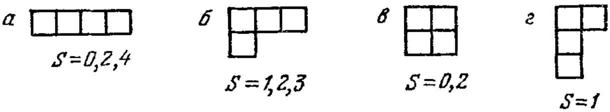
для схемы *б* определяются по остатку во втором равенстве, а затем для схемы *а* — по остатку в первом равенстве; значение спина для схемы *г* однозначно определяется третьим равенством:



§ 64. Вторичное квантование. Случай статистики Бозе

В теории систем, состоящих из большого числа одинаковых частиц, широко применяется особый метод рассмотрения, известный под названием *вторичного квантования*. Этот метод в особенности необходим в релятивистской теории, где приходится иметь дело с системами, в которых самое число частиц является переменным [1]).

Пусть $\psi_1(\xi)$, $\psi_2(\xi)$, ... — некоторая полная система ортогональных и нормированных волновых функций стационарных состояний одной частицы [2]). Это могут быть состояния частицы в некотором произвольно выбранном внешнем поле, но обычно выбираются просто плоские волны — волновые функции свободной частицы с определенными значениями импульса (и проекции спина). При этом с целью сведе́ния спектра состояний к дискретному рассматривают движение частиц в большой, но ограниченной области пространства; для движения в ограниченном объеме собственные значения компонент импульса пробегают дискретный ряд (причем интервалы между соседними значениями обратно пропорциональны линейным размерам области и стремятся к нулю при их увеличении).

В системе свободных частиц импульсы частиц сохраняются по отдельности. Тем самым сохраняются и *числа заполнения* состояний — числа N_1, N_2, ..., указывающие, сколько частиц находится в каждом из состояний ψ_1, ψ_2, ... В системе взаимодействующих частиц импульсы каждой из них уже не сохраняются, а потому не сохраняются и числа заполнения. Для такой системы можно говорить лишь о распределении вероятностей различных значений чисел заполнения. Поставим себе целью построить математический аппарат, в котором именно числа

---

[1]) Метод вторичного квантования был развит *Дираком* для фотонов в применении к теории излучения (1927 г.) и затем распространен на фермионы *Вигнером* и *Иорданом* (*E. Wigner*, *P. Jordan*, 1928).

[2]) Как и в § 61, ξ обозначает совокупность координат и проекции спина σ частицы, а под интегрированием по $d\xi$ будет подразумеваться интегрирование по координатам вместе с суммированием по σ.

заполнения (а не координаты и проекции спинов частиц) играли бы роль независимых переменных.

В таком аппарате удобно пользоваться обозначениями Дирака (см. конец § 11), выбирая N_1, N_2,... в качестве определяющих состояние квантовых чисел. Состояния, отвечающие волновым функциям (61,3) и (61,5), будут обозначаться $|N_1, N_2, \ldots\rangle$. При этом координатные и спиновые переменные уже не фигурируют в явном виде.

Соответственно такому выбору независимых переменных, так же и операторы различных физических величин (в том числе гамильтониан системы) должны формулироваться в терминах их воздействия на функции чисел заполнения. К такой формулировке можно прийти, отправляясь от обычного матричного представления операторов. При этом надо рассмотреть матричные элементы операторов по отношению к волновым функциям стационарных состояний системы невзаимодействующих частиц. Поскольку эти состояния можно описывать заданием определенных значений чисел заполнения, то тем самым выяснится характер воздействия операторов на эти переменные.

Рассмотрим сначала системы частиц, подчиняющихся статистике Бозе.

Пусть $\hat{f}_a^{(1)}$ есть оператор какой-либо величины, относящейся к одной (a-й) частице, т. е. действующий только на функции переменных ξ_a. Введем симметричный по всем частицам оператор

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_a \hat{f}_a^{(1)} \tag{64,1}$$

(суммирование по всем частицам) и определим его матричные элементы по отношению к волновым функциям (61,3). Прежде всего легко сообразить, что матричные элементы будут отличны от нуля только для переходов без изменения чисел N_1, N_2, ... (диагональные элементы) и для переходов, при которых одно из этих чисел увеличивается, а другое уменьшается на единицу. Действительно, поскольку каждый из операторов $\hat{f}_a^{(1)}$ действует только на одну функцию в произведении $\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\ldots\psi_{p_N}(\xi_N)$, то его матричные элементы могут быть отличны от нуля только для переходов с изменением состояния одной частицы; но это означает, что число частиц, находящихся в одном состоянии, уменьшается, а в другом соответственно увеличивается на единицу. Вычисление этих матричных элементов по существу очень просто; его легче произвести самому, чем проследить за его изложением. Поэтому мы приведем только результат вычисления. Недиагональные элементы равны

$$\langle N_i, N_k - 1|F^{(1)}|N_i - 1, N_k\rangle = f_{ik}^{(1)}\sqrt{N_i N_k}. \tag{64,2}$$

