Лекция 35. Метод вторичного квантования

При вычислении средних значений или вероятностей переходов квантовых

остоящих из большого количества частиц, приходится вычислять
систем, с
квантовомеханические средние или матричные элементы)
интегралы вида (

$$\int dx_1 dx_2 ... \quad \Psi_i^*(x_1, x_2, ...)\hat{V}(x_1, x_2, ...)\Psi_f(x_1, x_2, ...) \qquad (1)$$

где $\hat{V}(x_1, x_2, ...)$ -
оператор какой-либо физической величины, относящийся
действующий на функции
к рассматриваемой многочастичной системе и
$\Psi_{i,f}(x_1, x_2, ...)$ -
координат всех частиц системы, волновые функции

стационарных состояний системы. Удобным методом вычисления интегралов

типа (1) для систем тождественных частиц является метод вторичного
сновная идея метода заключается в следующем.
квантования. О

Лекция 35 (2 слайд)

Рассмотрим квантовую систему, состоящую из большого числа тождественных

имодействующих частиц, движущихся в некотором внешнем поле $U(x)$.

невза

Гамильтониан такой системы имеет вид

$$\hat{H}(x_1, x_2, \ldots) = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_a \frac{d^2}{dx_a{}^2} + \sum_a U(x_a) = \sum_a \hat{h}(x_a) \qquad (2)$$

где индекс a $\hat{h}(x_a)$

нумерует частицы; гамильтониан принято называть

ационарное уравнение Шредингера с гамильтонианом (2)

одночастичным. Ст

допускает разделение переменных и легко решается, если известны собственные

E_i ψ_i стичного гамильтониана $h(x_a)$.

значения и собственные функции одноча

едения

Собственными функциями гамильтониана (2) являются произв

$\psi_k(x)$ $\hat{h}(x_a)$

собственных функций одночастичного гамильтониана

$$\Psi_{k_1, k_2, \ldots}(x_1, x_2, \ldots) = \psi_{k_1}(x_1)\psi_{k_2}(x_2)\ldots \qquad (3)$$

Лекция 35 (3 слайд)

а также функции, отличающиеся от (3) перестановками аргументов и их

йные комбинации, а собственными значениями – суммы
произвольные лине

соответствующих собственных значений

$$\varepsilon_{k_1 k_2 \ldots} = E_{k_1} + E_{k_2} + \ldots \qquad (4)$$

Здесь индексы k_i
представляют собой набор квантовых чисел состояний
стемах тождественных бозонов допустимыми
одной частицы. В си
инации функций вида (3), в
являются только симметричные линейные комб

системах фермионов - антисимметричные. Для бозонов квантовые числа k_i в

выражениях (3), (4) могут повторяться, для фермионов (согласно принципу

Паули) все квантовые числа k_i в выражениях (3), (4) различны. Об этой ситуации
рмионы находятся в различных одночастичных состояниях.
говорят, что все фе

Лекция 35 (4 слайд)

Очевидно, нужным образом симметризованная (для бозонов или фермионов)

линейная комбинация функций вида (3) определяет такое состояние системы,
в котором одна частица находится в состоянии с квантовыми числами k_1,
одна

-

k_2

в состоянии с квантовыми числами и т.д. Назовем число частиц, которые

k_i, ения этого

находятся в одночастичном состоянии числом заполн

n_{k_i}.

одночастичного состояния и обозначим Из-за антисимметричности волновых

функций в системах тождественных фермионов введенные числа заполнения

могут принимать только два значения 0 и 1, в системах - любые целые
аполнения однозначно

неотрицательные значения. Поскольку набор всех чисел з

$\Psi_{k_1,k_2,\ldots}(x_1,x_2,\ldots)$,

определяет собственную функцию то

$$\Psi_{k_1,k_2,\ldots}(x_1,x_2,\ldots) \rightarrow \Psi_{n_{k_1},n_{k_2},\ldots}(x_1,x_2,\ldots) \qquad (5)$$

Лекция 35 (5 слайд)

При этом сумма всех чисел заполнения $n_{k_1} + n_{k_2} + \ldots$ равна полному числу частиц в системе. По своему построению волновые функции (5) описывают такие состояния системы тождественных частиц, в которых числа заполнения одночастичных состояний имеют определенные значения. При этом, если взять суперпозицию состояний с разными числами заполнения, то такая функция будет описывать состояние, в котором с определенными вероятностями могут быть обнаружены числа заполнения, отвечающие состояниям-слагаемым. Перебирая все возможные значения чисел заполнения в (5), мы перечислим все собственные функции оператора Гамильтона для этой системы частиц, то есть построим полную систему функций в пространстве состояний данной системы частиц

Лекция 35 (6 слайд)

Рассмотрим теперь волновую функцию $\Psi(x_1, x_2, ...)$ произвольного состояния.

