

Kapitel 7

Das Fermionenfeld in der Darstellung der zweiten Quantisierung

Was ändert sich nun gegenüber den Ausführungen von Kapitel 6, wenn es gilt, anstelle der Schrödingergleichung (6.2) für ein System von N Bosonen die Schrödingergleichung für ein System von N *Fermionen* zu lösen?

Der wesentliche Unterschied besteht darin, daß *als Ergebnis der Teilchenstatistik* jeder Fermionen-Vielteilchenzustand die zusätzliche Nebenbedingung

$$\psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots; t) \stackrel{!}{=} -\psi(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots; t) \quad (7.1)$$

erfüllen muß (Antisymmetriebedingung), wobei die Koordinaten x_i die Orts- und die Spinkoordinaten beschreiben. Unter Berücksichtigung von (7.1) kann nun eine allgemeine Lösung der Schrödingergleichung für ein *nicht wechselwirkendes* Fermionensystem in der Form

$$\psi_{E_1, \dots, E_N}(x_1, \dots, x_N) \sim \sum_{\nu} \text{sgn}(\mathcal{P}_{\nu}) \mathcal{P}_{\nu} \{u_{E_1}(x_1) \cdots u_{E_N}(x_N)\} f(t) \quad (7.2)$$

angeschrieben werden. $\text{sgn}(\mathcal{P}_{\nu}) = 1 (-1)$, wenn \mathcal{P}_{ν} einer geraden (ungeraden) Zahl von Teilchenvertauschungen entspricht. Gleichung (7.2) hat noch einen weiteren wichtigen Aspekt: die Quantenzahlen E_1, \dots, E_N *müssen alle verschieden sein*, da andernfalls wegen (7.1) die Wellenfunktion identisch mit ihrem Negativum sein müßte, was die physikalisch uninteressante Lösung $\psi \equiv 0$ zur Folge hätte. Es muß also gelten:

$$E_1 \neq E_2 \neq E_3 \neq \dots \neq E_N. \quad (7.3)$$

- *Jeder quantenmechanische Einteilchenzustand darf nur von höchstens einem Teilchen besetzt sein; das aber bedeutet, daß in der Teilchenzahldarstellung die Besetzungszahlen n_i nur die Werte 0 oder 1 annehmen dürfen. (Pauli'sches Ausschließungsprinzip.)*

Man kann nun für einen bestimmten Zustand eines nicht-wechselwirkenden Fermionensystems den Dirac'schen Zustandsvektor $|n_1, n_2, \dots, n_{\infty}\rangle$ definieren. Um den Zusammenhang zwischen diesem abstrakten Vektor und der

entsprechenden fermionischen Vielteilchen-Wellenfunktion in der Ortsdarstellung zu erhalten, geht man am besten von der Beziehung (6.31) aus und variiert diese Gleichung in bezug auf ein Fermionen-System.

Das bedeutet: (1) die Teilchen-Permutationen enthalten den Vorzeichenfaktor $\text{sgn}(P_\nu)$, und (2) alle Besetzungszahlen n_i können nur die Werte Null oder Eins annehmen. Damit ergibt für für alle $n_i \leq 1$, und man erhält

$$\langle x_1, \dots, x_N | n_1, n_2, \dots, n_\infty \rangle = \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_{\nu} \text{sgn}(P_\nu) P_\nu \{ u_{E_1}(x_1) u_{E_2}(x_2) \cdots u_{E_N}(x_N) \}. \quad (7.4)$$

Daraus kann man - ebenfalls äquivalent zum Bosonen-Fall (6.29) - einen Fermionenzustand für ein beliebiges, wechselwirkendes System in der Form

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1=0}^1 \cdots \sum_{n_\infty=0}^1 \tilde{A}(n_1, n_2, \dots, n_\infty; t) |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle, \quad (7.5)$$

mit

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k \stackrel{!}{=} N$$

anschreiben.

