5.3 Fock-Raum und „zweite" Quantisierung [Schwabl 1.3,5]

Kapitel 5.1-2: Quadratische Lagrange-Funktion für ein Feld & Pfadintegralquantisierung
$\Rightarrow$ Zustände mit unbestimmter Anzahl von (freien) Teilchen.

Jetzt: Zustände mit **unterschiedlichen Teilchenzahlen** & kanonische Quantisierung
$\Rightarrow$ Hamilton-Operator als Funktion eines Feldoperators.

Zustände: Der Index j numeriere eine vollständige Menge von Einteilchenzuständen;
z.B. $j \leftrightarrow \vec{n}$ für Impulseigenzustände mit Eigenwerten $\vec{k} = 2\pi\left(\frac{n_1}{L_1}, \frac{n_2}{L_2}, \frac{n_3}{L_3}\right)$,
oder $j \leftrightarrow \vec{m}$ für Ortseigenzustände mit Eigenwerten $\vec{x} = a\,(m_1, m_2, m_3)$.

$n_1 = 0, 1, \ldots$ Bosonen im $|1\rangle$; n_j im $|j\rangle$; ... $=: |n_1, \ldots, n_j, \ldots\rangle$ („Besetzungszahl" n_j).

Überhaupt keine Teilchen $= |0, 0, \ldots\rangle =:$ Vakuumzustand $=: |0\rangle$.

Die definierten Zustände spannen den „Fock-Raum" auf.

Orthonormierung: $\langle n_1, \ldots, n_j, \ldots | n_1', \ldots, n_j', \ldots \rangle = \delta_{n_1 n_1'} \cdots \delta_{n_j n_j'} \cdots$

Vollständigkeit: $\displaystyle\sum_{n_1, \ldots, n_j, \ldots} |n_1, \ldots, n_j, \ldots\rangle\langle n_1, \ldots, n_j, \ldots| = \hat{\mathbb{1}}$.

„Neue" Operatoren: „Erzeugungsoperator": $\hat{a}_j^+ |\ldots, n_j, \ldots\rangle := \sqrt{n_j + 1}\, |\ldots, n_j + 1, \ldots\rangle$.

„Vernichtungsoperator": $\hat{a}_j |\ldots, n_j, \ldots\rangle := \sqrt{n_j}\, |\ldots, n_j - 1, \ldots\rangle$, $n_j \geq 1$.

Behauptungen: $\hat{a}_j^+ = (\hat{a}_j)^+$; $\hat{a}_j = (\hat{a}_j^+)^+$.

Beweis (1. Behauptung):

$$\begin{aligned}\langle \ldots n_j \ldots | (\hat{a}_j)^+ | \ldots n_j' \ldots \rangle &= \left(\langle \ldots n_j' \ldots | \hat{a}_j | \ldots n_j \ldots \rangle\right)^+ \\ &= \left(\sqrt{n_j}\, \langle \ldots n_j' \ldots | \ldots n_j - 1 \ldots \rangle\right)^+ \\ &= \sqrt{n_j}\, \delta_{n_j', n_j - 1} = \sqrt{n_j' + 1}\, \delta_{n_j + 1, n_j'} \Rightarrow \blacksquare .\end{aligned}$$

Bemerkung: $\hat{a}_j |\ldots, 0, \ldots\rangle = 0$. ← kein Vakuumzustand sondern Nullvektor!

Folge: $|n_1, \ldots, n_j, \ldots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_j}}\, \hat{a}_j^+ |n_1, \ldots, n_j - 1, \ldots\rangle = \ldots = \frac{1}{\sqrt{n_1! \cdots n_j! \cdots}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} \cdots (\hat{a}_j^+)^{n_j} \ldots |0\rangle$.

Vertauschungen: $[\hat{a}_j, \hat{a}_k] = [\hat{a}_j^+, \hat{a}_k^+] = 0$, $[\hat{a}_j, \hat{a}_k^+] = \delta_{jk}$

($[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{q}}^+] := \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{q})$ im Kontinuumlimes, wobei es hier unterschiedliche Normierungskonventionen gibt.)

