1.7. Вторичное квантование

Одночастичный базис.
Многочастичный базис.
Операторы физических величин

Одночастичный базис

- Вакуумная волновая функция, обозначающая состояние, не содержащее *ни одной* частиц $|0\rangle$
- В качестве одночастичных состояний можно выбрать, например, плоские волны, образующие полный набор:

$$|k\rangle = e^{ikx}$$

- В формализме чисел заполнения такие состояния будут представлены следующим образом:

$$|k\rangle \equiv a_k^+|0\rangle$$

- Оператор рождения *по определению* рождает частицу в одночастичном состоянии, описываемом плоской волной с волновым вектором k
- Ортонормированность одночастичного базиса:

$$\langle 0|a_k a_{k'}^+|0\rangle = \delta_{kk'}$$

Многочастичный базис

- Двухчастичное состояние:

$$|k',k''\rangle \to a^+_{k'}a^+_{k''}|0\rangle$$

- *То же самое* физическое состояние:

$$|k'',k'\rangle \to a^+_{k''}a^+_{k'}|0\rangle$$

- Возможны только два вида коммутационных соотношений:

$$a^+_{k''}a^+_{k'} = +a^+_{k'}a^+_{k''};$$

$$a^+_{k''}a^+_{k'} = -a^+_{k'}a^+_{k''}$$

- Возможна либо коммутация, либо антикоммутация операторов рождения. Частицы, операторы которых коммутируют, называются *бозонами*, частицы с антикоммутационными соотношениями – *фермионами*. *Все элементарные частицы разделены на эти два основных класса*

Многочастичный базис

- Принцип Паули – в одном и том же квантовом состоянии не могут находиться два фермиона:

$$a_{k'}^{+} a_{k'}^{+} = -a_{k'}^{+} a_{k'}^{+} \equiv 0$$

- <u>Связь между коммутацией операторов рождения и перестановкой частиц</u>. Рассмотрим движение двух частиц в системе их центра масс. Соотношения коммутации:

$$a_{K+q}^{+} a_{K-q}^{+} = \pm a_{K-q}^{+} a_{K+q}^{+}$$

- Пусть центр масс движется равномерно и описывается плоской волной; тогда волновая функция двух частиц представима в виде:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}, \vec{K}) = \Phi(\vec{K})\varphi(\vec{r}) = e^{2i\vec{K}\vec{r}} \sum_q g(q)\varphi_{\vec{K}}(q)$$

- С учетом ура

$$\sum_q g(q)\, a_{K+q}^{+} a_{K-q}^{+} |0\rangle = \pm \sum_q g(q) a_{K-q}^{+}\, a_{K+q}^{+} |0\rangle = \pm \sum_q g(-q) a_{K+q}^{+} a_{K-q}^{+} |0\rangle$$

- Волновая функция бозонов должна быть *симметричной* относительно перестановки частиц, а фермионная – *антисимметричной*

Многочастичный базис

- Правила коммутации:

$$a_{k'}^{+}a_{k''}^{+} \mp a_{k''}^{+}a_{k'}^{+} = 0;$$
$$a_{k'}a_{k''} \mp a_{k''}a_{k'} = 0;$$
$$a_{k'}a_{k''}^{+} \mp a_{k''}^{+}a_{k'} = \delta_{k'k''}$$

- Свойство, справедливое для бозонов:

$$\left\langle 0 \middle| (a_{k'})^n \left(a_{k'}^{+}\right)^n \middle| 0 \right\rangle = n!$$

- Рассмотрим систему из трех частиц с ферми-статистикой на шести узлах. Узельный базис в числах заполнения будет состоять из 20 функций:

$$\begin{gathered}
\Phi_1 = |000111\rangle; \quad \Phi_2 = |001011\rangle; \quad \Phi_3 = |001101\rangle; \\
\Phi_4 = |001110\rangle; \quad \Phi_5 = |010011\rangle; \quad \Phi_6 = |010101\rangle; \\
\Phi_7 = |010110\rangle; \quad \Phi_8 = |011001\rangle; \quad \Phi_9 = |011010\rangle; \\
\Phi_{10} = |011100\rangle; \quad \Phi_{11} = |100011\rangle; \quad \Phi_{12} = |100101\rangle; \\
\Phi_{13} = |100110\rangle; \quad \Phi_{14} = |101001\rangle; \quad \Phi_{15} = |101010\rangle; \\
\Phi_{16} = |101100\rangle; \quad \Phi_{17} = |110001\rangle; \quad \Phi_{18} = |110010\rangle; \\
\Phi_{19} = |110100\rangle; \quad \Phi_{20} = |111000\rangle
\end{gathered}$$

Многочастичный базис

- Узельные многочастичные функции являются ортонормированными, при этом понимается, *что скалярное произведение двух функций равно нулю, если состояние хотя бы одного узла в одной функции отличается от аналогичного состояния другой функции*
- Правила действия операторов физических величин на базисные волновые ф ности:

$$a_i|n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = \begin{cases} |n_1 n_2 \dots 0 \dots\rangle, & \text{если } n_i = 1, \\ 0, & \text{если } n_i = 0; \end{cases}$$

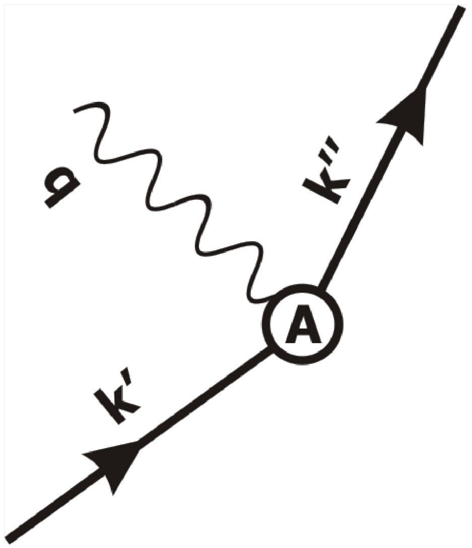
$$a_i^+|n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = \begin{cases} |n_1 n_2 \dots 1 \dots\rangle, & \text{если } n_i = 0, \\ 0, & \text{если } n_i = 1 \end{cases}$$

