{(n)}} |\, a(\varphi)\, |0\rangle = \langle \underbrace{a^\dagger(\varphi)\,\psi^{(n)}}_{\substack{\in \mathcal{H}^{(n+1)} \\ n+1=1,2,\dots}} |0\rangle = 0$$

$$\overset{\text{Lin.}}{\Rightarrow} \quad \langle \psi \,|\, a(\varphi)\, |0\rangle = 0 \quad \forall\, \psi \in \mathcal{H} \quad \Rightarrow \quad a(\varphi)\,|0\rangle = 0$$

Wirkung von $a(\varphi)$ auf einen n-Teilchen-Zustand $|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle$:

$$\langle \underbrace{\chi_1, \dots, \chi_{n-1}}_{\in \mathcal{H}^{(n-1)}} |\, a(\varphi)\, | \psi_1, \dots, \psi_n \rangle =$$

$$= \langle \varphi, \chi_1, \dots, \chi_{n-1} | \psi_1, \dots, \psi_n \rangle$$

$$= \begin{vmatrix} \langle \varphi|\psi_1\rangle & \langle \varphi|\psi_2\rangle & \dots & \langle \varphi|\psi_n\rangle \\ \langle \chi_1|\psi_1\rangle & \langle \chi_1|\psi_2\rangle & \dots & \langle \chi_1|\psi_n\rangle \\ & & & \\ \langle \chi_{n-1}|\psi_1\rangle & \langle \chi_{n-1}|\psi_2\rangle & \dots & \langle \chi_{n-1}|\psi_n\rangle \end{vmatrix}_\varepsilon =$$

Entw. nach 1. Zeile

$$\overset{\downarrow}{=} \sum_{k=1}^{n} \varepsilon^{k-1} \langle \varphi | \psi_k \rangle \langle \chi_1, \dots, \chi_{n-1} | \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_n \rangle$$

ohne ψ_k

$\langle \chi_1, \dots, \chi_{n-1} |$ war beliebig $\overset{\text{Lin.}}{\Longrightarrow}$

$$\boxed{a(\varphi) | \psi_1, \dots, \psi_n \rangle = \sum_{k=1}^{n} \varepsilon^{k-1} \langle \varphi | \psi_k \rangle | \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_n \rangle}$$

(Anti-) Vertauschungsrelationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

$$a^\dagger(\varphi_1)\, a^\dagger(\varphi_2) | \psi_1, \dots, \psi_n \rangle = | \varphi_1, \varphi_2, \psi_1, \dots, \psi_n \rangle =$$

$$= \varepsilon | \varphi_2, \varphi_1, \psi_1, \dots, \psi_n \rangle = \varepsilon\, a^\dagger(\varphi_2) | \varphi_1, \psi_1, \dots, \psi_n \rangle$$

$$= \varepsilon\, a^\dagger(\varphi_2)\, a^\dagger(\varphi_1) | \psi_1, \dots, \psi_n \rangle$$

$$\Rightarrow \quad a^\dagger(\varphi_1)\, a^\dagger(\varphi_2) = \varepsilon\, a^\dagger(\varphi_2)\, a^\dagger(\varphi_1)$$

$$\boxed{[\, a^\dagger(\varphi_1), a^\dagger(\varphi_2) \,]_{-\varepsilon} = 0}$$

wobei $[A, B]_{-\varepsilon} := AB - \varepsilon BA$

d.h. $[A,B]_- = AB - BA = [A,B]$ Kommutator für $\varepsilon = +1$

$[A,B]_+ = AB + BA =: \{A,B\}$ Antikommutator für $\varepsilon = -1$

Erzeugungsoperatoren kommutieren für Bosonen und antikommutieren für Fermionen.

Durch Adjungieren erhält man auch für die Vernichtungsoperatoren:

$$\boxed{[a(\varphi_1), a(\varphi_2)]_{-\varepsilon} = 0}$$

Was ergibt sich für $[a(\varphi_1), a^\dagger(\varphi_2)]_{-\varepsilon}$?

