

Dieses Dokument wurde von **Christian Buth** erstellt.

Es ist auf meinen Internetseiten unter

<http://www.Christian.Buth.mysite.de>

frei erhältlich.

Sollten Sie Probleme mit der Anzeige haben oder einen

Fehler entdecken, wenden Sie sich bitte an

cbuth@ix.urz.uni-heidelberg.de .

© 2000 Christian Buth. Dieser Text ist nach allen nationalen und internationalen Gesetzen urheberrechtlich geschützt. Das Verändern und anschließende Veröffentlichen unter meinem Namen ist verboten – auch auszugsweise. Das Veröffentlichen und Verbreiten unter einem anderen als meinem Namen ist nicht erlaubt. Das Dokument darf jedoch zu nichtkommerziellen Zwecken verbreitet und kopiert werden, sofern es unverändert bleibt. Kommerzielle Nutzung jeglicher Art – auch auszugsweise – ist nur mit einer schriftlichen Erlaubnis des Autors gestattet.

Feldquantisierung

von

ARMIN STEINKASSERER

und

CHRISTIAN BUTH

16.06.2000

Seminarvortrag im Theoretisch Physikalischen Seminar über Probleme der Quantenmechanik.

Dieses Material ist unter
<http://www.Christian.Buth.mysite.de>
erhältlich.

1 Motivation

1.1 Wohin soll es gehen?

Dieser Vortrag beschäftigt sich mit der **Quantisierung** des durch die quantenmechanische Wellenfunktion gegebenen Feldes. Dieser Vorgang wird auch als **zweite Quantisierung** bezeichnet, wobei man unter dem Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik die **erste Quantisierung** versteht. Letzterer Übergang geschieht durch die Ersetzung der klassischen Größen durch Operatoren. Um die Wellenfunktion zu quantisieren wird man den gleichen Weg beschreiten und sie durch einen Feldoperator ersetzen.

In diesem Vortrag wollen wir die Weiterentwicklung der nichtrelativistischen Quantenmechanik zur nichtrelativistischen **Quantenfeldtheorie** vollziehen.

1.2 Was leistet die Feldquantisierung

Die Feldquantisierung wird es ermöglichen **Erzeugung** und **Vernichtung** von Teilchen¹ zu beschreiben. Die Emission und Absorption von Photonen stellt die einfachste Anwendung, dar und liefert den zwingenden Grund für diesen Schritt.

2 Die FOCK-Darstellung

Sei ein vollständiges Orthonormalsystem $\{\phi_\mu\}$ von Einteilchenwellenfunktionen gegeben. Die ϕ_μ brauchen *nicht* notwendig Eigenfunktionen eines Einteilchenhamiltonoperators h zu sein.

Für $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$ *identische* Teilchen, wo n_i Teilchen durch ϕ_i beschrieben werden, wird durch

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \equiv |n_\mu\rangle \quad (1)$$

ein Vektor in der **Besetzungszahl** oder **FOCK-Darstellung** bezeichnet. Die Vektoren (1) spannen einen Hilbertraum auf.

Sofort sollen zwei Operatoren eingeführt werden. Der **Erzeugungsoperator** sei durch

$$a_i^\dagger |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i + 1, n_{i+1}, \dots\rangle \quad (2)$$

und der **Vernichtungsoperator** durch

$$a_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \begin{cases} \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i - 1, n_{i+1}, \dots\rangle & ; n_i \neq 0 \\ 0 & ; n_i = 0 \end{cases} \quad (3)$$

gegeben. Diese Operatoren werden auch mit dem Begriff **Leiteroperatoren** bezeichnet.

Das Prinzip dieser adjungierten Operatoren ist aus der Theorie des quantenharmonischen Oszillators wohlbekannt. Sie prägen dem Hilbertraum in der FOCK-Darstellung mittels der

¹Der Begriff *Teilchen* soll hier etwas weiter als üblich gefaßt sein und Quasiteilchen, wie Phononen mit einschließen.

für sie geltenden Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [a_\lambda, a_{\lambda'}] &= [a_\lambda^\dagger, a_{\lambda'}^\dagger] = 0 \\ [a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger] &= \delta_{\lambda\lambda'} \end{aligned} \quad (4)$$

eine fundamentale Struktur auf, deren Konsequenzen im Rest dieses Vortrages erläutert werden.

