Másodkvantálás

Shavitt és Bartlett

- keltő és eltüntető operátorok

$$\Phi = \hat{A}(\varphi_i \varphi_j \ldots \varphi_z) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_i(1) & \varphi_j(1) & \ldots & \varphi_z(1) \\ \varphi_i(2) & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \\ \varphi_i(N) & \varphi_j(N) & \ldots & \varphi_z(N) \end{vmatrix}$$

$\langle \varphi_p | \varphi_q \rangle = \delta_{pq}$, $\forall\, p,q$-ra

A fázis rögzítéséhez tfh. $i<j<\ldots<z$

~ betöltési szám reprezentáció: $\Phi \equiv (0,\ldots,0,\underset{\uparrow i}{1},0,\ldots,\underset{\uparrow j}{1},\ldots,\underset{\uparrow k}{1},\ldots,\underset{\uparrow z}{1},\ldots)$

- adott φ_i bázis mellett ezekkel a vektorokkal „kifeszíthető" a Hilbert-tér

$$n_p = \begin{cases} 1, & \text{ha } p \in occ. \\ 0, & \text{ha } p \notin occ. \end{cases}$$

- ekvivalens jelölés: $\Phi = |ij\ldots z\rangle$
- keltő ill. eltüntető operátorok: $\hat{a}_i^+ \underbrace{|jk\ldots z\rangle}_{n\,e^-} = \underbrace{|ijk\ldots z\rangle}_{n+1\,e^-}$

$\hat{a}_i^- \underbrace{|ijk\ldots z\rangle}_{n\,e^-} = \underbrace{|jk\ldots z\rangle}_{n-1\,e^-}$

az első pozícióba e^--t tesz fel, ill. e^--t vesz le onnan

(jelölés: $\hat{a}_i^- = \hat{a}_i = a_i = \hat{i}^- = \hat{i} = i$)

$\hat{a}_p^+ |ij\ldots z\rangle = |pij\ldots z\rangle = (-1)^{\eta_p} |ij\ldots p\ldots z\rangle$, ahol

$$\eta_p = \sum_{\mu=1}^{p-1} n_\mu$$

$\hat{a}_p^- |ij\ldots p\ldots z\rangle = \hat{a}_p (-1)^{\eta_p} |pij\ldots z\rangle = (-1)^{\eta_p} |ij\ldots z\rangle$

$\hat{a}_i^+ |\Phi\rangle = 0$, ha $n_i = 1$

$\hat{a}_i^- |\Phi\rangle = 0$, ha $n_i = 0$ → vákuum állapot

$|ij\ldots z\rangle = \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \ldots \hat{a}_z^+ |\ \rangle$, $\langle\ |\ \rangle = 1$

normált!

zárójelben: $\langle \Phi | \hat{A} | \eta \rangle = \langle \hat{A}^+ \Phi | \eta \rangle = \langle \eta | \hat{A}^+ \Phi \rangle^*$

$\langle pij\ldots z | \hat{a}_p^+ | ij\ldots z\rangle = 1$

$\langle (\hat{a}_p^+)^+ pij\ldots z | ij\ldots z\rangle = \langle ij\ldots z | (\hat{a}_p^+)^+ pij\ldots z\rangle$

$\Leftrightarrow (\hat{a}_p^+)^+ = \hat{a}_p^- \Rightarrow$ az $\hat{a}_p$ és $\hat{a}_p^+$ op-ok egymás adjungáltjai

$$\langle p\, i\, j \dots z | \hat{a}_p^+ = \langle \hat{a}_p\, p\, i\, j \dots z | = \langle i\, j \dots z |$$
$$\langle i\, j \dots z | \hat{a}_p = \langle \hat{a}_p^+\, i\, j \dots z | = \langle p\, i\, j \dots z |$$
hátrafelé hatva eltüntető, ill. keltő operátorok

36

- részecskeszám operátor

$$\hat{a}_p^+ \hat{a}_p |\Phi\rangle = \hat{n}_p |\Phi\rangle = \begin{cases} 0, \text{ ha } p \notin occ. \\ 1, \text{ ha } p \in occ. \end{cases}$$
$$\hat{N} = \sum \hat{n}_p, \quad \hat{N}|\Phi\rangle = N|\Phi\rangle$$

