Лекция 10
Метод вторичного квантования

1 Метод вторичного квантовангия системы тождественных бозонов

Для описания системы тождественных частиц удобно перейти к особому представлению, которое называется *представлением чисел заполнения* или *представлением вторичного квантования*. Как мы знаем, для системы тождественных частиц важную роль играют симметрии относительно перестановок тождественных частиц. В связи с этим описания систем бозонов и фермионов в представлении вторичного квантования различны. Рассмотрим сначала, как это делается для частиц, удовлетворяющих статистике Бозе–Эйнштейна.

1.1 Операторы рождения, уничтожения и числа частиц

На первых порах будем полагать, что взаимодействие между частицами отсутствует. В рамках координатного представления такая система описывается симметризованной волновой функцией

$$\psi_{n_1 n_2 \dots n_r \dots} = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_r! \dots}{N!}} \sum_\alpha P_\alpha \varphi_{k_1}(\xi_1)\varphi_{k_2}(\xi_2)\dots\varphi_{k_N}(\xi_N), \tag{1}$$

где $n_1, n_2 \dots, n_r, \dots$ — число частиц, находящихся в одинаковом квантовом состоянии, а $\varphi_{k_i}(\xi_i)$ — волновая функция отдельной частицы в квантовом состоянии k_i. P_α означает оператор перестановки частиц в различных квантовых состояниях. В общем случае ξ_i представляет совокупность спиновых и координатных переменных.

В представлении чисел заполнения в качестве независимых переменных рассматриваются не координаты ξ_i, а числа $n_1, n_2, \dots n_r, \dots$, которые называют *числами заполнения*. Очевидно, что, задав число частиц в каждом из квантовых состояний, мы тем самым задаем и полную волновую функцию (1). Ввиду того, что теперь независимыми переменными являются числа заполнения, то все физические операторы будут теперь действовать не на координаты ξ_i, а на дискретные переменные $n_1, n_2, \dots n_r, \dots$. Сейчас нашей целью будет построение таких операторов. Для этого введем специальный оператор $\hat{a}_r$, который определяется как оператор, следующим образом действующий на волновую функцию (1)

$$\hat{a}_r \psi_{n_1 n_2 \dots n_r \dots} = \sqrt{n_r}\psi_{n_1 n_2 \dots n_r - 1 \dots}. \tag{2}$$

Иными словами этот оператор уменьшает число частиц находящихся в квантовом состоянии k_r на единицу, а также изменяет нормировку волновой функции. Запишем закон действия оператора $\hat{a}_r$ (2) через векторы кэт и бра

$$\hat{a}_r \left| n_1, n_2, \dots, n_r, \dots \right\rangle = \sqrt{n_r} \left| n_1, n_2, \dots, n_r - 1, \dots \right\rangle . \tag{3}$$

Вычислим матричный элемент от оператора $\hat{a}_r$ по двум произвольным квантовым состояниям, задаваемых числами заполнения $n_1, n_2, \dots, n_r, \dots$ и $n'_1, n'_2, \dots, n'_r, \dots$. На основании (3) легко находим

$$\left\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_r, \dots \right| \hat{a}_r \left| n_1, n_2, \dots, n_r, \dots \right\rangle = \sqrt{n_r}\delta_{n_1 n'_1}\delta_{n_2 n'_2}\dots\delta_{n_{r-1} n'_{r-1}}\delta_{(n_r-1) n'_r}\delta_{n_{r+1} n'_{r+1}}\dots . \tag{4}$$

Конечно, соотношение (4) можно также рассматривать как определение оператора $\hat{a}_i$ в матричной записи.

Согласно определению, эрмитово соспряженная матрица к (4) представляет матричный элемент оператора $\hat{a}_r^+$

$$\langle n_1', n_2', \ldots, n_r', \ldots | \, \hat{a}_r^+ \, | n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle = \sqrt{n_r + 1} \delta_{n_1 n_1'} \delta_{n_2 n_2'} \ldots \delta_{n_{r-1} n_{r-1}'} \delta_{(n_r+1) n_r'} \delta_{n_{r+1} n_{r+1}'} \ldots . \tag{5}$$

Отсюда получаем закон действия оператора $\hat{a}_r^+$ на вектор состояния

$$\hat{a}_r^+ \, | n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle = \sqrt{n_r + 1} \, | n_1, n_2, \ldots, n_r + 1, \ldots \rangle \, . \tag{6}$$

Таким образом этот оператор увеличивает число частиц в квантовом состоянии k_r на единицу.

