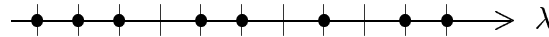


**Besetzungszahl-Darstellung**  $\equiv$  "Zweite Quantisierung"  
für Systeme identischer Fermionen

Das System (spezifiziert durch Potentiale, Felder, Randbedingungen) enthalte zunächst nur ein Teilchen. Wähle eine Basis  $\varphi_\lambda(1)$  dieses  $N=1$ -Sektors des Hilbertraumes. Meist kann man (muß aber nicht) das VONS der  $H$ -Eigenfunktionen verwenden ( $N=1$ : keine Ww.), und oft ist überdies  $\lambda = n, s$  oder  $\vec{k}, s$  und  $1 = \vec{r}_1, \sigma_1$ . Gebe den Quantenzahlen  $\lambda$  (willkürlich) eine Reihenfolge:



und werfe  $N$  Kugeln auf die vertikalen "Gedankenstriche" (höchstens eine pro Strich):

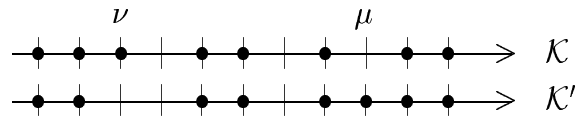


Jeder so erhaltenen Konfiguration  $\mathcal{K}$  entspricht eindeutig eine Slater-Determinante  $\langle 1, 2, \dots, N | \lambda_1, \dots, \lambda_N \rangle =: \langle r | \mathcal{K} \rangle$ . Die  $\langle r | \mathcal{K} \rangle$  bilden eine Basis des  $N$ -Teilchen-Hilbertraumes.

**I. Darstellungswechsel** von Ortsdarstellung ( $\langle r | \dots$ ) in "Slater-Determinanten-Darstellung" ( $\langle \mathcal{K} | \dots$ ) heißt bekanntlich, die durch  $\langle r | \rangle = \langle r | \mathcal{K} \rangle \langle \mathcal{K} |$  eingeführten Koeffizienten  $\langle \mathcal{K} |$  als Informationsträger anzusehen und sich die Wirkungsweise interessierender Operatoren (auf diese) auszurechnen:  $\langle \mathcal{K} | \hat{A} | \rangle = \langle \mathcal{K} | \hat{A} | \mathcal{K}' \rangle \langle \mathcal{K}' | \rangle$ ,  $\langle \mathcal{K} | \hat{A} | \mathcal{K}' \rangle = \langle \mathcal{K} | r \rangle \cdot \langle r | \hat{A} | \mathcal{K}' \rangle = \langle \mathcal{K} | r \rangle A \langle r | \mathcal{K}' \rangle$ . Sei  $A$  ein Einteilchen-Operator, d.h.  $A = \sum_{j=1}^N A_j$  :

$$\langle \mathcal{K} | \hat{A} | \mathcal{K}' \rangle = \frac{1}{N!} \int^N [\sum_P (-)^P \varphi_{\lambda_1}(P1) \dots \varphi_{\lambda_N}(PN)]^* \sum_{j=1}^N A_j [\sum_{P'} (-)^{P'} \varphi_{\lambda'_1}(P'1) \dots \varphi_{\lambda'_N}(P'N)]$$

- Alle Terme der  $P$ -Summe geben gleichen Beitrag (wegen Antisymmetrie des Restintegranden); wähle  $P = I$ ; d.h.  $Pk = Ik = k$ ; und lasse  $\frac{1}{N!}$  weg.
- Betrachte einen  $A_j$ -Term: wegen  $\varphi$ -Orthogonalität ist entweder  $\mathcal{K} = \mathcal{K}'$  oder sie unterscheiden sich nur durch Umsetzen eines Punktes auf der  $\lambda$ -Achse:



