ГЛАВА XII

МЕТОД ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ И ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

§ 99. Вторичное квантование для систем бозе- и ферми-частиц [1]

Одним из важных формальных расчетных методов, часто применяющихся в квантовой механике системы многих частиц, является так называемый метод вторичного квантования.

В методе вторичного квантования совершается переход от координатного представления волновой функции к новым переменным. В качестве новых переменных выбираются числа частиц, находящихся в данном квантовом состоянии. Таким образом, характеристика системы частиц заключается теперь не в задании волновой функции $\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N, t)$, а в задании новой функции $c(n_1, n_2, \ldots, t)$, где $n_1, n_2, \ldots$ — числа частиц в 1-м, 2-м и т. д. состояниях. Величины $n_1, n_2, \ldots$ мы будем именовать числами заполнения.

Величина

$$|c(n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots, t)|^2 \tag{99,1}$$

дает вероятность того, что в момент времени t в первом состоянии находится n_1 частиц, во втором состоянии — n_2 частиц и т. д. Метод вторичного квантования оказывается весьма удобным для таких систем, в которых изменяется число частиц в данном состоянии, а также происходит рождение и исчезновение частиц данного сорта (как например, при излучении и поглощении фотонов, при β-распаде ядер и т. д.). Переход от обычного описания ко вторичному квантованию является одним из примеров преобразования от одного представления к другому.

Рассмотрим формально систему невзаимодействующих тождественных частиц. Будем сперва предполагать, что частицы подчиняются статистике Бозе.

Обозначим через $\psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \ldots, \psi_k(\xi), \ldots$ совокупность ортогональных и нормированных волновых функций отдельной

[1]) В изложении этого параграфа мы следуем книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.

частицы, образующих некоторую произвольным образом выбранную полную систему функций. Индекс k обозначает номер состояния, характеризуемого выбранной совокупностью четырех квантовых чисел. Перейдем к представлению, в котором за независимые переменные выбираются не координаты частиц ξ_i, а числа заполнения n_k.

В новом представлении базисными функциями (см. § 65) служат симметризованные и нормированные произведения волновых функций отдельных частиц $\psi_k(\xi_i)$. Формула (65,5) для общего случая, когда в состоянии ψ_1 находится n_1 частиц, в состоянии ψ_2 — n_2 частиц и т. д., приобретает вид

$$\psi_{n_1, n_2, n_3, \dots}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \\ = \left(\frac{n_1!\, n_2!\, n_3! \dots}{N!}\right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\xi_1)\, \psi_{k_2}(\xi_2) \dots \psi_{k_N}(\xi_N). \qquad (99,2)$$

Суммирование ведется только по всем перестановкам разных индексов k_1, k_2, ...

Введем операторы $\hat{a}_k^+$ и $\hat{a}_k$, действующие на новые переменные — числа заполнения в состоянии k. Определим эти операторы формулами

$$\hat{a}_k \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} = \sqrt{n_k}\, \psi_{n_1, \dots, n_k - 1, \dots}, \qquad (99,3)$$

$$\hat{a}_k^+ \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} = \sqrt{n_k + 1}\, \psi_{n_1, \dots, n_k + 1, \dots}. \qquad (99,4)$$

Оператор $\hat{a}_k$ уменьшает число частиц в состоянии k на единицу, т. е. заменяет n_k на $n_k - 1$. Оператор $\hat{a}_k^+$ увеличивает это число на единицу, т. е. заменяет $n_k - 1$ на n_k. Очевидно, что последовательное применение операторов $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ не изменяет числа частиц в k-м состоянии, т. е.

$$\hat{a}_k^+ \hat{a}_k \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots} = n_k \psi_{n_1, \dots, n_k, \dots}. \qquad (99,5)$$

Матричные элементы операторов $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ имеют вид

$$(n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots | \hat{a}_k | n_1, n_2, \dots, n_k, \dots) = \\ = (a_k)_{n_k - 1, n_k} = \sqrt{n_k}, \qquad (99,6)$$

$$(n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots | \hat{a}_k^+ | n_1, n_2, \dots, n_k, \dots) = \\ = (a_k^+)_{n_k + 1, n_k} = \sqrt{n_k + 1}, \qquad (99,7)$$

$$(a_k^+ a_k)_{n_k', n_k} = n_k \delta_{n_k', n_k}. \qquad (99,8)$$

В соответствии с их смыслом, операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ называются соответственно операторами уничтожения и рождения частицы в k-м состоянии. Оператор $\hat{a}_k^+\hat{a}_k$ называют оператором числа частиц n_k, находящихся в состоянии k.

