

Elementy teorii reprezentacji i formalizmu przestrzeni Hilberta - przypomnienie

Zwykle stan układu opisujemy za pomocą funkcji falowej $\Psi_n(\xi, t)$ zależnej od zespołu wszystkich współrzędnych przestrzennych ξ i czasu t (czasami także spinu); n – w ogólności zespół liczb kwantowych

W ogólności możemy mówić o **wektorach stanu** z pewnej abstrakcyjnej przestrzeni (wektorowej) – **przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$** (może być skończenie lub nieskończenie wymiarowa; jeśli wymiary są przeliczalne to przestrzeń *ośrodkowa*, jeśli nie to normowanie wektorów do funkcji delta).

W przestrzeni można wybrać bazę $|i\rangle$, $i = 1, 2, \dots$; tzw. wektory „ket”;

$\Psi(\xi, t)$ - to przedstawienia (reprezentacje) położeniowe wektorów stanu;
ale równie dobrze możemy mieć reprezentację pędową wektora stanu $\Psi(p, t)$

można zdefiniować przestrzeń sprzężoną (dualną) z wektorami „bra” $\langle i|$ sprzężonymi hermitowsko do wektorów „ket”, oraz iloczyn skalarny w $\mathcal{H}$ [1]

$$\langle n|m \rangle = (\text{to samo}) = \int \Psi_n^*(\xi) \Psi_m(\xi) d\xi ,$$

w $\mathcal{H}$ działają operatory np. $\hat{F}|a\rangle = |b\rangle$, $\langle b| = \langle a|\hat{F}^\dagger$.

Stan układu to jeden z wektorów stanu $\mathcal{H}$; można go przedstawić (reprezentować) w bazie $|i\rangle$

$$|n\rangle = \sum_i c_i |i\rangle, \quad (\text{lub całka})$$

a z ortonormalności bazy: $c_i = \langle i|n\rangle$ (c w ogólności zależą od n).

Bazę w $\mathcal{H}$ mogą stanowić wektory własne dowolnego operatora (hermitowskiego);

może to być: operator położenia $\hat{x}$, operator Hamiltona $\hat{H}$, dowolny inny...

jeśli jako bazę wybierzemy $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ to $\Psi_n(x) = \langle x|n\rangle$.

[rzeczywiście, $\Psi_n(x)$ to funkcja – zbiór wartości liczbowych dla wszystkich wart. argumentu]

$$|n\rangle = \sum_i c_i |i\rangle \rightarrow \int_x \langle x|n\rangle |x\rangle dx = \int_x \Psi_n(x) |x\rangle dx$$

[1] - $\langle n|m \rangle$ formalnie można zapisać (wstawiając jedynkę $I = \sum_i |i\rangle\langle i|$ lub $I = \int |\xi\rangle\langle \xi| d\xi$, dla $\xi = x$) jako:

$$\sum_i \langle n|i\rangle \langle i|m\rangle \rightarrow \int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx.$$

W tej notacji Diraca $\langle n|\hat{H}|m\rangle = \int \Psi_n^*(\xi) \hat{H} \Psi_m(\xi) d\xi$, gdyż w przedstawieniu położeniowym ($\mathbf{x}$) operatory wyrażają się przez współrzędne położenia, $\hat{H} = \hat{H}(\xi)$, a $\langle x|p\rangle = e^{ikx}$, $k = p/\hbar$, fale płaskie w 1D – wektory własne operatora pędu w reprezentacji położeniowej;

[zauważmy, że $\langle p|x\rangle = e^{-ikx}$ to funkcje własne $\hat{x}$ w reprezentacji pędowej].

Wielkość $|n\rangle\langle n|$ to operator rzutowy, $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{I}$,

$\hat{I}$ - operator jednostkowy w $\mathcal{H}$,

twierdzenie spektralne $\hat{F} = \sum_n f_n |n\rangle\langle n|$, n – numeruj stany własne $\hat{F}$, stąd znane już wyrażenie na wartość oczekiwaną operatora $\hat{F}$ w stanie $|\alpha\rangle$ opisywanym funkcją falową Ψ_α

$$\langle \alpha | F | \alpha \rangle = \sum_n f_n |c_n|^2.$$

[$|\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$].