- Кроме указанных правил действия на волновые функции операторов рождения и уничтожения, необходимо также учесть антисимметрию волновых функций системы из ферми-частиц
- Антикоммутационные с

$$a_i a_j^+ + a_j^+ a_i = \delta_{ij};$$
$$a_i^+ a_j^+ + a_j^+ a_i^+ = 0;$$
$$a_i a_j + a_j a_i = 0$$

Операторы физических величин

- Оператор числа частиц:
$$n_i = a_i^{+} a_i$$
- Размерность базиса для системы из N_a узлов, $N_\uparrow$ частиц со спином вверх и $N_\downarrow$ частиц со спином вниз:
$$R = C_{N_a}^{N_\uparrow} C_{N_a}^{N_\downarrow}$$
- Операторы, действующие на одночастичные состояния:
$$A = \sum_{k',k''} \langle k''|A|k'\rangle a_{k''}^{+} a_{k'}$$
- Оператор импульса:
$$p = \sum_{k'k''} \left\langle k' \left| \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \right| k'' \right\rangle a_{k''}^{+} a_{k'} = \hbar \sum_{k} k a_k^{+} a_k$$
- Оператор импульса диагонален в базисе плоских волн



Операторы физических величин

- Оператор кинетической энергии:

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_k k^2 a_k^+ a_k$$

- Оператор числа частиц:

$$N = \sum_k a_k^+ a_k$$

- Частица во внешнем статическом кулоновском поле:

$$\frac{e^2}{r} = \sum_{k'k''}\left\langle k'\left|\frac{e^2}{r}\right|k''\right\rangle a_{k''}^+ a_{k'} = e^2 \sum_{k'k''}\left(\int d^3 r_1\, e^{-ik'r_1}\frac{1}{|r - r_1|}e^{-ik''r_1}\right) a_{k''}^+ a_{k'}.$$

$$\frac{e^2}{r} = \frac{1}{\Omega}\int \frac{4\pi e^2}{q^2} e^{iqr} d^3 q$$

- Если центр поля в начале координат:

$$\frac{e^2}{r} = \sum_{kq} V(q) a_k^+ a_{k+q}$$

Операторы физических величин

- Двухчастичные операторы:

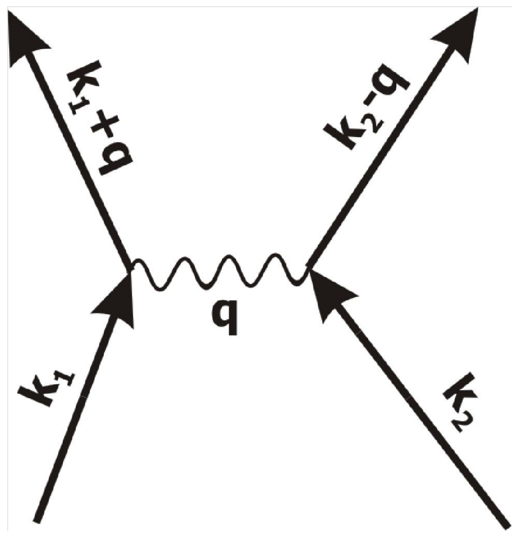
$$B = \frac{1}{2}\sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle k_4 k_3 | B | k_2 k_1 \rangle a^+_{k_4} a^+_{k_3} a_{k_2} a_{k_1}$$

- Межчастичное кулоновское взаимодействие:

$$\langle k_4 k_3 | V | k_2 k_1 \rangle = \int e^{-ik_4 r_1 - ik_3 r_2} \frac{e^2}{r} e^{ik_2 r_2 + ik_1 r_1} d^3 r_1 d^3 r_2$$

$$\langle k_4 k_3 | V | k_2 k_1 \rangle = \int d^3 q\, V(q) \int e^{i(k_1 - k_4 + q) r_1} d^3 r_1 e^{i(k_2 - k_3 - q) r_2} d^3 r_2 =$$

$$= \sum_q V(q) \delta_{k_1 - k_4, q} \delta_{k_2 - k_3, q}$$



- Окончательно:

$$\frac{e^2}{r_{12}} = \frac{1}{2}\sum_{k_1 k_2 q} V(q) a^+_{k_1+q} a^+_{k_2-q} a_{k_2} a_{k_1}$$

Операторы физических величин

- Межчастичное кулоновское взаимодействие:

$$\langle k_4 k_3 | V | k_2 k_1 \rangle = \int e^{-ik_4 r_1 - ik_3 r_2} \frac{e^2}{r} e^{ik_2 r_2 + ik_1 r_1} d^3 r_1 d^3 r_2$$

- Раскладывая взаимодействие в ряд Фурье аналогично одночастичному случаю, имеем:

$$\langle k_4 k_3 | V | k_2 k_1 \rangle = \int d^3 q \, V(q) \int e^{i(k_1 - k_4 + q) r_1} d^3 r_1 e^{i(k_2 - k_3 - q) r_2} d^3 r_2 =$$

$$= \sum_q V(q) \delta_{k_1 - k_4, q} \delta_{k_2 - k_3, q}$$

- Окончательно находим:

$$\frac{e^2}{r_{12}} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 q} V(q) a^+_{k_1 + q} a^+_{k_2 - q} a_{k_2} a_{k_1}$$