Berechnen zunächst

$$a(\varphi_1)\, a^\dagger(\varphi_2)\, |\psi_1, \ldots, \psi_n\rangle =$$

$$= a(\varphi_1)\, |\varphi_2, \psi_1, \ldots, \psi_n\rangle$$

$$= \langle\varphi_1|\varphi_2\rangle\, |\psi_1, \ldots, \psi_n\rangle + \sum_{k=1}^{n} \varepsilon^k \langle\varphi_1|\psi_k\rangle\, |\varphi_2, \psi_1, \ldots, \hat{\psi}_k, \ldots \psi_n\rangle$$

und dann

$$a^\dagger(\varphi_2)\, a(\varphi_1)\, |\psi_1, \ldots, \psi_n\rangle =$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \varepsilon^{k-1} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle \; a^\dagger(\varphi_2) \, | \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_n \rangle$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \varepsilon^{k-1} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle \; | \varphi_2, \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_n \rangle$$

$$= \varepsilon \sum_{k=1}^{n} \varepsilon^{k} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle \; | \varphi_2, \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_n \rangle$$

$$\Rightarrow \quad \varepsilon \, a^\dagger(\varphi_2) \, a(\varphi_1) \, | \psi_1, \dots, \psi_n \rangle =$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \varepsilon^{k} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle \; | \varphi_2, \psi_1, \dots, \hat{\psi}_k, \dots, \psi_n \rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{[a(\varphi_1), a^\dagger(\varphi_2)]_{-\varepsilon} = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle}$$

$\{ |\alpha\rangle \}_{\alpha = 1,2,\dots}$ VONS von $\mathcal{H}^{(1)}$

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \qquad \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}^{(1)}$$

$$\Downarrow$$

$$[a_\alpha, a_\beta^\dagger]_{-\varepsilon} = \delta_{\alpha\beta} \qquad (\, a_\alpha := a(\alpha) \,)$$

$$[a_\alpha, a_\beta]_{-\varepsilon} = [a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger]_{-\varepsilon} = 0$$

$$a_\alpha^\dagger \, | \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle = | \alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle$$

$$a_\alpha \, | \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle = \sum_{k=1}^{n} \varepsilon^{k-1} \delta_{\alpha\alpha_k} \, | \alpha_1, \dots, \hat{\alpha}_k, \dots \alpha_n \rangle$$

Besetzungszahlen:

Manchmal werden n-Teilchen-Zustände durch Besetzungszahlen charakterisiert (→ Kapitel über Photonen)

a) Bosonen ($\varepsilon = +1$):

$$|n_1, n_2, \ldots \rangle = \frac{|\overbrace{1,\ldots,1}^{n_1}, \overbrace{2,\ldots,2}^{n_2}, \ldots \rangle}{\sqrt{n_1!\, n_2! \ldots}}$$

$$\Rightarrow \quad \{ |n_1, n_2, \ldots \rangle \}_{n_\alpha \in \mathbb{N}_0} \quad \text{VONS von } \mathcal{H}$$

$$a_\alpha^\dagger \, |n_1, \ldots, n_\alpha, \ldots \rangle = \sqrt{n_\alpha + 1}\, |n_1, \ldots, n_\alpha + 1, \ldots \rangle$$

$$a_\alpha \, |n_1, \ldots, n_\alpha, \ldots \rangle = \sqrt{n_\alpha}\, |n_1, \ldots, n_\alpha - 1, \ldots \rangle$$

Operator der Teilchenzahl im Zustand $|\alpha\rangle$: $N_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha$

Bem.: Notation mit den Besetzungszahlen oft in der statistischen Physik verwendet. I.a. aber nicht besonders praktisch und für nicht auf 1 normierbare Zustände ohnehin unverwendbar.

Besser: Notation mit $|\alpha_1, \ldots, \alpha_n\rangle$

b) Fermionen ($\varepsilon = -1$):

$$|n_1, n_2, \ldots\rangle = |\alpha_1, \alpha_2, \ldots\rangle, \quad \text{wobei } \alpha_1 < \alpha_2 < \ldots$$

n_α gibt an, wie oft der Einteilchenzustand $|\alpha\rangle$ vorkommt (mögliche Werte: $n_\alpha = 0$ oder 1)

<u>Bsp.:</u> $$\underset{\substack{\uparrow\\|1\rangle}}{|0}, \underset{\substack{\uparrow\\|2\rangle}}{1}, \underset{\substack{\uparrow\\|3\rangle}}{0}, \underset{\substack{\uparrow\\|4\rangle}}{0}, \underset{\substack{\uparrow\\|5\rangle}}{1}, \ldots\rangle = |\underset{\substack{\shortparallel\\\alpha_1}}{2}, \underset{\substack{\shortparallel\\\alpha_2}}{5}, \ldots\rangle$$

$$a_\alpha^\dagger |n_1, \ldots, n_\alpha, \ldots\rangle = (-1)^{n_1 + \ldots + n_{\alpha-1}} |n_1, \ldots, n_\alpha + 1, \ldots\rangle$$

$$\neq 0 \text{ nur für } n_\alpha = 0$$

$a^\dagger$ kann als <u>Abbildung</u> aufgefasst werden, die jedem Vektor $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}^{(1)}$ einen linearen Operator $a^\dagger(\varphi): \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ zuordnet. Ist diese Abbildung linear?