3 Feldoperatoren

Nun soll die FOCK-Darstellung verlassen werden und zur **Ortsdarstellung** gewechselt werden. Dieser Schritt wird durch die Entwicklungen

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \phi_i(\vec{x}) \quad \Psi^\dagger(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i^\dagger \phi_i^*(\vec{x}) \quad (5)$$

vollzogen. Wichtig zu bemerken ist, dass es sich bei den a_i, a_i^\dagger um Operatoren und bei den ϕ_i, ϕ_i^* um Funktionen handelt. $\Psi^\dagger(\vec{x})$ ist der **Erzeugungsoperator** eines um \vec{x} lokalisierten Teilchens, $\Psi(\vec{x})$ der entsprechende **Vernichtungsoperator**. Es gelten die **Umkehrtransformationen**

$$a_i = \int_V \Phi_i^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}) d^3x \quad a_i^\dagger = \int_V \Phi_i(\vec{x}) \Psi^\dagger(\vec{x}) d^3x. \quad (6)$$

Das die Relationen in Gleichung (5) stimmen, soll plausibel gemacht werden. Ein Teilchen kann durch den Erzeugungsoperator a_i^\dagger im Quantenzustand $\phi_i(\vec{x})$ geschaffen werden. Die Summe über alle möglichen Erzeugungszustände i mit den Ortskoeffizienten ϕ_i repräsentiert die Entwicklung des Feldoperators nach den Zuständen in der FOCK-Darstellung, da um den Ort \vec{x} natürlich Teilchen in *allen existierenden* Quantenzuständen erzeugt werden können. Es handelt sich bei diesem Basiswechsel um eine unitäre Transformation.

Die Gleichungen (6) können benutzt werden, um die Vertauschungsrelationen (4) in ihre Pendanten für die Feldoperatoren zu übersetzen. Man erhält

$$\begin{aligned} [\Psi(\vec{x}, t), \Psi(\vec{x}', t)] &= [\Psi^\dagger(\vec{x}, t), \Psi^\dagger(\vec{x}', t)] = 0 \\ [\Psi(\vec{x}, t), \Psi^\dagger(\vec{x}', t)] &= \delta(\vec{x} - \vec{x}') \end{aligned} \quad (7)$$

Dies sind bereits die **Quantisierungsbedingungen** für Bosonen.

4 Klassische Feldtheorie

Dieser Abschnitt beschäftigt sich *ausschließlich* mit der klassischen LAGRANGESchen und HAMILTONSchen Formulierung der **Kontinuumsmechanik**.

4.1 Lagrange Formalismus

Wir verwenden das **Prinzip der stationären Wirkung** (HAMILTONsches Prinzip), aus dem die Hamiltonfunktion gewonnen wird, die dann in die Sprache der Quantenmechanik übersetzt werden kann. Es gilt

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L[\Phi(\vec{x}, t), \dot{\Phi}(\vec{x}, t)] dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_V \mathfrak{L}[\Phi(\vec{x}, t), \Phi_k(\vec{x}, t), \dot{\Phi}(\vec{x}, t)] d^3x dt = 0, \quad (8)$$

mit den Bezeichnungen $\dot{\Phi}(\vec{x}, t) = \frac{\partial \Phi(\vec{x}, t)}{\partial t}$ und $\Phi_k(\vec{x}, t) = \frac{\partial \Phi(\vec{x}, t)}{\partial x_k}$ für $k = 1, 2, 3$.

Führt man nun die Variation aus, wobei dies in analoger Weise zu den vertrauten diskreten Systemen geschieht, so erhält man

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_V \left(\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \Phi} - \sum_{i=1}^3 \frac{d}{dx_k} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \Phi_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{\Phi}} \right) d^3x dt \delta \Phi = 0 \quad (9)$$

wobei

$$\frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \Phi} - \sum_{i=1}^3 \frac{d}{dx_k} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \Phi_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{\Phi}} = 0 \quad (10)$$

folgt. Dies sind die **Euler-Lagrange-Gleichungen** für ein Feld $\Phi(\vec{x}, t)$, ausgedrückt mit Hilfe der **Lagrangedichte** $\mathfrak{L}[\Phi(\vec{x}, t), \Phi_k(\vec{x}, t), \dot{\Phi}(\vec{x}, t)]$.

