

A másodkvantálás módszere

January 25, 2005

1 A módszer alkalmazhatósága a fizikában

A másodkvantálás módszere egy nagyon általános és széles körben alkalmazott módszer az azonos részecskékből álló rendszerek tanulmányozására. Úgy a térelméletben mint a statisztikus fizikában és a modern szilárdtestfizikában is nagyon elterjedten alkalmazzák. A módszer nagy mértékben leegyszerűsíti az azonos részecskékből álló rendszerek tárgyalását.

2 A részecskeszám (elfoglalási szám) reprezentáció

Tekintsünk egy azonos részecskékből álló kvantummechanikai rendszert. Jelöljük N -el a részecskeszámot. Általános esetben a rendszer Hamilton függvénye:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V(\vec{r}_i) + \sum_{i,j=1}^N V'(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i,j,k=1}^N V''(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots \quad (1)$$

ahol az egymást követő tagok sorra a mozgási energiát, a külső térrel való kölcsönhatást, a párkölcsönhatást illetve a több részecske kölcsönhatásokat jellemzik.

Ha a Hamilton függvényben csak az első két tagot vesszük figyelembe (vagy csak az első két tag létezik), a rendszer tanulmányozható mint egymástól független részecskék rendszere felhasználva az egy részecske állapotokat. A rendszer hullámfüggvényét (állapotvektorát) az egy részecske állapotokból származtatjuk, szimmetrizálva vagy antiszimmetrizálva a hullámfüggvényt attól függően, hogy fermionjaink vagy bozonjaink vannak.

Legyenek az egy részecske tiszta állapotok: $|\tau_1\rangle, |\tau_2\rangle, \dots, |\tau_i\rangle, \dots$ (tételezzük fel, hogy ezek ismertek, vagyis ismert egy teljes és kompatibilis mennyiségrendszer). Ilyen feltételek mellett az N részecske rendszerre értelmezhető egy bázis az $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ típusú vektorok segítségével. Ebben a jelölésben n_1 megadja a τ_1 állapotban levő részecskék számát, n_2 a τ_2 állapotban levő részecskék számát, $\dots n_i$ meg a τ_i állapotban levő részecskék számát. A

$$\bigcup_{\sum_{j=1}^{\infty} n_j = N} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (2)$$

vektorok sokasága egy bázist alkot az N részecske állapotok terén. Az N részecskét jellemző állapotvektorok terén:

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | u_1, u_2, \dots, u_i, \dots \rangle \neq 0 \quad (3)$$

egyenlőtlenség csak akkor lesz igaz, hogyha $n_1 = u_1, n_2 = u_2, \dots, n_i = u_i, \dots$

Az $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ típusú vektorok szimmetriája a részecskéknek megfelelő szimmetria (bozonokra szimmetrikus a részecskék felcserélésére és fermionokra antiszimmetrikus). Az azonos részecskékre tanultak értelmében a Pauli féle kizárási elv érvényes a fermionokra és nem érvényes a bozonokra. Azonnal következik tehát, hogy fermionok esetén $n_i \in \{0, 1\}$, míg bozonok esetén $n_i \in \mathbb{N}$ (a természetes számok halmazának). Bármely $|\psi_N\rangle$ N -részecske állapotot kifejezhetünk tehát az $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ típusú vektorok segítségével:

$$|\psi_N\rangle = \sum_{\{n_i\}} f_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (4)$$

Általában sok azonos részecskét tartalmazó rendszer esetén könnyebb az $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ vektorok által meghatározott bázisban tanulmányozni. Azon esetben amikor ezen elfoglalási számokkal kapott bázisvektorokat használjuk a *másodkvantálás módszerét* alkalmazzuk. Ahhoz, hogy ezen vektorokkal dolgozhassunk először át kell írni az operátorokat is olyan alakra melyben az $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ bázisvektorokra való hatása könnyen meghatározható. Ha a rendszer szempontjából lényeges operátorokat sikerül ilyenformán felírni (megközelíteni) a kölcsönható rendszerek tanulmányozása nagymértékben leegyszerűsödik. Az elfoglalási szám vektorok által alkotott bázisban keressük majd a rendszer sajátértékeit és sajátvektorait. Amint a következőkben meglátjuk általában a $\hat{H}_N$ operátor és az ezzel kommutáló operátorok hatása ezekre az elfoglalási szám állapotokra ismert.

Megejegyezzük, hogy nagyból hasonló gondolatmenetet követtünk akkor is mikor az egydimenziós kvantummechanikai oszcillátort tárgyaltuk az általános formalizmus keretében.