Мы указываем только те индексы, по которым матричный элемент не диагонален, опуская для краткости остальные. Здесь $f_{ik}^{(1)}$ — матричный элемент

$$f_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(\xi)\hat{f}^{(1)}\psi_k(\xi)\,d\xi; \tag{64,3}$$

поскольку операторы $\hat{f}_a^{(1)}$ отличаются только обозначением переменных, на которые они действуют, то интегралы (64,3) от индекса a не зависят и этот индекс опущен. Диагональные матричные элементы от $F^{(1)}$ представляют собой средние значения величины $F^{(1)}$ в состояниях $\Psi_{N_1N_2\ldots}$. Вычисление дает

$$\overline{F^{(1)}} = \sum_i f_{ii}^{(1)}N_i. \tag{64,4}$$

Введем теперь основные в методе вторичного квантования операторы $\hat{a}_i$, действующие уже не на функции координат, а на функции чисел заполнения. По определению, оператор $\hat{a}_i$, действуя на состояние $|N_1, N_2, \ldots\rangle$, уменьшает на единицу значение переменной N_i, одновременно умножая функцию на $\sqrt{N_i}$ [1]):

$$\hat{a}_i|N_1, N_2, \ldots, N_i, \ldots\rangle = \sqrt{N_i}\,|N_1, N_2, \ldots, N_i-1, \ldots\rangle. \tag{64,5}$$

Можно сказать, что оператор $\hat{a}_i$ уменьшает на единицу число частиц, находящихся в i-м состоянии; его называют поэтому *оператором уничтожения* частиц. Его можно представить в виде матрицы, единственный отличный от нуля элемент которой есть

$$\langle N_i - 1|a_i|N_i\rangle = \sqrt{N_i}. \tag{64,6}$$

Сопряженный с $\hat{a}_i$ оператор $\hat{a}_i^+$ изображается, по определению (см. (11,9)), матрицей с единственным элементом

$$\langle N_i|a_i^+|N_i-1\rangle = \langle N_i - 1|a_i|N_i\rangle^* = \sqrt{N_i}. \tag{64,7}$$

Это значит, что при воздействии на функцию $|N_1, N_2, \ldots\rangle$ он увеличивает число N_i на 1:

$$\hat{a}_i^+|N_1, N_2, \ldots, N_i, \ldots\rangle = \sqrt{N_i+1}\,|N_1, N_2, \ldots, N_i+1, \ldots\rangle. \tag{64,8}$$

Другими словами, оператор $\hat{a}_i^+$ увеличивает на 1 число частиц в i-м состоянии; его называют *оператором рождения* частиц.

Произведение операторов $\hat{a}_i^+\hat{a}_i$ при воздействии на волновую функцию может лишь умножить ее на постоянную, оставляя все переменные $N_1, N_2, \ldots$ неизменными: оператор $\hat{a}_i$ уменьшает

---

[1]) Введено естественное обозначение $\hat{a}|n\rangle$ для результата воздействия оператора $\hat{a}$ на волновую функцию состояния $|n\rangle$.

переменную N_i на 1, после чего $\hat{a}_i^\dagger$ возвращает ее к исходному значению. Непосредственное перемножение матриц (64,6) и (64,7) действительно показывает, что $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ изображается диагональной матрицей с диагональными элементами, равными N_i:

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = N_i. \tag{64,9}$$

Аналогичным образом найдем

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger = N_i + 1. \tag{64,10}$$

Разность этих выражений дает правило коммутации между операторами $\hat{a}_i$ и $\hat{a}_i^\dagger$:

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = 1. \tag{64,11}$$

Операторы же с различными индексами i и k, действующие на различные переменные (N_i и N_k), коммутативны:

$$\hat{a}_i \hat{a}_k - \hat{a}_k \hat{a}_i = 0, \qquad \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_i = 0, \qquad i \neq k. \tag{64,12}$$

Исходя из описанных свойств операторов $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^\dagger$, легко видеть, что оператор

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_{i,k} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \tag{64,13}$$

совпадает с оператором (64,1). Действительно, все матричные элементы, вычисленные с помощью (64,6), (64,7), совпадают с элементами (64,2) и (64,4). Этот результат очень важен. В формуле (64,13) величины $f_{ik}^{(1)}$ — просто числа. Таким образом, нам удалось выразить обычный оператор, действующий на функции координат, в виде оператора, действующего на функции новых переменных — чисел заполнения N_i.

