

Оглавление

Глава 1. Сложные (составные) системы	4
1.1. Состояния системы, состоящей из невзаимодействующих подсистем	4
1.2. Сложение моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана	5
1.3. Система связанных гармонических осцилляторов	11
Глава 2. Системы тождественных частиц	16
2.1. Симметрия относительно перестановок	16
2.2. Системы тождественных частиц	18
2.3. Волновая функция системы тождественных частиц	20
2.4. Связь N -частичных состояний с полным спином	23
2.5. Обменное взаимодействие	26
Глава 3. Представление чисел заполнения	29
3.1. Операторы рождения и уничтожения	29
3.2. Представление чисел заполнения	33
3.3. Операторы рождения и уничтожения в пространстве чисел заполнения	34
3.4. Представление основных операторов	38

Глава 1

Сложные (составные) системы

1.1. Состояния системы, состоящей из не взаимодействующих подсистем

Рассмотрим две не взаимодействующие системы (частицы) с моментами j_1 и j_2 . Тогда состояние первой системы определяется вектором $|n_1, j_1, m_1\rangle$, а состояние второй – $|n_2, j_2, m_2\rangle$. Здесь n_1 и n_2 обозначают остальные квантовые числа из полного набора физических величин. Состояние системы двух не взаимодействующих частиц определяется вектором

$$|n_1, j_1, m_1; n_2, j_2, m_2\rangle = |n_1, j_1, m_1\rangle |n_2, j_2, m_2\rangle \quad (1.1)$$

Очевидно, операторы, действующие на первую систему, не действуют на вторую и наоборот (соответственно они между собой коммутируют):

$$\hat{f}_1 |n_1, j_1, m_1\rangle = |\Phi_1\rangle \equiv \sum_{n'_1, j'_1, m'_1} \langle n'_1, j'_1, m'_1 | \hat{f}_1 |n_1, j_1, m_1\rangle |n'_1, j'_1, m'_1\rangle. \quad (1.2)$$

Аналогично и для второй системы:

$$\hat{f}_2 |n_2, j_2, m_2\rangle = |\Phi_2\rangle, \quad (1.3)$$

но

$$\hat{f}_1 |n_2, j_2, m_2\rangle = |n_2, j_2, m_2\rangle \hat{f}_1. \quad (1.4)$$

Поэтому имеем

$$\hat{f}_1 |n_1 j_1 m_1; n_2 j_2 m_2\rangle = |\Phi_1; n_2 j_2 m_2\rangle \equiv |\Phi_1\rangle |n_2, j_2, m_2\rangle, \quad (1.5)$$

$$\hat{f}_2 |n_1 j_1 m_1; n_2 j_2 m_2\rangle = |n_1 j_1 m_1; \Phi_2\rangle \equiv |n_1, j_1, m_1\rangle |\Phi_2\rangle. \quad (1.6)$$

Для оператора вида $\hat{f}_{12} = \hat{f}_1 \hat{f}_2$, согласно формуле (1.4) получаем:

$$\begin{aligned} \hat{f}_1 \hat{f}_2 |n_1, j_1, m_1; n_2, j_2, m_2\rangle &= \hat{f}_1 |n_1, j_1, m_1\rangle \hat{f}_2 |n_2, j_2, m_2\rangle = \\ &= |\Phi_1\rangle |\Phi_2\rangle \equiv |\Phi_1; \Phi_2\rangle. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Как видим, действие оператора $\hat{f}_1 \hat{f}_2$ на вектор состояния $|n_1, j_1, m_1; n_2, j_2, m_2\rangle = |n_1, j_1, m_1\rangle |n_2, j_2, m_2\rangle$ определяется согласно правилу прямого произведения. Действительно, пространство состояний всей системы имеет ранг, равный произведению рангов пространств состояний каждой системы. Количество базисных векторов равно произведению соответствующих чисел для каждой системы. Таким образом, вектор состояния всей системы есть прямое произведение векторов состояний каждой подсистемы. Соответственно и произведение операторов отличается от обычного (внутреннего) матричного произведения, поскольку это опять прямое произведение операторов. Обычно знак прямого произведения (или суммы) не выделяют особо, считая этот факт очевидным, однако об этом всегда нужно помнить. Иными словами, строже было бы записать определение (1.1) так:

$$|n_1, j_1, m_1; n_2, j_2, m_2\rangle = |n_1, j_1, m_1\rangle \otimes |n_2, j_2, m_2\rangle. \quad (1.8)$$

То же самое уточнение следует сделать и для произведения операторов.

1.2. Сложение моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана

Итак, будем сейчас рассматривать только состояния с определенным моментом и для простоты опустим набор остальных квантовых чисел (но они всегда есть!). Для изолированной замкнутой системы, каковой и представляется наша система двух невзаимодействующих частиц, E , \mathbf{P} , \mathbf{M} – интегралы движения. Поэтому в нашем случае должен сохраняться полный (суммарный) момент количества движения:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2; \quad \mathbf{M} \rightarrow \hbar \hat{\mathbf{J}}; \quad \mathbf{M}_{1,2} \rightarrow \hbar \hat{\mathbf{j}}_{1,2}. \quad (1.9)$$

Состояния системы описываются линейными комбинациями $(2j_1 + 1) \cdot (2j_2 + 1)$ независимых векторов $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$. Это есть

размерность пространства состояний системы двух частиц с моментами j_1 и j_2 . Наша задача состоит в том, чтобы описать состояния всей системы с полным моментом \mathbf{J} , образованным двумя независимыми моментами \mathbf{j}_1 и \mathbf{j}_2 , которые в свою очередь сами по себе в отдельности сохраняются, поскольку частицы между собой не взаимодействуют. Иными словами, мы здесь имеем интегралы движения $\mathbf{j}_1^2, \mathbf{j}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$, которые и должны быть включены в полный набор физических величин. Или, как принято говорить, задать представление, в котором описывается система с определенным суммарным моментом.