Теперь на основании (2) и (6) можно найти действие оператора $\hat{a}_r^+ \hat{a}_r$ на вектор состояния

$$\hat{a}_r^+ \hat{a}_r \, | n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle = \sqrt{n_r} \hat{a}_r^+ \, | n_1, n_2, \ldots, n_r - 1, \ldots \rangle = n_r \hat{a}_r^+ \, | n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle \, . \tag{7}$$

Иными словами, вектор состояния $| n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle$ является собственной волновой функцией оператора $\hat{a}_r^+ \hat{a}_r$ с собственным значением n_r. Поэтому естественно назвать этот оператор *оператором числа частиц* в квантовом состоянии k_r. Соответственно, операторы $\hat{a}_r^+$ и $\hat{a}_r$ будем называть *операторами рождения и уничтожения частиц* в квантовом состоянии k_r.

Найдем коммутационные соотношения между операторами рождения и уничтожения. Очевидно, что

$$\left[\hat{a}_r, \hat{a}_l^+ \right] = 0, \text{ если } r \neq l. \tag{8}$$

С другой стороны, легко показать, что волновая функция (1) является собственной функцией оператора $\hat{a}_r \hat{a}_r^+$ с собственным значением $n_r + 1$

$$\hat{a}_r \hat{a}_r^+ \, | n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle = \sqrt{n_r + 1} \hat{a} \, | n_1, n_2, \ldots, n_r + 1, \ldots \rangle = (n_r + 1) \hat{a}_r^+ \, | n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle \, . \tag{9}$$

Тогда на основании (7) и (9) заключаем, что для любого вектора состояния

$$\left[\hat{a}_r, \hat{a}_r^+ \right] | n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle = | n_1, n_2, \ldots, n_r, \ldots \rangle \tag{10}$$

Соотношения (8) и (10) можно объеденить в коммутационное соотношение

$$\left[\hat{a}_r, \hat{a}_l^+ \right] = \delta_{rl}. \tag{11}$$

Аналогично доказывается, что

$$\left[\hat{a}_r, \hat{a}_l \right] = \left[\hat{a}_r^+, \hat{a}_l^+ \right] = 0. \tag{12}$$

1.2 Многочастичное состояние

Введем *вакуумное состояние* $|0\rangle$, т.е. такое состояние, которое любым оператором уничтожения $\hat{a}_i$ переводится в нуль

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \;\; |0\rangle \equiv |0, 0, \ldots\rangle. \tag{13}$$

Полагаем при этом, что вакуумное состояние нормировано

$$\langle 0|0\rangle = 1. \tag{14}$$

Действуя n раз на вакуумное состояние оператором рождения $\hat{a}_i$, получим состояние, в котором n частиц находятся в i-м квантовом состоянии

$$\left(\hat{a}_i^+\right)^n|0\rangle = N|0,0,\ldots,0,n,0,\ldots,0\rangle, \tag{15}$$

где N коэффициент, который предстоит определить. Действительно, на основании коммутационных соотношений (11), (12) легко показать, что что вектор (15) является собственным вектором оператора числа частиц с собственным значением n

$$\begin{aligned}
\hat{a}_i^+\hat{a}_i|0,0,\ldots,0,n,0,\ldots,0\rangle &= N\hat{a}_i^+\hat{a}_i\left(\hat{a}_i^+\right)^n|0\rangle = \\
&= N\left[\hat{a}_i^+\hat{a}_i^+\hat{a}_i\left(\hat{a}_i^+\right)^{n-1} + \left(\hat{a}_i^+\right)^n\right]|0\rangle = \\
&= N\left[\left(\hat{a}_i^+\right)^3\hat{a}_i^+\hat{a}_i\left(\hat{a}_i^+\right)^{n-2} + 2\left(\hat{a}_i^+\right)^n\right]|0\rangle = \ldots = \\
&= Nn\left(\hat{a}_i^+\right)^n|0\rangle = n|0,0,\ldots,0,n,0,\ldots,0\rangle.
\end{aligned} \tag{16}$$