Beweis (3. Behauptung):

$$\hat{a}_j \hat{a}_k^+ |\ldots n_j n_k \ldots\rangle = \sqrt{n_k + 1}\, \hat{a}_j |\ldots n_j, n_k + 1 \ldots\rangle = \begin{cases} \sqrt{n_j}\sqrt{n_k + 1}\, |\ldots n_j - 1, n_k + 1 \ldots\rangle, & k \neq j \\ (n_k + 1)\, |\ldots n_j, n_k \ldots\rangle, & k = j \end{cases}$$

$$\hat{a}_k^+ \hat{a}_j |\ldots n_j, n_k \ldots\rangle = \sqrt{n_j}\, \hat{a}_k^+ |\ldots n_j - 1, n_k \ldots\rangle = \begin{cases} \sqrt{n_j}\sqrt{n_k + 1}\, |\ldots n_j - 1, n_k + 1 \ldots\rangle, & k \neq j \\ n_k\, |\ldots n_j, n_k \ldots\rangle, & k = j \end{cases}$$

Subtrahiere $\Rightarrow \blacksquare$.

„Alte" Operatoren:

Wir definieren zuerst einen Besetzungszahloperator für den Zustand j wie beim harmonischen Oszillator:

$$\hat{n}_j := \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$$

$$\hat{n}_j |\ldots n_j \ldots\rangle = \hat{a}_j^\dagger \sqrt{n_j} |\ldots n_j - 1 \ldots\rangle = n_j |\ldots n_j \ldots\rangle .$$

Folglich:

Gesamtteilchenzahloperator $= \hat{N} := \sum_j \hat{n}_j = \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$;

$$\hat{N} |\ldots n_j \ldots\rangle = \Big(\sum_j n_j\Big) |\ldots n_j \ldots\rangle .$$

Falls die Basiszustände j Eigenzustände des Einteilchen-Hamilton-Operators mit Energie-Eigenwerten E_j sind, können wir dann einen („freien") Hamilton-Operator definieren:

$$\boxed{\hat{H}_0 := \sum_j E_j \hat{n}_j} .$$

zählt Teilchen

ihre Energie

Check:

Eine nützliche Beziehung: $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$.

$$\Rightarrow \quad [\hat{H}_0, \hat{a}_k] = \sum_j E_j [\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k] = \sum_j E_j \Big\{ \hat{a}_j^\dagger \underbrace{[\hat{a}_j, \hat{a}_k]}_{0} + \underbrace{[\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k]}_{-\delta_{jk}} \hat{a}_j \Big\} = -E_k \hat{a}_k ,$$

$$[\hat{H}_0, \hat{a}_k^\dagger] = \sum_j E_j [\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \sum_j E_j \Big\{ \hat{a}_j^\dagger \underbrace{[\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger]}_{\delta_{kj}} + \underbrace{[\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger]}_{0} \hat{a}_j \Big\} = +E_k \hat{a}_k^\dagger .$$

Sei $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand von $\hat{H}_0$, mit Energie E_ψ

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{H}_0 \hat{a}_k |\psi\rangle = (\hat{a}_k \hat{H}_0 + [\hat{H}_0, \hat{a}_k]) |\psi\rangle = (\hat{a}_k E_\psi - E_k \hat{a}_k) |\psi\rangle = (E_\psi - E_k) \hat{a}_k |\psi\rangle , \\ \hat{H}_0 \hat{a}_k^\dagger |\psi\rangle = (\hat{a}_k^\dagger \hat{H}_0 + [\hat{H}_0, \hat{a}_k^\dagger]) |\psi\rangle = (\hat{a}_k^\dagger E_\psi + E_k \hat{a}_k^\dagger) |\psi\rangle = (E_\psi + E_k) \hat{a}_k^\dagger |\psi\rangle . \end{cases}$$

Also, wie erwartet, $\hat{a}_k|\psi\rangle$ enthält ein Teilchen weniger, hat deshalb auch entsprechend weniger Energie.

Zeitentwicklung:

Dirac-Bild (Seite 6): $\quad i\hbar \partial_t \hat{A}_I = [\hat{A}_I, \hat{H}_0]$.

