

Kończymy zadania z poprzedniego tygodnia.

Operatory pola

Operatory kreacji i anihilacji reprezentacji położeniowej nazywane są operatorami pola:

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)]_{-} = [\hat{\psi}^{\dagger}(x), \hat{\psi}^{\dagger}(y)]_{-} = 0$$

Możemy je wyrazić w bazie jednostkowej $\{|\alpha\rangle\}$ jako:

$$\hat{\psi}^{\dagger}(x) = \sum_{\alpha} \langle \alpha | x \rangle a_{\alpha}^{\dagger} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^{\dagger}(x) a_{\alpha}^{\dagger}$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{\alpha} \langle x | \alpha \rangle a_{\alpha} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(x) a_{\alpha}$$

Operatory pola wykorzystuje się do zapisywania operatorów w postaci odpowiadającej II kwantyzacji, tzn.

wykonywującej odpowiednie operatory kreacji i anihilacji.

① Zapisać w postaci II kwantyzacji

powiższe operatory dla układu N elektronów:

a) operator spinu $\hat{\vec{S}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}_i$

b) operator energii kinetycznej w reprezentacji położeniowej $\hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m}$

c) operator gęstości w reprezentacji parowej $\hat{n}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$

Rozwiązanie:

a) $\hat{\vec{S}} = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}_i$, gdzie $\hat{\vec{\sigma}}_i = [\hat{\sigma}_x^{(i)}, \hat{\sigma}_y^{(i)}, \hat{\sigma}_z^{(i)}] =$

$$= \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right]$$

 macierze Pauliego

Wybieramy następującą bazę stanów

jednocząstkowych: $\{|\alpha\rangle = |\mu, \sigma\rangle \equiv |\mu\rangle \otimes |\sigma\rangle\}$

Dla wielu cząstek:

$$\hat{\vec{S}} = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\vec{S}} \hat{\psi}(\vec{r}) =$$

$$= \sum_{\alpha', \alpha} \phi_\alpha^*(\vec{r}) \hat{\vec{S}} \phi_{\alpha'}(\vec{r}) a_\alpha^\dagger a_{\alpha'} =$$

może to być
 up. stan pędowy $|\vec{h}\rangle$
 lub dla stanów
 zlokalizowanych
 położenie na danym
 węzle $|i\rangle$,
 stan spinowy

$$= \sum_{\alpha \alpha'} \int d^3 r \langle \alpha | r \rangle \hat{S} \langle r | \alpha' \rangle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha'} =$$

$$= \sum_{\substack{\mu, \mu' \\ \sigma, \sigma'}} \langle \mu \sigma | \underbrace{\int d^3 r |r\rangle \langle r|}_{\substack{\parallel \\ \parallel\parallel}} \hat{S} | \mu' \sigma' \rangle a_{\mu \sigma}^{\dagger} a_{\mu' \sigma'} =$$

$$= \sum_{\mu \mu'} \underbrace{\langle \mu | \mu' \rangle}_{\delta_{\mu \mu'}} \sum_{\sigma \sigma'} \underbrace{\langle \sigma | \hat{S} | \sigma' \rangle}_{\substack{\text{element macierzy} \\ \text{operatora } \hat{S}}} a_{\mu \sigma}^{\dagger} a_{\mu' \sigma'} =$$

$$\stackrel{\substack{= \\ \uparrow \\ \sigma \in \{ \uparrow, \downarrow \}}}{=} \frac{\hbar}{2} \sum_{\mu} \begin{bmatrix} a_{\mu \uparrow}^{\dagger} a_{\mu \downarrow} + a_{\mu \downarrow}^{\dagger} a_{\mu \uparrow} \\ i (a_{\mu \downarrow}^{\dagger} a_{\mu \uparrow} - a_{\mu \uparrow}^{\dagger} a_{\mu \downarrow}) \\ a_{\mu \uparrow}^{\dagger} a_{\mu \uparrow} - a_{\mu \downarrow}^{\dagger} a_{\mu \downarrow} \end{bmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \hat{S}_x \\ \leftarrow \hat{S}_y \\ \leftarrow \hat{S}_z \end{matrix}$$

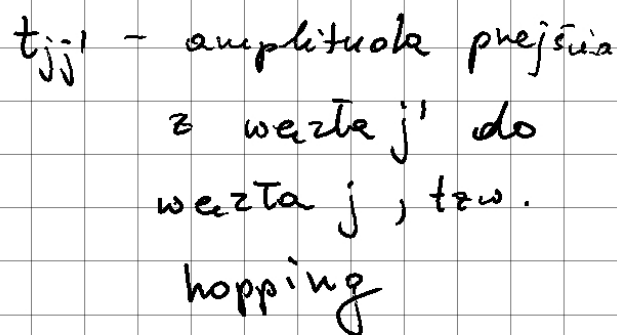
$$b) \hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right)$$

