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

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

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

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

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 $\hat{N} = \sum \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$. 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).

этого будем заполнять строки определителя (61,5) всегда таким образом, чтобы было

$$p_1 < p_2 < p_3 < \ldots < p_N, \qquad (65,1)$$

причем в столбцах стоят функции различных переменных в последовательности $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N$. Среди чисел $p_1, p_2, \ldots$ не может быть равных, так как в противном случае определитель обратится в нуль. Другими словами, числа заполнения N_i могут иметь только значения 0 или 1.

Рассмотрим снова оператор вида (64,1): $\hat{F}^{(1)} = \sum \hat{f}_a^{(1)}$. По тем же причинам, что и в § 64, его матричные элементы будут отличны от нуля только для переходов без изменения всех чисел заполнения и для переходов, при которых одно из них (N_i) уменьшается на единицу (становясь равным нулю вместо единицы), а другое (N_k) увеличивается на единицу (переходит из нуля в единицу). Легко найти, что при $i < k$

$$\langle 1_i, 0_k | F^{(1)} | 0_i, 1_k \rangle = f_{ik}^{(1)} (-1)^{\Sigma (i+1, k-1)}. \qquad (65,2)$$

Здесь посредством 0_i, 1_i обозначены значения $N_i = 0$, $N_i = 1$, а символ $\sum (k, l)$ обозначает сумму чисел заполнения всех состояний от k-го до l-го [1]):

$$\sum (k, l) = \sum_{n=k}^{l} N_n.$$

Для диагональных же элементов получается прежняя формула (64,4)

$$\overline{F^{(1)}} = \sum_i f_{ii}^{(1)} N_i. \qquad (65,3)$$

Для того чтобы оператор $\hat{F}^{(1)}$ мог быть представлен в форме (64,13), операторы $\hat{a}_i$ должны определяться как матрицы с элементами:

$$\langle 0_i | a_i | 1_i \rangle = \langle 1_i | a_i^+ | 0_i \rangle = (-1)^{\Sigma (1, i-1)}. \qquad (65,4)$$

Перемножив эти матрицы, найдем (при $k > i$)

$$\langle 1_i, 0_k | a_i^+ a_k | 0_i, 1_k \rangle = \langle 1_i, 0_k | a_i^+ | 0_i, 0_k \rangle \langle 0_i, 0_k | a_k | 0_i, 1_k \rangle =$$
$$= (-1)^{\Sigma (1, i-1)} (-1)^{\Sigma (1, i-1) + \Sigma (i+1, k-1)}$$

или

$$\langle 1_i, 0_k | a_i^+ a_k | 0_i, 1_k \rangle = (-1)^{\Sigma (i+1, k-1)}. \qquad (65,5)$$

---

[1]) При $i > k$ в показателе в (65,2) надо писать $\Sigma (k + 1, i - 1)$. При $i = k \pm 1$ эти суммы надо заменять нулями.

Если же $i = k$, то матрица $\hat{a}_i^+\hat{a}_i$ диагональна, причем ее элементы равны единице при $N_i = 1$ и нулю при $N_i = 0$; это можно написать в виде

$$\hat{a}_i^+\hat{a}_i = N_i. \tag{65,6}$$

При подстановке этих выражений в (64,13) мы действительно получим (65,2), (65,3).

Перемножая $\hat{a}_i^+$, $\hat{a}_k$ в обратном порядке, будем иметь

$$\langle 1_i, 0_k | a_k a_i^+ | 0_i, 1_k\rangle = \langle 1_i, 0_k | a_k | 1_i, 1_k\rangle \langle 1_i, 1_k | a_i^+ | 0_i, 1_k\rangle =$$
$$= (-1)^{\Sigma(1,\, i-1) + \Sigma(i+1,\, k-1) + \Sigma(1,\, i-1) + 1}$$

или

$$\langle 1_i, 0_k | a_k a_i^+ | 0_i, 1_k\rangle = -(-1)^{\Sigma(i+1,\, k-1)}. \tag{65,7}$$

Сравнив (65,7) с (65,5), мы видим, что эти величины противоположны по знаку, так что

$$\hat{a}_i^+\hat{a}_k + \hat{a}_k\hat{a}_i^+ = 0, \qquad i \neq k.$$

Для диагональной матрицы $\hat{a}_i\hat{a}_i^+$ найдем

$$\hat{a}_i\hat{a}_i^+ = 1 - N_i. \tag{65,8}$$

Сложив с (65,6), получим

$$\hat{a}_i\hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+\hat{a}_i = 1.$$

Оба полученных равенства можно написать вместе в виде

$$\hat{a}_i\hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+\hat{a}_i = \delta_{ik}. \tag{65,9}$$

Произведя аналогичные вычисления, получим для произведений $\hat{a}_i$, $\hat{a}_k$ соотношения

$$\hat{a}_i\hat{a}_k + \hat{a}_k\hat{a}_i = 0 \tag{65,10}$$

(в частности, $\hat{a}_i\hat{a}_i = 0$).

Таким образом, мы видим, что операторы $\hat{a}_i$ и $\hat{a}_k$ (или $\hat{a}_k^+$) с $i \neq k$ оказываются антикоммутативными, между тем как в случае статистики Бозе они коммутировали друг с другом. Это различие вполне естественно. В случае статистики Бозе операторы $\hat{a}_i$ и $\hat{a}_k$ были совершенно независимыми; каждый из операторов $\hat{a}_i$ действовал только на одну переменную N_i, причем результат воздействия не зависел от значений остальных чисел заполнения. В случае же статистики Ферми результат воздействия оператора $\hat{a}_i$ зависит не только от самого числа N_i, но и от чисел заполнения всех предыдущих состояний, как это видно из определения (65,4). Поэтому действие различных операторов $\hat{a}_i$, $\hat{a}_k$ не может рассматриваться как независимое.

После того как свойства операторов $\hat{a}_i$, $\hat{a}_i^+$ таким образом определены, все остальные формулы (64,13) — (64,18) остаются полностью в силе. Остаются также и формулы (64,23) — (64,25), выражающие операторы физических величин через ψ-операторы, определяемые посредством (64,20). Правила же коммутации (64,21) и (64,22) заменяются теперь равенствами

$$\hat{\psi}^{+}(\xi')\hat{\psi}(\xi)+\hat{\psi}(\xi)\hat{\psi}^{+}(\xi')=\delta(\xi-\xi'), \tag{65,11}$$

$$\hat{\psi}(\xi')\hat{\psi}(\xi)+\hat{\psi}(\xi)\hat{\psi}(\xi')=0. \tag{65,12}$$

Если система состоит из различных частиц, то для каждого рода частиц должны быть введены свои операторы вторичного квантования (как уже упоминалось в конце предыдущего параграфа). Операторы, относящиеся к бозонам и фермионам, при этом коммутативны друг с другом. Что же касается операторов, относящихся к различным фермионам, то в пределах нерелятивистской теории их формально можно считать либо коммутативными, либо антикоммутативными; в обоих предположениях применение метода вторичного квантования приводит к одинаковым результатам.

Имея, однако, в виду дальнейшее применение в релятивистской теории, допускающей взаимные превращения различных частиц, мы должны считать операторы рождения и уничтожения различных фермионов антикоммутативными. Это обстоятельство становится очевидным, если рассматривать в качестве «различных» частиц два разных внутренних состояния одной и той же сложной частицы.