Полученный результат легко обобщается и на операторы другого вида. Пусть

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{a>b} \hat{f}_{ab}^{(2)}, \tag{64,14}$$

где $\hat{f}_{ab}^{(2)}$ — оператор физической величины, относящейся сразу к паре частиц и поэтому действующей на функции от ξ_a и ξ_b. Аналогичные вычисления покажут, что такой оператор может быть выражен через операторы $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^\dagger$ посредством

$$\hat{F}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,m} \langle ik | f^{(2)} | lm \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_l, \tag{64,15}$$

где

$$\langle ik | f^{(2)} | lm \rangle = \int\int \psi_i^*(\xi_1) \psi_k^*(\xi_2) \hat{f}^{(2)} \psi_l(\xi_1) \psi_m(\xi_2) \, d\xi_1 \, d\xi_2.$$

Обобщение этих формул на симметричные по всем частицам операторы любого другого вида ($\hat{F}^{(3)} = \sum \hat{f}^{(3)}_{abc}$ и т. д.) очевидно.

С помощью этих формул можно выразить через операторы $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ также и гамильтониан исследуемой физической системы из N взаимодействующих одинаковых частиц. Гамильтониан такой системы, разумеется, симметричен по всем частицам. В нерелятивистском приближении[1]) он не зависит от спинов частиц и может быть представлен в общем виде следующим образом:

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}_a^{(1)} + \sum_{a>b} U^{(2)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) + \sum_{a>b>c} U^{(3)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_c) + \ldots \tag{64,16}$$

Здесь $\hat{H}_a^{(1)}$ есть часть гамильтониана, зависящая от координат только одной (a-й) частицы:

$$\hat{H}_a^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_a + U^{(1)}(\mathbf{r}_a), \tag{64,17}$$

где $U^{(1)}(\mathbf{r}_a)$ — потенциальная энергия одной частицы во внешнем поле. Остальные члены в (64,16) отвечают энергии взаимодействия частиц друг с другом, причем отделены друг от друга члены, зависящие соответственно от координат двух, трех и т. д. частиц.

Представление гамильтониана в такой форме позволяет непосредственно применить формулы (64,13), (64,15) и аналогичные им. Таким образом,

$$\hat{H} = \sum_{i,k} H_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,m} \langle ik | U^{(2)} | lm \rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_m \hat{a}_l \ \ldots \tag{64,18}$$

Этим осуществляется искомое выражение гамильтониана в виде оператора, действующего на функции от чисел заполнения.

Для системы невзаимодействующих частиц в выражении (64,18) остается только первый член:

$$\hat{H} = \sum_{i,k} H_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k. \tag{64,19}$$

Если в качестве функций ψ_i выбраны собственные функции гамильтониана $\hat{H}^{(1)}$ отдельной частицы, то матрица $H_{ik}^{(1)}$ диагональна и ее диагональные элементы — собственные значения энергии частицы ε_i. Таким образом,

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i;$$

заменяя оператор $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ его собственными значениями (64,9), получим для уровней энергии системы выражение

$$E = \sum_i \varepsilon_i N_i$$

— тривиальный результат, который и должен был получиться.

[1]) В отсутствие магнитного поля.

Развитый здесь аппарат можно представить в более компактном виде, введя так называемые ψ-*операторы* [1])

$$\hat{\psi}(\xi) = \sum_i \psi_i(\xi)\hat{a}_i, \qquad \hat{\psi}^+(\xi) = \sum_i \psi_i^*(\xi)\hat{a}_i^+, \tag{64,20}$$

где переменные ξ рассматриваются как параметры. В силу сказанного выше об операторах $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ ясно, что оператор $\hat{\psi}$ уменьшает, а $\hat{\psi}^+$ увеличивает полное число частиц в системе на единицу.

Легко видеть, что оператор $\hat{\psi}^+(\xi_0)$ создает частицу, находящуюся в точке ξ_0. Действительно, в результате действия оператора $\hat{a}_i^+$ создается частица в состоянии с волновой функцией $\psi_i(\xi)$. Отсюда следует, что в результате воздействия оператора $\hat{\psi}_i(\xi_0)$ создается частица в состоянии с волновой функцией

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

(использована формула (5,12)), что и соответствует частице с определенными значениями координат и спина [2]).

