

Fock-Raum : Hilbertraum für Zustände
beliebiger, endlicher
Teilchenzahl!

\mathcal{H} : 1-Teilchen-Raum

$$\mathcal{H}_{s/a}^{(n)} = \{ \psi \in \otimes^n \mathcal{H} \mid P_\sigma \psi = \{ \text{sgn} \sigma \} \psi \}$$

für $\begin{cases} \text{Bosonen (s)} \\ \text{Fermionen (a)} \end{cases}$

$$(\mathcal{H}_{s/a}^{(0)} = \mathbb{C}, \mathcal{H}_{s/a}^{(1)} = \mathcal{H})$$

$\mathcal{H}_{s/a}^{(n)}$: n-Teilchen-Raum

Fock-Raum :

$$\mathcal{F}_{s/a} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_{s/a}^{(n)}$$

Zustand $\Psi \in \mathcal{F}$ ist Folge

$$|\Psi\rangle = \{ \psi^0, \psi^1, \psi^2, \dots \} \text{ mit } \psi^n \in \mathcal{H}_{s/a}^{(n)}$$

Wir identifizieren

$$|\psi^n\rangle = \{0, 0, \dots, 0, \psi^n, 0, \dots\}$$

↑
n-ter Eintrag

Vakuum:

$$|0\rangle = \{1, 0, 0, \dots\}$$

Verriegelungsoperator

(Sei $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$, $|\psi\rangle \leftrightarrow \psi(\vec{z})$, $\vec{z} = (\vec{x}, s)$)

Für $|f\rangle \in \mathcal{H}$ sei

$$a(f) : \mathcal{H}_{sre} \rightarrow \mathcal{H}_{sre}, \quad \Psi \mapsto a(f)\Psi$$

definiert durch

$$(a(f)\Psi)^{n-1}(\vec{z}_2, \dots, \vec{z}_n)$$

$$:= \sqrt{n} \int d\vec{z}_1 \overline{f(\vec{z}_1)} \psi^n(\vec{z}_1, \vec{z}_2, \dots, \vec{z}_n).$$

Insbesondere:

- $a(f) : \mathcal{H}_{sre}^{(n)} \rightarrow \mathcal{H}_{sre}^{(n-1)}$, $(n \geq 1)$
- $a(f)|0\rangle = 0$

Erzeugnisoperator $a^*(f) := (a(f))^*$

$$(a^*(f)\psi)^n(z_1, \dots, z_n) \quad (n \geq 1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n (\pm 1)^{k-1} f(z_k) \psi^{n-1}(z_1, \dots, \overset{\uparrow}{z_k}, \dots, z_n)$$

↑
Auslassung

$$(a^*(f)\psi)^0 = 0$$

Insbesondere: $a^*(f) : \mathcal{H}_{S/Q}^{(n)} \rightarrow \mathcal{H}_{S/Q}^{(n+1)}$

Kommutator (Anti)Kommutator

$$[A, B]_{\mp} = AB \mp BA \quad \left. \begin{array}{l} \text{Bosonen} \\ \text{Fermionen} \end{array} \right\}$$

Vertauschungsrelationen

$$[a(f), a(g)]_{\mp} = 0, \quad [a^*(f), a^*(g)]_{\mp} = 0$$

$$[a(f), a^*(g)]_{\mp} = \langle f, g \rangle$$

$(|f\rangle, |g\rangle) \in \mathcal{H}$ (1-Teilchenzustände)

ONBasis $|f_i\rangle$ für \mathcal{H} . Setze

$$a_i = a(f_i)$$

Basiswechsel: $|f_i\rangle \rightarrow |\tilde{f}_i\rangle$

$$\tilde{a}_i = \sum_j a_j \langle \tilde{f}_i | f_j \rangle$$

$$\tilde{a}_i^* = \sum_j a_j^* \langle f_j | \tilde{f}_i \rangle$$

Observablen in der Fock-Darstellung

- 1-Teilchenoperator b

$$d\Gamma(b) = \sum_{i=1}^n b^{(i)}$$

auf n -Teilchenzuständen ($b^{(i)}$ ist b auf i -tes Teilchen wirkend). Dann

$$d\Gamma(b) = \sum_{kl} a_k^* b_{kl} a_l$$

(k, l indizieren Vektoren der 1-Teilchenbasis)

mit $b_{kl} = \langle f_k | b | f_l \rangle$

- 2-Teilchenoperator b

$$d\Gamma(b) = \sum_{i < j} b^{(ij)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} b^{(ij)} \text{ auf } \mathcal{H}^{(n)}$$

Dann

$$d\Gamma(b) = \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, l_1, l_2} a_{k_2}^* a_{k_1}^* b_{k_1 k_2, l_1 l_2} a_{l_1} a_{l_2}$$

mit

$$b_{k_1 k_2, l_1 l_2} = \langle f_{k_1} \otimes f_{k_2} | b | f_{l_1} \otimes f_{l_2} \rangle$$

Observablen in der Fock-Darstellung (Fort.)