Noch ein Wort zu den Basisfunktionen in der Ortsdarstellung (7.4). Für ein System von (z.B.) 3 Fermionen in den (verschiedenen) Einteilchenzuständen $E_1 = \alpha$, $E_2 = \beta$ und $E_3 = \gamma$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{\nu} \text{sgn}(P_\nu) P_\nu \{ u_\alpha(x_1) u_\beta(x_2) u_\gamma(x_3) \} = \\ & = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ u_\alpha(x_1) u_\beta(x_2) u_\gamma(x_3) - u_\alpha(x_1) u_\beta(x_3) u_\gamma(x_2) \\ & \quad - u_\alpha(x_2) u_\beta(x_1) u_\gamma(x_3) + u_\alpha(x_2) u_\beta(x_3) u_\gamma(x_1) \\ & \quad + u_\alpha(x_3) u_\beta(x_1) u_\gamma(x_2) - u_\alpha(x_3) u_\beta(x_2) u_\gamma(x_1) \}. \end{aligned}$$

Wie man leicht sieht, entspricht dieses Ergebnis genau der folgenden Determinantenschreibweise (Slater-Determinante, SD):

$$\frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{\nu} \text{sgn}(P_\nu) P_\nu \{ u_\alpha(x_1) u_\beta(x_2) u_\gamma(x_3) \} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} u_\alpha(x_1) & u_\alpha(x_2) & u_\alpha(x_3) \\ u_\beta(x_1) & u_\beta(x_2) & u_\beta(x_3) \\ u_\gamma(x_1) & u_\gamma(x_2) & u_\gamma(x_3) \end{vmatrix}.$$

Man kann also allgemein sagen: die Gleichung (7.5) bedeutet (in der Orts-Spin-Darstellung) die Entwicklung eines *wechselwirkenden* Fermizustandes nach einer Basis von Slater-Determinanten N -ter Ordnung, also

$$\langle x_1, \dots, x_N | n_1, \dots, n_\infty \rangle \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{E_1}(x_1) & u_{E_1}(x_2) & \cdots & u_{E_1}(x_N) \\ u_{E_2}(x_1) & u_{E_2}(x_2) & \cdots & u_{E_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{E_N}(x_1) & u_{E_N}(x_2) & \cdots & u_{E_N}(x_N) \end{vmatrix}, \quad (7.6)$$

wobei die Koeffizienten $\tilde{A}(n_1, \dots, n_\infty; t)$ in (7.5) die Wahrscheinlichkeitsamplituden bedeuten, mit welchen bestimmte (erlaubte) Besetzungssituationen repräsentiert sind.

Die Popularität der Formulierung (7.6) kommt auch daher, daß sie unmittelbar die zwei Hauptaussagen von W. Pauli widerspiegelt:

- (a) Wenn zwei Fermionen im selben Einteilchenzustand sind (= 2 gleiche Zeilen in der SD), oder
- (b) wenn zwei Fermionen am selben "Spin/Ort" sind (= 2 gleiche Spalten in der SD),

dann ist der entsprechende Zustandsvektor identisch Null!

Die weitere Vorgangsweise bei der Behandlung von Vielteilchen-*Fermionensystemen* im Teilchenzahlraum ist äquivalent mit der in Kapitel 6 diskutierten Behandlung von Vielteilchen-*Bosonensystemen*:

Der erste Schritt wird wieder mit der Einführung geeigneter *Erzeugungs-* und *Vernichtungsoperatoren* gesetzt. Wie Jordan und Wigner¹ allgemein zeigen konnten, gehorchen diese Operatoren (im "Fermionenfall" mit \hat{c}_k^\dagger und \hat{c}_k bezeichnet) aufgrund der veränderten Teilchenstatistik den sogenannten *Pluskommutatoren*:

$$\{\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}^\dagger\} = \hat{c}_k \hat{c}_{k'}^\dagger + \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_k = \delta_{k,k'}, \quad (7.7)$$

bzw.

$$\{\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}\} = \{\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_{k'}^\dagger\} = \hat{0}. \quad (7.8)$$

In diesem Skriptum wird auf die Ableitung dieser Gleichungen verzichtet; statt dessen wird im folgenden gezeigt, daß Operatoren mit den Eigenschaften (7.7) und (7.8) genau die Situation der Fermi-Statistik beschreiben: Aus (7.8) folgt unmittelbar:

$$\begin{aligned} \hat{c}_k \hat{c}_k + \hat{c}_k \hat{c}_k &= \hat{0} \rightarrow \hat{c}_k \hat{c}_k = \hat{0}, \\ \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k^\dagger + \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k^\dagger &= \hat{0} \rightarrow \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k^\dagger = \hat{0}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Bildet man nun (wie im Bosonenfall) aus \hat{c}_k^\dagger und \hat{c}_k den entsprechenden Teilchenzahl-Operator

$$\hat{N}_k \equiv \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k,$$

so finden wir für ihn die Eigenwertgleichung

$$\hat{N}_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle, \quad (7.10)$$

mit den Eigenzuständen $|n_k\rangle$ und den (reellen) Eigenwerten n_k .

¹Über das Paulische Äquivalenzverbot, Z. Physik **47**, 631 (1928).