- Wenn  $\mathcal{K} \neq \mathcal{K}'$ , dann kommen – bis auf  $\varphi_\nu$  – alle  $\varphi_{\lambda_k}$  von  $[ ]^*$  auch in der rechten Klammer vor und müssen dort wegen  $\varphi$ -Orthogonalität gleiches Argument haben: die  $P'$ -Summe reduziert sich auf einen Term.
- Aus  $\sum A_j$  überlebt nur ein Term. Er verhindert das Verschwinden des restlichen Integrals.
- Von  $(-)^{P'}$  bleiben soviele  $(-1)$ -en übrig wie Kugeln zwischen  $\nu$  und  $\mu$  liegen. – Resultat:

$$\left. \begin{aligned} \langle \mathcal{K} | \hat{A} | \mathcal{K} \rangle &= \sum_{\nu=1}^N A_{\nu\nu} & ; & \quad A_{\nu\mu} := \int_1 \varphi_\nu^*(1) A_1 \varphi_\mu(1) \\ \langle \mathcal{K} | \hat{A} | \mathcal{K}' \rangle &= (-1)^{Z_{\nu\mu}} \cdot A_{\nu\mu} & \text{für } \mathcal{K}' = \mathcal{K} \{ \nu \text{ geleert und } \mu \text{ gefüllt} \} \\ &\text{Null sonst ; } Z_{\nu\mu} := \text{Zahl der Kugeln zwischen } \nu \text{ und } \mu \end{aligned} \right\} \quad (\text{B. 1})$$

**II. Fermi-Operatoren**  $b, b^\dagger$  (QFT-Notation, Bose-Opn. heißen  $a$ ) operieren im vollen Hilbertraum HR (aller  $N$ -Teilchen-Sektoren;  $\mathcal{K}_N :=$  Konfiguration im  $N$ -Sektor) wie folgt:

$$\left. \begin{aligned} \text{Definition: } \langle \mathcal{K} | b_\nu | \mathcal{K}' \rangle &= (-1)^{Z_\nu}, \text{ wenn } \mathcal{K} = \mathcal{K}' \{ \nu \text{ nicht besetzt} \} \text{ und } \mathcal{K}' = \mathcal{K}'_{N+1} = \{ \mathcal{K} + \\ &+ \text{ eine weitere Kugel auf } \nu \} ; \text{ Null sonst ; } Z_\nu := \text{Zahl der Kugeln unterhalb } \nu \end{aligned} \right\} \quad (\text{B. 2})$$

$$\text{Mit dieser } \mathcal{K}\text{-}\mathcal{K}'\text{-Bedeutung ist } \langle \mathcal{K} | b_\nu | \mathcal{K}' \rangle = \langle \mathcal{K}' | b_\nu^\dagger | \mathcal{K} \rangle^* = (-1)^{Z_\nu} = \langle \mathcal{K}' | b_\nu^\dagger | \mathcal{K} \rangle \quad (\text{B. 3})$$

$$\text{Aus (B. 1), (B. 2), (B. 3) folgt, daß } \langle \mathcal{K} | \hat{A} | \mathcal{K}' \rangle = \langle \mathcal{K} | \sum_{\nu,\mu} A_{\nu\mu} b_\nu^\dagger b_\mu | \mathcal{K}' \rangle$$

$$\text{für alle } \mathcal{K}, \mathcal{K}' \text{ gilt, und somit die Operatoridentität } \hat{A} = \sum_{\nu,\mu} A_{\nu\mu} b_\nu^\dagger b_\mu \quad (\text{B. 4})$$

$$\text{Mittels (B. 2) und (B. 3) zeigt man : } \{ b_\nu, b_\mu \} = 0, \{ b_\nu^\dagger, b_\mu^\dagger \} = 0, \{ b_\nu, b_\mu^\dagger \} = \delta_{\nu,\mu} \quad (\text{B. 5})$$

Die Operatoralgebra (B. 5) führt bekanntlich auf die Eigenwerte 0 und 1 von  $b_\nu^\dagger b_\nu$ , sowie auf  $b_\nu | 0 \rangle_\nu = 0, b_\nu^\dagger | 0 \rangle_\nu = | 1 \rangle_\nu, b_\nu | 1 \rangle_\nu = | 0 \rangle_\nu, b_\nu^\dagger | 1 \rangle_\nu = 0$ . Hiermit können wir das HR-Vakuum  $| 0 \rangle$  definieren,  $| \mathcal{K} \rangle$  durch  $b^\dagger$ -Anwendungen erhalten und den allge-