Легко показать, что операторы

$$\hat{J}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}; \quad \mathbf{J}^2 = \mathbf{j}_1^2 + \mathbf{j}_2^2 + 2(\mathbf{j}_1 \mathbf{j}_2)$$

между собой коммутируют, а остальные компоненты удовлетворяют известным коммутационным соотношениям для момента:

$$[\mathbf{J}^2, \hat{J}_z] = 0, \quad [\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] = i e_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_\gamma. \quad (1.10)$$

Соответственно

$$\left. \begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= J(J+1) |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{J}_z |j_1, j_2, J, M\rangle &= M |j_1, j_2, J, M\rangle \end{aligned} \right\}. \quad (1.11)$$

Прежде всего заметим, что по определению $J = \max\{M\} = j_1 + j_2$. Такое состояние одно:

$$\left. \begin{aligned} |J, J\rangle &= |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle, \\ |J, J-1\rangle &= |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \propto \hat{J}_- |J, J\rangle \end{aligned} \right\}. \quad (1.12)$$

Подействуем оператором J_- на состояние с максимальной проекцией

$$\begin{aligned} \hat{J}_- |J, J\rangle &= \sqrt{2J} |J, J-1\rangle = \\ &= \sqrt{2j_1} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned}$$

Получаем состояние с проекцией на 1 меньше:

$$|J, J-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \quad (1.13)$$

Легко видеть, что существует вторая линейно независимая (ортогональная к первой) линейная комбинация:

$$\begin{aligned} & |\tilde{J}, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\ & = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Поскольку это состояние не относится к состоянию с полным моментом $J = j_1 + j_2$, оно должно соответствовать состоянию с другим полным моментом. Так как максимальная проекция равна $j_1 + j_2 - 1$, по определению следует положить $\tilde{J} = j_1 + j_2 - 1$.

Действуя теперь понижающим оператором на состояния $|J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2 - 1\rangle$ и $|\tilde{J} = j_1 + j_2 - 1, \tilde{M} = j_1 + j_2 - 1\rangle$, получим два линейно независимых состояния, относящихся к соответствующим полным моментам. Однако, если $J - 1 \neq 0$ или $1/2$, наряду с получающимися векторами можно построить третий, линейно независимый, ортогональный к двум полученным вектор¹. Как и прежде, этот вектор должен быть отнесен к состоянию с полным моментом $J = j_1 + j_2 - 2$. Продолжая процедуру, видим, что новые линейно независимые векторы могут быть построены до тех пор, пока проекция не понизится до значения $M = |j_1 - j_2|$. Таким образом, получаем, что полный момент системы двух частиц с моментами j_1 и j_2 может принимать значения

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq (j_1 + j_2). \quad (1.15)$$

Это так называемое неравенство треугольника. Если $j_2 < j_1$, получается всего $2j_2 + 1$ различных значений, которые может принимать полный момент системы двух частиц. Полное же число состояний всей системы остается неизменным:

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{J=j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1). \quad (1.16)$$

Таким образом, пространство $(2j_1+1)(2j_2+1)$ состояний с базисными векторами $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ разбилось на $2j_2 + 1$ инвариантных

¹Это справедливо, если j_1 и $j_2 > 1/2$.

подпространства независимых состояний с базисными векторами соответственно:

$$|J = j_1 + j_2, j_1, j_2, M\rangle, \dots, |J = |j_1 - j_2|, j_1, j_2, M\rangle.$$

Этот результат можно представить в виде

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1+m_2=M} C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \quad (1.17)$$

Коэффициенты $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M}$ составляют матрицу, которая осуществляет необходимое разбиение пространства. Они называются коэффициентами Клебша–Гордана. Остановимся кратко на их свойствах.

Согласно общему правилу, коэффициенты разложения (1.17) определяются при помощи скалярного произведения на соответствующий сопряженный вектор:

$$C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} = \langle j_1, m_1 | \langle j_2, m_2 | |J, M\rangle. \quad (1.18)$$

Обратный переход от описания состояний системы в базисе $|j_1, j_2, J, M\rangle$ к описанию состояний в базисе $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ осуществляется с помощью обратной матрицы:

$$|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = \sum_{\substack{M = m_1 + m_2; \\ |j_1 - j_2| \leq J \leq |j_1 + j_2|}} (C^{-1})_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} |j_1, j_2, J, M\rangle, \quad (1.19)$$

которая также находится по определению

$$\begin{aligned} (C^{-1})_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} &= \langle j_1, j_2, J, M | j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = \\ &= \left(\langle j_2, m_2 | \langle j_1, m_1 | j_1, j_2, J, M\rangle \right)^*. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Можно показать, что коэффициенты Клебша–Гордана могут быть выбраны все действительными. Имея обратную матрицу (1.20), сразу получаем соотношения ортогональности:

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2; JM | j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \langle j_2, m_2 | \langle j_1, m_1 | j_1, j_2; J' M'\rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}, \quad (1.21)$$

и наоборот:

$$\sum_{J,M} \langle j_2 m_2 | \langle j_1 m_1 | j_1 j_2; JM \rangle \langle j_1 j_2; JM | j_1 m'_1 \rangle | j_2 m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (1.22)$$

Итак, $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M}$ – унимодулярная матрица ортогонального преобразования базиса.

Матрица коэффициентов Клебша–Гордана разбивает полное пространство $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ на инвариантные подпространства меньшего ранга, соответствующие данному значению полного момента.

В качестве примера построим состояния с определенным полным моментом $|l_1, l_2, L, M\rangle$ для случая $l_1 = l_2 = 1$.

В данном примере мы должны получить 9 состояний: 5 состояний с $L = 2$; 3 – с $L = 1$ и 1 – с $L = 0$. Прежде всего следует построить состояния с максимальным значением $L = 2$. Состояния с максимальной и минимальной проекциями мы знаем:

$$|1, 1, 2, \pm 2\rangle = |1, \pm 1\rangle |1, \pm 1\rangle.$$

Далее, согласно изложенной процедуре, получаем состояния с проекциями ± 1 :

$$|1, 1, 2, \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle |1, \pm 1\rangle + |1, \pm 1\rangle |1, 0\rangle).$$

Вновь, действуя понижающим оператором на состояние с $M = +1$, получим последнее из состояний с $L = 2$:

$$|1, 1, 2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|1, -1\rangle |1, +1\rangle + |1, +1\rangle |1, -1\rangle + 2|1, 0\rangle |1, 0\rangle).$$

Для построения состояний с моментом $L = 1$ воспользуемся соотношениями ортогональности для коэффициентов Клебша–Гордана (1.21) и (1.22). Вначале выпишем явный вид уже известных коэффициентов:

$$C_{1, \pm 1, 1, \pm 1}^{2, \pm 2} = 1, \quad C_{1, \pm 1, 1, 0}^{2, \pm 1} = C_{1, 0, 1, \pm 1}^{2, \pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$C_{1, \pm 1, 1, \mp 1}^{2, 0} = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad C_{1, 0, 1, 0}^{2, 0} = \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Теперь запишем соотношение ортогональности для $M' = M = +1$, $L' = 2$, $L = 1$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(C_{1,+1,1,0}^{1,+1} + C_{1,0,1,+1}^{1,+1} \right) = 0.$$

Для значений $M' = M = 1$ и $L' = L = 1$ соотношение ортогональности есть просто условие нормировки, и мы получаем

$$|1, 1, 1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, 0\rangle|1, +1\rangle - |1, +1\rangle|1, 0\rangle \right).$$