С операторами, сходными с операторами $\hat{a}_k^+$ и $\hat{a}_k$, мы уже встречались в § 50 при рассмотрении задачи об осцилляторе. Нетрудно видеть, что операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}_k\hat{a}_l^+ - \hat{a}_l^+\hat{a}_k &= \delta_{kl}, \\ \hat{a}_k\hat{a}_l - \hat{a}_l\hat{a}_k &= 0, \\ \hat{a}_k^+\hat{a}_l^+ - \hat{a}_l^+\hat{a}_k^+ &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{99,9}$$

Покажем, как можно выразить обычные операторы, действующие на волновую функцию в координатном представлении, через операторы рождения и уничтожения частиц, т. е. в представлении вторичного квантования.

Рассмотрим оператор $\hat{L}(\xi_i)$, действующий на координаты одной i-й частицы. Под координатами подразумевается также и спиновая координата. Поскольку все частицы равноправны, введем оператор $\hat{L}_1 = \sum_{i=1}^{N} \hat{L}(\xi_i)$. Найдем выражение для него в представлении вторичного квантования. Матричные элементы $\hat{L}_1$ получим с помощью базисных функций (99,2).

Имеем по определению

$$(n_1', \ldots, n_k', \ldots |\hat{L}_1| n_1, \ldots, n_k, \ldots) = \left(n_1', \ldots, n_k', \ldots \left| \sum_{i=1}^{N} \hat{L}(\xi_i) \right| n_1, \ldots, n_k, \ldots\right). \tag{99,10}$$

Рассмотрим один член суммы по частицам

$$(n_1', \ldots, n_k', \ldots |\hat{L}(\xi_i)| n_1, \ldots, n_k, \ldots) = \int \psi^*_{n_1', \ldots, n_k', \ldots} \hat{L}(\xi_i) \psi_{n_1, \ldots, n_k, \ldots} \, d\xi_1 \ldots d\xi_N. \tag{99,11}$$

(По спиновым переменным имеется в виду суммирование.) Оператор $\hat{L}(\xi_i)$ действует только на переменные i-й частицы. Поэтому можно написать

$$\hat{L}(\xi_i)\psi_{n_1, \ldots, n_k, \ldots} = \left(\frac{n_1! \ldots n_k! \ldots}{N!}\right)^{1/2} \sum \psi_{k_1}(\xi_1) \ldots \psi_{k_N}(\xi_N) \hat{L}(\xi_i) \psi_{k_i}(\xi_i). \tag{99,12}$$

Умножая (99,12) на функцию $\psi^*_{n_1'\ldots}$ и интегрируя, мы замечаем прежде всего, что интегралы по всем переменным, кроме ξ_i, содержат только произведения волновых функций.

В силу ортогональности последних обратятся в нуль все интегралы, в которые входят множители вида $\psi_1^*(\xi_1)\psi_2(\xi_1)$, т. е. содержащие произведения волновых функций частиц (кроме i-й), относящихся к различным состояниям.

В двойной сумме по перестановкам (99,11) отличны от нуля лишь те слагаемые, которые содержат произведения волновых функций частиц (кроме i-й), относящихся к одинаковым состояниям. Интеграл по переменным ξ_i имеет вид

$$(\hat{L}(\xi_i))_{lk} = \int \psi_l^*(\xi_i)\hat{L}(\xi_i)\psi_k(\xi_i)\,d\xi_i.$$