Пользуясь коммутационными соотношениями и определением вакуумного состояния (13) найдем нормировочную константу N. Для этого запишем условие его нормировки вектора состояния (15)

$$\langle 0,0,\ldots,0,n,0,\ldots,0|0,0,\ldots,0,n,0,\ldots,0\rangle = \frac{1}{N^2}\langle 0|\left(\hat{a}_i\right)^n\left(\hat{a}_i^+\right)^n|0\rangle = 1 \tag{17}$$

и будем “продвигать” в его левой части операторы уничтожения вправо через операторы рождения, пока оператор уничтожения не подействует на вакуум. Затем воспользуемся определением вакуума (13). В результате получим

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N^2}\langle 0|\left(\hat{a}_i\right)^n\left(\hat{a}_i^+\right)^n|0\rangle &= \frac{1}{N^2}\langle 0|\left[\left(\hat{a}_i\right)^{n-1}\hat{a}_i\hat{a}_i^+\left(\hat{a}_i^+\right)^{n-1} + \left(\hat{a}_i\right)^{n-1}\left(\hat{a}_i^+\right)^{n-1}\right]|0\rangle = \ldots = \\
&= \frac{1}{N^2}\langle 0|\left[\left(\hat{a}_i\right)^{n-1}\hat{a}_i^+\left(\hat{a}_i^+\right)^{n-1}\hat{a}_i + n\left(\hat{a}_i\right)^{n-1}\left(\hat{a}_i^+\right)^{n-1}\right]|0\rangle = \\
&= \frac{n}{N^2}\langle 0|\left(\hat{a}_i\right)^{n-1}\left(\hat{a}_i^+\right)^{n-1}|0\rangle.
\end{aligned} \tag{18}$$

Повторяя эту процедуру еще $n-1$ раз найдем, что

$$\frac{1}{N^2}\langle 0|\left(\hat{a}_i\right)^n\left(\hat{a}_i^+\right)^n|0\rangle = \frac{n!}{N^2}\langle 0|0\rangle = \frac{n!}{N^2} = 1. \tag{19}$$

Откуда следует, что нормированный вектор состояния есть

$$|0,0,\ldots,0,n,0,\ldots,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{n!}}\left(\hat{a}_i^+\right)^n|0\rangle. \tag{20}$$

Действуя на вакуум определенным числом операторов рождения по каждому квантовому состоянию, мы получим вектор многочастичного состояния $|n_1,n_2,\ldots,n_r,\ldots\rangle$

$$|n_1,n_2,\ldots,n_r,\ldots\rangle = \sqrt{\frac{1}{n_1!n_2!\ldots n_r!\ldots}}\left(\hat{a}_1^+\right)^{n_1}\left(\hat{a}_2^+\right)^{n_2}\ldots\left(\hat{a}_r^+\right)^{n_r}\ldots|0\rangle. \tag{21}$$

1.3 Операторы физических величин

Теперь найдем выражения для операторов физических величин записанные через операторы рождения и уничтожения. Сначала рассмотрим случай, когда физическая величина может быть представлена как сумма соответствующих величин для отдельных частиц

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^{N} \hat{f}^{(i)}. \tag{22}$$

Теперь найдем матричный элемент оператора $\hat{f}^{(i)}$

$$\begin{aligned}
\langle n_1', \ldots, n_i' \ldots, n_r' | \hat{f}^{(i)} | n_1, \ldots, n_i \ldots, n_r \rangle &= \frac{\sqrt{n_1'! \ldots n_i'! \ldots n_r'! n_1! \ldots n_i! \ldots n_r!}}{N!} \times \\
&\times \sum_{\alpha,\beta} \int d^3r_1 \ldots d^3r_N P_\alpha \left[\psi^*_{k_1'}(\vec{r}_1) \ldots \psi^*_{k_i'}(\vec{r}_i) \ldots \psi^*_{k_N'}(\vec{r}_N) \right] \hat{f}^{(i)} \times \\
&\times P_\beta \left[\psi_{k_1}(\vec{r}_1) \ldots \psi_{k_i}(\vec{r}_i) \ldots \psi_{k_N}(\vec{r}_N) \right],
\end{aligned} \tag{23}$$

где сумма берется по всем перестановкам тождественных бозонов в начальном и конечном состояниях. Напомним, что индекс k_i обозначает квантовые числа i-й частицы. В результате действия оператора перестановки будут переставляться координаты соответствующих частиц при фиксированных расположениях индексов k_i.