Wektory stanu można też wyrażać w reprezentacjach *dyskretnych*, np. energetycznej $\langle n|\alpha\rangle = \langle E_n|\alpha\rangle$, E_n – wartości własne operatora H .

Postać dowolnego operatora w takim przedstawieniu będzie macierzowa:
zawsze możemy zapisać (1**)

$$\begin{aligned} \langle \xi | a \rangle &= \sum_n \langle \xi | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle \\ \langle \xi | b \rangle &= \sum_n \langle \xi | E_n \rangle \langle E_n | b \rangle, \end{aligned}$$

dowolny operator $\hat{F}$ w działaniu na stan „a”

$$\langle \xi | b \rangle = \hat{F} \langle \xi | a \rangle$$

zatem

$$\sum_n \langle \xi | E_n \rangle \langle E_n | b \rangle = \hat{F} \sum_n \langle \xi | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle$$

mnożymy z lewej przez $\langle E_m | \xi \rangle$, scałkowanie po ξ przy skorzystaniu z ortogonalności $\int d\xi \langle E_m | \xi \rangle \langle \xi | E_n \rangle = \delta_{m,n}$ dostaniemy

$$\langle E_m | b \rangle = \sum_n \langle E_m | \hat{F} | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle$$

gdzie (2)

$$\langle E_m | \hat{F} | E_n \rangle = \int d\xi \psi_m^*(\xi) \hat{F} \psi_n(\xi) = F_{m,n} ,$$

[$\hat{F}$ pod całką jest wyrażony w reprezentacji położeniowej]

definiują operator F jako macierz elementów (m,n) . Oczywiście macierz H jest w tym przedstawieniu diagonalna, z wartościami operatora $H - E_n$

(2*)

$$\langle E_m | \hat{H} | E_n \rangle = E_n \delta_{m,n} .$$

Podobnie można postąpić dla reprezentacji niedyskretnych (np. pędowej) ale wówczas sumy w (1**) należy zastąpić całkami (po dp) i (2) będzie:

$$\langle p' | \hat{F} | p \rangle = \int d\xi \langle p' | \xi \rangle \hat{F} \langle \xi | p \rangle ,$$

jest *macierzą nieskończenie ciągłą* i w rezultacie sprowadzi się do pewnej postaci operatorowej F jako funkcji nie x,y,z , ale p_x , p_y , p_z .

W szczególności można pokazać, że operator pędu w swojej reprezentacji, przez analogię do (2*) jest:

$$\langle p' | \hat{p} | p \rangle = p \delta(p' - p),$$

a operator położenia w reprezentacji pędowej

$$\langle p' | \hat{x} | p \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p' - p) .$$

Zrozumiałe staje się też dlaczego $\langle n | \hat{A} | m \rangle = \int \Psi_n^*(\xi) \hat{A} \Psi_m(\xi) d\xi$

(wstawiamy dwie jedynki [całkowe]) i reprezentacja położeniowa A

$$\langle \xi' | A | \xi \rangle \Rightarrow A(\xi) \delta(\xi' - \xi) .$$

Układy wielu cząstek (podukładów)

a) cząstki (podukłady) nieoddziałujące

hamiltonian $H(1,2,\dots,N) = \sum_i H(i)$,

przestrzeń Hilberta $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \cdots \otimes \mathcal{H}_N$ to iloczyn tensorowy,

[iloczyn skalarny w $\mathcal{H}$ definiuje się jako produkt iloczynów skalarnych w $\mathcal{H}_i$]

baza w przestrzeni $\mathcal{H} \rightarrow$ iloczyny wektorów bazowych w $\mathcal{H}_i$

$\mathcal{H}_1 : \{|1\rangle^{(1)}, |2\rangle^{(1)}, \dots, |m1\rangle^{(1)}\}$

$\mathcal{H}_2 : \{|1\rangle^{(2)}, |2\rangle^{(2)}, \dots, |m2\rangle^{(2)}\}$

.....

