Задачи к лекции «многочастичная квантовая механика и вторичное квантование»

Упражнения (35 баллов)

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 $\left[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{y})\right]_\mp = \hat{\psi}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{y}) \mp \hat{\psi}(\boldsymbol{y})\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})$, а также тот факт, что $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\,|0\rangle = 0$. Во всех упражнениях исследуйте обе статистики — Бозе и Ферми.

1. **(5 баллов)** Как записать элементы одночастничного координатного базиса $|\boldsymbol{x}\rangle$ и двухчастичного базиса $|\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2\rangle$ в представлении вторичного квантования? Как выглядит нормировка этих состояний $\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle$ и $\langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2|\boldsymbol{x}'_1, \boldsymbol{x}'_2\rangle$? Как записывается проектор на одночастичное $\hat{\mathbb{P}}(\mathcal{F}_1)$ и двухчастичное $\hat{\mathbb{P}}(\mathcal{F}_2)$ подпространства через эти вектора?

2. **(5 баллов)** Пусть состояние $|\psi_1\rangle$ описывается некой известной одночастичной волновой функцией $\psi_1(\boldsymbol{x})$. Как его записать на языке вторичного квантования? Покажите непосредственным вычислением, что $\langle \boldsymbol{x}|\psi_1\rangle = \psi_1(\boldsymbol{x})$.

3. **(5 баллов)** Теперь по аналогии расмотрите двухчастичное состояние, в котором одна частица находится в состоянии $\psi_1(\boldsymbol{x})$, а вторая — в состоянии $\psi_2(\boldsymbol{x})$, ортогональном $\psi_1(\boldsymbol{x})$. 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 соответсвующую симметричную комбинацию если алгебра бозонная. Отнормируйте это состояние: $\langle \psi_1, \psi_2|\psi_1, \psi_2\rangle = 1$.

4. **(10 баллов)** Подействовав оператором двухчастичного взаимодействия
$$\hat{V} = \frac{1}{2}\int d\boldsymbol{x}_1 d\boldsymbol{x}_2 \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_2)V(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}_1) \tag{1}$$
на базисное состояние $|\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N\rangle$, докажите эквивалентность этого оператора соответствующему оператору в представлении первичного квантования:
$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{n\neq m} V(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}_m) \tag{2}$$

5. **(10 баллов)** 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 интепретации, и к тому же зависит от статистики («член *Фока*», или же «обменный член»).

Задача 1 (флуктуации числа фермионов на отрезке, 35 баллов)

Вступление: Как правило, в задачах многочастичной квантовой механики число частиц N фиксированно — и работать необходимо не во всём Фоковском пространстве, но в подпространстве $\mathcal{F}_N$, что, как правило, достаточно неудобно: скажем, задача поиска основного состояния становится задачей поиска *условного минимума* (энергии, при условии $\left\langle \hat{N} \right\rangle = N$). Стандартный способ решения задач условного экстремума — это ввод множителей Лагранжа: вместо условного минимума оператора $\hat{H}$, необходимо искать безусловный минимум оператора $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$; а затем находить значение множителя Лагранжа μ (который носит название **химического потенциала**) из условия $\left\langle \hat{N} \right\rangle = N$. Такой трюк работает как для поиска основного состояния (минимизация энергии), так и для поиска термодинамически равновесных конфигураций при конечной температуре (минимизация свободной энергии).

Рассмотрите одномерную систему N бесспиновых фермионов, живущих на одномерной отрезке большой длины L с периодическими граничными условиями (для всей задачи подразумевается термодинамический предел $L \to \infty$ при фиксированной концентрации частиц $n = \frac{N}{L}$; поэтому все поправки вида $\sim \frac{1}{N}$ можно с чистой совестью выбрасывать); система описывается следующим гамильтонианом
$$\hat{H}_{el} = \int_0^L dx \hat{\psi}^\dagger(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu\right)\hat{\psi}(x) \tag{3}$$

1. Используя преобразование Фурье, диагонализуйте гамильтониан $\hat{H}_{el}$ — приведите его к виду невзаимодействующих «фермионных осцилляторов» $\hat{H}_{el} = \sum_p \epsilon_p \hat{a}^\dagger_p \hat{a}_p$, с коммутационными соотношениями $\{\hat{a}_p, \hat{a}^\dagger_q\} = \delta_{pq}$. Какой закон дисперсии полученных квазичастиц ϵ_p?

2. Покажите, что основное состояние $|\Omega\rangle$ такой системы соответствует заполненной ферми-сфере, а именно — $|\Omega\rangle = \prod_{|p|<p_F} \hat{a}^\dagger_p |0\rangle$ (что в представлении чисел заполнения соответствует состоянию с $n_p = \theta(p_F - p)$). Свяжите величину граничного импульса Ферми p_F с химическим потенциалом (который носит название энергии Ферми). Свяжите обе эти величины с концентрацией частиц n из условия $\left\langle \hat{N} \right\rangle = N$. Вычислите также энергию основного состояния в пересчёте на одну частицу $\epsilon = \frac{1}{N} \left\langle \hat{H} \right\rangle$.

3. Можно перейти от исходных операторов рождения и уничтожения *электронов* к операторам рождения и уничтожения *квазичастиц* — элементарных возбуждений системы — электронов для $p > p_F$ и *дырок* для $p < p_F$:
$$\hat{c}_p \equiv \begin{cases} \hat{a}_p, & p > p_F \\ \hat{a}^\dagger_p, & p < p_F \end{cases}, \tag{4}$$
при этом алгебра новых операторов точно такая же[1], однако основное состояние $|\Omega\rangle$ в терминах новых частиц будет совпадать с вакуумом $|0\rangle$. Перепишите гамильтониан $\hat{H}$, а также ψ-операторы, в терминах новых операторов. Нарисуйте закон дисперсии новых квазичастиц[2].

4. Рассмотрите отрезок конечной (но достаточно большой) длины $p_F^{-1} \ll l \ll L$. Оператор числа частиц на этом отрезке записывается следующим образом:
$$\hat{n} = \int_0^l dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \tag{5}$$
Вычислите флуктуацию числа фермионов на этом отрезке $\delta n^2 = \left\langle \hat{n}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{n} \right\rangle^2$.

5. Пусть теперь имеется такой-же *классический* газ, и каждая из частиц независимо от остальных равномерно распределена по всему объему. 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, 30 баллов)

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).

1. 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.

2. Вычислите распределение плотности газа вблизи стенки в термодинамическом пределе (то есть $x \ll L$). Оно даётся следующей величиной:
$$\rho(x) = \langle \hat{\rho}(x) \rangle = \langle \Omega | \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) | \Omega \rangle \tag{6}$$

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

[1]Такой трюк работает только в случае статистики Ферми!

[2]Обратите внимание: эти операторы описывают *возбуждения*, а энергия возбуждений — по определению положительная величина