4.2 Hamilton Formalismus

Nun definieren wir analog zur Punktmechanik **kanonisch konjugierte Felder**

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{\Phi}}, \quad (11)$$

so dass wir über die **Legendre-Transformation**

$$H(\Phi(\vec{x}, t), \pi(\vec{x}, t)) = \int_V \mathfrak{H}[\Phi(\vec{x}, t), \Phi_k(\vec{x}, t), \dot{\Phi}(\vec{x}, t)] d^3x \quad (12)$$

$$= \int_V (\pi(\vec{x}, t) \dot{\Phi}(\vec{x}, t) - \mathfrak{L}) d^3x \quad (13)$$

zum **Hamiltonformalismus** übergehen können.

5 Das Schrödingerfeld als klassisches Feld

Der Ausdruck für die Hamiltonfunktion des vorigen Abschnitts kann nun benutzt werden um die Hamiltonfunktion für das **Schrödingerfeld** explizit zu berechnen, denn *das Schrödingerfeld ist ein klassisches Feld!*

Zuerst die gewohnte Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t). \quad (14)$$

Die Lagrangedichte, die beim Einsetzen in die Lagrangegleichungen auf die Schrödingergleichung führt lässt sich wie folgt schreiben

$$\mathcal{L} = i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \Psi^* \vec{\nabla} \Psi - V(\vec{x}, t) \Psi^* \Psi, \quad (15)$$

wobei $\Psi(\vec{x}, t)$, $\Psi^*(\vec{x}, t)$ als *unabhängige* Felder zu betrachten sind. Hier steckt *keinerlei* Tief-sinnigkeit dahinter, wir fordern von der Lagrangedichte nur, dass sie zu den klassischen Feldgleichungen führt.

Die kanonisch konjugierten Felder ergeben sich nach einfacher Differentiation der Lagrangedichte zu

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = i\hbar \Psi^*(\vec{x}, t) \quad \tilde{\pi}(\vec{x}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} \equiv 0. \quad (16)$$

An der letzten Gleichung sieht man, dass das zu $\Psi^*(\vec{x}, t)$ kanonisch konjugierte Feld $\tilde{\pi}(\vec{x}, t)$ identisch verschwindet. Daher liegen *nur zwei* voneinander unabhängige Felder $\Psi(\vec{x}, t)$ und $\pi(\vec{x}, t)$ vor.

Setzt man nun diese Ausdrücke in die oben gewonnene Gleichung für die Hamiltondichte ein so erhält man

$$\mathfrak{H} = \pi \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \Psi^* \vec{\nabla} \Psi + V(\vec{x}, t) \Psi^* \Psi, \quad (17)$$

wobei π durch $i\hbar \Psi^*$ ersetzt wurde. Die Hamiltonfunktion folgt so zu

$$H = \int_V \mathfrak{H} d^3x = \int_V \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t) \right) \Psi d^3x. \quad (18)$$

6 Feldquantisierung

6.1 Bosonen

Die Quantisierung erfolgt nun mittels Ersetzung der Felder durch Feldoperatoren

$$\Psi^*(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}, t) \quad \pi(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\pi}(\vec{x}, t) \quad \Psi(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\Psi}(\vec{x}, t). \quad (19)$$

Im folgenden sollen alle Ψ beziehungsweise π Operatoren sein und die Akzentuierung entfällt.

Der Hamiltonoperator lässt sich nun schreiben als

$$H = \int_V \Psi^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}, t) \right) \Psi d^3x = \int_V \Psi^\dagger \hat{H} \Psi d^3x \quad (20)$$

Wichtig ist in diesem Zusammenhang, dass \vec{x} *kein* Operator ist, sondern lediglich ein Parameter, der angibt an welchem Raumpunkt wir den Operator wirken lassen.

Da die Feldoperatoren zeitabhängig sind ist man offensichtlich im **Heisenbergbild** und es gelten die bekannten **Heisenberggleichungen**

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = [\Psi(\vec{x}, t), H] \quad i\hbar \frac{\partial \pi(\vec{x}, t)}{\partial t} = [\pi(\vec{x}, t), H]. \quad (21)$$

Nun sind noch geeignete Vertauschungsrelationen für die Felder vorzuschreiben, die sich auch aus dem kanonischen Formalismus ableiten ließen. Dazu müßte allerdings die Funktionalableitung eingeführt werden.