3 Részecske keltő és eltüntető operátorok

Bevezetjük a bozonokra és a fermionokra a részecske keltő és eltüntető operátorokat: $\hat{a}_i^+$ és $\hat{a}_i$. Az $\hat{a}_i^+$ operátor egy részecskét kelt az i állapotban és az $\hat{a}_i$ eltüntető operátor egy részecskét tüntet el az i indexel jellemzett állapotban.

$$\hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = c |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (5)$$

$$\hat{a}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = c' |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (6)$$

A c és c' normálási konstansok. Ezeket a konstansokat úgy válasszuk meg, hogy a (5,6) egyenletek a normált

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle^2 = 1 \quad (7)$$

állapotokra legyen igaz, és a következő tulajdonságok is igazak legyenek:

- Az $\hat{a}_i$ és az $\hat{a}_i^+$ operátorok egymás adjungáltjai.
- $\hat{a}_i|n_1, n_2, \dots, 0^{(i)}, \dots\rangle = |0\rangle = 0$
- fermionok esetén $\hat{a}_i^+|n_1, n_2, \dots, 1^{(i)}, \dots\rangle = |0\rangle = 0$

Fermionokra amint mondtuk $n_i \in \{0, 1\}$ és a (5,6) egyenletekben a c és c' konstansokat úgy válasszuk meg, hogy:

$$\hat{a}_i|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{S_i} n_i |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (8)$$

$$\hat{a}_i^+|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{S_i} (1 - n_i) |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (9)$$

Megjegyezzük, hogy a $(-1)^{S_i}$ a fázis tagot sok tárgyalásmódban nem használják ($S_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$). A teljesség kedvéért mi azonban felírjuk.

Bozonokra $n_i \in \mathbf{N}$, és a (5, 6) egyenletekben definíció szerint a c és c' konstansokat úgy válasszuk meg, hogy:

$$\hat{a}_i|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (10)$$

$$\hat{a}_i^+|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (11)$$

Ellenőrizzük sorra, hogy a fenti c és c' megválasztással a kívánt tulajdonságok teljesülnek-e?

A megválasztott konstansokkal, úgy a bozonokra, mint a fermionokra

$$\hat{a}_i|n_1, n_2, \dots, 0^{(i)}, \dots\rangle = |0\rangle = 0, \quad (12)$$

a fermionokra meg igaz, hogy:

$$\hat{a}_i^+|n_1, n_2, \dots, 1^{(i)}, \dots\rangle = |0\rangle = 0 \quad (13)$$

Ellenőrizzük most, hogy az $\hat{a}_i$ az $\hat{a}_i^+$ adjungáltja:

a.) *Bozonokra:*

Induljunk ki az

$$\hat{a}_i|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle, \quad (14)$$

egyenletből. Az adjungált operátorok definíciója értelmében:

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i^+ = \langle n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots | \sqrt{n_i} \quad (15)$$

Beszorozzuk most a fenti egyenlet két oldalát jobbról az $|n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$ ket vektorral.

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i^+ | n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots \rangle = \sqrt{n_i} \quad (16)$$

$$\Rightarrow \hat{a}_i^+ | n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle \quad (17)$$

$$\hat{a}_i^+ | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} | n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots \rangle \quad (18)$$

Ezen utobbi egyenlet meg megfelel annak, ahogy az $\hat{a}_i^+$ operátor hatását definiáltuk bozonok esetén. Látható tehát, hogy bozonok esetén $\hat{a}_i^+$ az $\hat{a}_i$ adjungáltja.

b.) Fermionokra:

A fenti gondolatmenetet követve, ha:

$$\hat{a}_i|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{S_i} n_i |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (19)$$

hasonló módon következik, hogy:

$$\hat{a}_i^+|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = |0\rangle = (-1)^{S_i} (n_i + 1) |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (20)$$

Ezen utóbbi kifejezésben az $n_i + 1$ nem elfogadható normálási tag, mert $n_i = 1$ esetében nem ad 0-t. Ez a tag fermionok esetén csak az $n_i = 0$ esetben kell jó legyen, és az $n_i = 1$ esetben meg nullát kell kapjunk. Azonnal látható hogy ha $(1 - n_i)$ -t veszünk az $n_i + 1$ helyett akkor elfogadható lesz, mert $n_i = 0$ esetben ugyanazt az értéket adja, $n_i = 1$ esetében pedig 0-t ad. Vagyis:

$$\hat{a}_i^+|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{S_i} (1 - n_i) |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \quad (21)$$

ami megegyezik azzal ahogyan az $\hat{a}_i^+$ operátort értelmeztük fermionok esetére. Látható tehát a fermionok esetén is, hogy $\hat{a}_i^+$ az $\hat{a}_i$ adjungáltja.