- antikommutátorok

megj.: $\hat{a}_p \hat{a}_p^+ |\Phi\rangle = \begin{cases} 1, \text{ ha } p \notin occ \\ 0, \text{ ha } p \in occ. \end{cases}$

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ |i\, j \dots z\rangle &= |p\, q\, i\, j \dots z\rangle \\ \hat{a}_q^+ \hat{a}_p^+ |i\, j \dots z\rangle &= |q\, p\, i\, j \dots z\rangle = -|p\, q\, i\, j \dots z\rangle \end{aligned}\right\} +$$

$$(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ + \hat{a}_q^+ \hat{a}_p^+)|i\, j \dots z\rangle = 0$$

$$\{\hat{a}_p^+, \hat{a}_q^+\} \overset{\text{jelölés}}{=} [\hat{a}_p^+, \hat{a}_q^+]_+ = \hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ + \hat{a}_q^+ \hat{a}_p^+ = 0$$

hasonlóan megmutatható, h. $\{\hat{a}_p, \hat{a}_q\} = 0$

állítás: $\{\hat{a}_p^+, \hat{a}_q\} = \delta_{pq}$

igazolás: a, $p \neq q$ $\quad n_p = 1$ és/vagy $n_q = 0$

$$\Rightarrow \quad \hat{a}_p^+ \hat{a}_q |\Phi\rangle = 0 \quad \text{ill.} \quad \hat{a}_q \hat{a}_p^+ |\Phi\rangle = 0$$
$$(\hat{a}_p^+ \hat{a}_q + \hat{a}_q \hat{a}_p^+)|\Phi\rangle = 0$$

b, $n_p = 0$ és $n_q = 1$

$$\hat{a}_p^+ \hat{a}_q |i\, j \dots q \dots\rangle = (-1)^{\eta_q} |p\, i\, j \dots\rangle$$
$$\hat{a}_q \hat{a}_p^+ |i\, j \dots q \dots\rangle = \hat{a}_q |p\, i\, j \dots q \dots\rangle = (-1)^{\eta_q + 1} |p\, i\, j \dots\rangle$$
$$\Rightarrow \{\hat{a}_p^+, \hat{a}_q\} = 0$$

c, $p = q$ $\quad n_p = 1$ v. $n_p = 0$

$\{\hat{a}_p^+, \hat{a}_p\}|\Phi\rangle = |\Phi\rangle$, mert ha $p \in occ. \Rightarrow$ az első, ha $p \notin occ. \Rightarrow$ a második tag ad nem nulla járulékot

• Másodkvantált operátorok, mátrixelemek

– átfedés

$$|I\rangle = |i_1 i_2 \dots i_n\rangle = i_1^+ i_2^+ \dots i_n^+ |\,\rangle$$

$$|J\rangle = |j_1 j_2 \dots j_n\rangle = j_1^+ j_2^+ \dots j_n^+ |\,\rangle$$

$$\langle I|J\rangle = \langle\,| i_n \dots i_2 i_1 j_1^+ j_2^+ \dots j_n^+ |\,\rangle$$

ha $\forall$ i_n-hez van $j_m = i_n$, akkor $\langle I|J\rangle = \pm 1$,
egyébként $\langle I|J\rangle = 0$

$$\langle I|J\rangle = \langle\,| i_n \dots i_2 i_1 j_1^+ j_2^+ \dots j_n^+ |\,\rangle = \begin{cases} 1, \text{ ha a metszéspontok száma páros} \\ -1, \text{ ha páratlan} \end{cases}$$

$$= \pm \langle\,| \dots \underbrace{i_2 j_1^+}_{i_2 = j_1} \underbrace{i_n j_2^+}_{i_n = j_2} \dots \underbrace{i_1 j_n^+}_{i_1 = j_n} |\,\rangle = \pm \langle\,|\,\rangle = \pm 1$$

