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 ~~ol~~ 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 $U_pU_q(\varphi_1\otimes..\otimes\varphi_n) = U_{p\circ q}(\dots)$:

$$U_p(\varphi_{q^{-1}(1)}\otimes..\otimes\varphi_{q^{-1}(n)}) = \varphi_{p^{-1}(q^{-1}(1))}\otimes..\otimes U_{p^{-1}(q^{-1}(n))} = \varphi_{(p^{-1}\circ q^{-1})(1)}\otimes\dots\otimes\varphi_{(p^{-1}\circ q^{-1})(n)}$$
$$= U_{q\circ p}(\varphi_1\otimes..\otimes\varphi_n)$$

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 projectoren:

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

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

- 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 bekomen 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:

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

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 norm

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

$\overline{\varepsilon(p)}$ reëel $\in \{-1, 1\}$

def $\wedge$-norm

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- Nu willen we een orthonormale basis van de antisymmetrische ruimte $(\otimes \mathcal{H})^{a.s}$ zoeken. Stel dat de Hilbert een eindige orthonormale basis $\{e_j\}$ heeft. We bewijzen nu dat $\{e_{i_1} \wedge \dots \wedge e_{i_k} \mid i_1 < \dots < i_k \leq n = \dim \mathcal{H}\}$ een orthonormale basis van $(\otimes \mathcal{H})^{a.s}$ is.

Bewijs: Zij $v = v_1 \wedge \dots \wedge v_k = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^1 e_i\right) \wedge \dots \wedge \left(\sum_{j=1}^{n} a_j^n e_j\right)$, waarbij we elke vector gewoon hebben als lineaire combinatie van de basis. Als we nu dat uit~~schrijven~~ schrijven, wordt $v = \left(\sum_{i_1=1}^{n} a_{i_1} e_{i_1}\right) \wedge \dots \wedge \left(\sum_{i_n=1}^{n} a_{i_n}^n e_{i_n}\right) = \sum_{i_1=1}^{n} \dots \sum_{i_n=1}^{n} a_{i_1}^1 \dots a_{i_n}^n e_{i_1} \wedge \dots \wedge e_{i_n}$ $(*)$

Wanneer in deze som nu een $i_k = i_m$, zal het hele wedgeproduct (die term althans) nul geven want $x \wedge y = -y \wedge x$. Op die manier zal $(*)$ een som van termen zijn met een wedgeproduct bestaande uit eenheidsvectoren die hoogstens 1 keer voorkomen. De wedgeproducten kunnen geordend worden als we gebruiken dat $x \wedge y = -y \wedge x$. De voortbrengendheid van de verzameling is hiermee aangetoond. De lineaire onafhankelijkheid kan bewezen worden met inductie op n

- $n=1$. Dan zal de basisvector van $\mathcal{H}$ ook de basisvector van $(\otimes \mathcal{H})^{a.s}$ zijn. Als we nu een

- Nu keren we terug naar de ruimte $\mathcal{H}$ waarmee we een antisymmetrische Fockruimte bouwen. Als we stellen dat $\dim(\mathcal{H}) = d$, dan is $\mathfrak{F}^{a.s}(\mathcal{H}) = \Omega\mathbb{C} \oplus \mathcal{H} \oplus (\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})^{a.s} \oplus \dots \oplus (\bigotimes_{i=1}^{d} \mathcal{H})^{a.s}$

De dimensie van de Fockruimte wordt zo $= \dim(\mathfrak{F}(\mathcal{H})) = 1 + d + \dots + (d-1)d = 2^d$.

Nu beschouwen we $\mathfrak{F}^{a.s}(\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2)$, waarvan $\dim(\mathfrak{F}^{a.s}(\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2)) = 2^{d_1+d_2} = 2^{d_1} \cdot 2^{d_2} = \dim(\mathfrak{F}^{a.s}(\mathcal{H}_1) \otimes \mathfrak{F}^{a.s}(\mathcal{H}_2))$. We vermoeden dus dat $\mathfrak{F}^{a.s}(\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2) \simeq \mathfrak{F}^{a.s}(\mathcal{H}_1) \otimes \mathfrak{F}^{a.s}(\mathcal{H}_2)$.

We bewijzen dit op de achterkant.

$1 + d + \frac{(d-1)d}{2!} + \dots = 2^d$

niet d^2 want antisymm.

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

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

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

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.

- $n = 1$

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

- $n = 2$

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

2. Scheppings- en vernietigingsoperatoren

- Beschouw een toestand $\psi^{(0)} \oplus \psi^{(1)} \oplus \dots \in \mathcal{F}^{a.s}(\mathcal{H})$. We kunnen een fermion toevoegen via een scheppingsoperator $a^*(\psi)$. Dit is eigenlijk een afbeelding:

$$a^*(\psi) : \overset{j}{\otimes}\mathcal{H} \longrightarrow \overset{j+1}{\otimes}\mathcal{H} : \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_j \mapsto a^*(\psi)(\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_j) := \psi \wedge \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_j$$

Voor deze eigenschap gelden volgende eigenschappen:

i) De afbeelding $\psi \mapsto a^*(\psi)$ is complex lineair

ii) $a^*(\psi_1)\,a^*(\psi_2) = -a^*(\psi_2)\,a^*(\psi_1)$, omwille van de definitie van de Slaterdeterminant.
Er geldt dus volgende anti-commutatieregel $\{a^*(\psi_1), a^*(\psi_2)\} = 0$

- Nu, de Hermitisch toegevoegde van $a^*(\psi)$ is de vernietigingsoperator $a(\psi)$. Waaraan is dus $a(\psi)(\psi_1 \wedge \psi_2 \wedge \dots \wedge \psi_n) = ?$ gelijk?

We weten dat voor Hermitisch toevoegen geldt dat $\langle \varphi, A^*\psi \rangle = \langle A\varphi, \psi \rangle$. Zo wordt:

$$\langle \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_{n-1}, a(\eta)(\psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_n) \rangle = \langle a^*(\eta)(\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_{n-1}), \psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_n \rangle = \langle \eta \wedge \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_{n-1}, \psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_n \rangle$$

Stelling blz 2

$$= \begin{vmatrix} \langle \eta, \psi_1 \rangle & \langle \eta, \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \eta, \psi_n \rangle \\ \langle \varphi_1, \psi_1 \rangle & \langle \varphi_1, \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2, \psi_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_{n-1}, \psi_1 \rangle & \langle \varphi_{n-1}, \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_{n-1}, \psi_n \rangle \end{vmatrix}$$

Ontwikkeling naar eerste rij

$$= \sum_{j=1}^{n} (-1)^{j+1} \langle \eta, \psi_j \rangle \underbrace{\begin{vmatrix} \langle \varphi_1, \psi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1, \psi_{j-1} \rangle & \langle \varphi_1, \psi_{j+1} \rangle & \cdots & \langle \varphi_1, \psi_n \rangle \\ \langle \varphi_2, \psi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2, \psi_{j-1} \rangle & \langle \varphi_2, \psi_{j+1} \rangle & \cdots & \langle \varphi_2, \psi_n \rangle \\ \vdots & & & & & \\ \langle \varphi_{n-1}, \psi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_{n-1}, \psi_{j-1} \rangle & \langle \varphi_{n-1}, \psi_{j+1} \rangle & \cdots & \langle \varphi_{n-1}, \psi_n \rangle \end{vmatrix}}_{= \langle \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_{n-1}, \psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_{j-1} \wedge \psi_{j+1} \wedge \dots \wedge \psi_n \rangle}$$

$$= \left\langle \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_{n-1}, \sum_{j=1}^{n} (-1)^{j+1} \langle \eta, \psi_j \rangle \cdot \psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_{j-1} \wedge \psi_{j+1} \wedge \dots \wedge \psi_n \right\rangle$$

Dus:
$$a(\eta)(\psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_n) = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{j+1} \langle \eta, \psi_j \rangle \; \psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_{j-1} \wedge \psi_{j+1} \wedge \dots \wedge \psi_n$$

$$= \sum_{j=1}^{n} (-1)^{j+1} \langle \eta, \psi_j \rangle \bigwedge_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} \psi_i$$

Nu zoeken we een verband tussen a^* en a. We berekenen: voor elke $\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n$ geldt:

- $$a(\psi_2)a^*(\psi_1)(\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n) \overset{\text{def } a^*}{=} a(\psi_2)(\psi_1 \wedge \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n) = \langle \psi_2, \psi_1 \rangle \cdot \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n + \underbrace{\sum_{i=1}^{n} (-1)^i \langle \psi_2, \varphi_i \rangle \psi_1 \wedge \bigwedge_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \varphi_j}_{= -a^*(\psi_1)a(\psi_2)(\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n)}$$

- $$a^*(\psi_1)a(\psi_2)(\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n) = a^*(\psi_1) \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+1} \langle \psi_2, \varphi_i \rangle \bigwedge_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n} \varphi_i = -\sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+1} \langle \psi_2, \varphi_i \rangle \psi_1 \wedge \bigwedge_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \varphi_j$$

Dus: $a(\psi_2) a^*(\psi_1)(\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n) = \langle \psi_2, \psi_1 \rangle (\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n) - a^*(\psi_1) a(\psi_2)(\varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n)$

of dus $a(\psi_2) a^*(\psi_1) = \langle \psi_2, \psi_1 \rangle \mathbb{1} - a^*(\psi_1) a(\psi_2)$,

wat de anticommutator $\{a^*(\psi_1), a(\psi_2)\} = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle \mathbb{1}$ levert.

We vinden nu drie karakteriserende eigenschappen van de schepping- en vernietigingsoperatoren:

i) $\psi \mapsto a^*(\psi)$ is complex lineair

ii) $\{a^*(\psi_1), a^*(\psi_2)\} = 0$

iii) $\{a^*(\psi_1), a(\psi_2)\} = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle \mathbb{1}$

- Nu kunnen we de Fockruimte $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ opbouwen door de creatie-operator te laten inwerken op het vacuum Ω. We stellen dat voor alle $\psi \in \mathcal{H}$ $a(\psi)\Omega = 0$ en $\|\Omega\| = 1$.

