Deel 2: Fermionsystemen

1. Fockruimte en de Slaterdeterminant

- Een fermion is een spin $\frac{1}{2}$ deeltje en voldoet aan het Pauliprincipe. Dit Pauliprincipe zegt dat in een systeem er geen twee spin $\frac{1}{2}$-deeltjes zijn die ~~d~~ identiek dezelfde kwantumgetallen hebben.

- In de beschrijving van n fermionen beschouwen we volgende afbeelding tussen het n-voudig tensorproduct van de Hilbertruimte waarin we elk fermion apart beschrijven:

$$U_p : \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H} : U_p(\varphi_1 \otimes \dots \otimes \varphi_n) = \varphi_{p^{-1}(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{p^{-1}(n)}$$

met $p \in S_n = \{ \sigma : \{1, \dots, n\} \to \{1, \dots, n\} \mid \sigma \text{ is een permutatie} \}$. U_p beschrijft dus een soort van permutatie van fermionen in een systeem. Merk op dat geldt dat $U_p U_q(\varphi_1 \otimes \dots \otimes \varphi_n) = U_{p \circ q}(\dots)$:

$$U_p(\varphi_{q^{-1}(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{q^{-1}(n)}) = \varphi_{p^{-1}(q^{-1}(1))} \otimes \dots \otimes \varphi_{p^{-1}(q^{-1}(n))} = \varphi_{(p^{-1} \circ q^{-1})(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{(p^{-1} \circ q^{-1})(n)}$$

$$= U_{q \circ p}(\varphi_1 \otimes \dots \otimes \varphi_n)$$

Wanneer we nu n fermionen hebben en deze samenstellen in een systeem, moeten we, omwille van het Pauliprincipe de golffuncties antisymmetriseren. Dit doen we met projecties:

$$P^s : \bigotimes^n \mathcal{H} \longrightarrow \left(\bigotimes^n \mathcal{H}\right)^s : \bigotimes_{i=1}^n \varphi_i \mapsto P^s\left(\bigotimes^n \varphi_i\right) = \frac{1}{n!} \sum_{p \in S_n} U_p\left(\bigotimes_{i=1}^n \varphi_i\right)$$

$$P^{a.s} : \otimes \mathcal{H} \longrightarrow \left(\bigotimes^n \mathcal{H}\right)^{a.s} : \bigotimes_{i=1}^n \varphi_i \mapsto P^{a.s}\left(\bigotimes^n \varphi_i\right) = \frac{1}{n!} \sum_{p \in S_n} \varepsilon(p)\, U_p\left(\bigotimes_{i=1}^n \varphi_i\right), \text{ met } \varepsilon(p) = \begin{cases} 1 & \text{paar} \\ -1 & \text{onpaar} \end{cases}$$

- Om nu over te stappen op een eenvoudigere beschrijving stappen we over op het concept van de Fockruimte die verbonden is met de Hilbertruimte $\mathcal{H}$.

$$\mathcal{F}^{a.s}(\mathcal{H}) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Vacuum,} \\ \text{geen deeltje}}}{\mathbb{C}} \oplus \underset{\substack{\uparrow \\ \text{1-deeltjes} \\ \text{deelruimte}}}{\mathcal{H}} \oplus (\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})^{a.s} \oplus (\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \mathcal{H})^{a.s} \oplus \dots$$

• Als we nu een systeem beschouwen van n fermionen met hun individuele golffuncties $\varphi_1, \dots, \varphi_n \in \mathcal{X}$. De Slaterdeterminant zal dan de golffunctie van het systeem beschrijven. We definiëren:

$$\varphi_1 \wedge \varphi_2 \wedge \dots \wedge \varphi_n := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p \in S_n} \varepsilon(p)\, \varphi_{p(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{p(n)} = \sqrt{N!}\, P^{a,1}(\varphi_1 \otimes \dots \otimes \varphi_n).$$

Gegeven dat we een inproduct definiëren op het tensorproduct tussen golffuncties als $\langle \varphi_1 \otimes \varphi_2, \psi_1 \otimes \psi_2 \rangle = \langle \varphi_1, \psi_1 \rangle \langle \varphi_2, \psi_2 \rangle$.

We bewijzen dat $\langle \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n, \psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_n \rangle = \det\left([\langle \varphi_i, \psi_j \rangle]_{ij} \right)$.

Hiertoe noteren we eerst de definitie van de determinant van een vierkante matrix A:
$\det A = \sum_{p \in S_n} \varepsilon(p) \prod_{j=1}^{n} A_{j p(j)}$. Nu rekenen we gewoon uit

$$\langle \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n, \psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_n \rangle \overset{\text{def. } \wedge}{=} \left\langle \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_p \varepsilon(p)\, \varphi_{p(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{p(n)}, \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_q \varepsilon(q)\, \psi_{q(1)} \otimes \dots \otimes \psi_{q(n)} \right\rangle$$

Eigenschap som

$$= \frac{1}{n!} \sum_p \sum_q \underbrace{\overline{\varepsilon(p)}}_{\varepsilon(p) \text{ reëel } \in \{-1,1\}} \varepsilon(q) \underbrace{\left\langle \psi_{q(1)} \otimes \dots \otimes \psi_{q(n)}, \varphi_{p(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{p(n)} \right\rangle}_{= \langle \varphi_{p(1)} \otimes \dots \otimes \varphi_{p(n)},\, \psi_{q(1)} \otimes \dots \otimes \psi_{q(n)} \rangle}$$

def $\wedge$-som

$$= \frac{1}{n!} \sum_p \sum_q \varepsilon(p) \varepsilon(q) \prod_{i=1}^{n} \langle \varphi_{p(i)}, \psi_{q(i)} \rangle = \frac{1}{n!} \sum_{p,q} \varepsilon(pq) \prod_{i=1}^{n} \langle \varphi_{p(i)}, \psi_{q(i)} \rangle$$