Bezeichne $E_k =: \hbar \omega_k$.

$$\Rightarrow \quad i \partial_t \hat{a}_{k,I}(t) = \frac{1}{\hbar} [\hat{a}_{k,I}, \hat{H}_0] = -\frac{1}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{a}_{k,I}] = \omega_k \hat{a}_{k,I}(t)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\hat{a}_{k,I}(t) = \hat{a}_k e^{-i\omega_k t}}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\hat{a}_{k,I}^\dagger(t) = \hat{a}_k^\dagger e^{i\omega_k t}}$$

Verallgemeinerte Operatoren: Summe über Teilchen, nicht Zustände! ($N = \sum_j n_j$)

Sei $\hat{T} = \sum_{\alpha=1}^{N} \hat{t}_\alpha$ ein Einteilchenoperator, der nicht unbedingt diagonal in der gewählten Basis ist (z.B. $\hat{T} = \sum_{\alpha=1}^{N} V(\hat{\vec{x}}_\alpha)$ in der Impulsbasis).
Dann gilt (Verallgemeinerung vom Ausdruck von $\hat{H}_0$!):

$$\boxed{\hat{T} = \sum_{j,k} \hat{a}_j^+ \langle j|\hat{t}|k\rangle \hat{a}_k}\,.$$

nehme Teilchen
lasse etwas passieren
frei wieder

Bemerkung 1: formeller Beweis ist mühsam (vgl. Schwabl 1.3) und wird hier nicht gegeben; in der Praxis benutzen wir nur den diagonalen Fall wie beim $\hat{H}_0$.

Bemerkung 2: Verallgemeinerung auf Zweiteilchenoperatoren wie $V(|\hat{\vec{x}}_\alpha - \hat{\vec{x}}_\beta|)$:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{j,k,l,m} \hat{a}_j^+ \hat{a}_k^+ \langle j,k|\hat{f}|l,m\rangle \hat{a}_m \hat{a}_l\,.$$

(genauer in Aufgabe 11.2)

Basiswechsel: $\{j\} \to \{\lambda\}$, z.B. $\{\vec{k}\} \to \{\vec{x}\}$.

Bei Einteilchenzuständen gilt: $|\lambda\rangle = \hat{1}|\lambda\rangle = \sum_j |j\rangle\langle j|\lambda\rangle$.

In der Fock-Raum-Notation gilt: $|\lambda\rangle = \hat{a}_\lambda^+|0\rangle$, $|j\rangle = \hat{a}_j^+|0\rangle$.

$$\Rightarrow \boxed{\hat{a}_\lambda^+ = \sum_j \hat{a}_j^+ \langle j|\lambda\rangle \quad ; \quad \hat{a}_\lambda = \sum_j \langle \lambda|j\rangle \hat{a}_j}\,.$$

Feldoperatoren: Seite 10: bei Normierung $\langle \vec{k}|\vec{q}\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{q}}$ bzw. $\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{q})$

ist $\langle \vec{x}|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ bzw. $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$.

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{\phi}^+(\vec{x}) := \hat{a}_{\vec{x}}^+ = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} & \text{bzw.} \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \\ \hat{\phi}(\vec{x}) := \hat{a}_{\vec{x}} = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} & \text{bzw.} \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3}} \hat{a}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \end{cases}$$

Kinetische Energie:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}}^+ \delta_{\vec{k},\vec{q}} \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}}$$

$\delta_{\vec{k},\vec{q}} = \frac{1}{V}\int_V d^3\vec{x}\, e^{i(\vec{k}-\vec{q})\cdot\vec{x}}$

$$= \int_V d^3\vec{x} \sum_{\vec{q}} \frac{\hat{a}_{\vec{q}}^+}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \left(-\frac{\hbar^2\nabla_{\vec{x}}^2}{2m}\right) \sum_{\vec{k}} \frac{\hat{a}_{\vec{k}}}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$= \int_V d^3\vec{x}\, \hat{\phi}^+(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right) \hat{\phi}(\vec{x})\,.$$

Einteilchenpotential: benutze diesmal direkt die $\vec{x}$-Basis!

$$\hat{V} = \int_V d^3\vec{x}\, \hat{a}_{\vec{x}}^+ V(\vec{x}) \hat{a}_{\vec{x}} = \int_V d^3\vec{x}\, \hat{\phi}^+(\vec{x}) \big(V(\vec{x})\big) \hat{\phi}(\vec{x})\,.$$

Vergleich mit Kap. 5.2

(i) Seite 70: klassische Wellenlösung: $\phi(\vec{x},t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega(\vec{k})}} \left\{ a(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\cdot\vec{x}} + a^*(\vec{k}) e^{i\omega(\vec{k})t - i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right\}$.