Wybieramy bazę: $\{ | \alpha \rangle = | j \rangle \}$, gdzie

$| j \rangle$ jest stanem zlokalizowanym (stanem waniera)

na danym węzle sieci krystalicznej

$$\hat{T} = \int d^3 r \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{j,j'} \phi_j^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \phi_{j'}(\vec{r}) a_j^{\dagger} a_{j'} = \sum_{j,j'} \overset{\substack{\text{"hopping"} \\ \downarrow}}{t_{jj'}} a_j^{\dagger} a_{j'}$$



$$c) \hat{n}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

Diagram illustrating the calculation of the center of mass (CM) for a system of particles. A coordinate system is shown with axes x and y . Particles are represented by small circles. The position vectors $\vec{r}_1$ and $\vec{r}_2$ are shown for two particles. The center of mass is marked with a dot and labeled "CM". The text "początek układu współrzędnych" (origin of the coordinate system) is written near the origin.

$$\hat{n}(\vec{r}) = \int d^3r' \psi^\dagger(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}') = \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

Transformata Fourier:

$$\begin{aligned} \hat{n}(\vec{k}) &= \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{k}', \vec{k}''} \langle \vec{k}' | \vec{r} \rangle \underbrace{\langle \vec{r} | \vec{k}'' \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}''\cdot\vec{r}}} a_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}''} \\ &= \sum_{\vec{k}', \vec{k}''} \underbrace{\frac{1}{V} \int d^3r e^{i(\vec{k}'' - \vec{k} - \vec{k}')\cdot\vec{r}}}_{\delta(\vec{k}'' - \vec{k} - \vec{k}')} a_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}''} = \\ &= \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q} + \vec{k}} \end{aligned}$$

② Znajdź transformatę Fouriera potencjału Yukawy:

$$V_Y(\vec{r}) = \frac{\tilde{e}^2}{r} e^{-kr} \quad (k > 0)$$

wykonyj granicę $k \rightarrow 0$ w której dostajemy transformację Fouriera dla potencjału kulombowskiego.

Rozwiązanie:

$$\begin{aligned}\tilde{V}_Y(\vec{k}) &= \int V_Y(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r = \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^\infty dr r^2 \frac{\tilde{e}^2}{r} e^{-kr} e^{-ikr \cos\theta} = \\ &= \left\{ \begin{array}{l} u = \cos\theta \\ du = -\sin\theta d\theta \end{array} \right\} = 2\pi \tilde{e}^2 \int_{-1}^1 du \int_0^\infty dr r e^{-kr} e^{-ikru} = \\ &= 2\pi \tilde{e}^2 \int_0^\infty r e^{-kr} \left[-\frac{1}{ikr} e^{-ikru} \right]_{-1}^1 dr = \\ &= \frac{2\pi \tilde{e}^2}{ik} \int_0^\infty dr \left[e^{(ik-k)r} - e^{-(ik+k)r} \right] = \\ &= \frac{2\pi \tilde{e}^2}{ik} \left[\frac{e^{-(ik+k)r}}{k+ik} - \frac{e^{(ik-k)r}}{k-ik} \right]_0^\infty =\end{aligned}$$

$$= \frac{2\pi\tilde{e}^2}{ik} \left[-\frac{1}{k_2+ik} + \frac{1}{k_2-ik} \right] = \frac{2\pi\tilde{e}^2}{ik} \frac{2ik}{k_2^2+k^2} =$$

$$= \frac{4\pi\tilde{e}^2}{k^2+k_2^2} \xrightarrow{k_2 \rightarrow 0} \frac{4\pi\tilde{e}^2}{k^2} = \tilde{V}_c(\vec{k})$$

Oddziaływanie w barie pedowej
pomiędzy elektronami przyjmuje
postać:

$$\hat{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{q}} \tilde{V}_{\vec{q}} a_{\vec{k}_1+\vec{q}\sigma_1}^+ a_{\vec{k}_2-\vec{q}\sigma_2}^+ a_{\vec{k}_2\sigma_2} a_{\vec{k}_1\sigma_1}$$

↑
przechaz
pedu

$$\tilde{V}_{\vec{q}} = \frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2} \quad - \text{mówi o amplitudzie oddziaływania}$$