meinen  $N$ -Teilchen-Zustand  $| \rangle$  aufschreiben :

$$\left. \begin{aligned} |0\rangle &:= \prod_{\nu=1}^{\infty} |0\rangle_{\nu} , \quad |\mathcal{K}\rangle = b^{\dagger}_{\lambda_1} \cdot \dots \cdot b^{\dagger}_{\lambda_N} |0\rangle = \left\{ \begin{array}{l} \text{automatisch antisymmetrisch} \\ \text{zwei } \lambda; \text{ und } 0, \text{ wenn zwei } \lambda \text{ gleich} \end{array} \right\} , \\ | \rangle &= \sum_{\lambda_1} \dots \sum_{\lambda_N} c_{\lambda_1 \dots \lambda_N} b^{\dagger}_{\lambda_1} \cdot \dots \cdot b^{\dagger}_{\lambda_N} |0\rangle \end{aligned} \right\} \quad (\text{B. 6})$$

Wir können nun einen Operator  $\hat{N}$  angeben, den Teilchenzahl-Operator, welcher die im Zustand  $|\mathcal{K}\rangle$  enthaltenen "Kugeln" abzählt:  $\hat{N} := \sum_{\lambda} b^{\dagger}_{\lambda} b_{\lambda}$ . (B. 7)

Der einfachste Spezialfall von (B. 4) ergibt sich, wenn  $A = H_o = \sum_{j=1}^N H_j$  und die  $\varphi_{\lambda}(1)$  als Eigenfunktionen von  $H_1$  gewählt wurden:  $H_1 \varphi_{\lambda}(1) = \epsilon_{\lambda} \varphi_{\lambda}(1) \Rightarrow (H_o)_{\nu\mu} = \epsilon_{\nu} \delta_{\nu\mu}$  und somit  $\hat{H}_o = \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} b^{\dagger}_{\lambda} b_{\lambda} =: \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} \hat{N}_{\lambda}$  (B. 8)  
(zu vergleichen mit  $\hbar\omega(\frac{1}{2} + \hat{N})$ ,  $\hat{N} = a^{\dagger}a$ , beim 1D harmon. Oszillator).

**III. Feldoperator  $\Psi$  ; Definition:**  $\Psi(1) := \sum_{\lambda} \varphi_{\lambda}(1) b_{\lambda}$  (B. 9)

Der Nutzen dieser Definition zeigt sich u.a. darin, daß wir nun Einteilchen-Operatoren und Zweiteilchen-Operatoren in der folgenden eingängigen "zweitquantisierten"

Form aufschreiben können:  $A = \sum_{j=1}^N A_j \longrightarrow \hat{A} = \int_1 \Psi^{\dagger}(1) A_1 \Psi(1)$  (B. 10)

$$V = \sum_{j<l}^N V_{jl} \longrightarrow \hat{V} = \frac{1}{2} \int_1 \int_2 \Psi^{\dagger}(1) \Psi^{\dagger}(2) V_{12} \Psi(2) \Psi(1) \quad (\text{B. 11})$$

Um (B. 10) zu verifizieren, setze man (B. 9) ein; Resultat: (B. 4). Wer (B. 10) herleiten will, löse zuerst (B. 9) nach  $b$  auf (mit  $\varphi_{\nu}^*(1)$  multiplizieren, über 1 integrieren,  $\varphi_{\lambda}$ -Orthonormierung benutzen)  $\Rightarrow b_{\nu} = \int_1 \varphi_{\nu}^*(1) \Psi(1)$  (B. 12)  
und setze die Umkehrung (B. 12) in (B. 4) ein. Um (B. 11) zu erhalten, schreiben wir zunächst  $\sum_{j<l}^N V_{jl} = \frac{1}{2} \sum_j \sum_l V_{jl}$ ,  $V_{j=l} := 0$ , zweitquantisieren die Abhängigkeit von  $l$ ,  $\frac{1}{2} \sum_j \int_2 \Psi^{\dagger}(2) V_{j2} \Psi(2)$ , und verfahren nun ebenso mit der Abhängigkeit von  $j$ . Mittels (B. 9) oder (B. 12) übersetzen sich die Vertauschungsrelationen (B. 5) in

$$\{\Psi(1), \Psi(2)\} = 0 \quad , \quad \{\Psi(1), \Psi^{\dagger}(2)\} = \delta(1-2) \quad (\text{B. 13})$$