4 A keltő és eltüntető operátorok tulajdonságai

A következőkben bizonyítás nélkül felírjuk néhány tulajdonságát a keltő és eltüntető operátoroknak. A bizonyítások azonnaliak, és gyakorlatként az olvasóra bizzuk.

a.) Fermionokra:

A keltő és eltüntető operátoroknak lényeges antikommutálási tulajdonságai vannak:

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 \quad (22)$$

$$\{\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\} = 0 \quad (23)$$

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\} = \delta_{ij} \quad (24)$$

(ahol $\{a, b\} = ab + ba$).

b.) Bozonokra:

A keltő és eltüntető operátoroknak lényeges kommutálási tulajdonságai vannak:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad (25)$$

$$[\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0 \quad (26)$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij} \quad (27)$$

(ahol $[a, b] = ab - ba$).

5 A részecskeszám operátorok

Az elfoglalási szám reprezentáció keretében használjuk az $\hat{N}_i$ operátort aminek segítségével megkapható az i -edik állapotban levő részecskék száma, illetve az $\hat{N} = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{N}_i$ össz-részecskeszám operátort, aminek segítségével megkapható a rendszerben levő részecskék száma.

Definíció: Definiáljuk úgy fermionokra mint bozonokra az i állapotbeli részecskeszám operátort:

$$\hat{N}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i. \quad (28)$$

Tétel:

A fentebb definiált részecskeszám operátorra igaz úgy a fermionok mint a bozonok esetén, hogy:

$$\hat{N}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (29)$$

Bizonyítás:

a.) *Bozonokra:*

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \hat{a}_i^+ \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle = \quad (30)$$

$$= \sqrt{n_i} \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (31)$$

b.) *Fermionokra:*

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \hat{a}_i^+ (-1)^{S_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle = \\ &= (-1)^{S_i} n_i (-1)^{S_i} (1 - (n_i - 1)) |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \\ &= n_i (2 - n_i) |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \\ &= (2n_i - n_i^2) |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \\ &= n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle, \end{aligned} \quad (32)$$

ugyanis fermionok esetén $n_i^2 = n_i$ mivel $n_i \in \{0, 1\}$.

Definíció: A teljes részecskeszám-operátor:

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{N}_i = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad (33)$$

Tétel:

$$\begin{aligned} \hat{N} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= N |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \\ N &= \sum_{j=1}^{\infty} n_j \end{aligned} \quad (34)$$

A **bizonyítás:** az előbb bizonyított tétel alapján azonnali.

6 Egy adott koordinátával rendelkező részecskét keltő illetve eltüntető operátor

A következőkben bevezetünk két új operátort:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\vec{r}) &= \sum_{j=1}^{\infty} \langle \vec{r} | \tau_j \rangle \hat{a}_j \\ \hat{\psi}^+(\vec{r}) &= \sum_{j=1}^{\infty} \langle \vec{r} | \tau_j \rangle^* \hat{a}_j^+\end{aligned}\tag{35}$$

A $|\tau_i\rangle$ állapotvektor az i -edik egyrészecske tiszta állapotot jelöli. Azonnal látható, hogy ezen két operátor az $\vec{r}$ folytonos változótól függnek. Tudjuk ugyanakkor, hogy

$$\langle \vec{r} | \tau_j \rangle = \varphi_j(\vec{r}),\tag{36}$$

az egyrészecske tiszta állapotok hullámfüggvényei!

Az újonnan bevezetett $\hat{\psi}(\vec{r})$ és $\hat{\psi}^+(\vec{r})$ operátorokra kijelenthetünk néhány azonnali tulajdonságot:

a.) *Fermionok esetén:*

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')\} = 0\tag{37}$$

$$\{\hat{\psi}^+(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')\} = 0\tag{38}$$

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\tag{39}$$

b.) *Bozonok esetén:*

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')] = 0\tag{40}$$

$$[\hat{\psi}^+(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')] = 0\tag{41}$$

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')] = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\tag{42}$$

A fenti tulajdonságok bizonyítása azonnali figyelembe véve az $\hat{a}_i$ és $\hat{a}_i^+$ operátorokra érvényes kommutálási illetve antikommutálási relációkat. Ezeknek a bizonyítását gyakorlatként az olvasóra hagyjuk. Kijelentünk és bizonyítottunk azonban néhány fontos tételt:

1. **Tétel** Az össz-részecskeszám operátor felírható mint:

$$\hat{N} = \int_{\{\vec{r}\}} \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) d\vec{r}\tag{43}$$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned}
\int_{\{\vec{r}\}} \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) d\vec{r} &= \int_{\{\vec{r}\}} \left(\sum_{i=1}^{\infty} \langle \vec{r} | \tau_i \rangle^* \hat{a}_i^+ \right) \left(\sum_{j=1}^{\infty} \langle \vec{r} | \tau_j \rangle \hat{a}_j \right) d\vec{r} = \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \int \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \langle \vec{r} | \tau_i \rangle^* \langle \vec{r} | \tau_j \rangle d\vec{r} = \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \int \langle \vec{r} | \tau_i \rangle^* \langle \vec{r} | \tau_j \rangle d\vec{r} = \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \int \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) d\vec{r} = \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{N}_i = \hat{N}
\end{aligned} \tag{44}$$