$\mathcal{H}_N : \{|1\rangle^{(N)}, |2\rangle^{(N)}, \dots, |mN\rangle^{(N)}\}$

Jeden wektor bazowy w $\mathcal{H}$ to np.

$$|\alpha_l\rangle = |k_1\rangle^{(1)} |k_2\rangle^{(2)} \cdots |k_N\rangle^{(N)}$$

l – numeruje wektory bazowe $\mathcal{H}$,

bazy w $\mathcal{H}_i$ można wybrać jako wektory własne $H(i)$.

Twierdzenie:

Iloczyny wektorów własnych $H(i)$ są wektorami własnymi H , do wartości własnych będących sumą wartości własnych $H(i) : \lambda_j^i$ (j – numeruje kolejne wart. własne)

$$\lambda = \lambda_{j1}^1 + \lambda_{j2}^2 + \cdots \lambda_{jN}^N$$

b) oddziałujące cząstki

$H(1,2,\dots,N) = \sum_i H(i) + V(i,j,\dots)$, V – zawiera oddziaływania

przestrzeń Hilberta – ta sama,

wektory H zawsze można przedstawić w zupełnej i nieskończonej bazie $|\alpha_l\rangle \dots$

Inne reprezentacje

hasła: kwantowa teoria pola, kwantowanie pól, druga kwantyzacja,

reprezentacja liczby obsadzeń...

To co teraz robiliśmy dotychczas to tzw. *pierwsza kwantyzacja* – opis układów cząstek za pomocą funkcji falowych; w przybliżeniu jednoelektronowym – funkcji

falowych będących iloczynami funkcji jednocząstkowych – funkcji własnych hamiltonianów jednoelektronowych, tzn. w reprezentacji stanów jednocząstkowych;

$$|i_1, \dots, i_N\rangle = |i_1\rangle_1 \otimes \dots \otimes |i_N\rangle_N$$

gdzie indeks dolny w $|a\rangle_j$ numeruje elektrony, a $|a\rangle_j$ to stan j -tego elektronu, dla elektronów stan wielocząstkowy musi być jeszcze antysymetryzowany.

Dla układów, w których liczba cząstek może ulegać zmianie wygodniejszy jest opis za pomocą stanów w „reprezentacji liczby obsadzeń”, tzn.

$$|n_1, n_2, \dots\rangle$$

gdzie n_i mówi nam ile cząstek obsadza dany stan „i”,

„lista” n_i przebiega teraz listę możliwych stanów jednocząstkowych, a n_i mówi, które z nich i w jaki sposób są obsadzone;

oczywiście dla elektronów możliwe wartości n to tylko 0 lub 1 (jeśli mamy na myśli spinorbitale);

Przestrzeń wszystkich możliwych takich stanów $|n_1, n_2, \dots\rangle$, dla max. N cząstek nazywa się przestrzenią Focka;

Uwaga: przestrzeń Focka budujemy dla ustalonej liczby stanów, a nie liczby cząstek!

Założmy, że mamy M stanów jednocząstkowych, np. M=4, to wszystkie możliwe stany fermionowe rozpinające przestrzeń Focka są:

$$|0000\rangle, |1000\rangle, |0100\rangle, |0010\rangle, |0001\rangle, |1100\rangle, |0110\rangle, |0011\rangle, \\ |1001\rangle, |1010\rangle, |0101\rangle, |1110\rangle, |0111\rangle, |1011\rangle, |1101\rangle, |1111\rangle,$$

jest ich $2^M = 2^4 = 16$, stan $|0000\rangle$ nazywa się $|vac\rangle$ rzeczywistą próżnią (brak elektronów);

ale jeśli mówimy o układzie z dokładnie dwoma elektronami, N=2, to możliwych stanów jest $\binom{M}{N} = \binom{4}{2} = 6$

$$|1100\rangle, |1010\rangle, |1001\rangle, |0110\rangle, |0101\rangle, |0011\rangle$$

jeśli myślimy w kategoriach spinorbitali (stanów jednocząstkowych) HF to pierwszy z nich jest 2-cząstkowym stanem podstawowym (zajęte tylko orbitale obsadzone) a pozostałe dwa to jedno- lub dwu-cząstkowe stany **wzbudzone**,