Вектор состояния $|1, 1, 1, -1\rangle$ определяется отсюда тривиально. Теперь применим понижающий оператор \widehat{L}_- к полученному состоянию:

$$|1, 1, 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1, -1\rangle|1, +1\rangle - |1, -1\rangle|1, +1\rangle \right).$$

Осталось построить последний вектор с $L = 0$. Вновь воспользуемся соотношениями ортогональности для состояний с $M' = M = 0$:

$$\begin{aligned} L' = 2, L = 0 &: \frac{1}{\sqrt{6}} \left(C_{1,+1,1,-1}^{0,0} + C_{1,-1,1,+1}^{0,0} \right) + \frac{2}{\sqrt{6}} C_{1,0,1,0}^{0,0} = 0; \\ L' = 1, L = 0 &: \frac{1}{\sqrt{2}} \left(C_{1,+1,1,-1}^{0,0} - C_{1,-1,1,+1}^{0,0} \right) = 0. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Решая уравнения (1.23) и используя условия нормировки, получаем

$$\begin{aligned} |1, 1, 0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|1, -1\rangle|1, +1\rangle + \right. \\ &\quad \left. + |1, -1\rangle|1, +1\rangle - |1, 0\rangle|1, 0\rangle \right). \end{aligned}$$

Очень часто вместо коэффициентов Клебша–Гордана удобно использовать их выражение через $3j$ -символы Вигнера, которые связаны соотношением

$$\begin{aligned} C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{J, M} &= \\ &= (-1)^{j_1 - j_2 + M} \sqrt{2J + 1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

$3j$ -символы обладают свойствами симметрии, некоторые из которых мы перечислим.

Симметрия по отношению к перестановке столбцов:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (1.25)$$

Симметрия по отношению к замене знака проекций:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

Сумма проекций равна нулю:

$$m_1 + m_2 + m_3 = 0. \quad (1.27)$$

Кроме перечисленных важных свойств, приведем очевидную, но очень полезную формулу:

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} \frac{1}{\sqrt{2j+1}}. \quad (1.28)$$

Более подробное изложение свойств $3j$ -символов можно найти в учебниках по квантовой механике или в специальной литературе, посвященной представлениям группы вращений (см., например, [?]-[?]).

1.3. Система связанных гармонических осцилляторов

Рассмотрим теперь, как можно описать систему с большим числом степеней свободы, путем сведения ее к совокупности невзаимодействующих подсистем. В классической механике такой переход осуществлялся путем введения *нормальных координат и импульсов*: в этом случае степени свободы оказывались независимыми. Данная процедура возможна всегда, когда гамильтониан системы представляется в виде положительно определенной квадратичной формы. В этом случае систему можно представить как N связанных одномерных гармонических осцилляторов, где N – число степеней свободы. Гамильтониан такой системы можно записать в виде

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\hat{P}_k^2}{2m_k} + \sum_{k,l} V_{kl} \hat{Q}_k \hat{Q}_l, \quad (1.29)$$

где \hat{Q}_k и \hat{P}_k – операторы обобщенных координат и импульсов, которые удовлетворяют известным коммутационным соотношениям:

$$[\hat{Q}_k, \hat{Q}_l] = [\hat{P}_k, \hat{P}_l] = 0, \quad [\hat{Q}_k, \hat{P}_l] = i\hbar\delta_{kl}, \quad (1.30)$$

а матрица связи действительна и симметрична: $V_{kl} = V_{lk}$.

Приведем гамильтониан (1.29) к более симметричному виду, сделав замену переменных

$$\hat{q}_k = \sqrt{m_k} \hat{Q}_k, \quad \hat{p}_k = \frac{1}{\sqrt{m_k}} \hat{P}_k \quad (1.31)$$

и введя переопределение

$$U_{kl} = \frac{2}{\sqrt{m_k m_l}} V_{kl},$$

тогда коммутационные соотношения останутся прежними (1.30), а гамильтониан примет вид²

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_k \hat{p}_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{k,l} U_{kl} \hat{q}_k \hat{q}_l. \quad (1.32)$$

Будем считать, что матрица U_{kl} невырождена и положительно определена, тогда ее можно диагонализировать. Диагонализация, по сути дела, означает переход к *нормальным координатам* \hat{q}_α . Пусть переход к нормальным координатам осуществляется с помощью ортогональной матрицы:

$$\hat{q}_\alpha = \sum_k C_{\alpha k} \hat{q}_k, \quad \hat{q}_k = \sum_\alpha C_{k\alpha} \hat{q}_\alpha, \quad (1.33)$$

где

$$\sum_k C_{\alpha k} C_{\beta k} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \sum_\alpha C_{\alpha k} C_{\alpha l} = \delta_{kl}.$$

Поскольку матрица $C_{\alpha k}$ диагонализует матрицу связи, можно записать³:

$$\sum_{k,l} C_{k\alpha} V_{kl} C_{l\beta} = \omega_\alpha^2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (1.34)$$

Следовательно,

$$\sum_{k,l} U_{kl} \hat{q}_k \hat{q}_l = \sum_{k,l} U_{kl} \sum_\alpha C_{k\alpha} \hat{q}_\alpha \sum_\beta C_{l\beta} \hat{q}_\beta = \sum_\alpha \omega_\alpha^2 \hat{q}_\alpha^2.$$

²Такая форма записи гамильтониана осцилляторов с единичными массами будут полезна при квантовании свободного электромагнитного поля в Главе ??.

³Матрица связи положительно определена!

Поскольку операторы координаты и импульса канонически сопряжены, нормальные компоненты импульса также определяются матрицей $C_{\alpha k}$:

$$\hat{p}_\alpha = \sum_k C_{\alpha k} \hat{p}_k, \quad \hat{p}_k = \sum_\alpha C_{k\alpha} \hat{p}_\alpha, \quad (1.35)$$

причем

$$[\hat{q}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar \delta_{\alpha\beta}. \quad (1.36)$$

Подставляя все введенные обозначения и определения в формулу (1.32), получаем гамильтониан в виде суммы гамильтонианов *несвязанных* осцилляторов:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_\alpha (\hat{p}_\alpha^2 + \omega_\alpha^2 \hat{q}_\alpha^2). \quad (1.37)$$

Таким образом, можно сделать вывод, что состояние системы связанных осцилляторов можно представить в виде *прямого* произведения состояний одномерных осцилляторов, соответствующих нормальным степеням свободы. Поскольку состояние одномерного осциллятора определяется только *одним квантовым числом* n , имеем

$$|\Psi\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \cdots \otimes |n_N\rangle \equiv \prod_{\alpha=1}^N \otimes |n_\alpha\rangle. \quad (1.38)$$

