Лекция №4

Вторичное квантование.

Операторы рождения и уничтожения частиц.

При описании квантовых систем многих частиц, к числу которых относятся и конденсированные среды, приходится иметь дело с ансамблями тождественных частиц. Для квантовомеханического описания таких систем можно исходить из квантовомеханических состояний одной частицы. Если индексом i обозначить совокупность квантовых чисел, характеризующих состояние одной частицы (это может быть, например, импульс частицы и одна из проекций ее спина, либо полный момент частицы и его проекция на какую-либо ось), то, задав число частиц n_i, обладающих набором квантовых чисел i (или, как говорят, число частиц, находящихся в индивидуальном состоянии i), мы полностью определим некоторое состояние системы тождественных частиц. Такое состояние с определенными числами частиц n_i в различных индивидуальных состояниях i (они называются числами заполнения) обозначаются символами

$$\left|...n_i,...,n_j,...\right\rangle,$$

а метод описания состояний системы, при котором задаются числа заполнения n_i, носит название **метода вторичного квантования**.

Если частицы являются бозонами, то есть, подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, то числа заполнения n_i могут принимать любые значения, $n_i = 0,1,2,...$; если же частицы являются фермионами, то числа заполнения могут принимать только два значения, $n_i = 0,1$.

Состояния $\left|...n_i,...,n_j,...\right\rangle$ которые мы будем предполагать ортонормированными, образуют полную систему векторов в гильбертовом пространстве всей системы

$$...\sum_{n_i}...\sum_{n_j}...\left|...n_i,...,n_j,...\right\rangle\left\langle...n_j,...,n_i,...\right| = 1 \qquad .(1)$$

Для определения в формализме вторичного квантования операторов, соответствующих различным физическим величинам вводятся в рассмотрение операторы рождения $\hat{a}_i^+$ и уничтожения $\hat{a}_i$ частицы в состоянии i. Рассмотрим сначала систему тождественных бозонов. Операторы $\hat{a}_i^+$ и $\hat{a}_i$ определяется соотношениями

$$\hat{a}_i^+\left|...n_i,...\right\rangle = \sqrt{n_i+1}\left|...n_i+1,...\right\rangle, \qquad \hat{a}_i\left|...n_i,...\right\rangle = \sqrt{n_i}\left|...n_i-1,...\right\rangle. \quad (2)$$

Из этих формул следует, что

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i \left| ...n_i, ... \right\rangle = n_i \left| ...n_i, ... \right\rangle, \tag{3}$$

то есть, оператор $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ представляет собой оператор числа частиц в состоянии i.

Из определений (2) вытекают условия коммутации для операторов $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+ \right] \equiv \hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \delta_{ij}, \; \left[\hat{a}_i, \hat{a}_j \right] = \left[\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+ \right] = 0. \tag{4}$$

Состояния, в котором все числа заполнения равны нулю, носит названия состояния вакуума. Его обычно обозначают символом $\left| 0 \right\rangle$. Очевидно, что

$$\hat{a}_i \left| 0 \right\rangle = 0.$$

Векторы типа $\left| ...n_i, ..., n_j, ... \right\rangle$ могут быть построены действием операторов рождения на состояние вакуума

$$\left| ...n_i, ..., n_j, ... \right\rangle = \left(...n_i! ... n_j! \right)^{-1/2} ... \left(\hat{a}_i^+ \right)^{n_i} ... \left(\hat{a}_j^+ \right)^{n_j} ... \left| 0 \right\rangle. \tag{5}$$

Если подставить это выражение в условие полноты, получим

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i_1} ... \sum_{i_N} \hat{a}_{i_1}^+ ... \hat{a}_{i_N}^+ \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \hat{a}_{i_N} ... \hat{a}_{i_1} = 1. \tag{6}$$

В таком виде условие полноты будет справедливо и для фермионов. Удобно также ввести в рассмотрение векторы состояний

$$\left| i_1, ..., i_N \right\rangle = \hat{a}_{i_1}^+ ... \hat{a}_{i_N}^+ \left| 0 \right\rangle$$

в терминах которых можем записать условие полноты

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i_1} ... \sum_{i_N} \left| i_1, ..., i_N \right\rangle \left\langle i_N, ..., i_1 \right| = 1, \tag{7}$$

и условие ортонормировки

$$\left\langle i_1, ..., i_N \middle| i'_{N'}, ..., i'_1 \right\rangle = \delta_{NN'} \sum \delta_{i_1 i'_1} ... \delta_{i_N i'_{N'}}, \tag{8}$$

где суммирование распространяется на все перестановки штрихованных индексов.