$$a^\dagger(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2)|\psi_1, \ldots, \psi_n\rangle = |c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2, \psi_1, \ldots, \psi_n\rangle$$

$$= c_1 |\varphi_1, \psi_1, \ldots, \psi_n\rangle + c_2 |\varphi_2, \psi_1, \ldots, \psi_n\rangle =$$

$$= c_1\, a^\dagger(\varphi_1)|\psi_1, \ldots, \psi_n\rangle + c_2\, a^\dagger(\varphi_2)|\psi_1, \ldots, \psi_n\rangle$$

$$= \left(c_1 a^\dagger(\varphi_1) + c_2\, a^\dagger(\varphi_2)\right)|\psi_1, \ldots, \psi_n\rangle$$

$$\Rightarrow \quad a^\dagger(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2) = c_1\, a^\dagger(\varphi_1) + c_2\, a^\dagger(\varphi_2) \quad \text{linear} \checkmark$$

$$\Rightarrow \quad a(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2) = c_1^* \, a(\varphi_1) + c_2^* \, a(\varphi_2) \quad \underline{\text{anti}}\text{linear}$$

Man kann auch sagen, dass sich die Erzeugungsoperatoren wie ket-Vektoren verhalten,

$$|c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2\rangle = c_1 |\varphi_1\rangle + c_2 |\varphi_2\rangle ,$$

dagegen die Vernichtungsoperatoren wie bra-Vektoren:

$$\langle c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2| = c_1^* \langle\varphi_1| + c_2^* \langle\varphi_2|$$

Die (Anti-) Linearitätseigenschaft der Erzeugungs- (Vernichtungs-) Operatoren kann bei einem Basiswechsel benutzt werden.

<u>Bsp.:</u> Nichtrelativistische Quantenmechanik

Ortseigenzustände $\{|\vec{x}\rangle\}$

Impulseigenzustände $\{|\vec{p}\rangle\}$

Zusammenhang zwischen den beiden Basissystemen:

$$|\vec{p}\rangle = \int d^3x \; |\vec{x}\rangle \underbrace{\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle}_{\frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}} = \int d^3x \; |\vec{x}\rangle \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$|\vec{x}\rangle = \int d^3p \; |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle = \int d^3p \; |\vec{p}\rangle \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$\Rightarrow \quad a^\dagger(\vec{p}) = \int d^3x \; a^\dagger(\vec{x}) \, \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$a^\dagger(\vec{x}) = \int d^3p \; a^\dagger(\vec{p}) \, \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

Entsprechender Zusammenhang zwischen den Vernichtungsoperatoren durch Adjungieren der beiden Gleichungen:

$$a(\vec{p}) = \int d^3x \; a(\vec{x}) \, \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$a(\vec{x}) = \int d^3p \; a(\vec{p}) \, \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

3.3 Operatoren im Fockraum

$A^{(1)} : \mathcal{H}^{(1)} \xrightarrow{\text{lin.}} \mathcal{H}^{(1)}$ sei ein linearer Operator auf $\mathcal{H}^{(1)}$

Definieren einen dazugehörigen Operator $A : \mathcal{H} \xrightarrow{\text{lin.}} \mathcal{H}$ auf dem Fockraum $\mathcal{H}$ durch

$$A \, |\psi_1, \ldots, \psi_n\rangle := |A^{(1)}\psi_1, \ldots \psi_n\rangle + \ldots + |\psi_1, \ldots, A^{(1)}\psi_n\rangle$$

A entspricht der „Summe von $A^{(1)}$ über alle Teilchen".

Bsp.: Ang. $A^{(1)}|\psi_i\rangle = a_i|\psi_i\rangle$

$$\Rightarrow \quad A|\psi_1,\dots,\psi_n\rangle = (a_1+\dots+a_n)|\psi_1,\dots,\psi_n\rangle$$

Ist z.B. $A^{(1)} = H^{(1)}$ der Einteilchen-Hamiltonoperator, dann ist H der Operator der Gesamtenergie (wenn es keine Wechselwirkung zwischen den Teilchen gibt)

$\vec{P}^{(1)}$ = Einteilchen-Impulsoperator $\Rightarrow$ $\vec{P}$ = Gesamtimpulsoperator

$A^{(1)} = \mathbb{1}^{(1)} \Rightarrow A = N$ = Teilchenzahloperator

usw.