Здесь мы явно написали знак *прямого произведения*, поскольку пространство состояний N осцилляторов имеет размерность *произведения размерностей* пространств состояний одномерных осцилляторов. Очень часто знак прямого произведения \otimes опускают для простоты, считая это само собой разумеющимся, однако, по крайней мере, один раз все нужно написать в явном виде. Энергия системы осцилляторов равна сумме энергий. Соответственно, как и для одного одномерного осциллятора, удобно ввести повышающий и понижающий операторы:

$$\begin{aligned} \hat{a}_\alpha &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{\omega_\alpha}{\hbar}} \hat{q}_\alpha + \frac{i}{\sqrt{\hbar\omega_\alpha}} \hat{p}_\alpha \right), \\ \hat{a}_\alpha^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{\omega_\alpha}{\hbar}} \hat{q}_\alpha - \frac{i}{\sqrt{\hbar\omega_\alpha}} \hat{p}_\alpha \right), \end{aligned} \quad (1.39)$$

$$\hat{q}_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\alpha}} (\hat{a}_\alpha^+ + \hat{a}_\alpha), \quad \hat{p}_\alpha = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_\alpha}{2}} (\hat{a}_\alpha^+ - \hat{a}_\alpha). \quad (1.40)$$

Так введенные нами операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta] = [\hat{a}_\alpha^+, \hat{a}_\beta^+] = 0, \quad [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta}. \quad (1.41)$$

Учитывая определения операторов и их коммутационные соотношения (1.41), запишем гамильтониан (1.32) в виде

$$\hat{H} = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha \left(\hat{a}_\alpha^+ \hat{a}_\alpha + \frac{1}{2} \right). \quad (1.42)$$

Соответственно собственные состояния задаются совокупностью N чисел n_α и их можно записать как

$$|\Psi\rangle \equiv |n_1 n_2, \dots, n_N\rangle = \left[\prod_\alpha \frac{(a_\alpha^+)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} \right] |00 \dots 0\rangle, \quad (1.43)$$

а уровни энергии равны

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \sum_\alpha (n_\alpha + 1/2) \hbar\omega_\alpha. \quad (1.44)$$

Энергия основного состояния $|00 \dots 0\rangle$ равна $\sum_\alpha \hbar\omega_\alpha/2$ и для системы с бесконечным числом степеней свободы обращается в бесконечность. Поэтому обычно энергию системы переопределяют, отсчитывая от энергии основного состояния. В таком случае в формулах (1.42) и (1.44) $1/2$ в скобках исчезает.

В заключение параграфа, можно сказать, что система связанных осцилляторов может быть представлена как *ансамбль независимых осцилляторов*, а энергия системы равна сумме энергий всех независимых подсистем. При этом заметим, что если рассматривать только энергию системы (1.44), ее можно представить как сумму энергий

$$\mathcal{N} = \sum_\alpha n_\alpha$$

осцилляторов, из которых n_α описываются одинаковой частотой ω_α и находятся *на первом возбужденном уровне*. Теперь в нашем

описании получили, что все n_α осцилляторов *неразличимы*, и этот факт выражается множителем $\sqrt{n_\alpha!}$ в знаменателе формулы (1.44). Заметим, что $n_\alpha!$ – число перестановок одинаковых (тождественных) осцилляторов.

Глава 2

Системы тождественных частиц

2.1. Симметрия относительно перестановок

Частицы, которые обладают *всеми* одинаковыми физическими характеристиками в квантовой механике неразличимы и называются тождественными. Иными словами, тождественные частицы невозможно перенумеровать. Это – важное следствие соотношения неопределенностей в квантовой механике.

Рассмотрим две тождественные частицы, состояние которых описывается *двухчастичной волновой функцией*. Обычно в нерелятивистской физике спин частицы не рассматривают, если нет магнитных взаимодействий, однако при рассмотрении многочастичных задач спин начинает играть *принципиальную* роль. Действительно, полное описание состояния частицы задается не только в конфигурационном пространстве, но и состоянием дополнительных, “внутренних степеней свободы” – проекции спина на ось квантования. Очевидно, частицы, обладающие различными проекциями спина, находятся в различных состояниях. С другой стороны, неразличимость частиц может проявиться только в инвариантности *всех* свойств системы относительно перестановки (перемены) частиц местами, но частица при этом переносится вместе со своими внутренними степенями свободы, т.е. проекцией спина m_s . Поэтому, если мы хотим описать положение частицы, следует характеризовать ее как координатой в конфигурационном пространстве \mathbf{r} , так и “координатой” внутренних степеней свободы m_s . Таким образом, положение частицы в системе тождественных частиц обязательно должно определяться парой

$$\{\mathbf{r}, m_s\} \equiv x. \quad (2.1)$$

Соответственно волновая функция системы двух тождественных

частиц зависит от пары координат (2.1) и при перестановке частиц местами должна описывать физически то же самое состояние:

$$\widehat{P}\Psi(x_1, x_2; t) = \Psi(x_2, x_1; t), \quad (2.2)$$

где \widehat{P} – оператор перестановки двух частиц. Запишем формально гамильтониан системы двух нерелятивистских тождественных взаимодействующих частиц, находящихся во внешнем поле:

$$\widehat{H}(1, 2) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) + U(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.3)$$

Очевидно, гамильтониан (2.3) симметричен относительно перестановки двух частиц, поэтому коммутатор

$$[\widehat{P}, \widehat{H}(1, 2)] = 0, \quad (2.4)$$

а следовательно, волновая функция, удовлетворяющая уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, x_2; t) = \widehat{H}(1, 2)\Psi(x_1, x_2; t), \quad (2.5)$$

будет также собственной функцией оператора перестановки:

$$\widehat{P}\Psi(x_1, x_2; t) = \lambda\Psi(x_1, x_2; t). \quad (2.6)$$

Легко видеть, что собственные значения $\lambda = \pm 1$. Следовательно, волновая функция должна обладать определенной четностью относительно перестановки частиц, и это свойство есть *интеграл движения*.

Этот вывод вытекает из общих свойств уравнения Шредингера, точнее, из свойств математического аппарата, и никак не связан со спином частиц. Важно было только его наличие как такового. Однако, на самом деле, свойство симметрии волновой функции относительно перестановки тождественных частиц носит фундаментальный характер и однозначно связано со спином частицы. Это утверждение не следует из каких-либо общих принципов и принимается как *постулат*. Его можно сформулировать следующим образом.

Постулат о тождественных частицах. Тождественные частицы, обладающие *полуцелым* спином $(1/2, 3/2, 5/2, \dots)$, описываются только антисимметричными, а обладающие целым спином $(0, 1,$

2, ...) – только симметричными волновыми функциями относительно перестановки *любых* двух частиц.