$\varepsilon(p) = (-1)^{\# \text{inversies}}$

$$= \frac{1}{n!} \sum_p \sum_q \varepsilon(pq) \langle \varphi_{p(1)}, \psi_{q(1)} \rangle \langle \varphi_{p(2)}, \psi_{q(2)} \rangle \cdots \langle \varphi_{p(n)}, \psi_{q(n)} \rangle$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_p \sum_q \varepsilon(p^{-1} q) \langle \varphi_1, \psi_{p^{-1}(q(1))} \rangle \cdot \langle \varphi_2, \psi_{p^{-1}(q(2))} \rangle \cdots \langle \varphi_n, \psi_{p^{-1}(q(n))} \rangle$$

↳ $\varepsilon(p) = \varepsilon(p^{-1})$

Neem $\sigma = p^{-1} q$

$$= \frac{1}{n!} \sum_p \underbrace{\sum_{\cancel{q}\,\sigma} \varepsilon(\sigma) \langle \varphi_1, \psi_{\sigma(1)} \rangle \langle \varphi_2, \psi_{\sigma(2)} \rangle \cdots \langle \varphi_n, \psi_{\sigma(n)} \rangle}_{= \det\left([\langle \varphi_i, \psi_j \rangle]_{ij} \right)}$$

$$= \frac{1}{n!} \sum_p \det\left([\langle \varphi_i, \psi_j \rangle]_{ij} \right) = \det\left([\langle \varphi_i, \psi_j \rangle]_{ij} \right)$$

Eerst schrijven we uit wat „ $\mathcal{F}^{a.n}(\mathcal{X}_1) \otimes \mathcal{F}^{a.n}(\mathcal{X}_2)$ " betekent:

$$\mathcal{F}^{a.n}(\mathcal{X}_1) \otimes \mathcal{F}^{a.n}(\mathcal{X}_2) = (\mathbb{C}\Omega_1 \oplus \mathcal{X}_1 \oplus (\mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_1)^{a.n} \oplus \dots) \otimes (\mathbb{C}\Omega_2 \oplus \mathcal{X}_2 \oplus (\mathcal{X}_2 \otimes \mathcal{X}_2)^{a.n} \oplus \dots)$$

$$= \mathbb{C}\Omega_1 \otimes \mathbb{C}\Omega_2 \oplus \mathbb{C}\Omega_1 \otimes \mathcal{X}_2 \oplus \mathbb{C}\Omega_1 \otimes (\mathcal{X}_2 \otimes \mathcal{X}_2)^{a.n} \oplus \dots \oplus \mathcal{X}_1 \otimes \mathbb{C}\Omega_2 \oplus \mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_2$$
$$\oplus \mathcal{X}_1 \otimes (\mathcal{X}_2 \otimes \mathcal{X}_2)^{a.n} \oplus \dots \oplus (\mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_1)^{a.n} \otimes \mathbb{C}\Omega_2 \oplus (\mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_1)^{a.n} \otimes \mathcal{X}_2$$
$$\oplus (\mathcal{X}_1 \otimes \mathcal{X}_1)^{a.n} \otimes (\mathcal{X}_2 \otimes \mathcal{X}_2)^{a.n}$$
$$\oplus \dots$$

Nu vragen we ons af waarop $(\varphi_1 \underset{\oplus}{\otimes} \psi_1) \wedge (\varphi_2 \underset{\oplus}{\otimes} \psi_2) \wedge \dots \wedge (\varphi_n \underset{\oplus}{\otimes} \psi_n)$ afgebeeld wordt.

We nemen twee partities $\begin{cases} i_1 < \dots < i_k \\ j_1 < \dots < j_\ell \end{cases}$ met $i, j \in \{0, \dots, n\}$ en we eisen nu dat $\{i_1, \dots, i_k\} \cap \{j_1, \dots, j_\ell\} = \emptyset$ en $\{i_1, \dots, i_k\} \cup \{j_1, \dots, j_\ell\} = \{1, \dots, n\}$. Nu nemen we een k-deeltjesvector in het eerste deel van het systeem en een ℓ-deeltjesvector in het tweede deel: $(\varphi_{i_1} \wedge \dots \wedge \varphi_{i_k}) \otimes (\psi_{j_1} \wedge \dots \wedge \psi_{j_\ell})$. Noem ε het teken van de permutatie die $\{i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, j_\ell\}$ omzet in $\{1, \dots, n\}$. De afbeelding is dan:

$$(\varphi_1 \oplus \psi_1) \wedge (\varphi_2 \oplus \psi_2) \wedge \dots \wedge (\varphi_n \oplus \psi_n) \longmapsto \sum_{\text{partities}}^{\oplus} (\varphi_{i_1} \wedge \dots \wedge \varphi_{i_k}) \otimes (\psi_{j_1} \wedge \dots \wedge \psi_{j_\ell})$$

- $n = 0$

$\Omega \to \Omega_1 \otimes \Omega_2$: het vacuum wordt afgebeeld op de twee vacua.

- $n = 1$

$\varphi \oplus \psi \to \Omega_1 \otimes \psi \oplus \varphi \otimes \Omega_2$

- $n = 2$

$(\varphi_1 \oplus \psi_1) \wedge (\varphi_2 \oplus \psi_2) \longrightarrow$