De deeltjesoperator zal het aantal fermionen „meten" en wordt als volgt gedefinieerd. $\{e_j\}$ is een orthonormale basis van $\mathcal{H}$ en $N = \sum_j a^*(e_j) a(e_j)$.

3. Connectie tussen algebraïsche eigenschappen en de Hilbertruimte

- Zoals afgeleid is:

  1) $\forall \varphi \in \mathcal{H}: a^*(\varphi)(\psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_n) = \varphi \wedge \psi_1 \wedge \dots \wedge \psi_n$
  met eigenschappen
  i) $\varphi \mapsto a^*(\varphi)$ is complex lineair
  ii) $\{a^*(\varphi), a^*(\psi)\} = 0$
  iii) $\{a^*(\varphi), a(\psi)\} = \langle \varphi, \psi \rangle \mathbb{1}$

  2) de Fockruimte met n deeltjes wordt opgebouwd door n keer de creatie-operator toe te passen op het vacuum Ω:
  i) $\|\Omega\| = 1$ en $a(\varphi)\Omega = 0$ voor alle $\varphi \in \mathcal{H}$
  ii) $\Gamma^{a.n}(\mathcal{H}) = \mathcal{F}^{a.n}(\mathcal{H})$ is opgespannen door $\{a^*(\varphi_1) a^*(\varphi_2) \dots a^*(\varphi_n)\Omega\}$

De connectie tussen de Hilbertruimtebeschrijving met de Slaterdeterminant en de algebraïsche beschrijving met creatie-operatoren is:

$$a^*(\varphi_1) \dots a^*(\varphi_n)\Omega = \varphi_1 \wedge \dots \wedge \varphi_n . \quad (*)$$

- We weten ook dat a en a^* op irreducibele wijze inwerken op de Fockruimte. Dit wil zeggen:

  → er bestaat geen gesloten niet-triviale deelruimte van $\Gamma^{a.n}(\mathcal{H})$ die (globaal) invariant is onder alle $a^*(\varphi)$.

  Equivalentie via het lemma van Schur

  → er bestaat geen niet-triviale (= geen veelvoud van $\mathbb{1}$) lineaire afbeelding die commuteert met alle $a^*(\varphi)$.

We zullen dit laatste aantonen. Voor een continue lineaire afbeelding X zal voor alle $\varphi \in \mathcal{H}$ gelden dat $\|X(\varphi)\| \leq \|X\| \cdot \|\varphi\|$ → $\|X\|$ = operatornorm.

Veronderstel dat X commuteert met alle a^*'s: $\forall \varphi \in \mathcal{H}: [X, a^*(\varphi)] = 0$. We tonen aan dat $X = \langle \Omega, X\Omega \rangle \mathbb{1}$. We tonen eerst aan dat $X\Omega = \langle \Omega, X\Omega \rangle \Omega$.

Hiertoe schrijven we $X\Omega$ (= vector in de Fockruimte) uit. We nemen een orthonormale basis $\{e_j\}$ van de moederruimte $\mathcal{H}$. Vanuit blz 3 weten we dat volgende verzameling een basis vormt $\{e_{i_1}\wedge\dots\wedge e_{i_n} \mid i_1<\dots<i_n\} \underset{\text{Formule (*)}}{=} \{a^*(e_{i_1})\dots a^*(e_{i_n})\Omega \mid i_1<\dots<i_n\}$ van de Fockruimte $\Gamma^{a.s}(\mathcal{H})$.

Dan zegt de Formule van Plancherel dat:

$$X\Omega = \sum \langle a^*(e_{i_1})a^*(e_{i_2})\dots a^*(e_{i_n})\Omega, X\Omega\rangle\, a^*(e_{i_1})a^*(e_{i_2})\dots a^*(e_{i_n})\Omega$$

Som over alle basiselementen

$$= \sum \langle a^*(e_{i_2})\dots a^*(e_{i_n})\Omega, a(e_{i_1})X\Omega\rangle\, a^*(e_{i_1})\dots a^*(e_{i_n})\Omega$$

$[X, a(\psi)] = 0$

$$= \sum \underbrace{\langle a^*(e_{i_2})\dots a^*(e_{i_n})\Omega, X\underbrace{a(e_{i_1})\Omega}_{=0}\rangle}_{=0,\ \text{buiten voor } 1}\, a^*(e_{i_1})\dots a^*(e_{i_n})\Omega$$

$$= \langle \mathbb{1}\Omega, X\Omega\rangle\, \mathbb{1}\Omega = \langle\Omega, X\Omega\rangle\,\Omega$$

Dan volgt nu snel en eenvoudig, door op linker- en rechterlid een scheppingsoperator toe te passen, dat: voor $\psi\in\mathcal{H}$: $a^*(\psi)X\Omega = a^*(\psi)\langle\Omega,X\Omega\rangle\Omega$

$$\overset{a^*X = Xa^*}{\Longrightarrow} Xa^*(\psi)\Omega = \langle\Omega,X\Omega\rangle\, a^*(\psi)\Omega$$

Omdat voor alle $\psi_1\dots\psi_n\in\mathcal{H}$ geldt dat $X(\psi_1\wedge\dots\wedge\psi_n) = \langle\Omega,X\Omega\rangle(\psi_1\wedge\dots\wedge\psi_n)$ is $X = \langle\Omega,X\Omega\rangle$.

4. De Fermizee

- Bij de constructie van de Fockruimte is vertrokken van een vacuüm Ω en werden hierin fermionen gemaakt. In de volle fermizee vertrekken we van een volle zee Φ met fermionen waarin we gaten gaan slaan. Op dezelfde manier als in de Fockruimte kan zo een constructie gemaakt worden door middel van een separabele Hilbertruimte.

De structuur is dezelfde: $\underset{\text{Volle zee}}{\mathbb{C}\Phi} \oplus \underset{1\text{ gat}}{\mathcal{H}} \oplus (\mathcal{H}\otimes\mathcal{H})^{a.s} \oplus \dots$

We definiëren een vernietigingsoperator van fermionen (= creatie van een gat) als:

$$b(\psi)(\psi_1\wedge\dots\wedge\psi_n) = \bar{\psi}\wedge\psi_1\wedge\dots\wedge\psi_n$$

De commutatierelaties zullen dezelfde zijn als in de Fockruimte:

i) $\psi \mapsto b(\psi)$ is complex lineair

ii) $\{b^*(\psi), b^*(\psi)\} = 0$

iii) $\{b^*(\psi), b(\psi)\} = \langle \psi, \psi \rangle \mathbb{1}$

De creatie-operator van een fermion zal een gat vernietigen, waardoor $b^*(\psi)\,\Phi = 0$ voor alle $\psi \in \mathcal{H}$. We stellen weer dat $\{b(\psi_1) \cdots b(\psi_n)\Phi\}$ de Fermizee opspant.

- Interessant om te onderzoeken is of de Fockruimte en de Fermizee (of anti-Fockruimte $= A\Gamma(\mathcal{H})$ genoemd) unitair equivalent zijn. Dus:

Bestaat er een unitaire $u : \Gamma(\mathcal{H}) \longrightarrow A\Gamma(\mathcal{H})$ zodat voor alle $\psi \in \mathcal{H}$ geldt dat $u\, a^*(\psi) u^* = b^*(\psi)$?

Als $\dim(\mathcal{H}) < \infty$ is er unitaire equivalentie en dus op unitaire equivalentie na maar 1 realisatie

$\dim(\mathcal{H}) = \infty$ geen unitaire equivalentie

Beschouw $u^*(\Phi) \in \Gamma(\mathcal{H})$ ($\dim(\mathcal{H}) < \infty$). We laten hierop een creatieoperator $a^*(\psi)$ ($\psi \in \mathcal{H}$) werken en zien

$$a^*(\psi)\, u^*(\Phi) \underset{a^*(\psi) = u^* b^*(\psi) u}{=} u^* b^*(\psi) \underbrace{u u^*}_{=\mathbb{1}} \Phi = u^* \underbrace{b^*(\psi)\Phi}_{=0} = 0$$

Merk dus op, $\|u^*\Phi\| = 1$ en toepassen van de creatie-operator eigen levert 0.

N

- Als $\dim(\mathcal{H}) = d < \infty$, kiezen we een orthonormale basis $\{e_1, \ldots, e_d\}$ van $\mathcal{H}$. Dan is $a^*(\psi)\{a^*(e_1) \cdots a^*(e_d)\,\Omega\} = 0$. Er kunnen hoogstens d deeltjes in het systeem.
- Als $\dim(\mathcal{H}) = \infty$ bestaat er geen vector van lengte 1 die door alle creatie-operatoren vernietigd wordt.

5. CAR-Algebra en GNS-constructie

We stappen nu af van de Hilbertruimtebeschrijving en gaan volledig algebraïsch werken.
Een Algebra over een veld $\mathbb{C}$ is een vectorruimte die uitgerust is met een bilineair product.
Dus: een algebra over een veld is een verzameling die uitgerust is met vermenigvuldiging, som en vermenigvuldiging met een scalar. ($\in \mathbb{C}$)

- De algebra $\mathfrak{a}(\mathcal{H})$ wordt gegenereerd (= basis van de vectorruimte) door de elementen $\{c^*(\varphi) \mid \varphi \in \mathcal{H}\}$. c^* voldoet aan volgende eigenschappen:

  i) $\varphi \mapsto c^*(\varphi)$ is complex lineair

  ii) $\{c^*(\varphi), c^*(\psi)\} = 0$

  iii) $\{c^*(\varphi), c(\psi)\} = \langle \varphi, \psi \rangle \mathbb{1}$

  $\mathfrak{a}(\mathcal{H})$ is een algebra van observabelen.

en we leggen een norm $\|\cdot\| : \mathfrak{a}(\mathcal{H}) \to \mathbb{C}$ op de algebra die voldoet aan volgende eigenschappen: $\forall x \in \mathfrak{a}(\mathcal{H})$: $\|x^*\| = \|x\|$

$\|x^* x\| = \|x\|^2$ C^*-eigenschap.

Deze eigenschap zal ook de notie van continuiteit toelaten.

en veronderstellen dat $\mathfrak{a}(\mathcal{H})$ volledig is voor deze norm.
Deze algebra heet de Canonical Anti Commutation Algebra (CAR-Algebra) en is niet commutatief.