Частицы с полуцелым спином называются *ферми-частицами* и подчиняются статистике Ферми–Дирака, а частицы с целым спином называются *бозе-частицами* и подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна. Иными словами:

$$\begin{aligned}\Psi(x_1, x_2; t) &= -\Psi(x_2, x_1; t) \text{ при } s = 1/2, 3/2, \dots \\ &\quad - \text{ ферми-частицы;} \\ \Psi(x_1, x_2; t) &= +\Psi(x_2, x_1; t) \text{ при } s = 0, 1, 2, \dots \\ &\quad - \text{ бозе-частицы.}\end{aligned}\tag{2.7}$$

Если в системе находится больше двух частиц, формулы (2.7) легко обобщаются:

$$\Psi(x_1 \dots x_i \dots x_k \dots; t) = \pm \Psi(x_1 \dots x_k \dots x_i \dots; t),\tag{2.8}$$

где верхний знак относится к бозе-, а нижний – к ферми-частицам.

2.2. Системы тождественных частиц

В параграфе 1.3 показано, что состояние системы с N степенями свободы может быть сведено к системе N независимых подсистем и может быть записано в виде прямого произведения соответствующего числа *одночастичных* состояний. Совершенно аналогично можно рассматривать N независимых различных частиц. Если мы условно пронумеруем все эти независимые различные частицы и в произведении, описывающем состояние всей системы место каждого сомножителя в прямом произведении будет соответствовать частице с данным номером, тогда такое N -частичное состояние будет записано в виде

$$|\psi\rangle_N = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \dots |\psi_N\rangle \equiv |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle.\tag{2.9}$$

Поскольку все одночастичные состояния определены в *своих одночастичных пространствах*, скалярное произведение двух N -частичных состояний есть

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= (\langle\varphi_1|\langle\varphi_2|\dots\langle\varphi_N|)(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle|\dots|\psi_N\rangle) = \\ &= \langle\varphi_1|\psi_1\rangle\langle\varphi_2|\psi_2\rangle \dots \langle\varphi_N|\psi_N\rangle.\end{aligned}\tag{2.10}$$

Волновая функция N -частичного состояния (2.10) может быть записана как

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) &= \\ &= \langle \mathbf{r}_1 | \langle \mathbf{r}_2 | \dots \langle \mathbf{r}_N | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_2) \dots \psi(\mathbf{r}_N). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Волновая функция (2.11) не обладает никакой симметрией относительно перестановки частиц, поскольку они в данном случае все различимы.

Систему N независимых тождественных частиц также можно описать на языке *одночастичных* состояний, однако в силу неразличимости частиц мы теперь не можем пронумеровать их, а можем только констатировать факт, что в данном N -частичном состоянии представлены N , вообще говоря различных, одночастичных состояний. Сохраняя теперь вместо нумерации частиц нумерацию *состояний*, мы должны полностью симметризовать или антисимметризовать N -частичное состояние тождественных частиц. Поскольку симметричными состояниями описываются *бозе-частицы*, а антисимметричными – *ферми-частицы*, введем параметр ζ , который принимает значения

$$\zeta = \begin{cases} +1 & \text{для бозе-частиц,} \\ -1 & \text{для ферми-частиц.} \end{cases} \quad (2.12)$$

Для тождественных частиц имеет место свойство

$$|\psi_1, \dots, \psi_i, \dots, \psi_k, \dots, \psi_N\rangle = \zeta |\psi_1, \dots, \psi_k, \dots, \psi_i, \dots, \psi_N\rangle. \quad (2.13)$$

Теперь состояние (2.13) можно выразить через одночастичные состояния, проведя *все возможные перестановки*:

$$|\psi_1, \psi_2 \dots \psi_N\rangle_\zeta = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \zeta^P |\psi_{P(1)}\rangle |\psi_{P(2)}\rangle \dots |\psi_{P(N)}\rangle, \quad (2.14)$$

где символ P означает все перестановки N аргументов. Нам нужно уметь переходить от векторного представления (2.14) к волновым функциям. Для этого следует определить скалярное произведение таких (анти)симметризованных выражений. Запишем вектор бра:

$$\zeta \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N | = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_Q \zeta^Q \langle \varphi_{Q(1)} | \langle \varphi_{Q(2)} | \dots \langle \varphi_{Q(N)} | \quad (2.15)$$

и найдем скалярное произведение его с вектором (2.14):

$$\begin{aligned}
& \zeta \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N \rangle_\zeta = \\
& = \frac{1}{N!} \sum_{Q,P} \zeta^Q \zeta^P \langle \varphi_{Q(1)} | \varphi_{Q(2)} \dots \langle \varphi_{Q(N)} | | \psi_{P(1)} | \psi_{P(2)} \dots | \psi_{P(N)} \rangle = \\
& = \frac{1}{N!} \sum_{Q,P} \zeta^Q \zeta^P \langle \varphi_{Q(1)} | \psi_{P(1)} \rangle \langle \varphi_{Q(2)} | \psi_{P(2)} \rangle \dots \langle \varphi_{Q(N)} | \psi_{P(N)} \rangle = \\
& = \frac{1}{N!} \sum_{PQ^{-1}, Q} \zeta^{PQ^{-1}} \langle \varphi_1 | \psi_{PQ^{-1}(1)} \rangle \langle \varphi_2 | \psi_{PQ^{-1}(2)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{PQ^{-1}(N)} \rangle.
\end{aligned}$$

Обозначая перестановку $PQ^{-1} = R$ и учитывая, что остающееся независимое суммирование $\sum_Q = N!$, получаем

$$\zeta \langle \varphi_1 \dots \varphi_N | \psi_1 \dots \psi_N \rangle_\zeta = \sum_R \zeta^R \langle \varphi_1 | \psi_{R(1)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{R(N)} \rangle. \quad (2.16)$$

Можно заметить, что для ферми-частиц сумма (2.16) представляет собой детерминант матрицы

$$-\langle \varphi_1, \dots, \varphi_N | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle_- = \det \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \psi_N \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle \varphi_N | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_N | \psi_N \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Легко видеть, что *никакие две ферми-частицы* не могут находиться в *одинаковом* состоянии.

Для бозе-частиц вместо детерминанта в выражении (2.16) стоит полностью симметричная сумма скалярных произведений, которая называется *перманентом*.

