Zweite Quantisierung

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

$$F = F_0 + \delta \langle V \rangle_0 - \frac{\delta^2}{2} \sum_{n,n'} |\langle n | V - \langle V \rangle_0 | n' \rangle|^2 \frac{W_{n'} - W_n}{E_{n'} - E_n}$$

Kompliziert

Für viele identische Teilchen braucht man 2-te Q.

Bosonen und Fermionen, Spin-Statistik Theor. S-halb-Ferm

S-ganz Bosonen

$|i\rangle = \varphi_i(x)$ i = Zustand $\varphi_i(\vec{r}) \longrightarrow \varphi_i(\underbrace{\vec{r}, \sigma}_{x})$

1-Teilchen zustände

z.B. $\phi_{\vec{k},1}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \delta_{\sigma,1}$ Im Kasten $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$

Viele Teilchen: Bosonen N Teilchen

N_i $\sum_i N_i = N$

$$|N_1, N_2, \ldots, N_i, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p \varphi_{p_1}(x)\, \varphi_{p_2}(x) \ldots \varphi_{p_N}(x)$$

p - Legitime Permutationen (nur verschiedene Zustände)

Ein-Teilchen Operatoren

$$\cancel{-i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}_s}}$$

$$\vec{P} = \sum_{n=1}^{N} -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}_n}$$

Erlaubt: $\boxed{\hat{F}^{(1)} = \sum_n f^{(1)}_{x_n}}$ z.B.: $f^{(1)}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$, $f^{(1)}_x = \vec{r}$

$\langle N_1 \ldots N_i \ldots | \hat{F}^{(1)} | \tilde{N}_1 \ldots \tilde{N}_i \ldots \rangle = ?$ erlaubte Matrixelemente

---

Möglich $\langle N_1 \ldots N_i | \hat{F}^{(1)} | N_1 \ldots N_i \rangle$

oder $\langle \ldots N_i \ldots N_j - 1 \ldots | \hat{F}^{(1)} | \ldots N_i - 1 \ldots N_j \ldots \rangle = \sqrt{N_i N_j} \langle i | f^{(1)} | j \rangle$

(nur 1 Teilchen kann den Zustand wechseln)

$$\langle N_1 \ldots N_i | f^{(1)}_{x_1} | N_1 \ldots N_i \ldots \rangle = \frac{N_1! N_2! \ldots}{N!} \sum_p \langle P_1 | f_{x_1} | P_1 \rangle \langle P_2 | P_2 \rangle \ldots \langle P_N | P_N \rangle$$

$$= \langle 1 | f^{(1)} | 1 \rangle \frac{(N-1)!}{(N_1-1)!\, N_2! \ldots} \frac{N_1!\, N_2! \ldots}{N!} + \ldots$$

$$= \langle 1 | f^{(1)} | 1 \rangle \frac{N_1}{N} + \langle 2 | f^{(1)} | 2 \rangle \frac{N_2}{N} + \ldots$$

$$= \sum_i \frac{N_i}{N} \langle i | f^{(1)} | i \rangle$$

$$\langle N_i \; N_{j-1} \ldots | f_{x_1} | \ldots N_{i-1} \ldots N_j \ldots \rangle$$

$$= \langle P_1 | f | \tilde{P}_1 \rangle \langle P_2 | \tilde{P}_2 \rangle \ldots \langle P_N | \tilde{P}_N \rangle \sqrt{\frac{N_1! \ldots}{N!}} \sqrt{\frac{\tilde{N}_1! \ldots}{N!}}$$

$$= \langle i | f^{(1)} | j \rangle \frac{\sqrt{\ldots N_i! \ldots (N_j-1)! \ldots}}{\sqrt{N!}} \frac{\sqrt{\ldots (N_i-1)! \ldots N_j!}}{\sqrt{N!}} \frac{(N-1)!}{\ldots (N_i-1)!\,(N_j-1)!}$$

$$= \frac{\sqrt{N_i N_j}}{N} \langle i | f^{(1)} | j \rangle$$

Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren

$$a_i |\ldots N_i \ldots\rangle = \sqrt{N_i}\, |\ldots N_i - 1 \ldots\rangle \; ; \quad a_i^+ |\ldots N_i - 1 \ldots\rangle = \sqrt{N_i}\, |\ldots N_i \ldots\rangle$$

$$\langle \ldots N_i \ldots | a_i^+ | \ldots N_i - 1 \ldots \rangle = \sqrt{N_i} = \langle \ldots N_i - 1 \ldots | a_i | \ldots N_i \ldots \rangle$$

$$\underbrace{a_i^+ a_i}_{\hat{N}_i} |\ldots N_i \ldots\rangle = a_i^+ \sqrt{N_i}\, |\ldots N_i - 1 \ldots\rangle = N_i\, |\ldots N_i \ldots\rangle$$

$$a_i a_i^+ |\ldots N_i \ldots\rangle = (N_i + 1)\, |\ldots N_i \ldots\rangle$$

$$[a_i, a_i^+] = (a_i a_i^+ - a_i^+ a_i) = 1 \qquad [a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \qquad [a_i, a_j] = 0$$

$$[a_i^+, a_j^+] = 0$$

$$|00 \ldots N_i \ldots 0\rangle = |N_i\rangle = \frac{(a_i^+)^{N_i}}{\sqrt{N_i!}}\, |0\rangle$$

Wichtig: $F^{(1)} = \sum_{ij} \langle i | f^{(1)} | j \rangle\, a_i^+ a_j$

2-Teilchen Operatoren

z.B. $U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = f^{(2)}$

$$f^{(2)} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\, \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \qquad f^{(2)}_{ab} = f^{(2)}_{x_1 x_2} = f^{(2)}(x_1, x_2)$$

$$\boxed{F^{(2)} = \sum_{a<b} f^{(2)}_{ab}}$$

Im 2-te Q: $F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{iklm} \langle ik | f^{(2)} | lm \rangle\, a_i^+ a_k^+ a_l a_m$

$$\langle ik | f^{(2)} | lm \rangle = \iint dx_1\, dx_2\, \varphi_i^*(x_1)\, \varphi_k^*(x_2)\, f^{(2)}_{x_1 x_2}\, \varphi_l(x_1)\, \varphi_m(x_2)$$

Beispiel $H = \underbrace{\sum_a \frac{p_a^2}{2m}}_{F^{(1)}} + \underbrace{\sum_{a<b} U(\vec{r}_a - \vec{r}_b)}_{F^{(2)}}$

2-te Quantisierung: $H = \sum_{ij} \frac{\langle i|\hat{p}^2|j\rangle}{2m} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{iklm} \langle ik|\hat{U}|lm\rangle a_i^\dagger a_k^\dagger a_l a_m$

(wenn $\hat{p}$ diagonal: $\langle i|\hat{p}^2|j\rangle = \hat{p}^2 \delta_{ij}$)

$|i\rangle = \frac{e^{ikr}}{\sqrt{2}}$