Nun, nachdem alle Herleitungen verdaut sind, benötigt man nur noch die Gleichungen (B. 9) bis (B. 13)  $\Rightarrow$  merken! Der Teilchenzahloperator, vgl. (B. 7) mit (B. 4), führt auf den Trivialfall  $A_1 \equiv 1$  von (B. 10):  $\hat{N} = \int_1 \Psi^{\dagger}(1) \Psi(1)$  (B. 14)

" $\Psi^{\dagger}(1)$  erzeugt ein Teilchen bei 1", sagen manche Leute. - ? - Sei 1 eine feste Position (wir denken an Ortsvektor), während die Variable 2 den Raum absucht:

$$\begin{aligned} \langle 2 | \Psi^{\dagger}(1) | 0 \rangle &= \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^*(1) \sum_{\mathcal{K}} \langle 2 | \mathcal{K} \rangle \langle \mathcal{K} | b_{\nu}^{\dagger} | 0 \rangle \quad (\Rightarrow \mathcal{K} = \mathcal{K}_{N=1} =: b_{\nu}^{\dagger} | 0 \rangle) \\ &= \sum_{\nu, \mu} \varphi_{\nu}^*(1) \langle 2 | b_{\mu}^{\dagger} | 0 \rangle \langle 0 | b_{\mu} b_{\nu}^{\dagger} | 0 \rangle = \sum_{\nu, \mu} \varphi_{\nu}^*(1) \varphi_{\mu}(2) \delta_{\nu\mu} = \delta(2-1) \quad , \quad - \text{Ja!} \end{aligned}$$

"Quantisierung des Schrödinger-Feldes" - ? - : Der Feldoperator löst die Schrödinger-Gleichung:  $(i\hbar\partial_t - H_1) \Psi(1; t) = \sum_{\lambda} (i\hbar\partial_t - H_1) \varphi_{\lambda}(1; t) b_{\lambda} = 0$ .

**IV. Elektronen :**  $H = \sum_{j=1}^N (-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j) + \sum_{j<l}^N V(\vec{r}_j - \vec{r}_l)$ . Nun ist  $1 = \vec{r}, \sigma$ .

Wir wählen als Einteilchenbasis die  $H_1$ -Eigenfunktionen  $\varphi_{\lambda}(1) = \delta_{s, \sigma} \cdot (\frac{1}{2\pi})^{\frac{3}{2}} e^{i \vec{k} \vec{r}}$   
 $\Rightarrow \Psi(1) = \sum_s \int d^3k \delta_{s, \sigma} (\frac{1}{2\pi})^{\frac{3}{2}} e^{i \vec{k} \vec{r}} b_{\vec{k}\sigma} = (\frac{1}{2\pi})^{\frac{3}{2}} \int d^3k e^{i \vec{k} \vec{r}} b_{\vec{k}\sigma} =: \Psi_{\sigma}(\vec{r})$   
(B. 10) :  $\hat{H}_o = \sum_{\sigma} \int d^3k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} b_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} b_{\vec{k}\sigma}$ ,  $\hat{N} = \int d^3r \hat{\rho}$ ,  $\hat{\rho} = \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{\sigma}(\vec{r})$  (B. 15)  
 $\hat{\rho}$  ist der Operator der Teilchendichte. (B. 11) :

$$\left. \begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \Psi_{\sigma_1}^{\dagger}(\vec{r}_1) \Psi_{\sigma_2}^{\dagger}(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \Psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \Psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3k_1 \int d^3k_2 (\frac{1}{2\pi})^3 \int d^3q \tilde{V}(\vec{q}) \sum_{\sigma_1 \sigma_2} b_{\vec{k}_1 \sigma_1}^{\dagger} b_{\vec{k}_2 \sigma_2}^{\dagger} b_{\vec{k}_2 + \vec{q} \sigma_2} b_{\vec{k}_1 - \vec{q} \sigma_1} \end{aligned} \right\} \quad (\text{B. 16})$$