Über die Eigenwertgleichung von \hat{N}_k kann man folgende Aussage machen:

$$\begin{aligned}
\hat{N}_k \hat{N}_k |n_k\rangle &= n_k^2 |n_k\rangle \\
&= \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k |n_k\rangle = \hat{c}_k^\dagger (1 - \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k) \hat{c}_k |n_k\rangle \\
&= \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k |n_k\rangle - \underbrace{\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_k |n_k\rangle}_{=0 \text{ wegen (7.9)}} = \hat{N}_k |n_k\rangle.
\end{aligned}$$

Dies ergibt mit (7.10):

$$n_k^2 |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle \quad \text{bzw.} \quad n_k (n_k - 1) |n_k\rangle = 0.$$

Diese Gleichung ist nur für $n_k = 0$ oder $n_k = 1$ erfüllt. Daraus folgt weiter, daß $|n_k\rangle$ nur $|0_k\rangle$ oder $|1_k\rangle$ sein kann!

Welche Wirkung haben nun die Operatoren \hat{c} und \hat{c}^\dagger , wenn sie auf die möglichen Fermionenzustände $|0\rangle$ bzw. $|1\rangle$ wirken? Wir erhalten:

$$\left. \begin{aligned}
\hat{c} \underbrace{\hat{c}^\dagger \hat{c} |0\rangle}_{=0 \text{ wegen (7.10)}} &= 0 \\
\hat{c} \hat{c}^\dagger \hat{c} |0\rangle &= (1 - \hat{c}^\dagger \underbrace{\hat{c} \hat{c} |0\rangle}_{=0 \text{ wegen (7.9)}}) = \hat{c} |0\rangle
\end{aligned} \right\} \boxed{\hat{c} |0\rangle = 0}$$

$$\left. \begin{aligned}
\hat{c}^\dagger \hat{c} \hat{c}^\dagger |0\rangle &= (1 - \underbrace{\hat{c} \hat{c}^\dagger}_{=0 \text{ wegen (7.9)}}) \hat{c}^\dagger |0\rangle = \hat{c}^\dagger |0\rangle \\
\hat{c}^\dagger \hat{c} (\hat{c}^\dagger |0\rangle) &= 1 (\hat{c}^\dagger |0\rangle)
\end{aligned} \right\} \boxed{\hat{c}^\dagger |0\rangle = |1\rangle}$$

$$\begin{aligned}
\hat{c} |1\rangle &= \hat{c} \hat{c}^\dagger |0\rangle = (1 - \hat{c}^\dagger \hat{c}) |0\rangle = |0\rangle, \\
&\implies \boxed{\hat{c} |1\rangle = |0\rangle} \\
\hat{c}^\dagger |1\rangle &= \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger |0\rangle = 0 \text{ wegen (7.9)} \\
&\implies \boxed{\hat{c}^\dagger |1\rangle = 0}.
\end{aligned}$$

Die Operatoren \hat{c}^\dagger und \hat{c} sind somit tatsächlich Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die Zustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$.

Eine Zusammenfassung dieser Gleichungen ergibt:

$$\begin{aligned}
\hat{c}_k |n_k\rangle &= \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle, \\
\hat{c}_k^\dagger |n_k\rangle &= \sqrt{1 - |n_k|} |n_k + 1\rangle, \\
\hat{N}_k |n_k\rangle &\equiv \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle.
\end{aligned} \tag{7.11}$$

Zuletzt soll noch auf ein Detail hingewiesen werden, welches zu beachten ist, wenn man einen ‘‘Fermioperator’’ \hat{c}_k^\dagger bzw. \hat{c}_k auf einen Zustandsvektor

$|n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle$ wirken läßt. Ausgangspunkt für die folgenden Überlegungen ist der *Vakuumzustand* $|V\rangle$, in welchem kein Teilchenzustand besetzt ist, d.h.

$$|V\rangle \equiv |0_1, 0_2, \dots, 0_\infty\rangle.$$

Es sollen nun zwei Teilchen in den Zuständen 1 und 2 erzeugt werden:

$$\begin{aligned}\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger |V\rangle &= \hat{c}_1^\dagger |0_1\rangle \hat{c}_2^\dagger |0_2\rangle |0_3, \dots, 0_\infty\rangle \\ &= |1_1, 1_2, 0_3, \dots, 0_\infty\rangle.\end{aligned}$$

Nun gilt wegen der Vertauschungsrelation (7.8):

$$\begin{aligned}\left(\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger + \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1^\dagger\right) &= \hat{0} \quad \Longrightarrow \\ \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1^\dagger |V\rangle &= -|1_1, 1_2, 0_3, \dots, 0_\infty\rangle.\end{aligned}$$

Man kann also sagen:

Der aus dem Vakuumzustand durch fortwährende Einwirkung von Erzeugungsoperatoren entstehende Vielteilchenzustand hat ein positives Vorzeichen, wenn Operatoren in derselben Reihenfolge wirken, wie es die Ordnung der Einzelzustände vorschreibt. (Natürliche Reihenfolge.)