Über diese ließen sich dann die Poissonklammern der Felder berechnen und weiter über die Korrespondenzrelationen $\{\cdot, \cdot\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[\cdot, \cdot]$ die Kommutatoren einführen.

Wir verzichten hier aber bewußt darauf, da es sich nur um die Verwendung von mathematischen Formalismen handelt und außerdem auf die bereits aus der FOCK-Darstellung hergeleiteten Kommutatoren führt, womit auch gezeigt werden kann, dass beide Darstellungen äquivalent sind.

Wie wir schon in Gleichung (7) gesehen haben lauten die Kommutatoren für die Quantisierung eines Bosonenfeldes wie folgt

$$\begin{aligned} [\Psi(\vec{x}, t), \Psi(\vec{x}', t)] &= [\Psi^\dagger(\vec{x}, t), \Psi^\dagger(\vec{x}', t)] = 0 \\ [\Psi(\vec{x}, t), \Psi^\dagger(\vec{x}', t)] &= \delta(\vec{x} - \vec{x}') \end{aligned} \quad (22)$$

Nun können wir auch schon das Schrödingerfeld quantisieren, dazu setzen wir den Hamiltonoperator in die Heisenberggleichung ein und erhalten

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = [\Psi(\vec{x}, t), H] \quad (23)$$

$$= [\Psi(\vec{x}, t), \int_V \Psi^\dagger(\vec{x}', t) h(\vec{x}') \Psi(\vec{x}', t) d^3 x'] \quad (24)$$

$$= \int_V [\Psi(\vec{x}, t), \Psi^\dagger(\vec{x}', t)] h(\vec{x}') \Psi(\vec{x}', t) d^3 x' \quad (25)$$

$$= h(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t) \quad (26)$$

In Analoger Weise führen die selben Überlegungen für den Feldoperator Ψ^\dagger zur Schrödingergleichung in Operatorform.

Nun kann man versuchen die Feldoperatoren genau wie in der FOCK-Darstellung nach einem vollständigen Orthonormalsystem zu entwickeln

$$\Psi(\vec{x}, 0) = \sum_i a_i \Phi_i(\vec{x}) \quad \Psi^\dagger(\vec{x}, 0) = \sum_i a_i \Phi_i^*(\vec{x}), \quad (27)$$

andererseits muss auch gelten

$$a_i = \int_V \Phi_i^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, 0) d^3 x \quad a_i^\dagger = \int_V \Phi_i(\vec{x}) \Psi^\dagger(\vec{x}, 0) d^3 x. \quad (28)$$

Das vollständigen Orthonormalsystem ist gegeben durch

$$\int_V \Phi_i^*(\vec{x}) \Phi_j(\vec{x}) d^3x = \delta_{ij} \quad \sum_{i=1}^{\infty} \Phi_i(\vec{x}) \Phi_i^*(\vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (29)$$

Nun können wir eine Verbindung zwischen der Darstellung im FOCK-Raum und dieser abstrakten Darstellung konstruieren.

Da die a_i den Operatorcharakter der Feldoperatoren tragen und gezeigt werden kann, dass diese a_i mit den im FOCK-Raum definierten a_i übereinstimmen, kann man nun analog dazu einen Vakuumzustand fordern mit den Eigenschaften

$$\Psi(\vec{x})|0\rangle = 0. \quad (30)$$

Um nun die Verbindung zum FOCK-Raum zu demonstrieren geht man in die **Ortsdarstellung** und definiert

$$|\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \Psi^\dagger(\vec{x}_1, t) \dots \Psi^\dagger(\vec{x}_n, t) |0\rangle \quad (31)$$

Nun projizieren wir die Zustände in der FOCK-Darstellung auf den Ortsraum indem wir definieren

$$\Phi_{[n_1, n_2, \dots]}^{(n)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n, t) = \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n, t | n_1, n_2, \dots \rangle \quad (32)$$

und damit erhalten

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{[n_1, n_2, \dots]}^{(n)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n, t) \quad (33)$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n, t | n_1, n_2, \dots \rangle \quad (34)$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \Psi(\vec{x}_1, t) \dots \Psi(\vec{x}_n, t) | n_1, n_2, \dots \rangle \quad (35)$$

$$= \sum_i \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \Psi(\vec{x}_1, t) \dots \Psi(\vec{x}_{i-1}, t) \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\vec{x}_i) \right) \quad (36)$$

$$\cdot \Psi(\vec{x}_i, t) \Psi(\vec{x}_{i+1}, t) \dots \Psi(\vec{x}_n, t) | n_1, n_2, \dots \rangle \quad (37)$$

$$= \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\vec{x}_i) \right) \Phi_{[n_1, n_2, \dots]}^{(n)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n, t) \quad (38)$$

Die konstruierte Wellenfunktion erfüllt also die **Vielteilchen Schrödingergleichung**.