- Nu zullen we verwachtingswaarden beschrijven. Dit zal gebeuren via de notie v/e toestand op $\mathfrak{a}(\mathcal{H})$:

  $\omega : \mathfrak{a}(\mathcal{H}) \to \mathbb{C}$ met eigenschappen

  i) $x \mapsto \omega(x)$ is lineair

  ii) $\omega(\mathbb{1}) = 1$

  iii) $\omega(x^* x) \geq 0 \quad \forall x \in \mathfrak{a}(\mathcal{H})$

De verzameling van toestanden wordt genoteerd als $S(\mathfrak{a})$ of $\mathcal{E}(\mathfrak{a})$. Dit zijn convexe verzamelingen en zijn compact voor de goede notie van convergentie: $*$-zwakke convergentie: $A_1, .., A_n \in \mathfrak{a}(\mathcal{H})$, dan $\omega_\alpha \to \omega$ als voor alle j $\lim_{\alpha \to \infty} \omega_\alpha(A_j) = \omega(A_j)$.

De stelling van Krein-Milman zegt dat wanneer X een lokaal convexe topologische vectorruimte is en $K \subseteq X$ een compact convexe deelruimte, ~~Rein is zegt~~ dat K dan de gesloten convexe omhullende is van haar extreme punten.

Dit wil dus zeggen dat er genoeg extreme toestanden zijn (+ limieten van extreme punten) om een verzameling op te bouwen.

- We willen vanuit deze CAR-algebra de Hilbertruimtebeschrijving terugvinden. Dit zal gebeuren met de constructie van Gelfand-Naimark-Segal (GNS) en vertrekt vanuit de notie van een toestand.

Zij $\mathfrak{a}$ een algebra en $\omega : \mathfrak{a} \to \mathbb{C}$ een toestand, dan geeft de GNS-constructie:

- er bestaat een Hilbertruimte $\mathcal{H}$
- er bestaat een - op unitaire transformatie na - unieke $\Omega \in \mathcal{H}$ met $\|\Omega\| = 1$.
- er bestaat een - op unitaire equivalentie na - unieke representatie π van $\mathfrak{a}$ naar de verzameling van begrensde operatoren $B(\mathcal{H})$: $\pi : \mathfrak{a} \to B(\mathcal{H})$ zodat

  i) $\omega(A) = \langle \Omega, \pi(A)\Omega \rangle$ voor elke $A \in \mathfrak{a}$

  ii) $\overline{\pi(\mathfrak{a})\Omega} = \mathcal{H}$

De afbeelding π maakt alle eigenschappen van de algebra concreet in de Hilbertruimte. Ook de $*$-eigenschap: $\pi(A^*) = \pi(A)^\dagger$.

<u>Bewijs</u>: Beschouw de algebra $\mathfrak{a}$ als complexe vectorruimte. We proberen hieruit een orthogonale ruimte te maken om zo al de Hilbertruimte te vinden. Beschouw $A, B \in \mathfrak{a}$ en bekijk $\omega(A^*B) \in \mathbb{C}$. Dit definieert een scalair product op $\mathfrak{a}$. (Veronderstel dat als $\omega(A^*A) = 0$, dan $A = 0$. Dit is niet altijd zo, maar zo te technisch worden.) $\langle A, B \rangle_\omega := \omega(A^*B)$. We vinden nu de gezochte Hilbertruimte $\mathcal{H}$ door $\mathfrak{a}$ met scalair product $\langle \cdot, \cdot \rangle_\omega$ te vervolledigen. Zo is ook Ω eenvoudig te vinden: kies $\Omega = \mathbb{1} \in \mathcal{H}$ en dus $\|\Omega\| = \|\mathbb{1}\| = 1$. Als representatie-afbeelding π kiezen we $\pi : \mathfrak{a} \to B(\mathcal{H}) : B \mapsto \pi(A)(B) = AB$, de linker vermenigvuldiging met een vaste $A \in \mathfrak{a}$.

We checken alvast: $\langle \Omega, \Omega \rangle_\omega = \omega(\mathbb{1}^*\mathbb{1}) = \omega(\mathbb{1}\mathbb{1}) = \omega(\mathbb{1}) = 1$. We tonen nu aan dat π een operator is, dus dat voor alle $B \in \mathfrak{a}$ $\|\pi(A)B\|_\omega \leq$ „constante" $\cdot \|B\|_\omega$:

wordt later bewezen

$$\|\pi(A)B\|_\omega^2 = \|AB\|_\omega^2 = \omega((AB)^*AB) = \omega(B^*A^*AB) \boxed{\leq} \|A\|^2 \omega(B^*B) = \|A\|^2 \|B\|_\omega^2.$$

Dus is $\|\pi(A)B\|_\omega \leq \|A\| \|B\|_\omega$, wat ons toelaat $\pi(A)$ uit te breiden tot een continue lineaire transformatie van $\mathcal{H}$ en $\|\pi(A)\| \leq \|A\|$. We moeten nog checken of π een lineaire afbeelding is voor de uitbreiding

Er rest ons nog te bewijzen dat $\omega(B^*A^*AB) \leq \|A\|^2 \omega(B^*B)$.

Kies $\underset{=x^*}{x} \in \mathfrak{a}$ en neem voor de eenvoud dat $\|x\| = 1$. Dan zal $-\|x\| \mathbb{1} \leq x \leq \|x\| \mathbb{1}$ en ook $0 \leq \mathbb{1} - x$. We zullen tonen dat er een $y \in \mathfrak{a}$ is zodat $\mathbb{1} - x = y^* y$ en $y^* y \geq 0$. (0)

Het idee is om te noteren dat $\mathbb{1} - x = \sqrt{\mathbb{1} - x}\sqrt{\mathbb{1} - x}$ (zonder het concept van een vierkantswortel op de algebra ingevoerd te hebben!).

De Taylorreeks rond $z = 0$ van $\sqrt{1-z} = 1 - \frac{1}{2} z - \frac{1}{2!}\frac{1}{4} z^2 - \dots$

$= 1 - (c_1 z + c_2 z^2 + \dots)$ met alle $c_j > 0$. (*)

Als dus $z \to 1$ zal $\sum_i c_i = 1$, waardoor er uniforme convergentie is op de convergentiestraal.

Definieer nu $y := \mathbb{1} - \sum_{j=1}^{\infty} c_j x^j \in \mathfrak{a}$ met c_j de coefficienten van (*)

$\rightarrow$ • $y^* = y$ want $x = x^*$ en $*$-operatie zet zich door som.

• $y^2 = y^* y = \mathbb{1} - x$. Zo definiëren we $y = \sqrt{\mathbb{1} - x}$

Als we nu voor $x = A^*A$ nemen, hebben we omwille van (0) bewezen dat $A^*A \leq \|A^*A\| \mathbb{1} = \|A\|^2 \mathbb{1}$

Op die manier zal $B^*A^*AB \leq \|A\|^2 B^*B$ en dus $\omega(B^*A^*AB) \leq \|A\|^2 \omega(B^*B)$, wat nog bewezen moest worden.

• Voorbeeld: $\mathfrak{a} = \mathfrak{a}(\mathcal{H})$ met $\mathcal{K} = \Gamma(\mathcal{H})$ (= representatie).

We kiezen de vacuümvector $\Omega = 1 \oplus 0 \oplus \dots$. Dan is $\pi(c^*(\psi)) = a^*(\psi)$.

- We kunnen via de GNS ook iets zeggen over toestanden. Een toestand ω is puur/extreem als en slechts als de gevonden representatie π van ω irreducibel is. Dit laatste is wegens het Eerste lemma van Schur het geval als en slechts als $[X, \pi(A)] = 0$ voor alle $A \in \mathfrak{a}$, dan $X = c \cdot \mathbb{1}$.

We hebben dit vroeger al bewezen voor de Fock- en Anti-Focktoestanden, dit zijn dus zuivere toestanden.

6. Symmetrieën

- In de kwantummechanica wordt symmetrie beschreven door een symmetriegroep en een unitaire representatie van $\mathcal{H}$ in de groep. Hier zullen we dit via automorfismen doen, omdat er geen voorkeurs Hilbertruimte is. $\alpha : \mathfrak{a} \to \mathfrak{a}$ is een automorfisme en voldoet aan volgende eig:
  i) α is inverteerbaar
  ii) α bewaart alle algebraïsche eigenschappen: $\begin{cases} \alpha(A + \lambda B^*) = \alpha(A) + \lambda\, \alpha(B)^* \\ \alpha(AB) = \alpha(A)\alpha(B) \end{cases}$
- Voorbeeld: CAR-algebra $\mathfrak{a}(\mathcal{H})$
  Beschouw $\alpha : \mathfrak{a} \to \mathfrak{a} : c^*(\varphi) \to c^*(u\varphi)$, met u een unitaire transformatie van $\mathcal{H}$.
  Dan zal ook
  - $\{c^*(u\varphi), c^*(u\psi)\} = 0$, wegens anticommutatie van c^*
  - $\{c^*(u\varphi), c(u\psi)\} = \langle u\varphi, u\psi\rangle = \langle \varphi, \psi\rangle$

  We bekomen dezelfde anticommutatieregels. De eigenschappen blijven bewaard.
  De inverse is eenvoudig: $\alpha^{-1} : \mathfrak{a} \to \mathfrak{a} : c^*(\varphi) \mapsto c^*(u^+\varphi)$, en ja want
  $(\alpha \circ \alpha^{-1})(c^*(\varphi)) = \alpha(\alpha^{-1}(c^*(\varphi))) = \alpha(c^*(u^+\varphi)) = c^*(uu^+\varphi) = c^*(\varphi)$
- We kunnen ons de vraag stellen of er hetzelfde verband geldt als in de kwantummechanica, dat er een unitaire u bestaat zodat $\alpha(A) = uAu^+$. Dit is niet waar, wel volgend resultaat:

> Zij $\omega \in S(\mathfrak{a})$ en ω is α-invariant (= voor alle $A \in \mathfrak{a}$ is $\omega(\alpha(A)) = \omega(A)$). We nemen de GNS-constructie van ω, dan bestaat er één unitaire u op $\mathcal{H}$ zodat
> i) $u\Omega = \Omega$
> ii) voor alle $A \in \mathfrak{a}$ geldt $\pi(\alpha(A)) = u\,\pi(A)\,u^+$

Merk dus op: via de representatie π verkrijgen we wel het standaard Heisenbergbeeld met een unitaire u. Op de achterkant bewijzen we dit resultaat.