Es gilt somit allgemein:

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = \left(\hat{c}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{c}_2^\dagger\right)^{n_2} \cdots \left(\hat{c}_k^\dagger\right)^{n_k} \cdots \left(\hat{c}_\infty^\dagger\right)^{n_\infty} |V\rangle, \quad (7.12)$$

mit $n_i = 0$ oder 1 .

Läßt man nun den Erzeugungs-Operator \hat{c}_k^\dagger auf diesen Zustand wirken, so erhält man:

$$\hat{c}_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = \hat{c}_k^\dagger \left(\hat{c}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{c}_2^\dagger\right)^{n_2} \cdots \left(\hat{c}_{k-1}^\dagger\right)^{n_{k-1}} \left(\hat{c}_k^\dagger\right)^{n_k} \cdots |V\rangle.$$

Um die oben definierte „natürliche Reihenfolge“ der Operatoren zu erhalten, wird \hat{c}_k^\dagger bis vor $\left(\hat{c}_k^\dagger\right)^{n_k}$ „durchgezogen“. Wegen der dabei durchzuführenden Vertauschungen ergibt sich mit (7.8) der Phasenfaktor

$$(-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k-1}} \equiv (-1)^{\nu_k},$$

und man erhält unter Verwendung von (7.11) den Ausdruck

$$\begin{aligned}\hat{c}_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle &= (-1)^{\nu_k} \left(\hat{c}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{c}_2^\dagger\right)^{n_2} \cdots \hat{c}_k^\dagger \left(\hat{c}_k^\dagger\right)^{n_k} \cdots |V\rangle \\ &= (-1)^{\nu_k} \sqrt{1 - |n_k|} |n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots, n_\infty\rangle.\end{aligned} \quad (7.13)$$

Analog dazu findet man

$$\hat{c}_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = (-1)^{\nu_k} \sqrt{n_k} |n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots, n_\infty\rangle, \quad (7.14)$$

und es folgt aus den Gleichungen (7.13) und (7.14):

$$\begin{aligned} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle &= (-1)^{\nu_k} \sqrt{n_k} \hat{c}_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots, n_\infty\rangle \\ &= [(-1)^{\nu_k}]^2 n_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle, \end{aligned}$$

also

$$\hat{N}_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = n_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle. \quad (7.15)$$

Man sieht also, daß die Wirkung des Paares $\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$ (also des Teilchenzahloperators) nicht von seiner Stellung in Bezug auf weitere Operatoren zu anderen Zustandsindizes abhängt.

Abgesehen von diesen speziellen Eigenschaften der Operatoren \hat{c}^\dagger und \hat{c} ist die weitere Vorgangsweise analog zu Kapitel 6; insbesondere erhält man für den Hamiltonoperator eines Fermionensystemes in 2. Quantisierung die Form [vgl. (6.40)]:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \langle i | \hat{O} | j \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i, j | \hat{O} | k, l \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k. \quad (7.16)$$

Anmerkung ohne Beweis zur obigen Gleichung:

Der Gleichung (7.16) können Sie ein interessantes Detail entnehmen: die Reihenfolge der Indizes (i, j, k, l) im Matrixelement weicht von der Reihenfolge der beiden letzten c -Operatoren ($\hat{c}_l \hat{c}_k$) ab. Dies ergibt sich bei der Transformation des Teilchen-Teilchen-Wechselwirkungsterms, welche in diesem Skriptum nicht gezeigt wurde.

Dieser Effekt tritt bereits im *bosonischen* Fall auf [s. Glg.(6.40)]; ich habe das nicht näher erläutert, weil wegen der Vertauschungsrelationen der Bosonen-Operatoren (6.36)

$$\hat{b}_l \hat{b}_k = \hat{b}_k \hat{b}_l$$

gilt, sodass dieses Detail keine Rolle spielt. Im *fermionischen* Fall ist das jedoch wegen (7.8) anders: es gilt

$$\hat{c}_l \hat{c}_k = -\hat{c}_k \hat{c}_l,$$

d.h., die Reihenfolge der \hat{c} -Operatoren muss streng beachtet werden!