Отметим, что фигурирующий в (23) матричный элемент

$$\left(\hat{f}^{(i)} \right)_{jl} \equiv \int d^3r_i \psi^*_{k_j'}(\vec{r}_i) \hat{f}^{(i)} \psi_{k_l}(\vec{r}_i) \tag{24}$$

можно рассматривать как квантовый переход с уничтожением одной частицы в квантовом состоянии k_l и рождении частицы в состоянии k_j. Тогда матричный элемент (23) запишется через (24)

$$\begin{aligned}
&\langle n_1', \ldots, n_i' \ldots, n_r' | \hat{f}^{(i)} | n_1, \ldots, n_i \ldots, n_r \rangle = \\
&= \sum_{l,j} \prod_{p \neq l, q \neq j} \frac{\sqrt{n_1'! \ldots n_i'! \ldots n_r'! n_1! \ldots n_i! \ldots n_r!}}{N!} \delta_{n_l n_j'} \cdots \frac{(N-1)!}{n_1! \ldots (n_l - 1)! \ldots (n_j - 1)!} \times \\
&\times \left(\hat{F}^{(i)} \right)_{jl} \delta_{(n_l - 1) n_l'} \delta_{n_j (n_j' + 1)} = \\
&= \frac{1}{N} \sum_{j,l} \prod_{p \neq l, q \neq j} \delta_{n_p n_q'} \cdots \sqrt{n_j n_l} \left(\hat{f}^{(i)} \right)_{jl} \delta_{(n_l - 1) n_l'} \delta_{n_j (n_j' + 1)}
\end{aligned} \tag{25}$$

Матричный элемент (24) одинаков для всех i, и индекс i может быть опущен $f_{jl} = \left(\hat{F}^{(i)} \right)_{jl}$, а матричный элемент оператора (22) будет в N раз больше, чем (25)

$$\begin{aligned}
&\langle n_1', \ldots, n_i' \ldots, n_r' | \hat{F} | n_1, \ldots, n_i \ldots, n_r \rangle = \\
&= \sum_{j,l} \prod_{p \neq l, q \neq j} \delta_{n_p n_q'} \cdots \sqrt{n_j n_l} \left(\hat{f} \right)_{jl} \delta_{(n_l - 1) n_l'} \delta_{n_j (n_j' + 1)}
\end{aligned} \tag{26}$$

В том случае, когда $l = j$, $n_j' = n_l$ и матричный элемент диагонален

$$\begin{aligned}
&\langle n_1', \ldots, n_i' \ldots, n_r' | \hat{F} | n_1, \ldots, n_i \ldots, n_r \rangle = \\
&= \sum_{j,l} \prod_{p \neq l, q \neq j} \delta_{n_p n_q'} \cdots \left(\hat{f} \right)_{jj} \delta_{(n_l - 1) n_l'} \delta_{n_j (n_j' + 1)} \cdots
\end{aligned} \tag{27}$$

Результаты (26) и (27) легко записать в операторном виде, если

$$\hat{F} = \sum_{j,l} f_{jl} \hat{a}_j^+ \hat{a}_l = \sum_{j,l} \langle j|f|l\rangle \hat{a}_j^+ \hat{a}_l. \tag{28}$$

В качестве примера рассмотрим гамильтониан

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i, \text{ где } \hat{H}_i = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{r}_i). \tag{29}$$

Тогда матричные элементы одночастичного гамильтониана $\hat{H}_i$ диагональны и на основании (28) имеем для полного гамильтониана следующее выражение в представлении чисел заполнения