Так как функции (5) для всех возможных значений чисел заполнения $n_1, n_2, ..., n_i, ...$ образуют полную систему, то функция $\Psi(x_1, x_2, ...)$ может быть разложена в ряд по этой системе

$$\Psi(x_1, x_2, ...) = \sum_{n_1, n_2, ...} C(n_1, n_2, ...)\Psi_{n_1, n_2, ...}(x_1, x_2, ...) \qquad (6)$$

где $C(n_1, n_2, ...)$ - коэффициенты разложения. Поскольку функции $\Psi_{n_1, n_2, ...}(x_1, x_2, ...)$ описывают состояния с определенными значениями чисел заполнения, то квадрат модуля коэффициента $C(n_1, n_2, ...)$ определяет вероятность того, что в состоянии $\Psi(x_1, x_2, ...)$ числа заполнения состояний 1, 2, ... равны соо тветственно $n_1, n_2, ...$ Поэтому функция $C(n_1, n_2, ...)$ представляет собой волновую функцию квантовой системы в представлении чисел заполнения

Лекция 35 (7 слайд)

Аргументами функции являются целые неотрицательные числа: первым

очастичного состояния 1, которое может

аргументом – число заполнения одн

$n_1 = 0,1,2,...,$

аполнения одночастичного

принимать значения вторым – число з

$n_2 = 0,1,2,...$

состояния 2, которое может принимать значения и т.д.

Другими словами, аргументами вторичноквантованных волновых функций являются дискретные переменные $n_1, n_2, ...$). $\Psi(x_1, x_2, ...)$

Если функция

совпадает с одной из собственных функций гамильтониана, то есть описывает

аполнения, то в сумме (6)

состояние с определенными значениями чисел з

представлено только одно слагаемое с единичным коэффициентом, и,

следовательно, в пространстве чисел заполнения такому состоянию отвечает

$C(n_1, n_2, ...),$

функция равная единице только для одного набора аргументов

$n_1, n_2, ...,$

и равная нулю для всех остальных значений аргументов

Лекция 35 (8 слайд)

Для построения операторов физических величин в представлении чисел заполнения

одятся специальные операторы $\hat{a}_i$ $\hat{a}_i^+$,

вв и действующие на вторичноквантованные

кции. Для бозонов оператор $\hat{a}_i$

волновые фун определяется следующим образом:

$$\hat{a}_i \Psi_{n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots} = \sqrt{n_i}\, \Psi_{n_1, n_2, \ldots, n_i - 1, \ldots} \qquad (10)$$

Другими словами, что при действии оператора $\hat{a}_i$

на волновую функцию состояния

еленными значениями чисел заполнения получается также состояние с

с опред

ениями чисел заполнения, в котором, однако, число

определенными знач

заполнения

i -

го одночастичного состояния меньше на единицу; числа заполнения других

$\hat{a}_i$

одночастичных состояний не меняются. Поэтому оператор называется

оператором уничтожения частицы в i -

ом одночастичном состоянии

Лекция 35 (9 слайд)

Введенные операторы $\hat{a}_i$ (10) не являются эрмитовыми. Легко проверить, что оператор $\hat{a}_i^+$, эрмитово сопряженный оператору $\hat{a}_i$, должен на состояния с определенными значениями чисел заполнения одночастичных состояний действовать так

$$\hat{a}_i^+ \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} = \sqrt{n_i + 1}\,\Psi_{n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots} \qquad (11)$$

Это значит, что оператор $\hat{a}_i^+$ увеличивает число заполнения одночастичного состояния i на единицу. Поэтому оператор $\hat{a}_i^+$ называется оператором рождения частицы в одночастичном состоянии i. Для этих операторов справедливы коммутационные соотношения

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j\right] = 0 \qquad \left[\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\right] = 0 \qquad \left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\right] = \delta_{ij}$$

Лекция 35 (10 слайд)

Для фермионов операторы рождения и уничтожения определяются формулами, аналогичными (10), (11), в которые вводятся определенные фазовые множители (с помощью этих множителей учитывается антисимметрия волновой функции системы тождественных фермионов). При этом фермионные операторы рождения и уничтожения удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям

$$\hat{a}_i\hat{a}_j + \hat{a}_j\hat{a}_i = 0 \qquad \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ + \hat{a}_j^+\hat{a}_i^+ = 0 \qquad \hat{a}_i\hat{a}_j^+ + \hat{a}_j^+\hat{a}_i = \delta_{ij}$$

То есть для фермионных операторов перестановочные соотношения

–

антикоммутационные