2. Tétel

$$[\hat{N}, \hat{\psi}^+(\vec{r})] = \hat{\psi}^+(\vec{r}) \tag{45}$$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned}
[\hat{N}, \hat{\psi}^+(\vec{r})] &= [\hat{N}, \sum_i \varphi_i^*(\vec{r}) \hat{a}_i^+] = \\
&= \sum_i \varphi_i^*(\vec{r}) [\hat{N}, \hat{a}_i^+]
\end{aligned} \tag{46}$$

Felhasználva a fermionokat illetve bozonokat keltő és eltüntető operátorokra érvényes antikommutálási illetve kommutálási összefüggéseket írhatjuk, hogy:

$$\begin{aligned}
[\hat{N}, \hat{a}_i^+] &= [\sum_j \hat{a}_j^+ \hat{a}_j, \hat{a}_i^+] = \\
\sum_j [\hat{a}_j^+ \hat{a}_j, \hat{a}_i^+] &= \sum_j (\hat{a}_j^+ \hat{a}_j \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_j) = \\
&= (\hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i) = \hat{a}_i^+ [\hat{a}_i, \hat{a}_i^+]
\end{aligned} \tag{47}$$

Bozonok esetére tudjuk, hogy $[\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] = 1$. Fermionok esetén is belátható, hogy ezt az egyenlőséget használhatjuk. Fermionokra $[\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] = 1 - 2\hat{N}_i$, és $n_i = \{0, 1\}$. Ha $n_i = 0$, akkor az egyenlőség nyilvánvaló, ha meg $n_i = 1$, akkor $\hat{a}_i^+ [\hat{a}_i, \hat{a}_i^+]$ hatása minig a $|0\rangle$ -t eredményezi, függetlenül attól hogy mivel helyettesítjük a kommutátor értékét. A (46) egyenletbe tehát $[\hat{N}, \hat{a}_i^+] = \hat{a}_i^+$ úgy bozonokra mint fermionokra, és a bizonyítandó tétel azonnali.

3. **Tétel:** A $\hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle$ egy olyan állapotot eredményez ahol 1 részecskénk van:

$$\hat{N}\hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle = 1\hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle \quad (48)$$

Bizonyítás: A 2. tétel értelmében

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{\psi}^+(\vec{r})] |0\rangle &= \hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle \\ [\hat{N}\hat{\psi}^+(\vec{r}) - \hat{\psi}^+(\vec{r})\hat{N}] |0\rangle &= \hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle \\ \hat{N}\hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle - \hat{\psi}^+(\vec{r})\hat{N}|0\rangle &= \hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle \\ \hat{N}\hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle &= 1\hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle, \end{aligned} \quad (49)$$

ugyanis $\hat{N}|0\rangle = 0$.

4. **Tétel:**

$$\hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle = |\vec{r}\rangle \quad (50)$$

vagyis $\hat{\psi}^+(\vec{r})$ egy olyan operátor amely egy megadott $\vec{r}$ koordinátájú részecskét kelt. Ugyanakkor

$$\hat{\psi}(\vec{r})|\vec{r}\rangle = |0\rangle, \quad (51)$$

vagyis $\hat{\psi}(\vec{r})$ egy olyan operátor amely egy megadott koordinátájú ($\vec{r}$) részecskét tüntet el.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}' | \hat{\psi}^+(\vec{r}) | 0 \rangle &= \langle \vec{r}' | \sum_i \langle \vec{r}' | \tau_i \rangle^* \hat{a}_i^+ | 0 \rangle = \\ &= \sum_i \varphi_i^*(\vec{r}) \langle \vec{r}' | \hat{a}_i^+ | 0 \rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{r}) \langle \vec{r}' | \tau_i \rangle = \sum_i \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}') = \\ &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle \Rightarrow \hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle = |\vec{r}\rangle \end{aligned} \quad (52)$$

Hasonlóan bizonyíthatjuk, hogy $\hat{\psi}(\vec{r})|\vec{r}\rangle = |0\rangle$. Ezt gyakorlatként az olvasóra hagyjuk.