Wollen A mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren schreiben.

Zunächst für den Spezialfall $A^{(1)} = |\alpha\rangle\langle\beta|$

$$A|\psi_1,\dots,\psi_n\rangle = \langle\beta|\psi_1\rangle\,|\alpha,\psi_2,\dots,\psi_n\rangle$$
$$+\langle\beta|\psi_2\rangle\,|\psi_1,\alpha,\dots,\psi_n\rangle+\dots+\langle\beta|\psi_n\rangle\,|\psi_1,\psi_2,\dots,\alpha\rangle$$

andererseits:

$$a^\dagger(\alpha)\,a(\beta)\,|\psi_1,\dots,\psi_n\rangle =$$
$$= \sum_{k=1}^{n}\varepsilon^{k-1}\langle\beta|\psi_k\rangle\,|\alpha,\psi_1,\dots,\hat{\psi}_k,\dots,\psi_n\rangle \quad \text{(siehe S. 45)}$$
$$= \sum_{k=1}^{n}\langle\beta|\psi_k\rangle\,|\psi_1,\dots,\psi_{k-1},\alpha,\psi_{k+1},\dots,\psi_n\rangle$$

$\Rightarrow \quad A = a^\dagger(\alpha)\, a(\beta) \quad$ falls $\; A^{(1)} = |\alpha\rangle\langle\beta|$

Verallgemeinerung auf einen beliebigen Einteilchenoperator $A^{(1)}$:

wählen beliebiges VONS $\{|\alpha\rangle\}$ von $\mathcal{H}^{(1)}$

$$A^{(1)} = \underbrace{\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|}_{\mathbb{1}^{(1)}} \; A \; \sum_\beta |\beta\rangle\langle\beta|$$

$$= \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle \underbrace{\langle\alpha|A^{(1)}|\beta\rangle}_{A^{(1)}_{\alpha\beta}} \langle\beta|$$

$$= \sum_{\alpha,\beta} A^{(1)}_{\alpha\beta}\; |\alpha\rangle\langle\beta|$$

Aus dem vorigen Resultat und der Linearität folgt:

$$\boxed{A = \sum_{\alpha,\beta} A^{(1)}_{\alpha\beta}\; a^\dagger(\alpha)\, a(\beta)}$$

Bsp.: Nichtrelativistische Quantenmechanik (Spin 0)

a) $A^{(1)} = \mathbb{1}^{(1)} \;\Rightarrow\; A = N$ Teilchenzahloperator

$$\mathbb{1}^{(1)} = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \int d^3x\, |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| = \int d^3p\, |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|$$

$$\Rightarrow N = \sum_\alpha a^\dagger_\alpha a_\alpha = \int d^3x\, a^\dagger(\vec{x})\, a(\vec{x}) = \int d^3p\, a^\dagger(\vec{p})\, a(\vec{p})$$

b) <u>Impulsoperator</u> $\vec{P}^{(1)} = \int d^3p\, \vec{p}\, |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|$

$$= \int d^3x\, |\vec{x}\rangle \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\langle\vec{x}|$$

$\Rightarrow$ <u>Gesamtimpuls</u> $\vec{P} = \int d^3p\, \vec{p}\, a^\dagger(\vec{p})\, a(\vec{p})$

$$= \int d^3x\, a^\dagger(\vec{x}) \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} a(\vec{x})$$

c) <u>Hamiltonoperator</u> $H^{(1)} = \frac{\vec{P}^{(1)2}}{2m} + V(\vec{X}^{(1)})$

Ortsdarstellung: $H^{(1)} = \int d^3x\, |\vec{x}\rangle \left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} + V(\vec{x})\right)\langle\vec{x}|$

$\Rightarrow$ Operator der <u>Gesamtenergie</u> (nichtwechselwirkende Teilchen)

$$\Rightarrow \quad H = \int d^3x\, a^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right) a(\vec{x})$$

Impulsdarstellung:

$$H^{(1)} = \int d^3p\, \frac{\vec{p}^2}{2m} |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| + \int d^3p\, d^3p'\, |\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|V(\vec{X})|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|$$

Nebenrechnung: $\langle\vec{p}'|V(\vec{X})|\vec{p}\rangle = \int d^3x\, \langle\vec{p}'|V(\vec{X})|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle$

$$= \int d^3x\, V(\vec{x})\, \langle\vec{p}'|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \int d^3x\, V(\vec{x})\, \frac{e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$=: \tilde{V}(\vec{p}'-\vec{p})$$

