

Лекция 9.

Вторичное квантование для систем Бозе и Ферми.

В многогастигных задачах оказывается чрезвычайно продуктивным представление вторичного квантования. В нем аргументами волновой функции выступают не координаты, а числа заполнения, указывающие на количество частиц в системе, занимающих то, или иное одногастигное состояние. Необходимо осуществить переход от волновой функции $\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N, t)$ к $\Psi(n_1, n_2, \dots, n_k, t)$. Тогда величина $|\Psi|^2$ будет описывать вероятность того, что в состоянии "1" находятся n_1 частиц, в состоянии "2" — n_2 частиц, и т.д. Всего одногастигных состояний может быть сколько угодно — сколько угодно "координат".

Вспомним некоторые факты теории представлений. Состояние системы задается некоторым вектором в гильбертовом пространстве. В этом пространстве можно выбрать множеством способов ортонормированный базис. Например, им могут служить векторы состояний, с заданным значением координаты. Скалярное произведение вектора нашего состояния с базисными векторами Ψ_x есть волновая функция нашей системы в "x"-представлении.

$$(\Psi_x, \Psi) = \Psi(x).$$

Если мы теперь устроим скалярное произведение $\Psi(x)$ с собственными функциями оператора импульса (взятыми тоже в координатном представлении)

$$(\Psi_p(x), \Psi(x)) = \Psi(p),$$

получится волновая функция в "p"-представлении. Вообще, всегда, переход к "новому" представлению осуществляется скалярным произведением волновой функции "старого" представления с базисными векторами соответствующими определенным значениям величины F , но эти базисные векторы Ψ_F должны, разумеется, тоже быть написаны в "старом" представлении (см. ф-лу (1)).

У нас сейчас "старое" представление — "x" — представлению. Чтобы осуществить переход к "новому" — представлению второго квантования нужно написать в "x" представлении базис волновых функций, соответствующих заданному, фиксированному, набору чисел заполнения

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots, n_k, \dots}(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_N)$$

Таковыми ^{независимых} для дозона служат симметризованное произведение

$$\Psi_{n_1, n_2, \dots} = \left(\frac{n_1! n_2! \dots n_k! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \Psi_{k_1}(\xi_1) \Psi_{k_2}(\xi_2) \dots \Psi_{k_N}(\xi_N)$$

Здесь Ψ_1, Ψ_2, \dots — одночастичные волновые функции, соответствующие нахождению частицы в состоянии "1", "2" ... и т.д. Среди k_1, k_2, \dots, k_N имеется n_1 единиц, n_2 двоек и т.д. Симметризация ведётся по всем перестановкам только разных индексов среди k_1, k_2, \dots .

Введем операторы \hat{a}_k^+ и \hat{a}_k , действующие на новые переменные, на новые аргументы волновой функции, взятой в представлении второго квантования. Сразу отмету, что конкретный вид $\Psi(n_1, n_2, \dots)$ нам никогда не понадобится. Важно только иметь в виду, что эти очень важные для нас операторы \hat{a}_k^+ и \hat{a}_k действуют на аргументы каких-то $\Psi(n_1, n_2, \dots)$, которые есть

$$(\Psi_{n_1, n_2, \dots}(n_1, n_2, \dots) \cdot \Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N, t)) = \Psi(n_1, n_2, n_3, \dots)$$

Операторы \hat{a}_k^+ и \hat{a}_k действуют на переменную n_k , т.е. меняют число заполнения k-го состояния:

$$\hat{a}_k \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} = \sqrt{n_k} \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k-1, \dots} \quad (2)$$

$$\hat{a}_k^+ \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} = \sqrt{n_k+1} \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k+1, \dots}$$

Оператор \hat{a}_k уменьшает число частиц в состоянии "k" на единицу, а \hat{a}_k^+ — увеличивает. Очевидно, что последовательное применение \hat{a}_k и \hat{a}_k^+ не меняет числа частиц:

$$\hat{a}_k^+ \hat{a}_k \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} = n_k \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} \quad (3)$$

Естественно, оператор $\hat{a}_k^+ \hat{a}_k$ следует назвать оператором числа частиц в состоянии "k", n_k — собственное значение этого оператора а Ψ — собственной функцией

- 3 -

всех операторов $\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$. Операторы \hat{a}_k^+ и \hat{a}_k называются операторами рождения (умножения) числа частиц в состоянии "k", поскольку увеличивают (уменьшают) это число на единицу.