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j \hat{a}_j^+ \hat{a}_j, \tag{30}$$

где ε_j — собственное значение одночастичного гамильтониана. Собственными функцияи гамильтониана будут (20), которым соответствуют собственные значения

$$E_{n_1 \ldots n_r \ldots} = \sum_j n_j \varepsilon_j. \tag{31}$$

Теперь рассмотрим операторы, действующие на координаты двух частиц. Примером такого оператора может служить энергия взаимного отталкивания электронов в атоме. Пусть

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{N} \hat{A}^{ij}. \tag{32}$$

В представлении вторичного квантования его можно записать

$$\hat{A} = \sum_{n,m,k,l} \langle nm|\hat{A}^{ij}|lk\rangle \hat{a}_k^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_k \hat{a}_l, \tag{33}$$

$$\langle nm|\hat{A}^{ij}|lk\rangle = \int d^3r d^3r' \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m^*(\vec{r}\,') \hat{A}^{ij}(\vec{r},\vec{r}\,') \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m^*(\vec{r}\,'). \tag{34}$$

Соответственно, гамильтониан атома теперь можно записать

$$\hat{H} = \sum_{l,k} \hat{H}_{k,l}^{(i)} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k^+ + \frac{1}{2} \sum_{n,m,k,l} \langle nm|V^{ij}|lk\rangle \hat{a}_k^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_k \hat{a}_l, \tag{35}$$

где V_{ij} взаимодйствие между i-м и j-м электронами. Последний член в (35) имеет простую физическую интерпретацию: два электрона, которые находятся в квантовых состояниях k и l, рассеиваются и переходят в квантовые состояния n и m.

Полученные формулы могут быть формально получены, если одночастичные волновую функцию $\psi(\vec{r})$ на следующий оператор

$$\psi(\vec{r}) \to \hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_k \hat{a}_k \psi_k(\vec{r}) \tag{36}$$

и рассмотреть "среднее" от оператора. С этим формальным приемом и связано название метода *метод вторичного квантования*, т.е. мы формально рассматриваем операторы как физические величины, так и сами волновые функции.

2 Вторичное квантование для фермионов

Все формулы для операторов, равно как и формула (20) для волновой функции многочастичного состояния, остаются справедливыми и в случае фермионов. Однако при этом меняются свойства операторов рождения и уничтожения.

Действительно, в одном квантовом состоянии может находиться не более одного фермиона. Поэтому собственными значениями оператора числа частиц могут быть только 0 или 1. Этому требованию можно удовлетворить, если потребовать, чтобы между операторами рождения и уничтожения выполнялись соотношения (11) и (12) с заменой коммутаторов на антикоммутаторы, т.е.

$$\left\{\hat{a}_r, \hat{a}_l^+\right\} = \delta_{rl} \tag{37}$$

$$\{\hat{a}_r, \hat{a}_l\} = \left\{\hat{a}_r^+, \hat{a}_l^+\right\} = 0, \tag{38}$$

где фигурные скобки обозначают антикоммутатор

$$\left\{\hat{A}, \hat{B}\right\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \tag{39}$$

Заметим, что из (38), в частности, следует, что

$$\hat{a}_k^2 = \hat{a}_k^{+\,2} = 0. \tag{40}$$

Теперь покажем, что эти антикоммутационные соотношения приводят к тому, что собственные значения оператора число частиц принимают только значения 1 и 0. С этой целью рассмотрим квадрат оператора числа частиц

$$\begin{aligned}\left(\hat{a}_k^+\hat{a}_k\right)^2 &= \hat{a}_k^+\hat{a}_k\hat{a}_k^+\hat{a}_k = \hat{a}_k^+\hat{a}_k^+\left(1 - \hat{a}_k^+\hat{a}_k^+\right) = \\ &= \hat{a}_k^+\hat{a}_k^+ - \hat{a}_k^+\left(\hat{a}_k^+\right)^2\hat{a}_k^+ = \hat{a}_k^+\hat{a}_k^+.\end{aligned} \tag{41}$$

Диагональный матричный элемент от правой и левой части (41) дает

$$n_k^2 = n_k, \tag{42}$$

что справедливо, если только n_k=0 или 1.