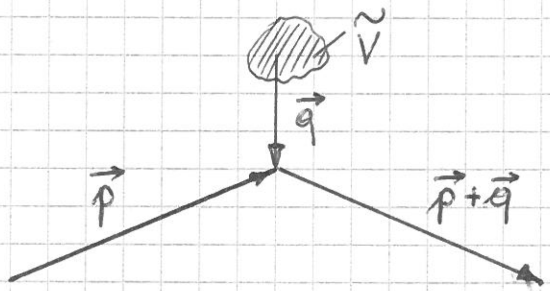
$$\Rightarrow \quad H^{(1)} = \int d^3p \, \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| + \int d^3p \, d^3p' \, \tilde{V}(\underbrace{\vec{p}'-\vec{p}}_{\vec{q}}) |\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}|$$

$$= \int d^3p \, \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| + \int d^3p \, d^3q \, \tilde{V}(\vec{q}) \, |\vec{p}+\vec{q}\rangle\langle\vec{p}|$$

$$\Rightarrow \quad H = \int d^3p \, \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} a^\dagger(\vec{p}) \, a(\vec{p}) + \int d^3p \, d^3q \, \tilde{V}(\vec{q}) \, a^\dagger(\vec{p}+\vec{q}) a(\vec{p})$$

Interpretation des Terms $\tilde{V}(\vec{q}) \, a^\dagger(\vec{p}+\vec{q}) \, a(\vec{p})$:

ein Teilchen mit Impuls $\vec{p}$ wird „vernichtet" und es wird mit Impuls $\vec{p}+\vec{q}$ wieder „erzeugt"; die Amplitude dafür ist $\tilde{V}(\vec{q})$ (Impulsänderung bei Bewegung des Teilchens in einem äußeren Potential)



Wählt man als VONS von $\mathcal{H}^{(1)}$ Eigenzustände $\{|\alpha\rangle\}$ von $H^{(1)}$, so ergibt sich:

$$H^{(1)} = \sum_\alpha E_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad \Rightarrow \quad H = \sum_\alpha E_\alpha \, a_\alpha^\dagger \, a_\alpha$$

<u>Bem.</u>: Die verschiedenen Ausdrücke für H können natürlich von den jeweils anderen hergeleitet werden, indem man den Zshg. zwischen $a(\vec{x})$, $a(\vec{p})$, a_α, usw. verwendet.

d) $|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|$ $\Rightarrow$ Teilchendichte-Operator $\varrho(\vec{x}) = a^\dagger(\vec{x})\,a(\vec{x})$

$$N = \int d^3x\ \varrho(\vec{x})$$

$$V = \int d^3x\ V(\vec{x})\,\varrho(\vec{x})$$ Potential gewichtet durch die Teilchendichte $(H = H_0 + V)$

Bis jetzt: Teilchen zwar unter dem Einfluss einer äußeren Kraft, jedoch ohne Wechselwirkung der Teilchen untereinander.

Betrachten jetzt zusätzliches Zweiteilchenpotential

$$V^{(2)}(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = V^{(2)}(\vec{x}_j - \vec{x}_i)$$

$\rightarrow$ Zweiteilchen - Wechselwirkung

$\rightarrow$ der entsprechende in $\mathcal{H}^{(2)}$ wirkende Operator ist dann:

$$V^{(2)} = \frac{1}{2}\int d^3x\, d^3y\ |\vec{x},\vec{y}\rangle\, V^{(2)}(\vec{x},\vec{y})\,\langle\vec{x},\vec{y}|$$

Bem.: Verifikation dieser Behauptung durch Anwendung von $V^{(2)}$ auf den Zweiteilchenzustand $|\vec{x}_1, \vec{x}_2\rangle$
$\rightarrow$ UE

Suchen nun einen Operator V, der auf die Zustände des Fockraums, sodass

$$V|\vec{x}_1,\dots,\vec{x}_n\rangle = \sum_{i<j} V^{(2)}(\vec{x}_i,\vec{x}_j)\,|\vec{x}_1,\dots,\vec{x}_n\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\ i\neq j}} V^{(2)}(\vec{x}_i,\vec{x}_j)\,|\vec{x}_1,\dots,\vec{x}_n\rangle$$

Vermutung:

$$V = \frac{1}{2}\int d^3x\, d^3y\; a^\dagger(\vec{x})\, a^\dagger(\vec{y})\, V^{(2)}(\vec{x},\vec{y})\, a(\vec{y})\, a(\vec{x})$$

Beweis dieser Vermutung durch Anwendung auf $|\vec{x}_1,\dots,\vec{x}_n\rangle$
$\rightarrow$ UE