Произвольный вектор $\left| \psi \right\rangle$ может быть разложен по этой системе векторов

$$\left| \psi \right\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i_1} ... \sum_{i_N} \psi\left(i_1, ..., i_N \right) \left| i_1, ..., i_N \right\rangle,$$

где

$$\psi(i_1,...,i_N)=\langle i_1,...,i_N|\psi\rangle$$

и

$$\sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!}\sum_{i_1}...\sum_{i_N}\left|\psi(i_1,...,i_N)\right|^2=1. \qquad (9)$$

Функция $\psi(i_1,...,i_N)$, представляющая собой проекцию вектора состояния $|\psi\rangle$ на состояние $|i_1,...,i_N\rangle$ является волновой функцией системы (с неопределенным числом частиц) в i представлении. Величина же

$$\frac{1}{N!}\sum_{i_1}...\sum_{i_N}\left|\psi(i_1,...,i_N)\right|^2$$

представляет собой вероятность того, что система содержит N частиц.

В дальнейшем важную роль будут играть импульсное и координатное представления. Волновые функции $\psi(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N)$ ($N=0,1,2,...$) системы с вектором состояния $|\psi\rangle$, в импульсном представлении в соответствии с вышеизложенным имеют вид:

$$\psi(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N)=\langle 0|\hat{a}_{\mathbf{p}_1}...\hat{a}_{\mathbf{p}_N}|\psi\rangle.$$

Следует отметить, что действие оператора $\hat{a}^+$ на вектор $|n\rangle$ соответствует действию оператора $\hat{a}$ на вектор $\langle n|$. Напомним также, что импульс частицы $\mathbf{p}$ принимает дискретные значения, если объем системы конечен.

Соответствующие волновые функции в координатном представлении определяются формулами:

$$\psi(\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_N)=\frac{1}{V^{N/2}}\sum_{\mathbf{p}_1\cdots\mathbf{p}_N}\psi(\mathbf{p}_1,...,\mathbf{p}_N)e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1\mathbf{x}_1+...+i\mathbf{p}_N\mathbf{x}_N)}=\langle\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_N|\psi\rangle,$$

где

$$|\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_N\rangle=\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1)...\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_N)|0\rangle. \qquad (10)$$

Здесь $\hat{\psi}^+(\mathbf{x}),\hat{\psi}(\mathbf{x})$ - операторы рождения и уничтожения частицы в точке $\mathbf{x}$ (их еще называют полевыми операторами)

$$\hat{\psi}(\mathbf{x})=V^{-1/2}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{px}}, \quad \hat{\psi}^+(\mathbf{x})=V^{-1/2}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}^+_{\mathbf{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{px}}. \qquad (11)$$

Используя приведенные выше коммутационные соотношения, нетрудно убедиться в справедливости формул

$$\left[\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)\right]=\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2),\ \left[\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}(\mathbf{x}_2)\right]=\left[\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)\right]=0.$$

До сих пор мы имели дело с системами тождественных бозонов. Но все полученные основные формулы справедливы и для фермионов. Мы должны только иметь ввиду иные условия коммутации для операторов рождения и уничтожения фермионов:

$$\left\{\hat{a}_i,\hat{a}_j^+\right\}\equiv\hat{a}_i\hat{a}_j^+ +\hat{a}_j^+\hat{a}_i=\delta_{ij},\ \left\{\hat{a}_i,\hat{a}_j\right\}=\left\{\hat{a}_i^+,\hat{a}_j^+\right\}=0.$$

Используя определения (11), можно получить коммутационные соотношения и для полевых операторов фермионов:

$$\left\{\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)\right\}=\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2),\ \left\{\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}(\mathbf{x}_2)\right\}=\left\{\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)\right\}=0.$$

Добавим также, что до сих пор мы считали частицы бесспиновыми, однако нетрудно учесть в представлении вторичного квантования и его. Для этого надо ввести операторы рождения и уничтожения частицы в точке $\mathbf{x}$ с данной проекцией σ ($-S\le\sigma\le S$) его спина на какую-либо ось:

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})=V^{-1/2}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{px}},\qquad \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})=V^{-1/2}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}^+e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{px}}.\tag{11}$$

Операторы физических величин.