Это означает, что при $l \neq k$, имеет место переход частицы из k-го состояния в l-е. Следовательно, число частиц в k-м состоянии уменьшается на единицу, а в l-м — увеличивается на единицу. Соответствующий матричный элемент обозначим через

$$(n_k - 1,\ n_l|\,\hat{L}(\xi_i)\,|n_k,\ n_l - 1) \tag{99,13}$$

(по остальным числам заполнения оператор диагонален и мы их не выписываем). Входящие в матричный элемент функции имеют вид

$$\psi^*_{n_1,\ \ldots,\ n_k-1,\ \ldots} = \left(\frac{n_1!\ldots(n_k-1)!\ldots n_l!\ldots}{N!}\right)^{1/2}\sum\psi^*_{k_1}(\xi_1)\ldots\psi^*_{k_N}(\xi_N),$$

$$\psi_{n_1,\ \ldots,\ n_l-1,\ \ldots} = \left(\frac{n_1!\ldots n_k!\ldots(n_l-1)!\ldots}{N!}\right)^{1/2}\sum\psi_{k_1}(\xi_1)\ldots\psi_{k_N}(\xi_N).$$

Интегрирование по координатам всех частиц в силу ортогональности волновых функций дает (учитывая перестановки $N-1$ частицы, кроме i-й)

$$(n_k - 1,\ n_l|\,\hat{L}(\xi_i)\,|n_k,\ n_l - 1) = \left(\frac{n_1!\ldots(n_k-1)!\ldots n_l!\ldots}{N!}\right)^{1/2}\times$$
$$\times\left(\frac{n_1!\ldots n_k!\ldots(n_l-1)!\ldots}{N!}\right)^{1/2}\frac{(N-1)!}{n_1!\ldots(n_k-1)!\ldots(n_l-1)!\ldots}(\hat{L}(\xi_i))_{lk} =$$
$$= \frac{\sqrt{n_k n_l}}{N}(\hat{L}(\xi_i))_{lk}.$$

Поскольку операторы $\hat{L}(\xi_1)$, $\hat{L}(\xi_2)$, ... отличаются друг от друга только номером частиц, на координаты которых они действуют, все матричные элементы, отличающиеся номером частицы, равны между собой. Поэтому для матричного элемента (99,10) оператора $\hat{L}_1$ можно написать окончательно:

$$(n_k - 1,\ n_l\,|\,\hat{L}_1\,|\,n_k,\ n_l - 1) = \left(n_k - 1,\ n_l \left| \sum_{i=1}^{N} \hat{L}(\xi_i) \right| n_k,\ n_l - 1\right) =$$
$$= N(n_k - 1,\ n_l\,|\,\hat{L}(\xi_i)\,|\,n_k,\ n_l - 1) = \sqrt{n_k n_l}\,(L(\xi))_{lk}. \qquad (99{,}14)$$

В том случае, когда рассматривается диагональный матричный элемент, т. е. когда распределение числа частиц по состояниям не изменяется, мы имеем аналогичным образом:

$$(n_1,\ n_2,\ \ldots\,|\,\hat{L}_1\,|\,n_1,\ n_2,\ \ldots) = \sum_k n_k\,(L(\xi))_{kk}. \qquad (99{,}15)$$

Введем теперь в формулы (99,14) и (99,15) операторы $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$. Тогда оператор $\hat{L}_1$ можно записать в виде

$$\hat{L}_1 = \sum_{k,\,l} (L(\xi))_{lk}\,\hat{a}_l^+ \hat{a}_k. \qquad (99{,}16)$$

Действительно, матричные элементы последнего оператора в силу (99,6), (99,7) и (99,8) совпадают с матричными элементами (99,14) и (99,15).

Аналогичный результат можно тем же способом получить для операторов, действующих на координаты двух частиц ξ_i и ξ_j.

Оператор

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

в представлении вторичного квантования выражается формулой

$$\hat{L}_2 = \sum_{k,\,p,\,l,\,m} (lm\,|\,\hat{L}(\xi,\ \xi')\,|\,kp)\,\hat{a}_l^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_k \hat{a}_p, \qquad (99{,}17)$$

где матричные элементы равны

$$(l,\ m\,|\,\hat{L}(\xi,\ \xi')\,|\,k,\ p) = \int \psi_l^*(\xi)\,\psi_m^*(\xi')\,\hat{L}(\xi, \xi')\,\psi_k(\xi)\,\psi_p(\xi')\,d\xi\,d\xi'. \qquad (99{,}18)$$