2.3. Волновая функция системы тождественных частиц

Нахождение волновой функции системы, состоящей из более чем двух взаимодействующих тождественных частиц, в квантовой механике так же невозможно, как и решение многочастичной задачи в классической механике. Однако квантовая механика по своему смыслу находится в более “выгодном” положении. Действительно,

даже для одночастичной задачи было весьма проблематичным нахождение волновой функции (определение состояния). Благодаря принципу суперпозиции эту проблему удалось обойти, представив произвольное состояние системы в виде суперпозиции возможных состояний, в которых определены соответствующие характеристики (физические величины), которые при этом можно одновременно измерить. В частности, даже связанное состояние можно было описать в виде суперпозиции состояний с определенным импульсом, хотя частица обладает определенным импульсом только будучи свободной.

В многочастичном случае можно попытаться представить себе такую картину, когда нам удалось-таки найти точное решение уравнения Шредингера в виде функции многих переменных. Возникает вопрос: дает ли знание такой функции понятную физическую картину? С формальной стороны мы можем вычислить любую величину, а фактически нам нужны величины, которые непосредственно могут быть измерены. Макроскопический наблюдатель в любом случае будет представлять состояние системы многих частиц в виде совокупности состояний *каждой* частицы. В данном случае даже не принципиально, что все частицы неразличимы. Важно то, что система многих частиц описывается с позиций состояний отдельных частиц – одночастичных состояний. Строго говоря, одночастичные состояния могут быть определены только для невзаимодействующих частиц, т.е. когда переменные, относящиеся к разным частицам, разделяются. Совокупность таких одночастичных состояний может служить базисом для построения базиса многочастичных состояний.

Одночастичное состояние каждой частицы определяется полным набором величин, который в системе тождественных частиц одинаков (хотя конкретные значения квантовых чисел – состояния – конечно в общем случае различны). В таком случае одночастичное состояние можно описать с помощью одночастичной волновой функции, для которой в нерелятивистском случае спиновые и координатные переменные могут быть разделены:

$$|n, m_s\rangle \rightarrow \psi_n(x) \rightarrow \langle \mathbf{r} | n, m_s \rangle = \psi_n(\mathbf{r}) | m_s \rangle. \quad (2.18)$$

Здесь n обозначает полный набор физических величин за исключением проекции спина.

Пусть в формуле (2.13) одночастичные состояния определяются

векторами (2.18). Для того чтобы найти волновую функцию системы тождественных частиц необходимо спроектировать состояния (2.14) на пространство переменных (2.1), т.е. формула (2.15) определяет полностью симметризованный или антисимметризованный вектор, определяющий положение частиц в координатном и спиновом пространстве (в пространстве переменных (2.1)): $\langle \varphi_k | = \langle x_k | = \langle \mathbf{r}_k; m_{s_k} |$. Соответственно в формуле (2.16) в произведении будут стоять *одночастичные волновые функции*

$$\langle \varphi_k | \psi_{R(i)} \rangle \rightarrow \langle x_k | \psi_{n_i} \rangle = \psi_{n_i}(x_k). \quad (2.19)$$

Таким образом, волновая функция системы N ферми-частиц, находящихся в состоянии с *определенным* набором одночастичных состояний, имеет вид

$$\begin{aligned} & \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}^{(-)}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_2}(x_1) & \dots & \psi_{n_N}(x_1) \\ \psi_{n_1}(x_2) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_N}(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_1}(x_N) & \psi_{n_2}(x_N) & \dots & \psi_{n_N}(x_N) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

где стоящий в знаменателе множитель $\sqrt{N!}$ обеспечивает нормировку волновой функции при условии, что все одночастичные волновые функции нормированы на 1. Волновая функция ферми-частиц в форме (2.20) называется *определителем Слеттера*.

Для системы бозе-частиц нужно составить полностью симметризованную по всем перестановкам сумму, которая иногда называется *перманентом*:

$$\begin{aligned} & \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}^{(+)}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\{P\}} \mathcal{P} \psi_{n_1}(x_{P_1}) \psi_{n_2}(x_{P_2}) \dots \psi_{n_N}(x_{P_N}), \end{aligned} \quad (2.21)$$

где суммирование ведется по всем перестановкам \mathcal{P} .

Функции вида (2.20) и (2.21) представляют собой N -частичный базис в одночастичном представлении. Произвольное состояние N тождественных (взаимодействующих) частиц согласно принципу

суперпозиции может быть записано в виде:

$$\begin{aligned} \Psi^{(\pm)}(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \\ &= \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_N\}} C_{n_1, n_2, \dots, n_N} \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}^{(\pm)}(x_1, x_2, \dots, x_N). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Здесь суммирование ведется по всем возможным наборам одночастичных состояний $\{n_1, n_2, \dots, n_N\}$. Естественно, обычно сумма (2.22) содержит бесконечное число членов. Легко видеть, что даже в базисных волновых функциях (2.20) и (2.21) спиновые и координатные переменные *не разделяются*, несмотря на то, что в одночастичных состояниях они разделены.

2.4. Связь N -частичных состояний с полным спином

Спиновые и координатные переменные в системе невзаимодействующих тождественных частиц могут быть в некотором смысле разделены, однако теперь базисные состояния будут характеризоваться определенным значением полного (суммарного) спина всей системы.

Вновь рассмотрим сначала для простоты систему двух тождественных частиц. Одночастичные состояния запишем в виде (2.18):

$$\psi_{n_1, 2}(x_{1, 2}) = \psi_{n_1, 2}(\mathbf{r}_{1, 2})|m_{1, 2}\rangle. \quad (2.23)$$

Базисные функции двухчастичных состояний запишутся как

$$\begin{aligned} \Psi_{n_1, n_2}^{(\pm)}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) |m_1\rangle |m_2\rangle \pm \right. \\ &\quad \left. \pm \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1) |m_2\rangle |m_1\rangle \right). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Поскольку в формуле (2.24) в общем случае $|m_1\rangle |m_2\rangle \neq |m_2\rangle |m_1\rangle$, спиновые и координатные переменные не разделяются, т.е. нельзя записать выражение в виде одного произведения $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |m_1, m_2\rangle$. Впрочем, это не очень удивительно, поскольку спиновое состояние вида $|m_1\rangle |m_2\rangle$ не характеризует систему как целую. Чтобы разобраться в этом, рассмотрим частные случаи.