$|\,\rangle$

$|\,\rangle$

– 1e⁻ operátorok

$$\hat{O}_N = \sum_{i=1}^{N} \hat{o}(i) \Longleftrightarrow \hat{O} = \sum_{r,s} \langle \varphi_r|\hat{o}|\varphi_s\rangle \hat{a}_r^+ \hat{a}_s =$$

$$\sum_{r,s} O_{rs} \hat{a}_r^+ \hat{a}_s$$

A Slater-szabályok teljesülnek!

$$\langle I|\hat{O}_N|I\rangle = \sum_{r,s} O_{rs} \underbrace{\langle I| a_r^+ a_s |I\rangle}_{1, \text{ ha } r=s \text{ és } r \in occ.} = \sum_{\substack{i=1 \\ i \in occ.}}^{N} \langle \varphi_i|\hat{o}|\varphi_i\rangle$$

$$\langle I(i_p \to b_p)|\hat{O}_N|I\rangle = \langle i_1 i_2 \dots b_p \dots |\hat{O}_N| i_1 i_2 \dots i_p \dots\rangle =$$

$$\sum_{r,s} \langle \varphi_r|\hat{o}|\varphi_s\rangle \underbrace{\langle i_1 i_2 \dots b_p \dots | \hat{a}_r^+ \hat{a}_s | i_1 i_2 \dots i_p \dots\rangle}_{1, \text{ ha } s = i_p \text{ és } r = b_p} = \langle \varphi_{b_p}|\hat{O}|\varphi_{i_p}\rangle$$

$\langle I(i_p \to b_p, i_q \to b_q)|\hat{O}|I\rangle = 0$, mert az $\hat{O}$ csak 1-et tud gerjeszteni.

– 2ē operátorok

$$\hat H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}} \frac{1}{r_{ij}} \iff \hat H_2 = \frac{1}{2} \sum_{pqrs} \langle pq|rs\rangle a_p^+ a_q^+ s^- r^-$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pq|rs\rangle p^+ q^+ s^- r^- + \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pq|rs\rangle p^+ q^+ s^- r^-$$

$r \leftrightarrow s$

$$= \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pq||rs\rangle p^+ q^+ s^- r^-$$

a, $\langle I|\hat H_2|I\rangle = \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle \langle I| p^+ q^+ r^- s^- |I\rangle$

$i^+ j^+ j^- i^- \overset{i\neq j}{=} i^+ i^- j^+ j^-$

$i^+ j^+ i^- j^- \overset{i\neq j}{=} -i^+ i^- j^+ j^-$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j \in occ.} \langle ij||ij\rangle$$

– a második tagban $r^- \leftrightarrow s^-$ a csere előjelváltáshoz az op.-rében

– ez az előjel eltűnik, ha az int.-ban is cseréljük!

$\langle i_1 i_2 \dots b_n i_{n+1} \dots | \hat H_2 | i_1 i_2 \dots i_n i_{n+1} \dots \rangle$

b, $\langle I(i_n \to b_n)|\hat H_2|I\rangle = \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle \langle I(i_n\to b_n)| p^+ q^+ r^- s^- |I\rangle$

$$= \sum_{i \in occ.} \langle b_n i || i_n i\rangle$$

$b_n^+ \; i^+ \; i^- \; i_n^-$

$b_n^+ \; i^+ \; i_n^- \; i^-$

$i^+ \; b_n^+ \; i_n^- \; i^-$

$i^+ \; b_n^+ \; i^- \; i_n^-$

mind a 4 ekvivalens

c, $\langle I(i_n \to b_n, i_m \to b_m)|\hat H_2|I\rangle =$

$$\frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle \langle I(i_n \to b_n, i_m \to b_m)| p^+ q^+ r^- s^- |I\rangle$$

$$= \langle b_n b_m || i_n i_m\rangle$$

$b_n^+ b_m^+ i_m^- i_n^-$

$b_n^+ b_m^+ i_n^- i_m^-$

$b_m^+ b_n^+ i_n^- i_m^-$

$b_m^+ b_n^+ i_m^- i_n^-$

d, a 3x-os v. magasabb gerjesztések nem adnak járulékot!

$$\hat H = \sum_{rs} h_{rs} r^+ s + \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \langle pq||sr\rangle p^+ q^+ r^- s^-$$