Правила коммутации ψ-операторов получаются непосредственно из правил коммутации операторов $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$:

$$\hat{\psi}(\xi)\hat{\psi}(\xi') - \hat{\psi}(\xi')\hat{\psi}(\xi) = 0, \tag{64,21}$$

$$\hat{\psi}(\xi)\hat{\psi}^+(\xi') - \hat{\psi}^+(\xi')\hat{\psi}(\xi) = \sum_i \psi_i(\xi)\psi_i^*(\xi') = \delta(\xi - \xi'). \tag{64,22}$$

Вторично-квантованный оператор $\hat{F}^{(1)}$ напишется с помощью ψ-операторов в виде

$$\hat{F}^{(1)} = \int \hat{\psi}^+(\xi)\hat{f}^{(1)}\hat{\psi}(\xi)\,d\xi \tag{64,23}$$

(здесь подразумевается, что оператор $\hat{f}^{(1)}$ действует в $\hat{\psi}(\xi)$ на функции параметров ξ). Действительно, подставив сюда $\hat{\psi}$ и $\hat{\psi}^+$ в виде (64,20) и используя определение (64,3), вернемся к формуле (64,13). Аналогичным образом вместо (64,15) будем иметь

$$\hat{F}^{(2)} = \frac{1}{2}\int\int \hat{\psi}^+(\xi)\hat{\psi}^+(\xi')\hat{f}^{(2)}\hat{\psi}(\xi')\hat{\psi}(\xi)\,d\xi\,d\xi'. \tag{64,24}$$

---

[1]) Обратим внимание на аналогию между выражением (64,20) и разложением $\psi = \sum a_i\psi_i$ произвольной волновой функции по некоторой полной системе функций. Здесь оно как бы снова квантуется, откуда и происходит название всего метода — вторичное квантование.

[2]) $\delta(\xi - \xi_0)$ обозначает условно произведение

$$\delta(x - x_0)\,\delta(y - y_0)\,\delta(z - z_0)\,\delta_{\sigma\sigma_0}.$$

В частности, гамильтониан системы, выраженный через ψ-операторы, напишется в виде

$$\widehat{H} = \int \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \widehat{\psi}^+(\xi)\, \Delta\widehat{\psi}(\xi) + \widehat{\psi}^+(\xi)\, U^{(1)}(\xi)\, \widehat{\psi}(\xi) \right\} d\xi + \\ + \frac{1}{2} \int\int \hat{\psi}^+(\xi)\, \hat{\psi}^+(\xi')\, U^{(2)}(\xi, \xi')\, \hat{\psi}(\xi')\, \hat{\psi}(\xi)\, d\xi\, d\xi' + \ldots \quad (64,25)$$

Оператор $\hat{\psi}^+(\xi)\,\hat{\psi}(\xi)$, построенный из ψ-операторов подобно произведению $\psi^*\psi$, определяющему плотность вероятности для частицы в состоянии с волновой функцией ψ, называют *оператором плотности* частиц. Интеграл же

$$\widehat{N} = \int \widehat{\psi}^+ \widehat{\psi}\, d\xi \qquad (64,26)$$

играет в аппарате вторичного квантования роль оператора полного числа частиц в системе. Действительно, подставив в него ψ-операторы в виде (64,20) и приняв во внимание нормированность и взаимную ортогональность волновых функций, получим $\widehat{N} = \sum \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$. Каждый член этой суммы есть оператор числа частиц в i-м состоянии — согласно (64,9) его собственные значения равны числам заполнения N_i; сумма же всех этих чисел есть полное число частиц в системе [1]).

Наконец, отметим, что если система состоит из бозонов различного рода, то в методе вторичного квантования должны быть введены свои операторы $\hat{a}$, $\hat{a}^+$ для каждого рода частиц. При этом, очевидно, операторы, относящиеся к различным родам частиц, коммутативны друг с другом.

§ 65. Вторичное квантование. Случай статистики Ферми

Вся принципиальная сторона метода вторичного квантования остается без изменений для систем, состоящих из одинаковых фермионов. Конкретные же формулы для матричных элементов величин и для операторов $\hat{a}_i$, конечно, меняются.

Волновая функция $\psi_{N_1 N_2 \ldots}$ имеет теперь вид (61,5). В связи с антисимметричностью этой функции прежде всего возникает вопрос о выборе ее знака. В случае статистики Бозе этого вопроса не было, так как, ввиду симметричности волновой функции, раз выбранный ее знак сохранялся при всех перестановках частиц. Для того чтобы сделать знак функции (61,5) определенным, условимся устанавливать его следующим образом. Перенумеруем раз и навсегда все состояния ψ_i последовательными номерами. После

---

[1]) Для систем с заданным числом частиц эти утверждения (как и свойства гамильтониана системы свободных частиц (64,19)) представляются тривиальными. Их обобщение в релятивистской теории приводит, однако, к новым, отнюдь не тривиальным результатам (ср. IV, § 11).