Bewijs: voor alle $A \in \mathfrak{a}$ berekenen we: $\|\pi(\alpha(A))\Omega\|^2 = \langle \pi(\alpha(A))\Omega, \pi(\alpha(A))\Omega\rangle$

$$= \langle \Omega, \pi(\alpha(A))^\dagger \pi(\alpha(A))\Omega\rangle = \langle \Omega, \pi(\alpha(A)^*)\pi(\alpha(A))\Omega\rangle = \langle \Omega, \pi(\alpha(A)^*\alpha(A))\Omega\rangle$$

$$= \langle \Omega, \pi(\alpha(A^*)\alpha(A))\Omega\rangle = \langle \Omega, \pi(\alpha(A^*A))\Omega\rangle = \omega(\alpha(A^*A)) \overset{\alpha\text{-invariantie}}{=} \omega(A^*A) = \langle \Omega, \pi(A^*A)\Omega\rangle$$

$$= \langle \Omega, \pi(A)^\dagger \pi(A)\Omega\rangle = \langle \pi(A)\Omega, \pi(A)\Omega\rangle = \|\pi(A)\Omega\|^2$$

Dus $\|\pi(\alpha(A))\Omega\| = \|\pi(A)\Omega\|$.

Beschouw de afbeelding $U: \pi(\mathfrak{a})\Omega \to \pi(\mathfrak{a})\Omega: \pi(A)\Omega \mapsto \pi(\alpha(A))\Omega$. Hiervoor geldt:

- goed gedefinieerd: zie hierboven
- is lineair
- is begrensd: er is een verband tussen bron- en beeldvector

Omdat $\pi(\mathfrak{a})\Omega$ dicht is in de GNS-ruimte, valt U uit te breiden naar de volledige Hilbertruimte $\mathcal{H} = \overline{\pi(\mathfrak{a})\Omega}$: via $\|U\psi\| = \|\psi\|$ voor elke $\psi \in \mathcal{H}$. U wordt zo een isomorfisme $(U^\dagger U = \mathbb{1})$ want de norm wordt bewaard.

Definieer nu: $V: \pi(\mathfrak{a})\Omega \to \pi(\mathfrak{a})\Omega: \pi(A)\Omega \mapsto V(\pi(A)\Omega) = \pi(\alpha^{-1}(A))\Omega$.

Merk op dat $V = U^\dagger$ en zo $U^\dagger U = \mathbb{1}$. Nu checken we twee puntjes:

- $U\Omega = \Omega$? Kies $A = \mathbb{1}$.
- Voor elke $B \in \mathfrak{a}$ geldt: $\pi(\alpha(A))\pi(B)\Omega = \pi(\alpha(A)B)\Omega = \pi(\alpha(A\alpha^{-1}(B)))\Omega = U\pi(A\alpha^{-1}(B))\Omega$
  $= U\pi(A)\pi(\alpha^{-1}(B))\Omega = U\pi(A)U^\dagger\pi(B)\Omega$. Omdat dit voor elke $B \in \mathfrak{a}$ geldt is
  $\pi(\alpha(A)) = U\pi(A)U^\dagger$.

$\square$

Dit resultaat is nuttig. Beschouw een eenvoudige dynamica, dit wordt beschreven door een groep van automorfismen $\alpha = \{\alpha_t \mid t \in \mathbb{R}\}$. We lezen tijdsevolutie als een vorm van symmetrie.

- In kwantummechanica is $[A_t, B_t] = [U_t A_t U_t^\dagger, U_t B_t U_t^\dagger] = U_t [A_t, B_t] U_t^\dagger$
- Hier: voor de eenparametergroep geldt dat $\alpha_{t_1} \circ \alpha_{t_2} = \alpha_{t_1+t_2}$. Als een toestand $\omega \in S(\mathfrak{a})$ invariant is onder α (bijvoorbeeld een grondtoestand of stabiele toestand), dit wil zeggen dat $\omega \circ \alpha_t(A) = \omega(A)$ voor alle $A \in \mathfrak{a}$. Dan is $\pi(\alpha_t(A)) = U_t \pi(A) U_t^\dagger$ met $U_{t_1} \cdot U_{t_2} = U_{t_1+t_2}$.

- Volgend belangrijk resultaat is de Stelling van Stone - von Neumann (1930):

> Zij $\mathcal{H}$ een Hilbertruimte en $\{U_t \mid t \in \mathbb{R}\}$ een groep van unitairen. De afbeelding $t \mapsto \langle \varphi, U_t \psi \rangle$ is continu voor alle $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$.
> Dan bestaat er een unieke zelftoegevoegde $H = H^*$ zodat $U_t = e^{iHt}$.

We bewijzen dit niet. H noemen we de Hamiltoniaan en hoeft niet begrensd te zijn.

7. CAR-algebra toepassen op fermionen

- Om nu verwachtingswaarden te berekenen van fysische grootheden en observabelen zullen we nu gebruik maken van ijkinvariante quasivrije toestanden en de klassieke fermiontoestanden.

Als we een product van creatie- en vernietigingsoperatoren $c^\#(\varphi_1) \dots c^\#(\varphi_k)$ ($\# = *$ of niets) beschouwen, kan dit met de anticommutatieregel $\{c(\varphi), c^*(\psi)\} = \langle \varphi, \psi \rangle 1$ herwerkt worden tot $c^*(\varphi_1) \dots c^*(\varphi_n) c(\psi_m) \dots c(\psi_1)$. Dan zal voor een functionaal ω op de CAR-algebra gelden dat
$$\omega(c^*(\varphi_1) \dots c^*(\varphi_n) c(\psi_m) \dots c(\psi_1)) = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ \det\left[\omega(c^*(\varphi_k) c(\psi_\ell))\right]_{k,\ell} & n = m \end{cases}$$

- Voorbeeld. Wat is $\omega(c^*(\varphi_1) c^*(\varphi_2) c(\psi_2) c(\psi_1))$?

$$\omega(c^*(\varphi_1) c^*(\varphi_2) c(\psi_2) c(\psi_1)) = \begin{vmatrix} \omega(c^*(\varphi_1) c(\psi_1)) & \omega(c^*(\varphi_1) c(\psi_2)) \\ \omega(c^*(\varphi_2) c(\psi_1)) & \omega(c^*(\varphi_2) c(\psi_2)) \end{vmatrix}$$
$$= \omega(c^*(\varphi_1) c(\psi_1)) \omega(c^*(\varphi_2) c(\psi_2)) - \underbrace{\omega(c^*(\varphi_2) c(\psi_1)) \omega(c^*(\varphi_1) c(\psi_2))}_{\text{mengtermen}}$$

Via de Representatiestelling van Riesz (zie Analyse II) weten we dat er geldt dat $\omega(c^*(\varphi) c(\psi)) = \langle \psi, Q \varphi \rangle$ met Q 'een' lineaire transformatie van $\mathcal{H}$. Deze Q zal de fermion-toestanden bepalen en we noteren daarom ook ω_Q.

> **Stelling**: ω_Q is een toestand op $\mathfrak{a}(\mathcal{H})$ als en slechts als $0 \leq Q \leq 1$.

We bewijzen deze stelling op de achterkant.

> Een toestand heet quasi-vrij als voor alle $n \geq 2$ en alle $\varphi_1 \dots \varphi_n \in \mathcal{H}$ geldt dat $\omega(a^*(\varphi_1) \dots a^*(\varphi_n)) = 0$.

Bewijs van de stelling

$\boxed{\Rightarrow}$ Veronderstel dat ω_Q een toestand is. Voor alle $\psi \in \mathcal{H}$ geldt

$0 \leq \omega_Q(c^*(\psi)c(\psi)) = \langle \psi, Q\psi \rangle$, waardoor $Q \geq 0$

$0 \leq \omega_Q(c^*(\psi)c(\psi)) = \omega_Q(\langle \psi,\psi\rangle 1 - c^*(\psi)c(\psi)) = \omega_Q(\langle \psi,\psi \rangle 1) - \omega_Q(c^*(\psi)c(\psi))$

$= \langle \psi,\psi \rangle \underbrace{\omega_Q(1)}_{=1} - \langle \psi, Q\psi \rangle = \langle \psi, (1-Q)\psi \rangle$ waardoor $1-Q \geq 0$

Samengenomen hebben we dat $0 \leq Q \leq 1$.

$\boxed{\Leftarrow}$ We gebruiken de GNS-constructie met ω_Q als toestand en $\mathfrak{A}(\mathcal{H})$ als algebra. We weten dat er een representatie $\pi: \mathfrak{A} \to \mathcal{H}$ bestaat en er ook een $\tilde{\Omega} \in \mathcal{H}$ bestaat zodat voor alle $X \in \mathfrak{A}$ geldt dat $\omega(X) = \langle \tilde{\Omega}, \pi(X)\tilde{\Omega} \rangle$.

Twee representaties kennen we al: de Fock- en de anti-Fock representatie: $\pi_F(c^*(\psi)) = a^*(\psi)$ op $\Gamma(\mathcal{H})$ en $\pi_{AF}(c^*(\psi)) = b^*(\psi)$ op $A\Gamma(\mathcal{H})$.

Als we $\mathcal{H} = \Gamma(\mathcal{H}) \otimes A\Gamma(\mathcal{H})$ kiezen (GNS levert ook een Hilbertruimte, dit zal de juiste blijken te zijn), zoeken we een representatie $\pi: \mathfrak{A} \to \mathcal{H} : c^*(\psi) \mapsto \pi(c^*(\varphi)) = ?$ met Gaussische toestand geven.

Kies alvast $\tilde{\Omega} := \Omega \otimes \Xi$ $\quad (\|\tilde{\Omega}\| = \|\Omega\| \cdot \|\Xi\| = 1 \cdot 1 = 1)$

Er kan voorgesteld worden om: $c^*(\psi) \mapsto a^*(\psi) \otimes 1_{AF} + 1_F \otimes b^*(\psi)$. Deze afbeelding is lineair, dat is goed. Echter, omdat $\{c^*(\psi), c^*(\varphi)\} = 0$ voor alle $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$ is er een probleem omdat π deze eigenschap in de Hilbertruimte moet overdragen.