С помощью общих формул (99,16) и (99,17) можно записать оператор Гамильтона системы частиц в представлении вторичного квантования. В случае системы невзаимодействующих частиц, находящихся в заданном внешнем поле, имеем

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i = \sum_{i=1}^{N} (\hat{T}_i + U(\xi_i)) = \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(\xi_i)\right), \qquad (99{,}19)$$

где $U(\xi_i)$ — потенциальная энергия i-й частицы во внешнем поле и $\hat{T}_i$ — оператор ее кинетической энергии. Оператор (99,19) является, очевидно, частным случаем оператора $\hat{L}_1$. Соответственно этому, можем сразу написать оператор (99,19) в представлении вторичного квантования

$$\hat{H} = \sum_{k,l} (\hat{H}_i)_{lk} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k. \qquad (99{,}20)$$

Выбирая за ψ_k собственные функции оператора Гамильтона $\hat{H}_i$ отдельной частицы, имеем:

$$(\hat{H}_i)_{lk} = \int \psi_l^*(\xi) \hat{H}_i(\xi) \psi_k(\xi)\, d\xi = E_k \delta_{lk},$$

где E_k — энергии частицы в k-м состоянии.

Поэтому окончательно

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k. \qquad (99{,}21)$$

Энергия системы частиц в силу (99,8) равна

$$E = \sum E_k n_k. \qquad (99{,}22)$$

Если за ψ_k выбрать собственные функции оператора $\hat{T}_i$, отвечающие собственным значениям ε_k, то (99,20) перепишется в виде

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \sum_{k,l} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k \int \psi_l^* U(\xi) \psi_k\, d\xi. \qquad (99{,}23)$$

В случае системы частиц, между которыми существует попарное взаимодействие, оператор энергии взаимодействия имеет вид

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(\xi_i, \xi_j).$$

Напишем, используя (99,17), оператор Гамильтона в представлении вторичного квантования

$$\hat{H} = \sum_{k,l} (\hat{H}_i)_{lk} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,p,l,m} (lm|\,W\,|kp)\, \hat{a}_l^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_k \hat{a}_p, \qquad (99{,}24)$$

или, беря за функции ψ_k собственные функции оператора $\hat{H}_i$,

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{k,p,l,m} (lm|\,W\,|kp)\, \hat{a}_l^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_k \hat{a}_p. \qquad (99{,}25)$$

Заметим, что попарное взаимодействие (последний член в формуле (99,24)) допускает наглядную интерпретацию. Взаимодействие можно трактовать как столкновение двух частиц, находящихся в p-м и k-м состояниях. После взаимодействия они переходят в l-е и m-е состояния.

Полезно заметить, что формула (99,20) может быть получена с помощью следующего формального приема: заменим в выражении для средней энергии (65,9) волновую функцию на оператор в пространстве чисел заполнения, определяемый как

$$\psi(\xi) \to \hat{\psi}(\xi) = \sum_k \hat{a}_k \psi_k(\xi) \tag{99,26}$$

и соответственно

$$\psi^*(\xi) \to \psi^+(\xi) = \sum_l \hat{a}_l^+ \psi_l^*(\xi). \tag{99,26'}$$

Тогда в правой части (65,9) имеем

$$\int \psi^*(\xi) \hat{H}_i \psi(\xi) d\xi \to \sum_{k,\,l} \int \hat{a}_l^+ \psi_l^*(\xi) \hat{H}_i \hat{a}_k \psi_k(\xi) d\xi = \sum_{k,\,l} \hat{a}_l^+ \hat{a}_k (\hat{H}_i)_{lk}. \tag{99,27}$$

Сравнивая (99,27) с (99,20), мы видим, что при замене обычной волновой функции на оператор, правая часть (65,9) совпадает с (99,20). Это означает, что при этом можно формально заменить $\overline{H}$ на оператор $\hat{H}$ в представлении вторичного квантования.

С заменой волновой функции ψ оператором $\hat{\psi}$ связано и название метода вторичного квантования. При вторичном квантовании не только все механические величины заменяются квантовыми операторами (обычное квантование), но и квантуется, т. е. заменяется на оператор сама волновая функция. Хотя вторичное квантование является формальным приемом, оно оказывается весьма полезным в целом ряде случаев.