3.4 Zeitentwicklung

Heisenbergbild: Zustände zeitunabhängig, Operatoren zeitabhängig

Annahme: $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial A_S}{\partial t} = 0$ $\Rightarrow$ $A(t) = e^{iHt/\hbar} A(0)\, e^{-iHt/\hbar}$

$$\dot{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)]$$

Zusammenhang mit dem Schrödingerbild:

$$|\psi(t)\rangle_S = e^{-iHt/\hbar}\,|\psi(0)\rangle_S \quad , \quad |\psi(0)\rangle_S = |\psi\rangle_H$$

$$A_S = A_H(0) =: A$$

Nichtrelativistische Quantenmechanik – Vielteilchentheorie

Basis von $\mathcal{H}^{(1)}$: $|\vec{x},\sigma\rangle$ (jetzt mit Spin: $\sigma = -s, \dots, +s$)

$$\vec{X}^{(1)}|\vec{x},\sigma\rangle = \vec{x}\,|\vec{x},\sigma\rangle, \qquad \vec{S}^2|\vec{x},\sigma\rangle = \hbar^2 s(s+1)\,|\vec{x},\sigma\rangle$$

$$S_z|\vec{x},\sigma\rangle = \hbar\sigma\,|\vec{x},\sigma\rangle$$

s ganzzahlig: Bosonen; s halbzahlig: Fermionen

$a_\sigma(\vec{x}) \equiv a(|\vec{x},\sigma\rangle)$ Vernichtungsoperator im Schrödingerbild

$$\underbrace{a_\sigma(t,\vec{x})}_{\substack{\text{Vernichtungsop.}\\ \text{im Heisenbergbild}}} = e^{iHt/\hbar}\,\underbrace{a_\sigma(\vec{x})}_{a_\sigma(0,\vec{x})}\,e^{-iHt/\hbar}$$

$$\Rightarrow \quad a_\sigma^\dagger(t,\vec{x}) = e^{iHt/\hbar}\,a_\sigma^\dagger(\vec{x})\,e^{-iHt/\hbar}$$

Welche Zustände werden durch $a_\sigma^\dagger(t,\vec{x})$ „erzeugt" bzw. von $a_\sigma(t,\vec{x})$ „vernichtet"?

$$a_\sigma^\dagger(t,\vec{x})\,|0\rangle = e^{iHt/\hbar}\,a_\sigma^\dagger(\vec{x})\,e^{-iHt/\hbar}\,|0\rangle$$

$$= e^{iHt/\hbar}\,a_\sigma^\dagger(\vec{x})\,|0\rangle = e^{iHt/\hbar}\,|\vec{x},\sigma\rangle = \underbrace{e^{iH^{(1)}t/\hbar}\,|\vec{x},\sigma\rangle}_{=:\,|t,\vec{x},\sigma\rangle}$$

$|t,\vec{x},\sigma\rangle$ ist Eigenzustand von $\vec{X}^{(1)}(t)$ zum Eigenwert $\vec{x}$: $\vec{X}^{(1)}(t)\,|t,\vec{x},\sigma\rangle = e^{iH^{(1)}t/\hbar}\,\vec{X}^{(1)}\underbrace{e^{-iH^{(1)}t/\hbar}\,e^{iH^{(1)}t/\hbar}}_{\mathbb{1}^{(1)}}|\vec{x},\sigma\rangle$

$$= \vec{x}\,e^{iH^{(1)}t/\hbar}\,|\vec{x},\sigma\rangle = \vec{x}\,|t,\vec{x},\sigma\rangle$$

$|t,\vec{x},\sigma\rangle$ entspricht also jenem Zustand, bei dem zum Zeitpunkt t ein Teilchen (mit z-Komponente des Spins $\hbar\sigma$) am Ort $\vec{x}$ sitzt. Der dazugehörige Erzeugungsoperator $a_\sigma^\dagger(t,\vec{x})$ erzeugt zum Zeitpunkt t ein Teilchen am Ort $\vec{x}$ und Spin $\hbar\sigma$, $a_\sigma(t,\vec{x})$ vernichtet zum Zeitpunkt t ein solches Teilchen am Ort $\vec{x}$.

Bem.: $|t,\vec{x},\sigma\rangle$ nicht zu verwechseln mit $e^{-iH^{(1)}t/\hbar}|\vec{x},\sigma\rangle$ (im Schrödingerbild), welches der Zeitentwicklung eines Zustands entspricht, bei dem das Teilchen zum Zeitpunkt $t=0$ am Ort $\vec{x}$ war!