$\{\pi(c^*(\psi)), \pi(c^*(\varphi))\} = \{a^*(\psi) \otimes 1_{AF} + 1_F \otimes b^*(\psi), a^*(\varphi) \otimes 1_{AF} + 1_F \otimes b^*(\varphi)\} =$

$(a^*(\psi) \otimes 1_{AF} + 1_F \otimes b^*(\psi))(a^*(\varphi) \otimes 1_{AF} + 1_F \otimes b^*(\varphi)) + (a^*(\varphi) \otimes 1_{AF} + 1_F \otimes b^*(\varphi))(a^*(\psi) \otimes 1_{AF} + 1_F \otimes b^*(\psi))$

$= \underline{a^*(\psi)a^*(\varphi) \otimes 1_{AF}} + a^*(\psi) \otimes b^*(\varphi) + a^*(\varphi) \otimes b^*(\psi) + \underline{1_F \otimes b^*(\psi)b^*(\varphi)} + \underline{a^*(\varphi)a^*(\psi) \otimes 1_{AF}}$

$+ a^*(\varphi) \otimes b^*(\psi) + \underline{1_F \otimes b^*(\varphi)b^*(\psi)} + a^*(\psi) \otimes b^*(\varphi) = \underbrace{\{a^*(\psi), a^*(\varphi)\}}_{0} \otimes 1_{AF} +$

$1_F \otimes \underbrace{\{b^*(\psi), b^*(\varphi)\}}_{0} + 2a^*(\psi) \otimes b^*(\varphi) + 2a^*(\varphi) \otimes b^*(\psi) = 2(a^*(\psi) \otimes b^*(\varphi) + a^*(\varphi) \otimes b^*(\psi))$

Dit zullen we oplossen door ergens een twistoperator te gebruiken en een 1 hierdoor te vervangen: $\Theta_{(A)F}$, met $\Theta_F\{\bigoplus_n \psi^{(n)}\} = \bigoplus_n (-1)^n \psi^{(n)}$. Omdat $a^*(\psi): (\otimes^n \mathcal{H})^{a.s.} \to (\otimes^{n+1} \mathcal{H})^{a.s.}$ zal $\{\Theta_F, a^*(\psi)\} = 0$, want $\{\Theta_F, a^*(\psi)\} = \Theta_F a^*(\psi) + a^*(\psi)\Theta_F$, er wordt in beide termen een deeltje bijgemaakt, maar in het ene geval wordt er een even aantal gemeten, in het andere een oneven aantal, zodat de anticommutator nul is.

Merk dus op $\Theta_F = (-1)^N = (-1)^{\text{"deeltjesoperator"}}$, $\Theta_F^2 = 1_F$ en $\Theta_F^* = \Theta_F$: Hermitisch unitair ($\Rightarrow$ EW $= \pm 1$)

Het nieuwe voorstel voor representatie is: $\pi(c^*(\psi)) = a^*(\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F \otimes b^*(\psi)$.

Dan is $\{\pi(c^*(\psi)), \pi(c^*(\psi))\} = \left(a^*(\psi)\otimes 1_F + \Theta_F\otimes b^*(\psi)\right)\left(a^*(\psi)\otimes 1_F + \Theta_F\otimes b^*(\psi)\right)$

$+ \left(a^*(\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b^*(\psi)\right)\cdot\left(a^*(\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b^*(\psi)\right) = \underline{a^*(\psi)a^*(\psi)\otimes 1_{AF}} + a^*(\psi)\Theta_F\otimes b^*(\psi)$

$+ \underline{\Theta_F a^*(\psi)\otimes b^*(\psi)} + \underbrace{\Theta_F^2}_{1_F}\otimes b^*(\psi)b^*(\psi) + \underline{a^*(\psi)a^*(\psi)\otimes 1_{AF}} + a^*(\psi)\Theta_F\otimes b^*(\psi) + \underline{\Theta_F a^*(\psi)\otimes b^*(\psi)}$

$+ \underbrace{\Theta_F^2}_{1_F}\otimes b^*(\psi)b^*(\psi) = \{a^*(\psi), a^*(\psi)\}\otimes 1_{AF} + 1_F\otimes\{b^*(\psi), b^*(\psi)\} + \{\Theta_F, a^*(\psi)\}\otimes b^*(\psi) +$

$\{\Theta_F, a^*(\psi)\}\otimes b^*(\psi) = 0$, wat goed is!

Als we nu $\{c^*(\psi), c(\psi)\} = \langle\psi,\psi\rangle 1$ gebruiken en de momentele representatie op loslaten, vinden we: $\{\pi(c^*(\psi)), \pi(c(\psi))\} = \left(a^*(\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b^*(\psi)\right)\left(a(\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b(\psi)\right) +$

$\left(a(\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b(\psi)\right)\cdot\left(a^*(\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b^*(\psi)\right) = \underline{a^*(\psi)a(\psi)\otimes 1_{AF}} + a^*(\psi)\Theta_F\otimes b(\psi) + \Theta_F a(\psi)\otimes b^*(\psi)$

$+ \underline{\Theta_F^2\otimes b^*(\psi)b(\psi)} + \underline{a(\psi)a^*(\psi)\otimes 1_{AF}} + a(\psi)\Theta_F\otimes b^*(\psi) + \Theta_F a^*(\psi)\otimes b(\psi) + \underline{\Theta_F^2\otimes b(\psi)b^*(\psi)}$.

$= \{a^*(\psi), a(\psi)\}\otimes 1_{AF} + 1_F\otimes\{b^*(\psi), b(\psi)\} + \underbrace{\{a^*(\psi), \Theta_F\}}_{=0}\otimes b(\psi) + \underbrace{\{a(\psi), \Theta_F\}}_{=0}\otimes b^*(\psi)$

$= \langle\psi,\psi\rangle 1_F\otimes 1_{AF} + 1_F\otimes\langle\psi,\psi\rangle 1_{AF} = \cancel{\langle\psi,\psi\rangle(1_F\otimes 1_{AF})}$.

Dit probleem kan weggewerkt worden door de representatie aan te passen tot:

$c^*(\psi) \mapsto \pi(c^*(\psi)) = a^*(A\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b^*(B\psi)$. Dan wordt: $\{\pi(c^*(\psi)), \pi(c(\psi))\} =$

$\left(a^*(A\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b^*(B\psi)\right)\left(a(A\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b(B\psi)\right) + \left(a(A\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b(B\psi)\right)\left(a^*(A\psi)\otimes 1_{AF} +\right.$

$\left.\Theta_F\otimes b^*(B\psi)\right) = \underline{a^*(A\psi)a(A\psi)\otimes 1_{AF}} + a^*(A\psi)\Theta_F\otimes b(B\psi) + \Theta_F a(A\psi)\otimes b^*(B\psi) + \underline{\Theta_F^2\otimes b^*(B\psi)b(B\psi)}$

$+ \underline{a(A\psi)a^*(A\psi)\otimes 1_{AF}} + a(A\psi)\Theta_F\otimes b^*(B\psi) + \Theta_F a^*(A\psi)\otimes b(B\psi) + \underline{\Theta_F^2\otimes b(B\psi)b^*(B\psi)}$

$= \{a^*(A\psi), a(A\psi)\}\otimes 1_{AF} + 1_F\otimes\{b^*(B\psi), b(B\psi)\} + \{\Theta_F, a^*(A\psi)\}\otimes b(B\psi) + \{a(A\psi), \Theta_F\}\otimes b(B\psi)$

$= \langle A\psi, A\psi\rangle 1_F\otimes 1_{AF} + 1_F\otimes\langle B\psi, B\psi\rangle 1_{AF} = \langle\psi, A^*A\psi\rangle 1_F\otimes 1_{AF} + 1_F + \langle\psi, B^*B\psi\rangle 1_{AF}$

$= \langle\psi, (A^*A + B^*B)\psi\rangle(1_F + 1_{AF}) = \langle\psi,\psi\rangle$ als $A^*A + B^*B = 1$

We hebben nu gevonden: $\pi: \mathfrak{a}(\mathcal{H}) \to \mathcal{X}: c^*(\psi)\mapsto\pi(c^*(\psi)) = a^*(A\psi)\otimes 1_{AF} + \Theta_F\otimes b^*(B\psi)$ met $A^*A + B^*B = 1$.

Nu rekenen we (op de achterkant) uit wat $\langle\Omega\otimes\Xi, \pi(c^*(\psi)c(\psi))(\Omega\otimes\Xi)\rangle$ uit.

$$\langle \Omega \otimes \Phi, \pi(c^*(\psi)c(\psi))(\Omega\otimes\Phi)\rangle = \langle \Omega\otimes\Phi, \pi(c^*(\psi))\pi(c(\psi))(\Omega\otimes\Phi)\rangle$$

$$= \langle \Omega\otimes\Phi, \pi(c^*(\psi))\left[a(A\psi)\otimes \mathbb{1}_{AF} + \Theta_F \otimes b(B\psi)\right](\Omega\otimes\Phi)\rangle = \langle \Omega\otimes\Phi, \pi(c^*(\psi))\left[\underbrace{a(A\psi)\Omega}_{\substack{=0 \text{ want} \\ \text{annihileert op } \Omega}}\otimes\Phi + \underbrace{\Theta_F\Omega}_{=\Omega}\otimes b(B\psi)\Phi\right]\rangle$$

$$= \langle \Omega\otimes\Phi, \pi(c^*(\psi))(\Omega\otimes b(B\psi)\Phi)\rangle = \langle \pi(c(\psi))(\Omega\otimes\Phi), \Omega\otimes b(B\psi)\Phi\rangle = \langle \Omega\otimes b(B\psi)\Phi, \Omega\otimes b(B\psi)\Phi\rangle$$

$$= \langle\Omega,\Omega\rangle\cdot\langle b(B\psi)\Phi, b(B\psi)\Phi\rangle = 1\cdot\langle\Phi, b^*(B\psi)b(B\psi)\Phi\rangle = \langle\Phi, (-b(B\psi)b^*(B\psi) + \langle B\psi, B\psi\rangle \mathbb{1})\Phi\rangle$$

$$= \langle\Phi, -b(B\psi)\underbrace{b^*(B\psi)\Phi}_{\substack{=0, \text{ want} \\ \text{gat weghalen uit volle zee}}}\rangle + \langle B\psi, B\psi\rangle \mathbb{1}\langle\Phi,\Phi\rangle = \langle B\psi, B\psi\rangle \mathbb{1}.$$

Definieer nu $\omega_Q(c^*(\psi)c(\psi)) = \langle\Omega\otimes\Phi, \pi(c^*(\psi)c(\psi))\rangle$. Volgens Reen moet er een Q zijn zodat

$$= \langle\Omega\otimes\Phi, Q(\Omega\otimes\Phi)\rangle$$

Als we dit vergelijken met hierboven nemen we $Q = B^*B$. Omdat $A^*A + B^*B = \mathbb{1}$ is zo $A^*A = \mathbb{1} - Q$, of dus $A = \sqrt{1-Q}$, wat goed gedefinieerd is, want Q is positief definiet.