np. jeśli bierzemy pod uwagę dwa stany (spinorbitale) Focka dla He, $1s^+$, $1s^-$ oraz dwa spinorbitale wirtualne $2s^+$, $2s^-$ to $|1100\rangle$ opisuje stan podstawowy He, a

pozostałe trzy odpowiadają stanom wzbudzonym w tej bazie stanów jednocząstkowych;

ponieważ wzbudzenia liczy się często od stanu podstawowego, to stan $|1100\rangle$ (w tym przypadku) oznaczamy często przez $|0\rangle$ i nazywamy stanem „próżni Fermiego”.

Operatory w przestrzeni Focka buduje się w oparciu o elementarne operatory kreacji i anihilacji cząstek w danym stanie, które muszą być tak zdefiniowane (zob. też KOH DK1ab) : (DK0)

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i |\dots, n_i + 1, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i, \dots\rangle,\end{aligned}$$

a liczbowe czynniki wynikają z normalizacji i spełnione są reguły komutacji

$$\begin{aligned}[\hat{a}_i, \hat{a}_j] &= \hat{a}_i \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, & [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] &= \delta_{ij} & \text{for bosons,} \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} &= \hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_i = \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0, & \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} &= \delta_{ij} & \text{for fermions.}\end{aligned}$$

to, że $\{a_i^\dagger, a_i^\dagger\} = 2a_i^\dagger a_i^\dagger = 0$ wyraża zasadę Pauliego.

Łatwo sprawdzić, że

$$n_i = a_i^\dagger a_i$$

jest operatorem liczby cząstek w stanie i -tym

a hamiltonian jednocząstkowy (którego stany jednocząstkowe „i” mają energie ε_i) daje się zatem zapisać jako

(X)

$$H = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i$$

(wartości własne, tzn. możliwe energie układu, takiego hamiltonianu (nieoddziałujących cząstek) są poprawnie zdefiniowane jako sumy możliwych energii jednocząstkowych ε_i)

i zwróćmy też uwagę na podobieństwo do twierdzenia spektralnego

$$H = \sum_n E_n |n\rangle \langle n|,$$

a dowolny inny operator jednocząstkowy (którego stany nie są własnymi) jako

(DK0a)

$$T = \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j$$

[w tej reprezentacji można też wyrazić operator dwucząstkowy oddziaływania e-e (na razie bez dowodu)

(DK0b)

$$V = \frac{1}{2} \sum_{abcd} V_{abcd} a_a^\dagger a_b^\dagger a_c a_d$$

]

W powyższym przykładzie dla He stany wzbudzone można wygenerować z działania na $|0\rangle = |1100\rangle$ operatorami $a_i^\dagger$ oraz a_j , np.

$$a_4^\dagger a_2 |1100\rangle \rightarrow |1001\rangle$$

Przypomnijmy kwantowy oscylator harmoniczny

W jednym wymiarze hamiltonian $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2$ po podstawieniu $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ zagadnienie własne wyraża się jako $\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\omega^2 m^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x) = 0$, a po podstawieniu $\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ i $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$ jako $\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \varepsilon\right)\psi(\xi) = 0$; w tych współrzędnych operator pędu $\hat{p}_\xi = -i\frac{d}{d\xi}$, zatem $H = \frac{\hbar\omega}{2}(\xi^2 + \hat{p}_\xi^2)$; wprowadzając operatory