Bewegungsgleichung für $a_\sigma(t,\vec{x})$:

$$\dot{a}_\sigma(t,\vec{x}) = \frac{i}{\hbar}\left[H, a_\sigma(t,\vec{x})\right]$$

Bem.: $H(t) = H(0) = H$

Verwende für H:

$$H(t) = \sum_\sigma \int d^3x \; a_\sigma^\dagger(t,\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right) a_\sigma(t,\vec{x})$$

$$\dot{a}_\sigma(t,\vec{x}) = \frac{i}{\hbar}\sum_\tau \int d^3y\, [a^\dagger_\tau(t,\vec{y})\overbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{y})\right)}^{H_y} a_\tau(t,\vec{y}), a_\sigma(t,\vec{x})]$$

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_\tau \int d^3y\, \{ a^\dagger_\tau(t,\vec{y})\, H_y a_\tau(t,\vec{y})\, a_\sigma(t,\vec{x})$$

$$- a_\sigma(t,\vec{x})\, a^\dagger_\tau(t,\vec{y})\, H_y\, a_\tau(t,\vec{y}) \}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\sum_\tau \int d^3y\, \{ \overset{(-1)^{2S}}{\overset{\shortparallel}{\varepsilon}}\, a^\dagger_\tau(t,\vec{y})\, a_\sigma(t,\vec{x})\; H_y\, a_\tau(t,\vec{y})$$

$$- a_\sigma(t,\vec{x})\, a^\dagger_\tau(t,\vec{y})\; H_y\, a_\tau(t,\vec{y}) \}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\sum_\tau \int d^3y\, \underbrace{[a_\sigma(t,\vec{x}), a^\dagger_\tau(t,\vec{y})]_\varepsilon}_{\delta_{\sigma\tau}\,\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})}\; H_y\, a_\tau(t,\vec{y})$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right) a_\sigma(t,\vec{x})$$

$$\boxed{i\hbar\, \dot{a}_\sigma(t,\vec{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right) a_\sigma(t,\vec{x})}$$

Bewegungsgleichung des Vernichtungsoperators $a_\sigma(t,\vec{x})$

= <u>zeitabh. Schrödingergleichung</u> in der Ortsdarstellung!

<u>Bem.:</u> Oft wird die Notation $\Psi_\sigma(t,\vec{x}) := a_\sigma(t,\vec{x})$

($\Psi_\sigma(t,\vec{x})$ = Feldoperator) verwendet. Natürlich

<u>nicht zu verwechseln</u> mit der Einteilchenwellenfunktion

eines (Einteilchen-) Zustandes $|\psi_S^{(1)}(t)\rangle$

$$\psi_S^{(1)}(t,\vec{x},\sigma) = \langle \vec{x},\sigma | \psi_S^{(1)}(t)\rangle = \langle \vec{x},\sigma | e^{-iH^{(1)}t/\hbar} | \psi_S^{(1)}(0)\rangle$$

$$= \langle t,\vec{x},\sigma | \psi_S^{(1)}(0)\rangle = \langle 0 | a_\sigma(t,\vec{x}) | \psi_S^{(1)}(0)\rangle$$

$$\equiv \langle 0 | \Psi_\sigma(t,\vec{x}) | \psi_S^{(1)}(0)\rangle = \langle 0 | \Psi_\sigma(t,\vec{x}) | \psi_H^{(1)}\rangle$$

Zusammenfassung: Ausgangspunkt war der Teilchen-Standpunkt. Die Vielteilchentheorie erwies sich als äquivalent zu einer Feldtheorie für ein operatorwertiges Quantenfeld, das (im Falle der nichtrelativistischen Quantenmechanik) der Schrödingergleichung genügt.

3.5 Feldquantisierung.

Wir nehmen nun den entgegengesetzten Standpunkt ein. Ausgangspunkt ist diesmal eine (zunächst) klassische Feldtheorie mit der Feldgleichung

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

Diese Feldgleichung lässt sich durch Minimieren des Wirkungsintegrals

$$S = \int dt \underbrace{\int d^3x\, \overbrace{\sum_\sigma \left[\psi_\sigma^* \, i\hbar\, \dot{\psi}_\sigma - \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi_\sigma)^* \cdot \vec{\nabla}\psi_\sigma - \psi_\sigma^* V \psi_\sigma\right]}^{\text{Lagrangedichte } \mathcal{L}}}_{\text{Lagrangefunktion } L}$$

erhalten.