Nu beschouwen we $\langle\Omega\otimes\Phi, \pi(c^*(\psi_1)\dots c^*(\psi_n)c(\varphi_m)\dots c(\varphi_1))(\Phi\otimes\Omega)\rangle$

• Als we de klasse van Gaussische verdelingen $\{\omega_Q \mid 0 \leq Q \leq 1\}$ beschouwen. Dit zijn de ijkinvariante quasi-vrije toestanden. Ijkinvariant omdat in de representatie er enkel scheppingsoperatoren staan en geen vernietigingsoperatoren. We hebben dus maar een deelruimte van de quasi-vrije toestanden gevonden.

Nu kunnen we alle vragen beantwoorden...

Wanneer is een toestand zuiver? $\rightarrow$ ω_Q is zuiver als en slechts als $Q = Q^2$ en $0 \leq Q \leq 1$.

We zullen dit niet bewijzen. Q is dus een projector.

8. Fermionmodellen

Er zijn verschillende modellen om atomen te beschrijven. Er zullen altijd een aantal aannames gemaakt moeten worden: (1) ionen zijn zwaar en blijven op hun kristalrooster zitten en trillen hoogstens maar wat (fononen), (2) elektronen bewegen als een gas tussen het kristalrooster, (3) fononen en elektronen zijn gekoppeld via de Coulombinteractie.

Makkelijk model: jelliummodel. Aannames: (1) uniforme achtergrondlading, (2) elektronen tussen atomen, (3) globaal is er elektrische neutraliteit. Dit model zal nog steeds onoplosbaar zijn, al zal Hartree-Fock een goede benaderende oplossing bieden.

We leggen op dat

- er steeds een eindige elektronendichtheid is. Voor eindige volumes zitten we dichtbij het vacuum.
- de energie is: $H = \underbrace{\text{kinetische term}}_{\text{1-deeltjesoperator}} + \underbrace{\text{wisselwerkingen}}_{\substack{=\text{uitwendig veld} + \\ \text{paarinteracties}}}$ 2-deeltjesoperator

* A is de eendeeltjesoperator: een lineaire operator op de moederruimte $a \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$

Nu willen we de energie opschrijven die overeenkomt met de 1-fermionoperator A

$\rightarrow$ Fockruimte $\mathcal{F}(\mathcal{H}) = \Omega \oplus \mathcal{H} \oplus (\mathcal{H}\otimes\mathcal{H})^{a.s} \oplus (\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}\otimes\mathcal{H})^{a.s} \oplus \ldots$

Dan is de tweede kwantisatie van A:

$$\Gamma(A) = 0 \oplus A \oplus (A\otimes 1 + 1\otimes A)\big|_{(\mathcal{H}\otimes\mathcal{H})^{a.s}} \oplus (A\otimes 1\otimes 1 + 1\otimes A\otimes 1 + 1\otimes 1\otimes A)\big|_{(\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}\otimes\mathcal{H})^{a.s}} \oplus \ldots$$

* De tweefermionoperator $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H}\otimes\mathcal{H})^{a.s.}$. De voornaamste keuze is dat B commuteert met de wisseloperator $F: \mathcal{H}\otimes\mathcal{H}: \varphi\otimes\psi \mapsto F(\varphi\otimes\psi) = \psi\otimes\varphi$.

De tweede kwantisatie van B is dan

$$\Gamma(B) = 0 \oplus 0 \oplus (B_{12}\otimes 1_3 + B_{13}\otimes 1_2 + B_{23}\otimes 1_1)|_{(\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}\otimes\mathcal{H})^{a.s.}} \oplus \dots$$

Dan wordt de Hamiltoniaan: $\mathcal{H} = \Gamma(A) + \Gamma(B)$

- Bewering: Zij $\{\psi_j\}$ een orthonormale basis van $\mathcal{H}$ en $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Dan is $\Gamma(A) = \sum_j a^*(A\psi_j)a(\psi_j)$
$= \sum_j a^*(\sum_i \langle\psi_i, A\psi_j\rangle\psi_i)a(\psi_j) = \sum_{ij} \underbrace{\langle\psi_i, A\psi_j\rangle}_{:=A_{ij}} \underbrace{a^*(\psi_i)}_{:=a_i^*}\underbrace{a(\psi_j)}_{=a_j}$.

$\Gamma(B)$ is gelijk aan $\Gamma(B) = \frac{1}{2}\sum_{\substack{i_1,i_2\\ j_1,j_2}} B_{i_1i_2j_1j_2} a^*_{i_1}a^*_{i_2}a_{j_1}a_{j_2}$

Bewijs van $\Gamma(A)$.

* $\Gamma(A)\Omega = 0$ want vernietigingsoperator op de lege ruimte is nul.

$\Gamma(A)\psi = \sum_{ij} A_{ij}\, a_i^* a_j \underbrace{\psi}_{=a_k^*\Omega} = \sum_{ij} A_{ij}\, a_i^* a_j a_k^*\Omega = \sum_{ij} A_{ij}\, a_i^*(\underbrace{\langle k,j\rangle}_{=\delta_{kj} \text{ want } \psi_k\perp\psi_j \text{ en o.n.b}} 1 - a_k^* a_j)\Omega = \sum_{ij} A_{ij}\, a_i^*(\delta_{kj} 1)\Omega$ ← $a_k^* a_j \Omega = 0$

$= \sum_i A_{ik}\, a_i^* 1\,\Omega = a^*(\sum_i A_{ik}\psi_i)\Omega = a^*(A\psi_k) = A\psi_k$

$\Gamma(A)\,\varphi\wedge\psi = \sum_{ij} A_{ij}\, a_i^* a_j\, \varphi\wedge\psi = \sum_{ij} A_{ij}\, a_i^* a_j a_k^* a_m^*\Omega = \sum_{ij} A_{ij}\, a_i^*(\underbrace{\langle j,k\rangle}_{\delta_{kj}} 1 - a_k^* a_j)a_m^*\Omega$

$a_j a_k^* = \langle j,k\rangle 1 - a_k^* a_j$

$= \sum_{i} A_{ik}\, a_i^*(1 - a_k^* a_k)a_m^*\Omega = \sum_i A_{ik}\, a_i^* a_m^*\Omega - \sum_i A_{ik}\, a_i^* a_k^* a_k a_m^*\Omega$

$= \sum_i A_{ik}\, a^*(\psi_i)a^*(\psi_m)\Omega$

$= \sum_{ij} A_{ik}\, a_i^* \quad a_m^*\,\Omega - \sum_{ij} A_{ij}\, a_i^* a_k^* \underbrace{a_j a_m^*}_{\delta_{jm} - a_m^* a_j \;\to\; \text{geeft } 0}\Omega$

$= \sum_i A_{ik}\, a_i^* a_m^*\,\Omega - \sum_i A_{im}\, a_i^* a_k^*\,\Omega$ ↓ omgek. volgorde voor k, m.

$= (A\psi_k)\wedge\psi_m + \psi_k\wedge(A\psi_m)$

• Voorbeeld.

We zullen eerst even $B=0$ stellen en dus $H = \Gamma(A)$ bekijken.

Merk op dat

$$\Gamma(1) = 0 \oplus 1 \oplus (1\otimes 1 + 1 \otimes 1) \oplus \dots$$
$$= 0 \oplus 1\cdot 1 \oplus 2\cdot 1\otimes 1 \oplus \dots \quad = \text{deeltjesoperator.}$$

We willen de lokale kinetische energie v/h systeem bekijken. Hiertoe beschouwen we een kubus met zijde L (en $V = L^3 \in \mathbb{R}^3$) en leggen periodieke randvoorwaarden op voor de golffuncties van deeltjes in de kubus.

De impulsoperator is gegeven door $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ en zo is $\vec{p}\left(\boxed{\frac{1}{L^{3/2}} e^{2\pi i \vec{k}\cdot\vec{x}}}\right) = 2\pi\hbar\vec{k}\cdot \frac{e^{2\pi i \vec{k}\cdot\vec{x}}}{L^{3/2}}$ en $= \rho_{\vec{k}}$

zo met $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \in \frac{1}{L}\mathbb{Z}^3$.

De kinetische energie van het systeem willen berekenen, vinden we dat

$$T = \sum_{\vec{k}} \frac{4\pi^2\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2m} |\rho_{\vec{k}}\rangle\langle\rho_{\vec{k}}|$$

• De eendeeltjesoperator zal een bepaalde dynamica definiëren: $x \to \alpha_t(x) = e^{-itH} x e^{itH}$ met $t \in \mathbb{R}$

Als we nu $H = \Gamma(A)$ (met $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$) nemen, waaraan is dan $e^{-it\Gamma(A)} x e^{it\Gamma(A)}$ gelijk?