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + i\hat{p}_\xi), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - i\hat{p}_\xi),$$

można pokazać, że

(DK1ab)

$$\begin{aligned} aa^\dagger \psi_n &= (n+1)\psi_n \\ a^\dagger a \psi_n &= n\psi_n \end{aligned}$$

i także z definicji operatorów ξ i $\hat{p}_\xi$ dostajemy

$$a^\dagger a + aa^\dagger = \xi^2 + \hat{p}_\xi^2$$

zatem

$$H\psi_n = \frac{\hbar\omega}{2}(\xi^2 + \hat{p}_\xi^2)\psi_n = \frac{\hbar\omega}{2}(a^\dagger a + aa^\dagger)\psi_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n$$

ale z (DK1b) $a^\dagger a \psi_n = n\psi_n$ zatem

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega a^\dagger a + \frac{1}{2}\hbar\omega = \varepsilon a^\dagger a + c$$

pomijając stałą $c = \frac{1}{2} \hbar \omega$ (jako energię zerową – przesunięcie na skali energii),
 $H = \varepsilon a^\dagger a$ jest niczym innym jak (X powyżej) dla układu, w którym jest tylko jeden stan o energii $\varepsilon = \hbar \omega$, a liczbę „cząstek” w tym stanie (liczbę wzbudzeń) liczy nam **operator liczby cząstek** (wzbudzeń)

$$n = a^\dagger a$$

Taki hamiltonian opisuje np. „fonony” – kwazicząstki - kwantowe odpowiedniki wzbudzeń drgań sieci krystalicznej o częstotliwości ω , (fonony są bozonami)
 tu kwazicząstki to „wzbudzenia” drgań o częstotliwości ω
 więcej wzbudzeń = więcej wykreowanych fononów, większa energia drgań ($N \times \hbar \omega$) co klasycznie odpowiada większej amplitudzie drgań.

Łatwo sprawdzić, że tak jak powinno być dla bozonów

$$[a, a^\dagger] = 1$$

oraz, że tak jak w (DK0)

$$\begin{aligned} a\psi_n &= \sqrt{n}\psi_{n-1} \\ a^\dagger\psi_n &= \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \end{aligned}$$

[zauważmy, że dla KOH $a\psi_0 = 0$].

Inny przykład. Wróćmy do (X) dla przypadku liniowej, zamkniętej struktury węglowej o M węzłach. Weźmy $M=6$ [jeden elektron może obsadzać różne stany jednocząstkowe na 6-ciu węzłach], (np. modelu molekuly benzenu, lub 6-cio elementowej komórki grafenu); w metodzie TB z jednym orbitalem na węzeł, w przybliżeniu najbliższych sąsiadów, efektywny hamiltonian jednocząstkowy w reprezentacji liczb obsadzeń będzie wyglądał tak

$$H = \sum_i^M \varepsilon_i a_i^\dagger a_i + \sum_{ij}^M t_{ij} a_i^\dagger a_j$$

a baza stanów tak: $|100000\rangle, |010000\rangle, \dots, |000001\rangle$; jeśli założyć, że $t_{ij} = t$ dotyczy tylko najbliższych sąsiadów to macierz hamiltonianu w takiej bazie będzie

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & t & 0 & 0 & 0 & t \\ t & \varepsilon & t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & \varepsilon & t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t & \varepsilon & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t & \varepsilon & t \\ t & 0 & 0 & 0 & t & \varepsilon \end{bmatrix}$$

diagonalizacja tej macierzy da 6 wartości energii (nie konieczne wszystkie różne);
 interpretacja: ...

Druga kwantyzacja dotyczy w zasadzie pól, a w szczególności układów oddziałujących, w których liczba „cząstek” może ulegać zmianie.

Na przykład, jeśli stan podstawowy układu N-elektronowego przyjmiemy jako stan próżni (nie ma elektronów obsadzających jednocząstkowe stany wzbudzone), to wzbudzenia w tym układzie można potraktować jako „kwazicząstki”; takie wzbudzenia dokonywane są za pomocą fotonów – pojawienie się (kreacja) kwazicząstki = anihilacja fotonu i odwrotnie.

W chemii kwantowej lub w ciele stałym, gdzie w stanie podstawowym mamy zapełnioną pewną liczbę stanów jednocząstkowych, takie wzbudzenia kreują elektron w stanie dotychczas nieobsadzonym, ale także „dziurę” w stanach w pełni zapełnionych (w morzu Fermiego); tu często posługujemy się dwoma gatunkami operatorów kreacji i anihilacji: elektronów i dziur – żeby opisać stany wzbudzone wielocząstkowe.