Отличные от нуля матричные элементы операторов \hat{a}_k и \hat{a}_k^+ имеют вид:

$$(n_1, n_2, \dots, n_k-1, \dots | \hat{a}_k | n_1, n_2, \dots, n_k, \dots) = (a_k)_{n_k-1, n_k} = \sqrt{n_k}$$

$$(n_1, n_2, \dots, n_k+1, \dots | \hat{a}_k^+ | n_1, n_2, \dots, n_k, \dots) = (a_k^+)_{n_k+1, n_k} = \sqrt{n_k+1}$$

$$(\hat{a}_k^+ \hat{a}_k)_{n_k, n_k} = n_k \delta_{n_k, n_k}$$

Нетрудно убедиться, что операторы \hat{a}_k^+ и \hat{a}_k удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$\hat{a}_k \hat{a}_e^+ - \hat{a}_e^+ \hat{a}_k = \delta_{ke}$$

$$\hat{a}_k \hat{a}_e - \hat{a}_e \hat{a}_k = 0$$

$$\hat{a}_k^+ \hat{a}_e^+ - \hat{a}_e^+ \hat{a}_k^+ = 0$$

Операторы физических величин, действующие на координаты волковых функций, заданных в обычном координатном представлении, в представлении вторичного квантования выражаются через операторы \hat{a}_k и \hat{a}_k^+ . Пусть есть оператор $\hat{L}(\xi_i)$, действующий на координаты одной i -ой частицы. Введём оператор

$$\hat{L}_1 = \sum_{i=1}^N \hat{L}(\xi_i),$$

действующий на координаты всех частиц (например, оператор $\hat{p} = \sum_i \hat{p}_i = \frac{\hbar}{i} \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i}$ есть оператор полного импульса). Без доказательства приведём его выражение в представлении вторичного квантования:

$$\hat{L}_1 = \sum_{k, l} (L(\xi))_{lk} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k, \quad (L(\xi))_{lk} = \int d\xi \psi_l^*(\xi) \hat{L}(\xi) \psi_k(\xi)$$

Здесь $(L(\xi))_{lk}$ - матричный элемент одночастичного оператора \hat{L} , соответствующий переходу из одночастичного состояния "k" в состояние "l".

Оператор, действующий на координаты двух частиц

$$\hat{L}_2 = \sum_{i,j=1}^N \hat{L}(\xi_i, \xi_j)$$

(например, энергия взаимодействия частиц между собой) в представлении вторичного квантования выражается формулой:

$$\hat{L}_2 = \sum_{k,p,r,m} (l,m | \hat{L}(\xi, \xi') | k,p) \hat{a}_e^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_r \hat{a}_p,$$

$$(l,m | \hat{L}(\xi, \xi') | k,p) = \int \psi_l^*(\xi) \psi_m^*(\xi') \hat{L}(\xi, \xi') \psi_k(\xi) \psi_p(\xi') d\xi d\xi'.$$

С помощью замисанных формул мы можем привести формулу для гамильтониана взаимодействующих бозонов:

$$\hat{H} = \sum_{k,l} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\xi) \right)_{lk} \hat{a}_e^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,p,r,m} (l,m | W | k,p) \hat{a}_e^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_r \hat{a}_k,$$

$W(\xi_i, \xi_k)$ - энергия взаимодействия i -ой и k -ой частиц. $1/2$, чтобы не учитывать дважды энергию взаимодействия i -ой с k -ой и k -ой с i -ой.

Если в качестве $\psi_k(\xi)$ выбрать собственные функции одного частицы оператора гамильтона $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\xi)$,

то

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N E_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,r,m} (l,m | W | k,p) \hat{a}_e^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_r \hat{a}_k,$$

E_k - одночастичная энергия k -го состояния. Парное взаимодействие во вторичном ~~квантовании~~ квантовании допускает наглядную интерпретацию. Взаимодействие можно трактовать как рассеяние частиц p -го и k -го состояний с переходом в " l " и " m " состояния.

Развитый здесь аппарат можно представить в более компактном виде, введя операторы

$$\hat{\Psi}(\xi) = \sum_i \psi_i(\xi) \hat{a}_i, \quad \hat{\Psi}^+(\xi) = \sum_i \psi_i^*(\xi) \hat{a}_i^+.$$

Легко убедиться, что оператор $\hat{\Psi}^+(\xi_0)$ создает частицу в точке ξ_0 , а $\hat{\Psi}(\xi_0)$ - уничтожает. Действительно, оператор \hat{a}_i^+ создает частицу с волновой функцией $\psi_i(\xi)$. Тогда оператор $\hat{\Psi}^+(\xi_0)$ создает частицу с волновой функцией

$$\sum_i \psi_i^*(\xi_0) \psi_i(\xi) = \delta(\xi - \xi_0),$$

которая соответствует гасише с определенным значением координаты ξ_0 . Правила коммутации для операторов $\hat{\psi}(\xi)$ и $\hat{\psi}^+(\xi)$ получаются непосредственно из правил коммутации для \hat{a}_i^+ и \hat{a}_i .