Eerst en vooral merken we op dat $\alpha_t(x)$ een automorfisme is. Inderdaad, want:

- $\alpha_t(xy) = e^{-itH} x y e^{itH} = \underbrace{e^{-itH} x e^{itH}}_{\alpha_t(x)} \underbrace{e^{-itH} y e^{itH}}_{\alpha_t(y)} = \alpha_t(x)\alpha_t(y)$
- $\alpha_t(x^\dagger) = e^{-itH} x^\dagger e^{itH} = (x(e^{-itH})^\dagger)^\dagger e^{itH} = [(e^{itH})^\dagger x (e^{-itH})^\dagger]^\dagger = [e^{-itH} x e^{itH}]^\dagger$
  $= \alpha_t(x)^\dagger$

Nu leveren we dat $e^{-it\Gamma(A)} a^*(\varphi) e^{it\Gamma(A)} = \exp(-it[\Gamma(A), \cdot])(a^*(\varphi))$

$$[\Gamma(A), \cdot](a^*(\varphi)) := [\Gamma(A), a^*(\varphi)]$$

Als we nu als voorbeeld berekenen: stel $\{e_i\}$ een orthonormale basis van $\mathcal{H}$

$$[P(A), a^*(\psi)] = \Big[\sum_{ij} A_{ij}\, a^*(e_i)a(e_j),\ a^*(\psi)\Big] = \sum_{ij} A_{ij} \{a^*(e_i)a(e_j)a^*(\psi) - a^*(\psi)a^*(e_i)a(e_j)\}$$

$$= \sum_{ij} A_{ij} \{a^*(e_i)[\langle e_j,\psi\rangle \mathbb{1} - a^*(\psi)a(e_j)] + a^*(e_i)a^*(\psi)a(e_j)\}$$

CAR

$$= \sum_{ij} A_{ij} \{\langle e_j,\psi\rangle a^*(e_i) - \cancel{a^*(e_i)a^*(\psi)a(e_j)} + \cancel{a^*(e_i)a^*(\psi)a(e_j)}\} = a^*\Big(\sum_{ij} A_{ij}\langle e_j,\psi\rangle e_i\Big)$$

$$= a^*\Big(\sum_{ij} \langle e_i, Ae_j\rangle\langle e_j,\psi\rangle e_i\Big) = a^*\Big(\sum_i \langle e_i, A\psi\rangle e_i\Big) = a^*(A\psi)$$

Als we dan de definitie van de superoperator gebruiken, is zo $[P(A),\cdot\,](a^*(\psi)) = [P(A), a^*(\psi)]$. $= a^*(A\psi)$.

Zo wordt $e^{-itP(A)}a^*(\psi)e^{itP(A)} = \exp(-it[P(A),\cdot\,])(a^*(\psi)) = \exp(-it\, a^*(A\psi)) = a^*(e^{itA}\psi)$.

Op deze manier wordt $e^{-itP(A)}a^*(\varphi_1)\ldots a^*(\varphi_n)a(\varphi_m)\ldots a(\varphi_1)e^{itP(A)} = e^{-itP(A)}a^*(\varphi_1)e^{itP(A)}e^{-itP(A)}a^*(\varphi_2)\ldots e^{-itP(A)}a^*(\varphi_n)e^{itP(A)}e^{-itP(A)}a(\varphi_m)e^{itP(A)}\ldots a(\varphi_1)e^{itP(A)} = a^*(e^{-itA}\varphi_1)\ldots a^*(e^{-itA}\varphi_n)a(e^{-itA}\varphi_m)\ldots a(e^{-itA}\varphi_1)$.

Als we nu $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H}\otimes\mathcal{H})$ niet-nul kiezen dan zal $[P(B), a^*(\psi)]$ zeer moeilijk en ingewikkeld worden, omdat $P(B) = \frac{1}{2}\sum_{i_1 i_2 j_1 j_2} B_{i_1 i_2, j_1 j_2}\, a^*_{i_1} a^*_{i_2} a_{j_1} a_{j_2}$

- Als we nu de verwachtingswaarde berekenen $\omega_Q(e^{-itP(A)} X e^{itP(A)}) = \omega_{Q_t}(X)$, waarbij we $Q \to Q_t$ tijdsafhankelijk maken. Er zal gelden dat

  $\langle\psi, Q\psi\rangle = \omega_Q(a^*(\psi)a(\psi))$

ω_Q zal tijdsinvariant zijn als $Q_t = Q$ (voor alle t), wat geldt als $e^{itA}Qe^{-itA} = Q$, of dus $[Q, e^{itA}] = 0$. Dit zal gelden als en slechts als $[A,Q]=0$.

Dit is in analogie met klassieke kwantummechanica. Een verwachte waarde van een observabele is constant in de tijd als de Hamiltoniaan commuteert met de operator.

9. Grondtoestand van lineaire systemen

We werken in $\mathbb{R}^3$ en veronderstellen dat de (eindige) dichtheid van fermionen gegeven is. De klasse $L^2(\mathbb{R}^3)$ (kwadratisch integreerbare functies) zullen de mogelijke golffuncties zijn. We zoeken nu naar de grondtoestand: minimale energiedichtheid.

- We beschouwen de translatietransformatie: een unitaire transformatie die de golffunctie volgens een bepaalde vector verschuift: $U(\vec{x}_0)\varphi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}-\vec{x}_0)$. Er geldt dat $U(\vec{x}_0)U(\vec{x}_1) = U(\vec{x}_0+\vec{x}_1)$.

- Fouriertransformatie

  Afbeelding $\wedge : \varphi \in L^2(\mathbb{R}^3) \longrightarrow \hat{\varphi}(\vec{k}) = \int d\vec{x}\, \varphi(\vec{x})\, e^{-2\pi i \vec{k}\cdot\vec{x}}$, met $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$

  Deze afbeelding $\varphi \mapsto \hat{\varphi}$ is unitair. De gelijkheid van Parseval zegt dat $\langle \varphi, \psi \rangle = \langle \hat{\varphi}, \hat{\psi} \rangle$.

  Als we nu de Fourieranalyse maken van een verschoven φ vinden we:

$$\widehat{U(\vec{x}_0)\varphi(\vec{x})} \longrightarrow \int d\vec{x}\, \varphi(\vec{x}-\vec{x}_0)\, e^{-2\pi i \vec{k}\cdot\vec{x}} = \underbrace{\int d\vec{x}\, \varphi(\vec{x}-\vec{x}_0)\, e^{-2\pi i \vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{x}_0)}}_{=\hat{\varphi}(\vec{k})} e^{-2\pi i \vec{k}\cdot\vec{x}_0}$$
$$= \hat{\varphi}(\vec{k})\, e^{-2\pi i \vec{k}\cdot\vec{x}_0}$$

  Verschuiven in de Euclidische ruimte is vermenigvuldiging met een fasefactor in de Fourierruimte.

- Als we nu $A \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^3)$ nemen en veronderstellen dat voor alle $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ geldt dat $[U(\vec{x}_0), A] = 0$. Dan zal $\widehat{A\varphi}(\vec{k}) = a(\vec{k})\,\hat{\varphi}(\vec{k})$. (= soort van eigenwaardevgl).

  Inverse Fouriertransformatie zegt ons nu dat

$$(A\varphi)(\vec{x}) = \int d\vec{k}\, a(\vec{k})\, \hat{\varphi}(\vec{k})\, e^{2\pi i \vec{k}\cdot\vec{x}} = \int d\vec{k}\, a(\vec{k})\, e^{+2\pi i \vec{k}\cdot\vec{x}} \int d\vec{\xi}\, \varphi(\vec{\xi})\, e^{-2\pi i \vec{k}\cdot\vec{\xi}}$$

We veronderstellen ook nog dat $H = \Gamma(A)$ translatieinvariant is, evenals Q (samen de toestanden). De eigenwaarden van A en Q veronderstellen we ook langs onder begrensd en omdat $0 \le Q \le 1$ zal $0 \le q \le 1$.

• Nu beschouwen we een kubus met ribbe L en $V = L^3$. We zoeken het aantal fermionen in V. We zullen gebruik maken van de deeltjesoperator N_V, deze telt het aantal deeltjes in V: $\omega_Q(N_V)$. Meer precies is N_V de deeltjesoperator in de Fockruimte met $L^2(V)$ als eendeeltjesruimte. Zij $\{e^V_{\vec{k}}\}$ een orthonormale basis van $L^2(V)$.
Dan is $N_V = \sum_{\vec{k}} a^*(e^V_{\vec{k}})\, a(e^V_{\vec{k}})$. Zo wordt de verwachtingswaarde

Representatiestelling van Riesz blz 15

$$\langle N_V \rangle = \omega_Q\Big(\sum_{\vec{k}} a^*(e^V_{\vec{k}})\, a(e^V_{\vec{k}})\Big) = \sum_{\vec{k}} \omega_Q\big(a^*(e^V_{\vec{k}})\, a(e^V_{\vec{k}})\big) = \sum_{\vec{k}} \langle e^V_{\vec{k}}, Q e^V_{\vec{k}} \rangle$$

$$= \sum_{\vec{k}} \int_{\vec{x} \in V} d\vec{x}\; \overline{e^V_{\vec{k}}(\vec{x})} \cdot (Q e^V_{\vec{k}})(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \int d\vec{x}\; \overline{e^V_{\vec{k}}(\vec{x})} \cdot \int d\vec{p}\, e^{2\pi i \vec{p}\cdot\vec{x}}\, q(\vec{p}) \int d\vec{y}\, e^V_{\vec{k}}(\vec{y})\, e^{-2\pi i \vec{p}\cdot\vec{y}}$$

Formule vorige blz

$$= \int_{\vec{x}\in V} d\vec{x} \int d\vec{p} \int d\vec{y}\, \underbrace{\Big\{\sum_{\vec{k}} \overline{e^V_{\vec{k}}(\vec{x})}\, e^V_{\vec{k}}(\vec{y})\Big\}}_{= \delta(\vec{x}-\vec{y}) \text{ want onb}} q(\vec{p})\, e^{2\pi i \vec{p}\cdot\vec{x}}\, e^{-2\pi i \vec{p}\cdot\vec{y}} = \underbrace{\int_{\vec{x}\in V} d\vec{x}}_{=V} \int d\vec{p}\, q(\vec{p}) = V \int d\vec{p}\, q(\vec{p})$$

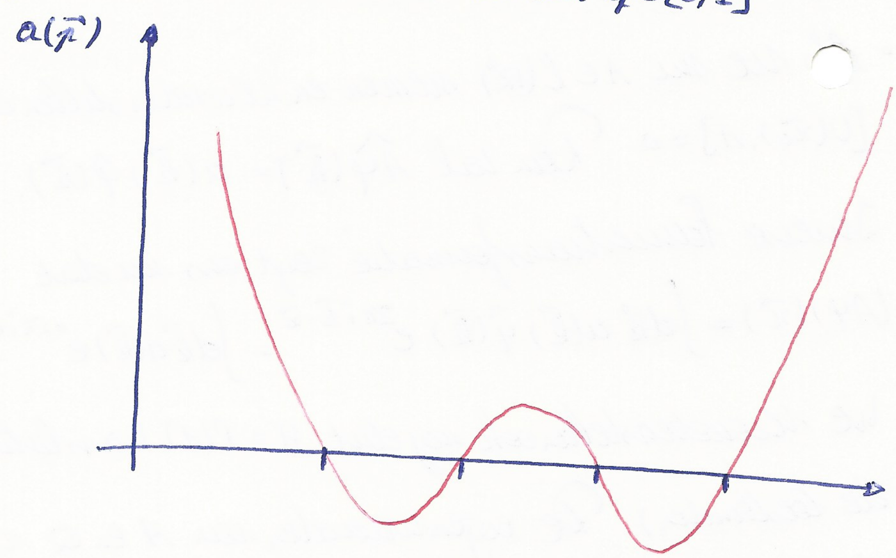
en zo is $\rho = \frac{N}{V} = \int d\vec{p}\, q(\vec{p})$, wat de deeltjesdichtheid van de fermionen is.