Seiten 72-73 ⇒ Dirac-Bild-Operatoren: $\hat{\phi}_I(\vec{x},t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3}} \hat{a}_{\vec{k}} \, e^{-i\omega_{\vec{k}} t + i\vec{k}\cdot\vec{x}}$; $\hat{\phi}_I^+(\vec{x},t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \, e^{i\omega_{\vec{k}} t - i\vec{k}\cdot\vec{x}}$.

(ii) Seite 68: Lagrange-Funktion: $L = \int_V d^3\vec{x} \, \frac{1}{2}\phi(\vec{x},t) \left\{ -\partial_t^2 + c^2\nabla^2 - \omega_0^2 \right\} \phi(\vec{x},t)$.
(nach partieller Integration)

Seite 73: Hamilton-Operator: $\hat{H} = \int_V d^3\vec{x} \; \hat{\phi}^+(\vec{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{x}) \right\} \hat{\phi}(\vec{x})$.

(Diesen müßten wir pfadintegralquantisieren, um mit L vergleichen zu können!
Ohne Beweis (vgl. Kap. 5.4): $L = \int_V d^3\vec{x} \; \phi^*(\vec{x},t) \left\{ i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - V(x) \right\} \phi(\vec{x},t)$.)

(i) & (ii) ⇒ Ähnlich aber nicht gleich (reell / komplex; $-\partial_t^2 / i\hbar\partial_t$; ...); mehr dazu im Kapitel 7!
Auf jeden Fall gibt es „Felder" auf beiden Seiten.

Warum „zweite Quantisierung"?

Gesamtteilchenzahloperator (Seite 72): $\hat{N} = \sum_j \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \overset{\vec{x}\text{-Basis}}{\downarrow}{=} \int_V d^3\vec{x} \; \hat{\phi}^+(\vec{x}) \hat{\phi}(\vec{x})$.

Impulsoperator (wie $\hat{H}_0$ auf Seite 73): $\hat{\vec{P}} = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hbar\vec{k} \, \hat{a}_{\vec{k}} = \int_V d^3\vec{x} \; \hat{\phi}^+(\vec{x}) (-i\hbar\nabla) \hat{\phi}(\vec{x})$

Strom := „Geschwindigkeitsoperator" := $\frac{\hat{\vec{P}}}{m} = \frac{\hbar}{im} \int_V d^3\vec{x} \; \hat{\phi}^+(\vec{x}) \nabla \hat{\phi}(\vec{x})$

$$= \frac{\hbar}{2im} \int_V d^3\vec{x} \left\{ -\nabla\hat{\phi}^+(\vec{x})\hat{\phi}(\vec{x}) + \hat{\phi}^+(\vec{x})\nabla\hat{\phi}(\vec{x}) \right\}$$

„partielle Integration"
$$= \int_V d^3\vec{x} \, \frac{\hbar}{m} \, „\mathrm{Im}" \left\{ \hat{\phi}^+(\vec{x}) \nabla \hat{\phi}(\vec{x}) \right\}.$$

Die Integranden sehen genau wie die Wahrscheinlichkeitsdichte ($|\psi|^2$) und die Stromdichte ($\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}(\psi^*\nabla\psi)$) der Einteilchenquantenmechanik aus, mit Ersatz Wellenfunktion $\psi \to$ Feldoperator $\hat{\phi}$.

Der Feldoperator $\hat{\phi}_H(\vec{x},t)$ erfüllt auch eine ähnliche partielle Differenzialgleichung wie $\psi(\vec{x},t)$ (vgl. Aufgabe 11.3).

Trotzdem bleibt die Physik unverändert*; der einzige Unterschied ist, dass wir jetzt den gesamten Fock-Raum auf einmal behandeln.
(Wenn es um ein System mit nur wenigen Teilchen geht, ist dies natürlich unnötig; bei sehr vielen Teichen $N \sim 10^{23}$ gibt es aber Vorteile.)

---

* z.B.: $\hat{N}|\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$.
$\uparrow$
normierter Einteilchenortseigenzustand.