Определим теперь операторы основных физических величин в представлении вторичного квантования. Поскольку $\hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x}),\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})$ являются операторами рождения и уничтожения частиц в точке $\mathbf{x}$ с проекцией спина σ, легко выписать оператор числа частиц $\hat{N}$:

$$\hat{N}=\int d^3x\hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})\tag{12}$$

(по повторяющимся индексам σ подразумевается суммирование). Оператор спина $\hat{\mathbf{S}}$ в этом представлении может быть записан в виде

$$\hat{\mathbf{S}}=\int d^3x\hat{\psi}_{\sigma_1}^+(\mathbf{x})\mathbf{S}_{\sigma_1\sigma_2}\hat{\psi}_{\sigma_2}(\mathbf{x}).$$

Операторы импульса и оператор орбитального момента даются выражениями:

$$\hat{P}_i = -\frac{i}{2}\int d^3x \left\{ \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{x}) \frac{\partial \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})}{\partial x_i} - \frac{\partial \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{x})}{\partial x_i} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) \right\}, \tag{13}$$

$$\hat{L}_i = \frac{i}{2}\int d^3x \varepsilon_{ikl} \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{x}) \left\{ x_l \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \right\} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}),$$

где ε_{ikl} – абсолютно антисимметричный тензор, так называемый символ Леви-Чивита.

Гамильтониан $\hat{H}$ системы в случае парного взаимодействия между частицами определяется формулами:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \qquad \hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\int d^3x \nabla \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{x}) \nabla \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}), \tag{14}$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\int d^3x_1 d^3x_2 \hat{\psi}^+_{\sigma_1}(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^+_{\sigma_2}(\mathbf{x}_2) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\sigma_2}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\sigma_1}(\mathbf{x}_1),$$

где m - масса частицы.

В представлении вторичного квантования удобно описывать квантовомеханические системы многих частиц. Используется оно преимущественно и в квазичастичном подходе к описанию процессов и явлений в физике конденсированного состояния.

Как уже упоминалось, при описании систем многих частиц приходится иметь дело не с чистыми, а со смешанными состояниями. Ввиду этого обстоятельства необходимо использовать понятие матрицы плотности ρ:

$$\rho = \sum_n |n\rangle w_n \langle n|. \tag{15}$$

Принимая во внимание, что вектора состояний $|n\rangle$ удовлетворяют уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|n\rangle = \hat{H}|n\rangle, \tag{16}$$

легко получить и уравнение, которому удовлетворяет матрица плотности

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho = \sum_n \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|n\rangle \right) w_n \langle n| + \sum_n |n\rangle w_n i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle n|.$$

Замечая, что

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle n| = -\langle n|\hat{H}$$

и используя (16), получим

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[\hat{H}, \rho\right]. \tag{17}$$

Это уравнение называется уравнением Лиувилля. Зная гамильтониан системы, и умея решать это уравнение, мы сможем в принципиальном отношении описать поведение системы во времени.

Но это уравнение надо снабдить «начальным условием». В качестве такового обычно используют так называемое эргодическое соотношение. Оно отражает простой и ясный факт, что всякая изолированная система, будучи предоставленная самой себе, в результате эволюции придет в состояние статистического равновесия

$$\rho(t) \underset{t\to\infty}{\to} w,$$

Статистическое равновесие описывается распределением Гиббса w:

$$w = \exp\left\{\Omega - \frac{1}{T}\left(\hat{H} - \mathbf{u}\hat{P} - \mu\hat{N}\right)\right\}, \tag{18}$$

где Ω - большой термодинамический потенциал, определяемый из условия

$$Spw = 1, \tag{19}$$

а величины T (температура), $\mathbf{u}$ (средняя скорость системы как целого) и μ (химический потенциал) должны находиться из уравнений:

$$Spw\hat{H} = W,\ Spw\hat{\mathbf{P}} = \mathbf{P},\quad Spw\hat{N} = N, \tag{20}$$

где W - полная энергия системы, $\mathbf{P}$ - средний импульс системы как целого и N - полное число частиц в системе. Операторы соответствующих физических величин приведены нами выше.

Уравнения (18)-(20) полностью определяют термодинамику системы.