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\xi) \hat{\psi}(\xi') - \hat{\psi}(\xi') \hat{\psi}(\xi) &= 0 \\ \hat{\psi}^+(\xi) \hat{\psi}^+(\xi') - \hat{\psi}^+(\xi') \hat{\psi}^+(\xi) &= 0 \\ \hat{\psi}(\xi) \hat{\psi}^+(\xi') - \hat{\psi}^+(\xi') \hat{\psi}(\xi) &= \delta(\xi - \xi'). \end{aligned}$$

Выражение для оператора

$$\hat{L}_1 = \sum_{k,l} (L(\xi))_{ek} \hat{a}_e^+ \hat{a}_k$$

перепишется в компактном виде

$$\hat{L}_1 = \int \hat{\psi}^+(\xi) \hat{L} \hat{\psi}(\xi) d\xi.$$

Аналогично

$$\hat{L}_2 = \iint \hat{\psi}^+(\xi) \hat{\psi}^+(\xi') \hat{L}(\xi, \xi') \hat{\psi}(\xi) \hat{\psi}(\xi') d\xi d\xi'$$

В частности, физической величине $f(\xi)$, которая просто функции ξ , соответствует оператор

$$\hat{f} = \int d\xi f(\xi) \hat{\psi}^+(\xi) \hat{\psi}(\xi).$$

Отсюда видно, что $\hat{\psi}^+(\xi) \hat{\psi}(\xi) d\xi$ есть оператор числа гасиш, находящихся в области пространства $d\xi$.

Сравним две формулы:

$$\bar{f} = \int \psi^*(\xi) \hat{f} \psi(\xi) d\xi - \text{для среднего значения } f$$

$$\hat{f} = \int \hat{\psi}^+(\xi) \hat{f} \hat{\psi}(\xi) d\xi - \text{для оператора величины } f \text{ в представлении вторичн. квант.}$$

А теперь такие формулы:

$$\psi(\xi) = \int dp a_p \Psi_p(x) - \text{разложение волновой функции по собственным функциям, скажем, импульса}$$

$$\hat{\psi}(\xi) = \int dp \hat{a}_p \Psi_p(x) - \text{оператор рождения гасиш в точке } \xi, \text{ выраженный через оператор уничтож. гасиш в состоянии } p.$$

Понятно происхождение термина "вторичное квантование". В этом представлении не только физические величины получают по "шляпке", но и волновые функции $\psi(\xi)$ и a_f

Все полученные результаты относимся к бозонам. Для фермионов вся принципиальная сторона метода остается без изменений. Однако, нужно учесть принцип Паули. Теперь базисом для перехода к представлению второго квантования служат "антисимметризованные" волновые функции:

$$\Psi_{n_1, n_2, \dots} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{k_1}(\xi_1) & \Psi_{k_1}(\xi_2) & \dots & \Psi_{k_1}(\xi_N) \\ \Psi_{k_2}(\xi_1) & \Psi_{k_2}(\xi_2) & \dots & \Psi_{k_2}(\xi_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{k_N}(\xi_1) & \Psi_{k_N}(\xi_2) & \dots & \Psi_{k_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$

В связи с антисимметричностью этой функции прежде всего возникает вопрос о выборе её знака. Ведь стоит на минуту перевернуть пару состояний, как изменится знак Ψ . Чтобы такое не случилось, условились устанавливать знак следующим образом. Перенумеруем раз и навсегда все состояния $\Psi_k(\xi)$ последовательными номерами и будем заполнять строки детерминанта всегда так, чтобы $k_1 < k_2 < k_3 < \dots < k_N$. Ясно, что среди k_i нет одинаковых, ибо тогда детерминант обратился в нуль (принцип Паули). Числа заполнения могут быть либо нуль, либо 1. Поэтому нельзя определить операторы \hat{a}_k^+ и \hat{a}_k так, как для бозонов. Для бозонов было

$$\hat{a}_k \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} = \sqrt{n_k} \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k-1, \dots} \quad \text{— остается и для фермионов (с точностью до знака).}$$

$$\hat{a}_k^+ \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} = \sqrt{n_k+1} \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_k+1, \dots} \quad \text{— для фермионов не верно.}$$

Во-первых, если $n_k=1$, то \hat{a}_k^+ это состояние заужает. Во-вторых, проблема знака. Пусть с помощью оператора $\hat{a}_e^+ \hat{a}_k$ частица из состояния "к" переходит в состояние "е". Чтобы это произошло нам в детерминанте надо не только Ψ_k заменить на Ψ_e , но и учесть знак, т.е. умножить на $(-1)^\Sigma$, где Σ - число заполненных состояний между "к" и "е". Можно убедиться, что все свойства оказываются выполненными, если потребовать у фермионных операторов \hat{a} и \hat{a}^+ выполнение следующих коммутационных соотношений:

$$\hat{a}_k \hat{a}_e + \hat{a}_e \hat{a}_k = 0$$

$$\hat{a}_k^+ \hat{a}_e^+ + \hat{a}_e^+ \hat{a}_k^+ = 0$$

$$\hat{a}_e \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_e = \delta_{ke}$$

В частности, тогда окажется

$$\hat{a}_k^+ \hat{a}_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k = \hat{n}_k$$

$$n_k^2 = n_k \quad n_k = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$