Operatory polowe i związek z układem wielu cząstek (LA)

Na razie bez konkretnego związku z funkcjami falowymi, zdefiniujmy sobie operatory pola

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$$

gdzie $\mathbf{x}$ to zespół współrzędnych w przestrzeni (x,y,z) i współrzędnych spinowych σ ;
(w teorii pola służą one np. do opisu pól kwantowych);
zakładamy, że działają one w pewnej przestrzeni Hilberta (definicja później), w której istnieje wektor stanu $|0\rangle$, unormowany $\langle 0|0\rangle$ (na razie abstrakcyjny), taki, że
(P1)

$$\hat{\psi}(\mathbf{x})|0\rangle = 0 ;$$

[na razie widzimy pewną analogię z operatorem a i stanem o najniższej energii dla KOH, a także ze stanem próżni Fermiego]

Można rozważyć dwa typy takich operatorów

(P2)

(A) fermionowe

$$\{\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}')\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \{\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x}')\} = 0$$

(B) bozonowe

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}')] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x}')] = 0$$

Definiujemy operator $\hat{N}$

$$\hat{N} = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x})$$

Z (P1) wynika, że

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

tzn. $|0\rangle$ jest wektorem własnym $\hat{N}$ do wartości własnej 0.

Z (P2) można pokazać, że

(P3a)

$$[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})\hat{\psi}(\mathbf{y}), \hat{\psi}(\mathbf{x})] = -\delta(\mathbf{y} - \mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x})$$

{ trzeba wykorzystać pierwsze z równań (P2-B), definicję $[A,B]$ oraz fakt, że $[B,A] = -[A,B]$ }
oraz (P3a)

$$[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})\hat{\psi}(\mathbf{y}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})] = -\delta(\mathbf{y} - \mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$$

(zarówno dla P2 A i B),

a zatem po scałkowaniu po $d\mathbf{y}$, dostaniemy

$$[\hat{N}, \hat{\psi}(\mathbf{x})] = -\hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad [\hat{N}, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})] = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$$

co (rozpisując komutator) daje:

$$\hat{N}\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \hat{\psi}(\mathbf{x})(\hat{N} - 1), \quad \hat{N}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})(\hat{N} + 1)$$

Weźmy wektor własny $\hat{N}$, $|N'\rangle$ do wartości własnej N' , to po zadziałaniu operatorami $\hat{N}\hat{\psi}(\mathbf{x})$ oraz $\hat{N}, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$ na ten wektor własny dostaniemy:

(P4)

$$\hat{N}(\hat{\psi}(\mathbf{x})|N'\rangle) = (N' - 1)(\hat{\psi}(\mathbf{x})|N'\rangle)$$

oraz

$$\hat{N}(\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})|N'\rangle) = (N' + 1)(\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})|N'\rangle)$$

tzn, że $\hat{\psi}(\mathbf{x})|N'\rangle$ i $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})|N'\rangle$ są wektorami własnymi $\hat{N}$;

a ponieważ norma takiego wektora jest nieujemna $\langle N' | \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x}) | N' \rangle \geq 0$, to po scałkowaniu po $d\mathbf{x}$ i wykorzystaniu definicji $\hat{N}$ dostaniemy

$$N' \geq 0$$

dodatkowo liczby N' nie mogą być ułamkowe (wielokrotne działanie (P4) prowadziłyby do wartości <0),

$$\text{zatem } N = 0, 1, 2, 3, \dots$$

i możemy przyporządkować wektorom wartości własne

$$|0\rangle \rightarrow 0, \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1)|0\rangle \rightarrow 1, \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2)|0\rangle \rightarrow 2, \dots$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_N)|0\rangle \rightarrow N$$

Operator $\hat{N}$ ma zatem właściwości operatora liczby (cząstek/wzbudzeń).