De verwachte energie per volume-eenheid zal gelijk zijn aan $\langle E \rangle = \int d\vec{k}\, a(\vec{k}) \cdot q(\vec{k})$

$\leadsto \omega_Q(P_V\, \Gamma(A)\, P_V) = V \int d\vec{p}\, q(\vec{p})\, a(\vec{p})$

Projector : $L^2(\mathbb{R}^3) \to L^2(V)$

Om nu de grondtoestand te berekenen, moet het minimum van $\langle E \rangle$ over $q \in [0,1]$ bepaald worden.



Nu gaan we een temperatuur T bij ons systeem beschouwen. De vrije energie $F = U - k_B T S$ wordt dan een interessante grootheid. We werken nog steeds met eendeeltjesinteracties en translatie-invariantie : $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$.

We zullen een kubus met ribbe L en volume $V = L^3$ bekijken, de Hilbertruimte wordt zo $L^2(V)$: de eendeeltjesruimte van fermionen in V. Nog altijd veronderstellen we dat de fermiondichtheid eindig is, we werken dichtbij de Fockruimte.

Nu gaan we variëren over alle translatie vrije toestanden ω_Q, met Q translatie-invariant:

$$\omega_{Q_V}(c^*(\varphi_1)\dots c^*(\varphi_n)\underline{c(\psi_n)}\dots c(\psi_1)), \quad \varphi_i, \psi_j \in L^2(V)$$

golffunctie met drager in V — quasi-vrije toestand op $\mathfrak{a}(L^2(V))$

We beperken Q tot Q_V, via $Q_V = P_L \cdot Q \cdot P_L$ met P_L de projector $L^2(\mathbb{R}^3) \to L^2(V)$

Omwille van de equivalentie tussen toestanden en dichtheidsmatrices kan de toestand ω_{Q_V} beschreven worden door een dichtheidsmatrix in de Fockrepresentatie $\Gamma(L^2(V))$

- Als $V = \mathcal{H}$. Als $0 \leq Q \leq 1$ en $Q \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. We kunnen ω_Q voorstellen door een dichtheidsmatrix in de Fockrepresentatie van $\mathfrak{a}(\mathcal{H})$.

  We weten dat Fockrepresentatie $\Leftrightarrow$ $Q = 0$. Vb: $\omega(c^*(\varphi)c(\varphi)) = 0 = \langle \Omega, \pi(c^*(\varphi)c(\varphi))\Omega \rangle$
  $= \|\pi(c(\varphi))\Omega\|^2$

- We verwachten Q klein : <u>Q moet traceclass zijn.</u>

  Traceclass : klasse van afbeeldingen waarvoor het spoor goed gedefinieerd is.
  Als er een orthonormale basis $\{\varphi_i\}$ van $\mathcal{H}$ bestaat met $|A|\varphi_i = a_i \varphi_i$ en $\sum_i a_i < \infty$, dan is A traceclass. (Merk op dat alle a_i positief zijn omdat $|A| = \sqrt{A^\dagger A}$ positief definiet is).
  Speciaal geval : Als $A = A^\dagger$ en er bestaat een orthonormale basis van eigenvectoren $\{\varphi_i\}$ met $A\varphi_i = a_i \varphi_i$. Dan is $\sum_i |a_i| < \infty$

(a) $\dim(\mathcal{H}) = 1$ (Er is dus ook maar plaats voor 1 deeltje!)

De Fockvector is $\Omega = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ en $c^* = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $c = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ en dus $c^*c = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

Dan is $\omega_Q(c^*c) = \mathrm{Tr}\,\rho\, c^*c$

Q is een getal

met $\rho = \begin{pmatrix} q & 0 \\ 0 & 1-q \end{pmatrix}$ — Focktoestand; 1 deeltjestoestand

(♡)

(b) Zij Q traceclass en $\{\varphi_i\}$ een orthonormale basis van $\mathcal{H}$ waarvoor geldt dat $Q\varphi_i = q_i\varphi_i$.
Merk op dat die basis bestaat wegens het traceclass-zijn van Q.

Dan is $\mathcal{H} = \bigoplus_i \mathbb{C}\varphi_i$ en is $\Gamma(\mathcal{H}) = \bigoplus_i \Gamma(\mathbb{C}\varphi_i)$. De ontbinding van $\omega_Q(X)$ wordt dan zo: $\omega_Q(X) = \mathrm{Tr}\left(\bigotimes_i \rho_i \cdot \pi_F X\right)$, met π_F de Fockrepresentatieafbeelding en $X \in \mathfrak{a}(L^2(V))$ want $Q \sim 0$

Dan is $\omega_Q(a^*(\varphi_i)a(\varphi_j)) = \langle \varphi_i, Q\varphi_j\rangle = \langle \varphi_i, q_j \varphi_j\rangle = \delta_{ij} q_j$

ρ zal goed gedefinieerd zijn als $\rho = \bigotimes_i \begin{pmatrix} q_i & 0 \\ 0 & 1-q_i \end{pmatrix}$

Als $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ en P_V is de projectieoperator $P_V : L^2(\mathbb{R}^3) \to L^2(V)$ voor de ruimte of het volume. $Q \in \mathcal{B}(L^2(\mathbb{R}^3))$, de verzameling van de begrensde continue operatoren, wat beperkt kan worden tot V via $P_V Q P_V =: Q_V$. We veronderstellen dat $P_V Q P_V$ traceclass is voor alle V, wat eigenlijk overeenkomt met $\int d\vec{k}\, q(\vec{k}) < \infty$.

Zoals hierboven zal $\omega_{Q_V}(X)$, met $X \in \mathfrak{a}(L^2(V))$, gelijk zijn aan $\omega_{Q_V}(X) = \mathrm{Tr}\, \rho_V \pi_F(X)$

De entropie definiëren we dan als $S_V = -\mathrm{Tr}\, \rho_V \log \rho_V$

$\Rightarrow$ • $\dim \mathcal{H} = 1$: dan is $S_V = -\mathrm{Tr}\, \rho_V \log \rho_V \underset{(\nabla)}{=} -q\log q - (1-q)\log(1-q)$

• $\dim \mathcal{H} = \infty$: ρ kunnen we op als tensorproduct van 2dimensionale matrices:
$\rho_V = \bigotimes_i \rho_i$, met $\rho_i = \begin{pmatrix} q_i & 0 \\ 0 & 1-q_i \end{pmatrix}$, met q_i telkens een eigenwaarde van Q_V.

Zo wordt $S_V = \sum_i -q_i \log q_i - (1-q_i)\log(1-q_i)$. ~~met q_i~~

of nog: $S_V = -\mathrm{Tr}\left(Q_V \log Q_V + (1-Q_V)\log(1-Q_V)\right)$, wat de von Neumann-entropie genoemd wordt, met $Q_V = P_V Q P_V$

Nu vragen we ons af wat er met de entropie gebeurt als $V \to \infty$. De Stelling van Szegö zegt dat $s = \lim_{L \to \infty} \frac{S_V}{L^3} = \int d\vec{k} \, \{-q \log q - (1-q)\log(1-q)\}$, wat de entropie per volume-eenheid weergeeft.

De energiedichtheid wordt gegeven door $e = \int d\vec{k} \, a(\vec{k}) q(\vec{k})$, gegeven dat $\int q(\vec{k}) d\vec{k} = \rho$.
Nu willen we weten voor welke toestand Q_V we een minimale energie energie dichtheid hebben. We minimaliseren de vrije energie $F = U - k_B T S$;

Wat is $\inf_{0 \le q \le 1} \{e - \frac{1}{\beta}\hat{s}\}$, gegeven dat $\rho = \frac{N}{V} = \int d\vec{k} \, q(\vec{k})$ constant is.

We beschouwen de functionaal $q \to \int d\vec{k} \left[a(\vec{k}) q(\vec{k}) + \frac{1}{\beta}\{q \log q + (1-q)\log(1-q)\} + \mu q\}\right]$

We bepalen van deze functionaal het minimum (naar q):

$$\frac{\partial}{\partial q}\left(\int d\vec{k} \, a(\vec{k}) q(\vec{k}) + 1/\beta\{q \log q + (1-q)\log(1-q)\} + \mu q\right)$$

$$= \int d\vec{k} \, \underbrace{a(\vec{k}) + 1/\beta\left(\log q + 1 - \log(1-q) - 1 + \mu\right)}_{=0} = 0$$

Maximum

Neem: $a + \frac{1}{\beta}\log\frac{q}{1-q} + \mu = 0$ zodat $\frac{q}{1-q} = e^{\beta a} \frac{e^{\beta\mu}}{\xi} = \xi e^{\beta a}$

of nog: $q = \frac{1}{1 + \xi e^{\beta a}}$, waar we de Fermi-Diracverdeling in herkennen.