Lecture notes FY8305

13. august 2019

Digitalisert fra FAG 74986 Funksjonal-integral metoder HØST 1996. Brukes per 2019 som forelesningsnotater til selvstudium for faget FY8305 -Funksjonalintegral metoder i kondenserte fasers fysikk

Innhold

1 Kort rekapitulering av 2. kvantisering for fermioner og bosoner

Notasjon: λ = sett av kvantetall som bestemmer en én-partikkel tilstand.

1.1 Mangepartikkelbasis

Eks 1.

$$\begin{aligned}
\lambda &= (\vec{k}, \sigma) : \text{Bølgetall, spinn} \\
\lambda &= (i, \sigma) : \text{Gitterpunkt, spinn} \\
\lambda &= (n, i) : \text{Orbital, gitterpunkt}
\end{aligned}$$

En mange-partikkel basis kan skrives $|\phi\rangle = |n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2}, \ldots, n_{\lambda_N}\rangle$. Mangepartikkeltilstander er bygget opp av én-partikkel tilstander, men hvor én-partikkeltilstandene ikke nødvendighvis er uavhengige. Dersom ett av kvantetall-settene, λ_i, endres, får denne spredningen generelt konsekvenser for fordelingen av kvantetall i de øvrige kvantetallene $\{\lambda_j\}_{j \neq i}$. Vi tenker oss at en generell mangepartikkeltilstand kan bygges opp som en lineærkombinasjon av $|\phi\rangle$-er;

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_{\lambda_1}, \ldots, n_{\lambda_N}} \phi_{\lambda_1, \ldots, n_{\lambda_N}} |\lambda_1, \ldots, n_{\lambda_N}\rangle . \tag{1}$$

Én-bestemt tilstandsvektor $|n_{\lambda_1}, \ldots, n_{\lambda_N}\rangle$ kan kreves fra en vakuum-tilstand $|0\rangle$ (ingen kvant i noen av de mulige én-partikkeltilstandene) via kreasjonsoperatorer.

bosoner : $a^\dagger \lambda$

fermioner : $c^\dagger \lambda$

Et kvant i en én-partikkeltilstand kan destrueres v.h.a annihilasjonsoperatorene

bosoner : $a\lambda$

fermioner : $c\lambda$

Disse operatorene oppfyller diverse kommutasjonsrelasjoner

$$[a\lambda, a\lambda'] = [a^\dagger \lambda, a^\dagger \lambda'] = 0 \tag{2}$$

$$[a\lambda, a^\dagger \lambda'] = \delta_{\lambda\, \lambda'} \tag{3}$$

$$[A, B] = AB - BA \tag{4}$$

$$\{c^\dagger \lambda, c^\dagger \lambda'\} = \{c\lambda, c\lambda'\} = 0 \tag{5}$$

$$\{c\lambda, c^\dagger \lambda'\} = \delta_{\lambda\, \lambda'} \tag{6}$$

I tillegg kommer Pauli-prinsippet, som gir symmetriske/antisymmetriske kommutatorer ved ombytte, avhengig om det er fermion eller boson.

1.2 Fra klassisk til 2.kvantisering av én-partikkel operatorer

For én-partikkel operatorer har vi som regel for den kinetiske energien

$$T = \sum_i T(\vec{r}_i, \vec{p}_i) = \sum_i T\left(\vec{r}_i, \frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{7}$$

Eks 2. Eksternt elektrostatisk potensial:

$$T = \sum_i V_{\text{ext}}(\vec{r}_i) \tag{8}$$

Eks 3. Kinetisk energi:

$$T = \sum_i \frac{p^2}{2m} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \tag{9}$$

Eks 4. Krystall-potensial:

$$T = \sum_i \sum_j v_{\text{cryst}}\left(\vec{r}_i, \vec{R}_j\right) \tag{10}$$

2. kvantisering av en slik operator kan skrives

$$T = \sum_{\lambda,\lambda'} T_{\lambda\,\lambda'} c_\lambda^\dagger c_{\lambda'}, \tag{11}$$

hvor

$$T_{\lambda\,\lambda'} = \langle \lambda | T(\vec{r}, \vec{p}) | \lambda' \rangle \,. \tag{12}$$

NB: Matriseelementet av én-partikkel operatorer er bestemt av matrise-elementer i Hilbertrommet av én-partikkel tilstander

1.3 Fra klassisk til 2. kvantisering av to-partikkel operator

Vi ser typisk på par-potensialer

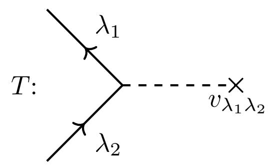
$$V = \sum_{i,j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \,. \tag{13}$$

Eks 5. Vekselvirkning mellom to ladninger

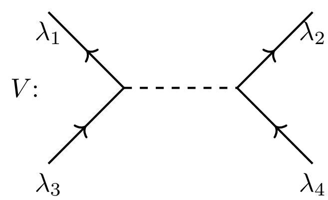
$$V = \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{14}$$

2. kvantisert versjon er

$$V = \sum_{\lambda_1,\ldots,\lambda_4} V_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} c_{\lambda_1}^\dagger c_{\lambda_2}^\dagger c_{\lambda_3} c_{\lambda_4}, \tag{15}$$



Figur 1: Spredning fra eksternt potensial $v_{\lambda_1\lambda_2} c^\dagger_{\lambda_1} c_{\lambda_2}$



Figur 2: Vekselvirkning mellom to partikler.

hvor igjen

$$V_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} = \langle\lambda_1\,\lambda_2|V\,(\vec{r}_i, \vec{r}_j)|\lambda_4\,\lambda_3\rangle \tag{16}$$

Matrise-elementer av to-partikkel operatorer er bestemt av matrise-elementer i Hilbert-rommet av to-partikkel tilstander.

Hamilton-operatoren:

$$H = T + V \tag{17}$$

$$T = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 \tag{18}$$

Så langt er dette bare gjort for fermione-operatorer, men helt tilsvarende utsagn gjelder selvsagt for bosoner. 2. kvantisert versjon av Hamilton-operatoren for et vekselvirkende, materielt, boson-system har identisk samme form som **??**. Legg merke til at hvert ledd i H har like mange $c^\dagger_\lambda$ som $c_{\lambda'}$.

2 Koherente tilstander for bosoner

3 Grassman variable

4 Koherente tilstander for fermioner