Az $|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle$ vektro egy olyan állapot értelmez ahol az első részecske koordinátája $\vec{r}_1$, a második részecske koordinátája $\vec{r}_2$, ..., az N-edik részecske koordinátája $\vec{r}_N$. Ezek a vektorok egy folytonos bázist alkotnak az N azonos részecskéből álló rendszer állapotvektoraira. Ez a koordináta reprezentáció.

$$|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle = |\vec{r}_1\rangle |\vec{r}_2\rangle \dots |\vec{r}_N\rangle \quad (53)$$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | \psi_N \rangle \quad (54)$$

A 4. tétel alapján azonnal belátható, hogy:

$$|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle = C \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \hat{\psi}^+(\vec{r}_2) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_N) |0\rangle \quad (55)$$

Ahhoz, hogy $|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle$ normált legyen, $C = \frac{1}{\sqrt{N!}}$:

$$|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \hat{\psi}^+(\vec{r}_2) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_N) |0\rangle \quad (56)$$

Ilyen feltételek mellett az $|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle$ vektorok rendszere egy teljes és ortonormált vektor sokaságot alkot.

$$\int_{(\vec{r}_1)} \int_{(\vec{r}_2)} \dots \int_{(\vec{r}_N)} |\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N| d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = \hat{I} \quad (57)$$

Azonnal belátható, hogy a megválasztott C érték mellett a teljesség feltétele teljesül:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{(\vec{r}_1)} \int_{(\vec{r}_2)} \dots \int_{(\vec{r}_N)} |\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N| d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = \\ &= \int_{(\vec{r}_1)} \dots \int_{(\vec{r}_N)} |C|^2 \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_N) |0\rangle \langle 0| \hat{\psi}(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N = \\ &= |C|^2 \int_{(\vec{r}_1)} \dots \int_{(\vec{r}_{N-1})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-1}) \left[\int_{(\vec{r}_N)} |\vec{r}_N\rangle \langle \vec{r}_N| d\vec{r}_N \right] \\ &\quad \hat{\psi}(\vec{r}_{N-1}) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-1} \end{aligned} \quad (58)$$

Behelyettesítve, hogy

$$\int_{(\vec{r}_N)} |\vec{r}_N\rangle \langle \vec{r}_N| d\vec{r}_N = \hat{I} \quad (59)$$

azonnal adódik:

$$\begin{aligned} I_1 &= |C|^2 \int_{(\vec{r}_1)} \dots \int_{(\vec{r}_{N-1})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-1}) \hat{\psi}(\vec{r}_{N-1}) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-1} = \\ &= |C|^2 \int_{(\vec{r}_1)} \dots \int_{(\vec{r}_{N-2})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-2}) \left[\int_{(\vec{r}_{N-1})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-1}) \hat{\psi}(\vec{r}_{N-1}) d\vec{r}_{N-1} \right] \\ &\quad \hat{\psi}(\vec{r}_{N-2}) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-2} \end{aligned} \quad (60)$$

Az itt megjelenő integrál alatti zárójelre az 1. tétel értelmében igaz, hogy:

$$\int_{(\vec{r}_{N-1})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-1}) \hat{\psi}(\vec{r}_{N-1}) d\vec{r}_{N-1} = \hat{N} \quad (61)$$

Ha az $\hat{N}$ operátort eggyel balra visszük a 3. tétel alapján felírhatjuk, hogy:

$$\hat{\psi}^+ \hat{N} = \hat{N} \hat{\psi}^+ - \hat{\psi}^+ = (\hat{N} - 1) \hat{\psi}^+ \quad (62)$$

Ezek alapján az I_1 -re tovább írhatjuk:

$$\begin{aligned} I_1 &= |C|^2 \int_{(\vec{r}_1)} \dots \int_{(\vec{r}_{N-2})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-2}) \hat{N} \hat{\psi}(\vec{r}_{N-2}) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-2} = \quad (63) \\ &= |C|^2 \int_{(\vec{r}_1)} \dots \int_{(\vec{r}_{N-3})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-3}) (\hat{N} - 1) \int_{(\vec{r}_{N-2})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-2}) \hat{\psi}(\vec{r}_{N-2}) d\vec{r}_{N-2} \\ &\quad \hat{\psi}(\vec{r}_{N-3}) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-3} = \\ &= |C|^2 \int_{(\vec{r}_1)} \dots \int_{(\vec{r}_{N-3})} \hat{\psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}^+(\vec{r}_{N-3}) (\hat{N} - 1) \hat{N} \hat{\psi}(\vec{r}_{N-3}) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{N-3} = \end{aligned}$$

A fenti módszer sorozatos alkalmazásával azonnal adódik, hogy

$$I_1 = |C|^2 \hat{N} (\hat{N} - 1) \dots \hat{I} \quad (64)$$

Mivel $I_1 = \hat{I}$:

$$|C|^2 \hat{N} (\hat{N} - 1) \dots \hat{I} = \hat{I} \quad (65)$$

$\forall \varphi$ állapotra, amihez az szükséges, hogy $|C|^2 = 1/N!$, vagyis $|C| = 1/\sqrt{N!}$.

7 Operátorok másodkvantált formában

Az azonos részecskékből álló rendszer Hamilton függvénye nagyon általánosan felírható mint

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + V(r_i) \right] + \sum_{i,j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i,j,k} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots, \quad (66)$$

ahol az első összegben az úgynevezett egyrészecske tagok, a második összegben a kétrészecske tagok és a harmadik összegben a háromrészecske tagok vannak. Az egyrészecske tagok, csak egy részecske impulzusától és koordinátájától függnak, a kétrészecske tagok két részecske koordinátáitól függnak ...