Besonders wichtig ist in diesem Zusammenhang die Symmetrieeigenschaft der Vielteilchenwellenfunktion $\Phi_{[n_1, n_2, \dots]}^{(n)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n, t)$. An der Konstruktion erkennt man, dass sie **symmetrisch** in allen Koordinaten ist, da alle $\Psi^\dagger(\vec{x}_i, t)$ miteinander vertauschen. Das mit den Kommutatorrelationen quantisierte Schrödingerfeld beschreibt also n nicht unterscheidbare Teilchen, die der **Bose-Einstein-Statistik** genügen.

6.2 Fermionen

Fermionen können *nicht* durch den im vorigen Abschnitt entwickelten Formalismus beschrieben werden, da dieser mehrere Teilchen im gleichen Quantenzustand zulässt.

Wir benötigen also eine neue algebraische Struktur, den **Antikommutator**

$$[A, B]_+ = AB + BA. \quad (39)$$

Um ein Fermionenfeld zu quantisieren ersetzen wir also die Kommutatoren in (7) durch die entsprechenden Antikommutatoren und erhalten

$$\begin{aligned} [\Psi(\vec{x}, t), \Psi(\vec{x}', t)]_+ &= [\Psi^\dagger(\vec{x}, t), \Psi^\dagger(\vec{x}', t)]_+ = 0 \\ [\Psi(\vec{x}, t), \Psi^\dagger(\vec{x}', t)]_+ &= \delta(\vec{x} - \vec{x}') \end{aligned} \quad (40)$$

Die Entwicklung der Feldoperatoren nach der Teilchenzahldarstellung (6) ergibt die äquivalenten Quantisierungsbedingungen für die Leiteroperatoren

$$\begin{aligned} [a_\lambda, a_{\lambda'}]_+ &= [a_\lambda^\dagger, a_{\lambda'}^\dagger]_+ = 0 \\ [a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger]_+ &= \delta_{\lambda\lambda'} \end{aligned} \quad (41)$$

Ob der so modifizierte Formalismus *physikalisch sinnvoll* und fruchtbar ist, muss nun untersucht werden.

Zuerst soll geprüft werden, ob unsere Theorie auch das Verhalten fermionischer Teilchen richtig wieder gibt. Dies ist genau dann der Fall wenn dem PAULIschen Ausschließungsprinzip genügt wird.

Ein Zwei-Teilchen-Zustand in der FOCK-Darstellung kann über $a_i^\dagger a_j^\dagger |0\rangle$ aufgebaut werden. Es soll nun $i = j$ gelten. Dieser Zustand ist für Fermionen *verboten* und soll 0 zur Folge haben. Mit dem zweiten Antikommutator aus (41) sieht man leicht ein, dass dies in der Tat richtig ist.

Die Bewegungsgleichung der Operatoren lautet

$$[\Psi(\vec{x}, t), \int_V \Psi^\dagger(\vec{x}', t) h(\vec{x}') \Psi(\vec{x}', t) d^3r]_+ = h(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t). \quad (42)$$

Sie stimmt bemerkenswerterweise, wie bei der Quantisierung des Bosonenfeldes, formal mit ihrem quantenmechanischen Pendant im HEISENBERGbild überein.

Der Formalismus ist jetzt vollständig entwickelt und muss nun seine Tragfähigkeit anhand konkreter physikalischer Systeme beweisen.

Literatur

- [1] Gerald Grawert. *Quantenmechanik*. AULA-Verlag, 5. edition, 1989.
- [2] Walter Greiner. *Feldquantisierung*, volume 7A of *Theoretische Physik*. Harri Deutsch, 1. edition, 1993.
- [3] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Wiley and Sons, 1997.
- [4] Leonard Schiff. *Quantum Mechanics*. International series in pure and applied physics. McGraw Hill, 3. edition, 1988.