

Wstęp do Kwantowej Teorii Wielu Ciał

Zestaw 4. Druga kwantyzacja. Elementy statystyki kwantowej, operacje na wektorach stanu w przestrzeni Focka.

4.1. Dla układu nieoddziałujących cząstek opisanych Hamiltonianem

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (1)$$

proszę policzyć funkcję rozdziału

$$Z_G = \text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}) \quad (2)$$

a następnie potencjał termodynamiczny wyrażony wzorem

$$\Omega = -k_B T \ln Z_G. \quad (3)$$

Dla fermionów oraz bozonów policzyć całkowitą średnią liczbę cząstek oraz średnią liczbę cząstek w danym stanie kwantowym, przy czym

$$\langle N \rangle = \sum_i \langle n_i \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}. \quad (4)$$

4.2. W drugiej kwantyzacji wieloelektronowe funkcje bazowe reprezentowane są przez wektory stanu w przestrzeni Focka

$$|n_{\nu_1}, n_{\nu_2} \dots n_{\nu_\infty}\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_{\nu_1}! \dots n_{\nu_\infty}!}} \hat{S}_\pm(\psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \dots \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N)), \quad (5)$$

które można wyrazić za pomocą operatorów kreacji

$$|n_{\nu_1}, n_{\nu_2} \dots n_{\nu_\infty}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{\nu_1}! \dots n_{\nu_\infty}!}} (\hat{b}_{\nu_1}^\dagger)^{n_{\nu_1}} \dots (\hat{b}_{\nu_\infty}^\dagger)^{n_{\nu_\infty}} |0\rangle. \quad (6)$$

Zakładając, że stan próżnie jest unormowany $\langle 0|0\rangle = 1$ proszę udowodnić, że

$$\langle n_{\nu_1}, n_{\nu_2} \dots n_{\nu_\infty} | n_{\nu'_1}, n_{\nu'_2} \dots n_{\nu'_\infty} \rangle = \delta_{\nu_1 \nu'_1} \delta_{\nu_2 \nu'_2} \dots \delta_{\nu_\infty \nu'_\infty} \quad (7)$$

4.3. Dla układu oddziałujących elektronów, którego Hamiltonian w drugiej kwantyzacji przyjmuje postać

$$\hat{H} = \sum_{\nu_a \nu_b} \langle \psi_{\nu_a} | \hat{T} | \psi_{\nu_b} \rangle \hat{a}_{\nu_a}^\dagger \hat{a}_{\nu_b} + \frac{1}{2} \sum_{\nu_a, \nu_b, \nu_c, \nu_d} \langle \psi_{\nu_a} \psi_{\nu_b} | \hat{V} | \psi_{\nu_c} \psi_{\nu_d} \rangle \hat{a}_{\nu_a}^\dagger \hat{a}_{\nu_b}^\dagger \hat{a}_{\nu_c} \hat{a}_{\nu_d} \quad (8)$$

proszę wyprowadzić reguły Slatera-Condon'a używając formalizmu drugiej kwantyzacji.

Wskazówka: Patrz zestaw 2. Wyznaczniki Slatera w drugiej kwantyzacji mają postać

$$\psi_\nu = \psi_{\nu_1 \dots \nu_N} = |n_{\nu_1}, n_{\nu_2} \dots n_{\nu_\infty}\rangle, \quad (9)$$

$$\psi_{\nu_i \rightarrow \nu_p} = \hat{a}_{\nu_p}^\dagger \hat{a}_{\nu_i} |n_{\nu_1}, n_{\nu_2} \dots n_{\nu_\infty}\rangle, \quad (10)$$

$$\psi_{\nu_i \rightarrow \nu_p, \nu_j \rightarrow \nu_k} = \hat{a}_{\nu_k}^\dagger \hat{a}_{\nu_j} \hat{a}_{\nu_p}^\dagger \hat{a}_{\nu_i} |n_{\nu_1}, n_{\nu_2} \dots n_{\nu_\infty}\rangle. \quad (11)$$