Az N azonos részecskékből álló rendszer állapotát megadó állapotvektor legyen $|\psi_N\rangle$. Ennek koordináta reprezentációja:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | \psi_N \rangle \quad (67)$$

Az első kvantálás során a H Hamilton függvényhez hozzárendeltük a $\hat{H}$ Hamilton operátort amely a $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ hullámfüggvényekre hat.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(r_i) \right] + \sum_{i,j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i,j,k} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots \quad (68)$$

Az összes fizikai mennyiségekhez hasonlóan operátorokat rendeltünk, melyek szintén a rendszer hullámfüggvényére hatottak. Ez volt az út a klasszikus mechanikáról a hullámmechanikára való áttérésre.

Második kvantálás során a $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ koordináta-reprezentációban értelmezett hullámfüggvények helyett az $\rightarrow |n_1, n_2, \dots, n_i\rangle$ elfoglalási szám reprezentációban értelmezett állapotvektorokkal dolgozunk. Egy $\rightarrow |n_1, n_2, \dots, n_i\rangle$ állapotvektor egy olyan kvantummechanikai állapotot jellemez amelyben n_i részecske van a $|\tau_i\rangle$ tiszta egyrészecske állapotban.

A lényeges kérdés itt az, hogy milyenek lesznek azok az operátorok amelyek ezen állapotvektorokra hatnak? $H \rightarrow \hat{H} = ?$ illetve egy tetszőleges operátor esetén: $A \rightarrow \hat{A} = ?$. A választ a következő fontos tétel adja:

Tétel:

Az **egyrészecske tagok másodkvantálása** (az egyrészecske tagokhoz való operátor hozzárendelés)

$$\sum_i K_1(\vec{r}_i, d\vec{r}_i/dt) \rightarrow \int_{\{\vec{r}\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{K}_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt) \hat{\Psi}(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (69)$$

ahol $\hat{K}_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt)$ a K_1 egyrészecske tagokhoz rendelt első kvantált operátorok.

Hasonlóan a **kétrészecske tagok másodkvantálása**:

$$\sum_{i,j} K_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \rightarrow \int_{\{\vec{r}\}} \int_{\{\vec{r}'\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{\Psi}^+(\vec{r}') \hat{K}_2(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}' \quad (70)$$

A **háromrészecske tagok másodkvantálása** meg:

$$\begin{aligned} & \sum_{i,j,k} K_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) \rightarrow \\ & \rightarrow \int_{\{\vec{r}\}} \int_{\{\vec{r}'\}} \int_{\{\vec{r}''\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{\Psi}^+(\vec{r}') \hat{\Psi}^+(\vec{r}'') \hat{K}_3(\vec{r}, \vec{r}', \vec{r}'') \hat{\Psi}(\vec{r}'') \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}' d\vec{r}'' \quad (71) \end{aligned}$$

Bizonyítás:

A bizonyítást az egyrészecske tagok esetére végezzük. A bizonyítás hasonló több-részecske tagok esetére is csak sokkal hosszadalmasabb. A bizonyítás során felhasználjuk, hogy az **elsőkvantált** és **másodkvantált** mátrixelemek ugyanazok bármely két tetszőleges $|\Psi\rangle$ és $|\Psi'\rangle$ állapot között.

Kiindulunk a $\langle \Psi' | \sum_i \hat{K}_1 | \Psi \rangle = \langle \Psi' | \sum_i \hat{K}_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt) | \Psi \rangle$ mátrixelemből. Felírható, hogy:

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi' | \sum_i \hat{K}_1 | \Psi \rangle = \\
& = \int_{\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\}} \Psi'^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \left[\sum_i K_1 (\vec{r}_i, d\vec{r}_i/dt) \right] \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (72) \\
& \Psi'^* (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | \Psi' \rangle^* = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | n'_1 n'_2 \dots n'_j \dots \rangle^* \quad (73) \\
& \Psi (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | \Psi \rangle = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | n_1 n_2 \dots n_j \dots \rangle \quad (74)
\end{aligned}$$

A fentiek alapján tovább írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi' | \sum_i \hat{K}_1 | \Psi \rangle = \\
& = \int_{\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\}} \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | n'_1 n'_2 \dots n'_j \dots \rangle^* \cdot \\
& \cdot \left[\sum_i \hat{K}_1 \right] \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | n_1 n_2 \dots n_j \dots \rangle d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = \\
& = \langle n'_1 n'_2 \dots n'_j \dots | \{ \int_{\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\}} |\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N \rangle \cdot \\
& \cdot \left[\sum_i \hat{K}_1 \right] \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \} | n_1 n_2 \dots n_j \dots \rangle, \quad (75)
\end{aligned}$$

ahonnan azonnal következik, hogy a $\sum_i \hat{K}_1$ operátor másodkvantált alakja:

$$\hat{K}_m = \sum_{i=1}^N \hat{K}_m^i = \int_{\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\}} |\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N \rangle \left[\sum_i \hat{K}_1 \right] \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (76)$$

