

Задачи к лекции «многочастичная квантовая механика и вторичное квантование»

Побойко Игорь

1 марта 2017

Упражнения

В этом наборе упражнений мы покажем, как устроены одночастичные и многочастичные волновые функции на языке вторичного квантования. Для решения этих задач достаточно использовать только коммутационные соотношения $[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = \hat{\psi}(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) \mp \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, а также тот факт, что $\hat{\psi}(\mathbf{x})|0\rangle = 0$. Во всех упражнениях исследуйте обе статистики — Бозе и Ферми.

1. Как записать элементы одночастичного координатного базиса $|\mathbf{x}\rangle$ и двухчастичного базиса $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ в представлении вторичного квантования? Как выглядит нормировка этих состояний $\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle$ и $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2|\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2\rangle$? Как записывается проектор на одночастичное $\hat{\mathbb{P}}(\mathcal{F}_1)$ и двухчастичное $\hat{\mathbb{P}}(\mathcal{F}_2)$ подпространства через эти вектора?
2. Пусть состояние $|\psi_1\rangle$ описывается некой известной одночастичной волновой функцией $\psi_1(\mathbf{x})$. Как его записать на языке вторичного квантования? Покажите непосредственным вычислением, что $\langle \mathbf{x}|\psi_1\rangle = \psi_1(\mathbf{x})$.
3. Теперь по аналогии рассмотрите двухчастичное состояние, в котором одна частица находится в состоянии $\psi_1(\mathbf{x})$, а вторая — в состоянии $\psi_2(\mathbf{x})$, ортогональном ψ_1 . Покажите непосредственным вычислением, что при этом соответствующая координатная волновая функция $\psi_{12}(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2|\psi_1, \psi_2\rangle$ представляет собой детерминант Слэтера в случае, если ψ -операторы образуют фермионную алгебру, и соответствующую симметричную комбинацию если алгебра бозонная. Отнормируйте это состояние: $\langle \psi_1, \psi_2|\psi_1, \psi_2\rangle = 1$.
4. Подействовав оператором двухчастичного взаимодействия

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_1) \quad (1)$$

на базисное состояние $|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$, докажете эквивалентность этого оператора соответствующему оператору в представлении первичного квантования:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m) \quad (2)$$

5. Рассмотрите среднее значение оператора $\hat{V}$ по состоянию $|\psi_1, \psi_2\rangle$. Покажите, что при этом получается два члена, первый из которых имеет смысл классического взаимодействия плотностей («член Хартри»), а второй не имеет классической интерпретации, и к тому же зависит от статистики («член Фока», или же «обменный член»).

Задача 1 (флуктуации числа фермионов)

Рассмотрим одномерную систему N бесспиновых фермионов, живущих на одномерной отрезке большой длины L с периодическими граничными условиями (для всей задачи подразумевается термодинамический предел $L \rightarrow \infty$ при фиксированной концентрации частиц $n = \frac{N}{L}$; поэтому все поправки вида $\sim \frac{1}{N}$ можно с чистой совестью выбрасывать). Гамильтониан такой системы имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{el} = \int_0^L dx \hat{\psi}^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}(x), \quad \int_0^L \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) = N = \text{const} \quad (3)$$

1. Используя преобразование Фурье, диагонализуйте гамильтониан $\hat{H}_{el}$ — приведите его к виду невзаимодействующих «фермионных осцилляторов» $\hat{H}_{el} = \sum_p \epsilon_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p$, с коммутационными соотношениями $\{\hat{c}_p, \hat{c}_q^\dagger\} = \delta_{pq}$. Какой закон дисперсии полученных квазичастиц ϵ_p ?
2. Покажите, что основное состояние $|\Omega\rangle$ такой системы соответствует заполненной ферми-сфере, а именно — $|\Omega\rangle = \prod_{|p| < p_F} \hat{c}_p^\dagger |0\rangle$ (что в представлении чисел заполнения соответствует состоянию с $n_{k < k_F} = 1$ и $n_{k > k_F} \equiv 0$). Свяжите

величину граничного импульса Ферми p_F с концентрацией частиц n из условия, что полное число частиц, которое записывается следующим образом:

$$\hat{N} = \int_0^L dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) = \sum_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p, \quad (4)$$

равно $\langle \hat{N} \rangle = N$ (квантомеханическое среднее по состоянию $|\Omega\rangle$). Вычислите энергию Ферми $E_F = \frac{p_F^2}{2m}$, а также энергию основного состояния в пересчёте на одну частицу $\epsilon = \frac{1}{N} \langle \hat{H} \rangle$.

- Обратите внимание, что для состояний с $p < p_F$ можно формально ввести операторы рождения и уничтожения *дырок*, согласно определению $\hat{a}_p \equiv \hat{c}_p^\dagger$ и $\hat{a}_p^\dagger \equiv \hat{c}_p$; при этом алгебра новых операторов точно такая же¹. При этом основное состояние $|\Omega\rangle$ в терминах новых частиц будет совпадать с вакуумом $|0\rangle$ (быть может, с точностью до несущественной фазы). Перепишите гамильтониан $\hat{H}$, а также ψ -операторы, в терминах новых операторов. Нарисуйте закон дисперсии новых квазичастиц.
- Рассмотрите отрезок конечной (но достаточно большой) длины $p_F^{-1} \ll l \ll L$. Оператор числа частиц на этом отрезке записывается следующим образом:

$$\hat{n} = \int_0^l dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \quad (5)$$

Вычислите флуктуацию числа фермионов на этом отрезке $\delta n^2 = \langle \hat{n}^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle^2$.

- Пусть теперь имеется такой-же *классический* газ, и каждая из частиц независимо от остальных равномерно распределена по всему объёму. Найдите полную функцию распределения числа частиц в маленьком отрезке длины l ; вычислите флуктуацию этого числа δn^2 . Сравните полученные ответы.

Источник ЛШ, глава 5 «идеальный Ферми-газ», задача 26.

Задача 2 (Фриделевские осцилляции)

Рассмотрите одномерный Ферми-газ из предыдущей задачи, по-прежнему помещённый в термодинамически большой «ящик», но на сей раз этот ящик моделируется бесконечными стенками в точках $x = 0$ и $x = L$ (тем самым, граничные условия — нулевые вместо периодических).

- Диагонализуйте гамильтониан, перейдя к базису собственных состояний одночастичного гамильтониана — стоячим волнам; определите, как устроено основное состояние $|\Omega\rangle$. Хотя импульс не является теперь хорошим квантовым числом, поскольку трансляционная инвариантность нарушена границами; однако модуль импульса — является, поэтому по-прежнему можно говорить об импульсе Ферми p_F . Покажите, что он связан с концентрацией частиц n точно таким же выражением, как и в случае периодических граничных условий.
- Вычислите распределение плотности газа вблизи стенки в термодинамическом пределе (то есть $x \ll L$). Оно даётся следующей величиной:

$$\rho(x) = \langle \hat{\rho}(x) \rangle = \langle \Omega | \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) | \Omega \rangle \quad (6)$$

Hint: возможно, вам опять покажется удобным «частично-дырочное» представление для ψ -операторов.

¹Такой трюк работает только в случае статистики Ферми!