Przestrzeń Hilberta, w której zdefiniowane są wektory własne $\hat{N}$ jest zbudowana jako suma prosta ortogonalnych podprzestrzeni (odpowiadających liczbie cząstek/wzbudzeń)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \dots + \mathcal{H}_N$$

Dowolny wektor w tej przestrzeni można rozłożyć na $|\varphi\rangle = \sum_N |\varphi_N\rangle$ gdzie $|\varphi_N\rangle \in \mathcal{H}_N$; można pokazać, że bazę w $\mathcal{H}_N$ można wybrać jako

$$|N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \dots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_N) |0\rangle$$

Dowolny wektor $|\varphi_N\rangle$ można w tej bazie przedstawić zawsze jako (całkowanie to jedynka)

$$|\varphi_N\rangle = \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N |N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\rangle \langle N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n | \varphi_N\rangle$$

a oznaczając

(P5)

$$\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \langle N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n | \varphi_N\rangle$$

Możemy powiedzieć, że jest funkcją falową układu N cząstek w *reprezentacji liczb obsadzeń* (porównaj z $\Psi_n(x) = \langle x | n \rangle$ z początku wykładu).

Hamiltonian w tej reprezentacji definiuje się jako $\mathbb{H}$

(P6)

$$\mathbb{H} = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{H}_0(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{x} d\mathbf{y} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x})$$

gdzie $\hat{H}_0(\mathbf{x})$ i $V(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ to operatory jedno i dwucząstkowe w reprezentacji położeniowej; jego wektory własne odpowiadające odpowiedniej energii E układu to

$$\mathbb{H} |\varphi_{NE}\rangle = E |\varphi_{NE}\rangle.$$

Obliczając

$$\langle N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n | \mathbb{H} | \varphi_{NE}\rangle = E \langle N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n | \varphi_{NE}\rangle$$

po żmudnych przekształceniach dochodzi się do równania

$$\left\{ \sum_i \hat{H}_0(\mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right\} \langle N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n | \varphi_{NE} \rangle = E \langle N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n | \varphi_{NE} \rangle$$

czyli równania Hamiltona dla układu wielocząstkowego.

Rozwijając operatory pola za pomocą operatorów kreacji i anihilacji pojedynczych cząstek w stanach jednocząstkowych (α)

(P7)

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{x}) a_{\alpha} \\ \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{x}) &= \sum_{\beta} \psi_{\beta}^*(\mathbf{x}) a_{\beta}^{\dagger} \end{aligned}$$

gdzie współczynniki rozwinięcia są jednocząstkowymi funkcjami falowymi (w rep.

położeniowej), łatwo zdefiniować operatory a_{α}

(P7 mnożymy przez $\psi_{\beta}^*(\mathbf{x})$, całkujemy, korzystamy z ortogonalności ψ_{α} , zmieniamy indeks)

(P8)

$$a_{\alpha} = \int d\mathbf{x} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x})$$

i odpowiednio $a_{\alpha}^{\dagger}$.

Reguły komutacji dla tych operatorów wynikają z reguł komutacji dla $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ i

ortonormalności funkcji $\psi_{\alpha}^*(\mathbf{x})$, a definicja (P6) operatora Hamiltona w tej reprezentacji przyjmuje postać

(P9)

$$\mathbb{H} = \sum_{\alpha\beta} E_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta}$$

gdzie

$$\begin{aligned} E_{\alpha\beta} &= \int d\mathbf{x} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}) \hat{H}_0(\mathbf{x}) \psi_{\beta}(\mathbf{x}) \\ V_{\alpha\beta\gamma\delta} &= \iint d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \psi_{\alpha}^*(\mathbf{x}) \psi_{\beta}^*(\mathbf{x}') V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi_{\gamma}(\mathbf{x}') \psi_{\delta}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

czyli to, czego nam brakowało - oddziaływań dwucząstkowych w hamiltonianie w reprezentacji liczb obsadzeń (DK0a, DK0b);

zauważmy też, że jeśli użyjemy $\psi_{\alpha}(\mathbf{x})$ jako funkcji własnych $\hat{H}_0(\mathbf{x})$, to pierwszy człon w (P9) przyjmuje postać

$$\sum_{\alpha} E_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$$

operator obsadzenia stanu jednocząstkowego α ma postać

$$n_{\alpha} = a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$$

a operator całkowitej liczby cząstek (wzbudzeń)

$$\hat{N} = \sum_{\alpha} n_{\alpha} .$$