Ezt az alakot tovább tudjuk alakítani, felhasználva, hogy:

$$|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\Psi}^+ (\vec{r}_1) \hat{\Psi}^+ (\vec{r}_2) \dots \hat{\Psi}^+ (\vec{r}_N) |0\rangle \quad (77)$$

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \hat{\Psi} (\vec{r}_N) \dots \hat{\Psi} (\vec{r}_2) \hat{\Psi} (\vec{r}_1) \quad (78)$$

$\hat{K}_m^1$ -re ezek alapján ($i = 1$):

$$\begin{aligned}
\hat{K}_m^1 &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \hat{\Psi}^+ (\vec{r}_1) \hat{\Psi}^+ (\vec{r}_2) \dots \hat{\Psi}^+ (\vec{r}_N) |0\rangle \hat{K}_1 (\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) \langle 0 | \hat{\Psi} (\vec{r}_N) \dots \\
&\dots \hat{\Psi} (\vec{r}_2) \hat{\Psi} (\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = \quad (79)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \hat{\Psi}^+ (\vec{r}_1) \hat{\Psi}^+ (\vec{r}_2) \dots | \vec{r}_N \rangle \hat{K}_1 (\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) \langle \vec{r}_N | \dots \\
&\dots \hat{\Psi} (\vec{r}_2) \hat{\Psi} (\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = \quad (80)
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\Psi}^+(\vec{r}_{N-1}) \hat{K}_1(\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) \hat{\Psi}(\vec{r}_{N-1}) \dots$$

$$\dots \hat{\Psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_{N-1} \int |\vec{r}_N\rangle \langle \vec{r}_N| d\vec{r}_N = \quad (81)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\Psi}^+(\vec{r}_{N-1}) \hat{K}_1(\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) \hat{\Psi}(\vec{r}_{N-1}) \dots$$

$$\dots \hat{\Psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_{N-1} = \quad (82)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\Psi}^+(\vec{r}_{N-2}) \hat{K}_1(\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) \cdot$$

$$\cdot \left[\int \hat{\Psi}^+(\vec{r}_{N-1}) \hat{\Psi}(\vec{r}_{N-1}) d\vec{r}_{N-1} \right] \hat{\Psi}(\vec{r}_{N-2}) \dots \hat{\Psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_{N-2} = \quad (83)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\Psi}^+(\vec{r}_{N-2}) \hat{K}_1(\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) \hat{N} \hat{\Psi}(\vec{r}_{N-2}) \dots$$

$$\dots \hat{\Psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_{N-2} = \quad (84)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\Psi}^+(\vec{r}_{N-3}) \hat{K}_1(\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) (\hat{N} - 1) \cdot$$

$$\cdot \left[\int \hat{\Psi}^+(\vec{r}_{N-2}) \hat{\Psi}(\vec{r}_{N-2}) d\vec{r}_{N-2} \right] \hat{\Psi}(\vec{r}_{N-3}) \dots \hat{\Psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_{N-3} = \quad (85)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \hat{\Psi}^+(\vec{r}_1) \dots \hat{\Psi}^+(\vec{r}_{N-3}) \hat{K}_1(\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) (\hat{N} - 1) \hat{N} \hat{\Psi}(\vec{r}_{N-3}) \dots$$

$$\dots \hat{\Psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_{N-3} = \quad (86)$$

$$= \dots = \quad (87)$$

$$= \frac{(N-1)!}{N!} \int_{\{\vec{r}_1\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}_1) \hat{K}_1(\vec{r}_1, d\vec{r}_1/dt) \hat{\Psi}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1. \quad (88)$$

Hasonló módon igazolható, hogy:

$$\hat{K}_m^i = \frac{(N-1)!}{N!} \int_{\{\vec{r}_i\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}_i) \hat{K}_1(\vec{r}_i, d\vec{r}_i/dt) \hat{\Psi}(\vec{r}_i) d\vec{r}_i. \quad (89)$$

Ezek alapján megkapjuk a $\hat{K}_m$ keresett alakját:

$$\hat{K}_m = \sum_{i=1}^N \frac{(N-1)!}{N!} \int_{\{\vec{r}_i\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}_i) \hat{K}_1(\vec{r}_i, d\vec{r}_i/dt) \hat{\Psi}(\vec{r}_i) d\vec{r}_i = \quad (90)$$

$$= N \frac{(N-1)!}{N!} \int_{\{\vec{r}\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{K}_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt) \hat{\Psi}(\vec{r}) d\vec{r} =$$

$$= \int_{\{\vec{r}\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{K}_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt) \hat{\Psi}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (91)$$

Ezáltal a tételünket bizonyítottuk az egyrészecske operátorok másodkvantált alakjára vonatkozóan.