Во-первых, для двух бозе-частиц со спином 0 никаких проблем не возникает, поскольку нет спиновых степеней свободы. Поэтому рассмотрим случай двух частиц с минимальным отличным от нуля спином $1/2$, т.е. двух ферми-частиц. Проекция спинов могут принимать два значения и соответственно два одночастичных спиновых состояния $|+\rangle$ и $|-\rangle$. Всего возможны 4 двухчастичных спиновых состояния:

$$|+\rangle|+\rangle, |+\rangle|-\rangle, |-\rangle|+\rangle, |-\rangle|-\rangle. \quad (2.25)$$

Для первого и последнего случаев спиновое состояние можно вынести из скобок формулы (2.24):

$$\Psi_{n_1, n_2}^{(-)}(x_1, x_2) = \Phi_{n_1, n_2}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|\pm\rangle|\pm\rangle, \quad (2.26)$$

где

$$\Phi_{n_1, n_2}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)). \quad (2.27)$$

При этом спиновые состояния в формуле (2.26) есть собственные состояния суммарного спина $S = 1$ с проекциями ± 1 :

$$|S = 1, M_S = \pm 1\rangle = |\pm\rangle|\pm\rangle.$$

Пусть теперь спиновые состояния различны, тогда имеем

$$\begin{aligned} \Psi_{n_1, n_2}^{(-)}(x_1, x_2) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2)|+\rangle|-\rangle - \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)|-\rangle|+\rangle), \end{aligned} \quad (2.28)$$

где спиновое состояние нельзя вынести за скобки. Заметим, однако, что как $|+\rangle|-\rangle$, так и $|-\rangle|+\rangle$ не описывают состояния с определенным суммарным спином двух частиц, но описывают состояния с суммарной проекцией спинов, равной 0. Состояния со спином $S = 1$ и $S = 0$ с проекциями 0 имеют вид

$$\begin{aligned} |S = 1, M_S = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle), \\ |S = 0, M_S = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Спиновые состояния в формуле (2.28) следует выразить через состояния с определенным полным спином (2.29):

$$|+\rangle|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle + |0, 0\rangle), \quad |-\rangle|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle - |0, 0\rangle). \quad (2.30)$$

Подставим теперь выражения (2.30) в формулу (2.28) и получим

$$\Psi_{n_1, n_2}^{(-)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Phi_{n_1, n_2}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|1, 0\rangle + \Phi_{n_1, n_2}^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|0, 0\rangle \right], \quad (2.31)$$

где

$$\Phi_{n_1, n_2}^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)). \quad (2.32)$$

Полученные результаты можно записать в виде единой формулы:

$$\Psi_{n_1, n_2}^{(-)}(x_1, x_2) = \sum_{S, M_S} C_{S, M_S} \Phi_{n_1, n_2}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|S, M_S\rangle. \quad (2.33)$$

Здесь

$$\Phi_{n_1, n_2}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) + (-1)^S \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)\psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)). \quad (2.34)$$

Легко получить самостоятельно, что формула (2.33) имеет место и для двух бозе-частиц:

$$\Psi_{n_1, n_2}^{(+)}(x_1, x_2) = \sum_{S, M_S} C_{S, M_S} \Phi_{n_1, n_2}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|S, M_S\rangle, \quad (2.35)$$

причем координатная двухчастичная функция определена по-прежнему формулой (2.34). Иными словами, формулы (2.33) и (2.35) имеют место соответственно для ферми- и бозе-частиц с *любым спином*.

Результаты, полученные для двух частиц, можно обобщить и на случай N тождественных частиц:

$$\begin{aligned} & \Psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}^{(\pm)}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \\ & = \sum_{S, M_S} C_{S, M_S} \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_N}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|S, M_S\rangle, \end{aligned} \quad (2.36)$$

однако в этом случае координатные и спиновые функции уже не имеют такого простого вида и могут быть получены, исходя из свойств группы перестановок в теории симметрии. Заметим только, что для системы ферми-частиц симметрии относительно перестановок частиц координатной и спиновой функций $|S, M_S\rangle$ должны быть противоположны, тогда как для бозе-частиц – одинаковы.

2.5. Обменное взаимодействие

Свойства тождественности частиц приводит к появлению чисто квантовых эффектов, связанных с так называемым *обменным взаимодействием*. Рассмотрим систему двух тождественных частиц, взаимодействие между которыми $\hat{V}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \hat{V}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$ не зависит от спина и может быть учтено как возмущение к гамильтониану

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2. \quad (2.37)$$

Уровни энергии невозмущенной системы двух частиц

$$E_{n_1 n_2}^{(0)} = E_{n_1} + E_{n_2} \quad (2.38)$$

для простоты будем считать вырожденными только по спиновым переменным $(2s+1)^2$ -кратно¹. Выберем в качестве *исходного базиса* состояния с определенным *суммарным спином* S :

$$\Psi^{(0)}(x_1, x_2) = \Phi_{n_1, n_2}^{(S)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |S, M_S\rangle. \quad (2.39)$$

Решение задачи по теории возмущений для вырожденного спектра сводится к вычислению матрицы возмущения:

$$\langle \Psi^{(0)} | V | \Psi^{(0)'} \rangle = \delta_{SS'} \delta_{M_S M_S'} \langle \Phi^{(S)} | V | \Phi^{(S')} \rangle. \quad (2.40)$$

Матрица возмущения оказывается диагональной по полному спину и его проекции и ее можно представить в виде

$$\langle \Phi^{(S)} | V | \Phi^{(S)} \rangle = I + (-1)^S J, \quad (2.41)$$

¹Это требование совсем необязательно, однако упрощает дальнейшее изложение, не конкретизируя тип частиц, невозмущенных систем и взаимодействия.

где

$$\begin{aligned} I &= \iint |\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{n_2}(\mathbf{r}_2)|^2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \iint |\psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{n_1}(\mathbf{r}_2)|^2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2; \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} J &= \iint \psi_{n_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \iint \psi_{n_2}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_1}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Итак, несмотря на независимость возмущения от спинов частиц, поправки к уровням энергии уже зависят от величины полного спина.

Обсудим физический смысл двух слагаемых, определяющих поправку к невозмущенному уровню энергии (2.38). Первое слагаемое есть просто энергия взаимодействия двух систем с плотностями распределения $\rho_{1,2}(\mathbf{r}) = |\psi_{n_{1,2}}(\mathbf{r})|^2$:

$$I = \iint \rho_{n_1}(\mathbf{r}_1) \rho_{n_2}(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (2.44)$$

В частности, если рассматривать электроны в атоме, взаимодействие между ними – кулоновское отталкивание, а $e|\psi_{n_{1,2}}(\mathbf{r})|^2 = \rho_{n_{1,2}}(\mathbf{r})$ – плотности распределения зарядов. Тогда

$$I_{\text{кулон}} = \iint \frac{\rho_1(\mathbf{r}_1) \rho_2(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (2.45)$$

есть просто известная формула классической электродинамики, определяющая энергию взаимодействия двух распределенных плотностей зарядов.