Аналогичным образом легко получить и гамильтониан системы попарно взаимодействующих частиц. Для этого в формуле (65,8) снова заменим функции ψ и ψ^* на операторы (99,26). При этом, в соответствии со сказанным выше, заменяем $\overline{H} \to \hat{H}$, где $\hat{H}$ — оператор Гамильтона в представлении вторичного квантования.

После замены получаем формулу (99,24).

Все полученные результаты относились к бозе-частицам. Можно показать[1]), что формулы (99,20) и (99,24) остаются справедливыми и для системы фермионов. Однако операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ при этом уже не могут удовлетворять соотношениям (99,9). Действительно, для операторов $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$, определенных формулами (99,9), собственные значения произведения $\hat{a}_k^+ \hat{a}_k$ равны произвольным положительным целым числам n_k. Для системы фермионов числа заполнения могут равняться лишь нулю и единице в соответствии с принципом Паули. Операторы $\hat{a}_k$

[1]) См. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 273.

и $\hat{a}_k^+$ должны теперь быть определены так, чтобы собственные значения оператора $\hat{a}_k^+\hat{a}_k$ равнялись нулю либо единице, т. е.

$$\left(\hat{a}_k^+\hat{a}_k\right)_{n_k n_k} = n_k = \begin{cases} 0 \\ 1. \end{cases} \tag{99,28}$$

Покажем, что условия (99,28) выполняются, если операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ удовлетворяют следующим правилам антикоммутации:

$$\hat{a}_k\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l^+\hat{a}_k = \delta_{kl}, \tag{99,29}$$

$$\hat{a}_k\hat{a}_l + \hat{a}_l\hat{a}_k = \hat{a}_k^+\hat{a}_l^+ + \hat{a}_l^+\hat{a}_k^+ = 0. \tag{99,30}$$

Для этого убедимся, что

$$(\hat{a}_k^+\hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^+\hat{a}_k. \tag{99,31}$$

Действительно, раскрываем левую часть и, пользуясь (99,29), получаем:

$$(\hat{a}_k^+\hat{a}_k)^2 = \hat{a}_k^+\hat{a}_k\hat{a}_k^+\hat{a}_k = \hat{a}_k^+\hat{a}_k\left(1 - \hat{a}_k\hat{a}_k^+\right) = \hat{a}_k^+\hat{a}_k - \hat{a}_k^+\hat{a}_k\hat{a}_k\hat{a}_k^+ = \hat{a}_k^+\hat{a}_k,$$

так как $\hat{a}_k^2 = 0$, что следует из (99,30).

Взяв диагональные матричные элементы от соотношения (99,31), находим:

$$n_k^2 = n_k.$$

Это равенство может выполняться лишь при $n_k = 0$ и $n_k = 1$. Основываясь на соотношениях (99,30), можно найти явный вид матриц $\hat{a}_k$. Поскольку числа n_k принимают только два значения 0 и 1, то операторы $\hat{a}_k$ и $\hat{a}_k^+$ по этим переменным являются двухрядными матрицами. Приведем соответствующие матричные элементы без вывода. Они равны

$$(a_k)_{01} = (a_k^+)_{10} = \prod_{l=1}^{k-1}(1 - 2n_l). \tag{99,32}$$

Все остальные матричные элементы равны нулю. В результате перемножения величин $(1 - 2n_l)$, где $l = 1, 2, \ldots, k-1$, получается либо $(+1)$ либо (-1) в зависимости от значения чисел заполнения состояний, предшествующих данному.

Ясно поэтому, что нумерация состояний $1, 2, \ldots, k$, будучи первоначально выбранной, не должна изменяться.

Уравнение Шредингера в представлении чисел заполнения, когда гамильтониан дается формулой (99,24), содержит в себе закон сохранения полного числа частиц (см. § 7). Однако введение операторов $\hat{a}_k^+$ и $\hat{a}_k$, описывающих поглощение и рождение частиц, позволяет при соответствующем обобщении исследовать и процессы, в которых число частиц данного сорта не сохраняется.