Az egyrészecske és több részecske operátorok felírhatók direkt módon az $\hat{a}^+$ keltő és $\hat{a}$ eltüntető operátorok segítségével. Ezen alak a gyakorlati felhasználások szempontjából nagyon fontos, és általában ilyen alakban használjuk őket.

Vizsgáljuk először a $\hat{K}_m$ egyrészcseke operátort. A (91) alakban behelyettesítjük a

$$\hat{\Psi}^+(\vec{r}) = \sum_j \langle \vec{r} | \tau_j \rangle^* \hat{a}_j^+ \quad (92)$$

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_j \langle \vec{r} | \tau_j \rangle \hat{a}_j, \quad (93)$$

alakokat. Ezáltal

$$\hat{K}_m = \int_{\{\vec{r}\}} [\sum_i \langle \vec{r} | \tau_i \rangle^* \hat{a}_i^+] \hat{K}_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt) [\sum_j \langle \vec{r} | \tau_j \rangle \hat{a}_j] d\vec{r} = \quad (94)$$

$$\sum_i \sum_j \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \int \varphi_i^*(\vec{r}) \hat{K}_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt) \varphi_j(\vec{r}) d\vec{r} = \quad (95)$$

$$= \sum_i \sum_j \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \langle i | \hat{K}_1 | j \rangle, \quad (96)$$

és az egyrészcseke operátor másodkvantált alakja:

$$\sum_{i=1}^N K_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt) \rightarrow \sum_{i,j} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \langle i | \hat{K}_1 | j \rangle \quad (97)$$

$$(\langle i | \hat{K}_1 | j \rangle = \int \varphi_i^*(\vec{r}) \hat{K}_1(\vec{r}, d\vec{r}/dt) \varphi_j(\vec{r}) d\vec{r})$$

Teljesen analóg módon megkaphatjuk a kétrészcseke operátorok másodkvantált alakját a keltő és eltüntető operátorok segítségével:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} K_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) &\rightarrow \int_{\{\vec{r}, \vec{r}'\}} \hat{\Psi}^+(\vec{r}) \hat{\Psi}^+(\vec{r}') \hat{K}_2(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' = \\ &= \int [\sum_j \langle \vec{r} | \tau_j \rangle^* \hat{a}_j^+] [\sum_k \langle \vec{r}' | \tau_k \rangle^* \hat{a}_k^+] \hat{K}_2(\vec{r}, \vec{r}') [\sum_i \langle \vec{r} | \tau_i \rangle \hat{a}_i] [\sum_l \langle \vec{r}' | \tau_l \rangle \hat{a}_l] d\vec{r} d\vec{r}' = \\ &= \sum_{j,k,i,l} \hat{a}_j^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_i \hat{a}_l \int_{\{\vec{r}, \vec{r}'\}} \varphi_j^*(\vec{r}) \varphi_k^*(\vec{r}') \hat{K}_2(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_i(\vec{r}) \varphi_l(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' = \\ &= \sum_{j,k,i,l} \hat{a}_j^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_i \hat{a}_l \langle jk | \hat{K}_2 | il \rangle \quad (98) \end{aligned}$$

A kétrészcseke operátor másodkvantált alakja ezáltal:

$$\sum_{i,j} K_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \rightarrow \sum_{j,k,i,l} \hat{a}_j^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_i \hat{a}_l \langle jk | \hat{K}_2 | il \rangle \quad (99)$$

$$(\langle jk | \hat{K}_2 | il \rangle = \int_{\{\vec{r}, \vec{r}'\}} \varphi_j^*(\vec{r}) \varphi_k^*(\vec{r}') \hat{K}_2(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_i(\vec{r}) \varphi_l(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}')$$

Hasonlóan megadható a több részecske operátorok alakjai a keltő és eltüntető operátorok segítségével.

A több részecske rendszer másodkvantált Hamilton operátora tehát, ha csak a párkölcsönhatásokat (kétrészecske kölcsönhatásokat) vesszük figyelembe:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \langle i | \hat{K}_1 | j \rangle + \sum_{j,k,i,l} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_l \langle jk | \hat{K}_2 | il \rangle \quad (100)$$

Ez az operátor az $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ típusú elfoglalási szám állapotokra hat. Sok azonos részecskét tartalmazó kvantummechanikai vagy kvantum-statisztikai rendszerek esetén ezen operátorral sokkal kényelmesebb dolgozni. Kvantum-statisztikus fizikai alkalmazások esetén jóval könnyebben kiszámíthatjuk vagy megközelíthetjük a rendszer állapotösszegét.