Allgemeine Form:

$$S = \int dt \int d^3x \, \mathcal{L}(\psi_\sigma, \dot\psi_\sigma, \psi_{\sigma,k}, t, \vec{x})$$

$k = 1, 2, 3$

$$\delta S = \int dt \int d^3x \sum_\sigma \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} \delta\psi_\sigma + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot\psi_\sigma} \delta\dot\psi_\sigma + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\sigma,k}} \delta\psi_{\sigma,k} \right)$$

$$\underset{\text{partielle Integration}}{=} \int dt \int d^3x \sum_\sigma \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot\psi_\sigma} - \frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\sigma,k}} \right) \delta\psi_\sigma$$

$\delta\psi_\sigma$ bel. $\Rightarrow$ <u>Feldgleichungen</u> $\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot\psi_\sigma} + \frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\sigma,k}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma}$

(Verallgemeinerung von $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}$)

in unserem Fall: $\psi_\sigma, \psi_\sigma^*$ als unabhängige Variablen aufgefasst

$\Pi_\sigma := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot\psi_\sigma} = i\hbar\psi_\sigma^*$ zu ψ_σ <u>kanonisch konjugierter Impuls</u>

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\sigma,k}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k\psi_\sigma^*, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} = -\psi_\sigma^* V$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot\psi_\sigma^*} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{\sigma,k}^*} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{\sigma,k}, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma^*} = i\hbar\dot\psi_\sigma - V\psi_\sigma$$

Bewegungsgleichung für ψ_σ: $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\sigma = i\hbar\dot\psi_\sigma^* - V\psi_\sigma$

$\rightarrow$ Schrödingergleichung $i\hbar\dot\psi_\sigma = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\sigma + V\psi_\sigma$

Bewegungsgleichung für ψ_σ^*: $i\hbar\dot\psi_\sigma^* - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\sigma^* = -\psi_\sigma^* V$

$\rightarrow$ komplex konj. Schrödingergl. $-i\hbar\dot\psi_\sigma^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_\sigma^* + \psi_\sigma^* V$

Hamiltondichte

allgemein: $\mathcal{H} = \sum_\sigma \pi_\sigma \dot{\psi}_\sigma - \mathcal{L}$ (in Analogie zu $H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L$)

in unserem Fall ergibt sich für $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = \sum_\sigma \pi_\sigma \dot{\psi}_\sigma - \mathcal{L} = i\hbar \sum_\sigma \psi_\sigma^* \dot{\psi}_\sigma - i\hbar \sum_\sigma \psi_\sigma^* \dot{\psi}_\sigma$$

$$+ \sum_\sigma \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}\psi_\sigma)^* \vec{\nabla}\psi_\sigma + \psi_\sigma^* V \psi_\sigma \right)$$

$$\Rightarrow \quad H = \int d^3x\, \mathcal{H} = \int d^3x \sum_\sigma \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}\psi_\sigma)^* \vec{\nabla}\psi_\sigma + \psi_\sigma^* V \psi_\sigma \right]$$

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{part. Int.}}}{=} \int d^3x \sum_\sigma \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_\sigma^* \Delta \psi_\sigma + \psi_\sigma^* V \psi_\sigma \right]$$

$$= \int d^3x \sum_\sigma \psi_\sigma^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi_\sigma$$

Quantisierung

$\psi_\sigma \to \Psi_\sigma$

$\psi_\sigma^* \to \Psi_\sigma^\dagger$

c-Zahl-Felder ↑ ↑ Operatoren

Vertauschungsrelationen:

$$[\Psi_\sigma(t,\vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t,\vec{y})]_{-\varepsilon} = i\hbar\, \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})\, \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$[\Psi_\sigma(t,\vec{x}), \Psi_{\sigma'}(t,\vec{y})]_{-\varepsilon} = 0$$

$$[\Pi_\sigma(t,\vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t,\vec{y})]_{-\varepsilon} = 0$$

kanonische Quantisierung

Schrödinger-Theorie:

mit $\Pi_\sigma = i\hbar\, \Psi_\sigma^\dagger$ erhalten wir:

$$[\Psi_\sigma(t,\vec{x}), \Psi_{\sigma'}^\dagger(t,\vec{y})]_{-\varepsilon} = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})\,\delta_{\sigma\sigma'}$$

Wir erhalten also genau die <u>gleichen</u> Vertauschungsrelationen, die wir vorhin hatten, als wir das Teilchenbild als Ausgangspunkt genommen hatten.

<u>Wesentliche Erkenntnis</u>: In einer <u>quantisierten</u> Theorie sind <u>Teilchen- und Feldbild äquivalent!</u>