- 1-Teilchenoperator b auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{V})$
Erwartungswerte ($|\psi\rangle \in \mathcal{H}$)

$$\begin{aligned}\langle \psi | b | \psi \rangle &= \int d\vec{x} d\vec{x}' \langle \psi | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | b | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \psi \rangle \\ &= \int d\vec{x} d\vec{x}' \overline{\psi(\vec{x})} b(\vec{x}, \vec{x}') \psi(\vec{x}')\end{aligned}$$

Zum Vergleich:

$$d\Gamma(b) = \int d\vec{x} d\vec{x}' \overline{\Psi^*(\vec{x})} b(\vec{x}, \vec{x}') \Psi(\vec{x}')$$

„Rezept“ der 2. ten Quantisierung:

$b \rightsquigarrow d\Gamma(b)$ erhält man durch

$$\begin{array}{ccc} \psi(\vec{x}) & \rightsquigarrow & \Psi(\vec{x}) \\ \uparrow & & \uparrow \\ \text{Wellenfunktion} & & \text{Feldoperator} \end{array}$$

im Ausdruck für $\langle \psi | b | \psi \rangle$.

- 2-Teilchenoperator: analog, s. Beispiele

Beispiele (Abkürzung $\hat{\rho} \equiv \hat{\rho}(\vec{x}_0)$)

1) Dichte in \vec{x}_0 : 1-Top.

$$\rho(\vec{x}_0) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_0)$$

$$\langle \psi | \rho(\vec{x}_0) | \psi \rangle = \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 \delta(\vec{x} - \vec{x}_0)$$

$$= |\psi(\vec{x}_0)|^2 = \overline{\psi(\vec{x}_0)} \psi(\vec{x}_0)$$

Also:

$$\hat{\rho}(\vec{x}_0) = \overline{\psi(\vec{x}_0)} \psi(\vec{x}_0).$$

2) Kinetische Energie: 1-Top

$$T = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

$$\langle \psi | T | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \overline{\psi(\vec{x})} (\Delta \psi)(\vec{x})$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \overline{\vec{\nabla} \psi(\vec{x})} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x})$$

Also:

$$\hat{T} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \overline{\vec{\nabla} \psi(\vec{x})} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x})$$

3) Paarwechselwirkung: 2-T. op.

$$W(\vec{x}-\vec{y})$$

$$\langle \psi | W | \psi \rangle = \int d^3x d^3y \overline{\psi(\vec{x}, \vec{y})} W(\vec{x}-\vec{y}) \psi(\vec{x}, \vec{y})$$

Also

$$\hat{W} = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \psi^*(\vec{y}) \psi^*(\vec{x}) W(\vec{x}-\vec{y}) \psi(\vec{x}) \psi(\vec{y})$$

Anwendung: Der Vielteilchen-Hamiltonoperator

$$H = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{x}_i) \right) + \sum_{i < j}^n W(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$$

ist auch

$$H = \int d^3x \left(\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) + \psi^*(\vec{x}) V(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \right) \\ + \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \psi^*(\vec{y}) \psi^*(\vec{x}) W(\vec{x}-\vec{y}) \psi(\vec{x}) \psi(\vec{y})$$

Freie Teilchen im Quantisierungsvolumen $[0, L]^3$, ($V=L^3$):

- 1-Teilchenzustände (Basis) $|\varphi_{\vec{k}, s}\rangle$

$$\langle \vec{x}, s | \varphi_{\vec{k}, s'} \rangle = \delta_{ss'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad \left(\vec{k} \in \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}^3, s=\pm \right)$$

- Zweite Quantisierung

$$\text{Basis } |\varphi_{\vec{k}, s}\rangle \longrightarrow a_{\vec{k}, s}$$

$$\text{Basis } |\zeta\rangle = |\vec{x}, s\rangle \longrightarrow \Psi(\zeta)$$

$$\Psi(\vec{x}, s) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} a_{\vec{k}, s}$$

"Feldoperator"