Второе слагаемое классического аналога не имеет, поскольку содержит “перекрестные” члены, возникающие из-за симметризации волновой функции относительно перестановки (обмена) частиц. Это так называемый *обменный интеграл*, который связан с *обменным взаимодействием*². Если ввести “обменную” плотность

²Поскольку рассматриваются, как правило заряженные частицы (чаще всего электроны), это взаимодействие еще часто называют кулоновским обменным или спин-обменным взаимодействием.

распределения $\rho_{\text{ex}}(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r})\psi_2^*(\mathbf{r})$, обменный интеграл можно записать в виде

$$J = \iint \rho_{\text{ex}}(\mathbf{r}_1)\rho_{\text{ex}}^*(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (2.46)$$

Видно, что расщепление уровня энергии для состояний с разными значениями суммарного спина S равно

$$\Delta E = E_{\text{чет}S} - E_{\text{нечет}S} = 2J. \quad (2.47)$$

Иногда, чтобы подчеркнуть зависимость энергетического спектра системы от обменного взаимодействия и соответственно спинов, вводят эффективное спин-обменное взаимодействие в виде оператора, описывающего формальное “взаимодействие” спинов:

$$\widehat{V}_{\text{ex}} = 2J\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2. \quad (2.48)$$

В этом случае “невозмущенный” уровень энергии равен

$$E_0 = E_{n_1} + E_{n_2} + I - J/2. \quad (2.49)$$

поправки к нему находятся простым вычислением среднего значения оператора (2.48) по состояниям с разными значениями полного спина. Если обменный интеграл положителен $J > 0$, основное состояние имеет нечетный суммарный спин. Например, для двух электронов основное состояние будет иметь $S = 1$. Положительный обменный интеграл приводит к явлению ферромагнетизма в твердых телах. Если обменный интеграл отрицателен $J < 0$, основное состояние имеет четный суммарный спин, например, для двух электронов $S = 0$. Обменное взаимодействие объясняет природу химической связи и диамагнетизм молекул.

Глава 3

Представление чисел заполнения

3.1. Операторы рождения и уничтожения

В предыдущей главе мы увидели, что описание систем тождественных частиц на языке волновых функций оказывается весьма громоздким. К сожалению, таких трудностей не удастся избежать в случае, когда для получения определенных результатов необходимо записать волновую функцию. Такая ситуация, в частности, имеет место в задачах квантовой химии. Однако в задачах статистической физики обычно не возникает необходимости использовать координатное представление состояний, более того, как мы увидим далее, координатное представление вообще не пригодно в задачах статистической физики. Для таких задач необходимо развить более адекватный формализм, в котором бы в явном виде учитывалась тождественность частиц и соответственно их принципиальная неразличимость. В параграфе 2.3 мы записали в общем случае состояние системы тождественных частиц с определенным набором одночастичных состояний в виде полностью симметризованного или антисимметризованного выражения (2.14). Для того чтобы продвинуться дальше, необходимо, следуя системе постулатов, определить действие различных операторов физических величин на такие состояния.

Напомним, что действие *любого оператора* на произвольный вектор состояния в общем случае приводит к изменению этого вектора. Для того чтобы построить оператор, выбирают некоторое *представление*, в котором оператор всегда можно записать в ви-

де матрицы. Вид матрицы определяется выбором базиса:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle, \\ \hat{f}|\psi\rangle &= \sum_{n,k} f_{kn} c_n |k\rangle. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь $f_{kn} = \langle k|\hat{f}|n\rangle$, и можно определить $\tilde{c}_k = \sum_n f_{kn} c_n$, тогда

$$\hat{f}|\psi\rangle \equiv |\varphi\rangle = \sum_k \tilde{c}_k |k\rangle.$$

На первый взгляд мы ничего нового не написали, а всего лишь занимались переобозначениями. Однако попробуем объяснить словами проведенные манипуляции. Как видно из формулы (3.1), действие оператора на состояние $|n\rangle$ в выбранном представлении сводится к тому, что оно “заменяется” на другое: $|k\rangle$. Эту замену формально также можно описать, введя *новые* операторы, позволяющие заменять одно состояние на другое. Проще всего такую операцию определить, разбив ее на два этапа: на первом этапе избавляемся от “старого” состояния, а на втором этапе вводим “новое”. Определим оператор, который позволяет избавляться от *существующего* состояния:

$$\hat{a}_n |n\rangle = |0\rangle, \quad (3.2)$$

где новый вектор $|0\rangle$ будет обозначать, что это состояние *пустое*. Теперь из этого пустого состояния необходимо получить другое. Для этого определим второй оператор, который создает искомое состояние:

$$\hat{a}_k^+ |0\rangle = |k\rangle. \quad (3.3)$$

Тогда состояние $|n\rangle$ переходит в состояние $|k\rangle$ простым действием:

$$|k\rangle = \hat{a}_k^+ \hat{a}_n |n\rangle.$$

Имея операторы \hat{a}_k^+ в количестве, равном числу состояний (вообще говоря, бесконечном), можно построить все состояния из одного “пустого”, а произвольный вектор состояния и оператор в фор-

муле (3.1) соответственно представить в виде

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n \hat{a}_n^+ |0\rangle,$$

$$\hat{f}|\psi\rangle = \sum_{n,k} c_n f_{kn} \hat{a}_k^+ \hat{a}_n |n\rangle \quad \text{или} \quad \hat{f} = \sum_{n,k} c_n f_{kn} \hat{a}_k^+ \hat{a}_n. \quad (3.4)$$

Как видим из полученной формулы (3.4), роль базисных векторов взяли на себя операторы \hat{a}_k^+ и единственный вектор $|0\rangle$. В обычном случае смысл введения новых операторов кажется весьма сомнительным, однако при описании систем тождественных частиц аппарат, использующий такие операторы, становится наиболее адекватным.

Определим оператор $\hat{a}^+(\varphi)$ таким образом, что при действии на любое N -частичное состояние он переводит его в $N+1$ -частичное следующим образом:

$$\hat{a}^+(\varphi)|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = |\varphi, \psi_1, \dots, \psi_N\rangle. \quad (3.5)$$

Оператор $\hat{a}^+(\varphi)$ называется *оператором рождения*. Введенный таким образом оператор неэрмитов, поскольку

$$(\hat{a}^+(\varphi)|\psi_1 \dots \psi_N\rangle)^+ = \langle \psi_1 \dots \psi_N | \hat{a}(\varphi) = \langle \varphi, \psi_1 \dots \psi_N |.$$

Сопряженный оператор $\hat{a}(\varphi)$ называется *оператором уничтожения*. Действительно, по определению

$$\langle \varphi, \psi_1 \dots \psi_N | \varphi, \psi_1 \dots \psi_N \rangle = \langle \psi_1 \dots \psi_N | \hat{a}(\varphi) \hat{a}^+(\varphi) | \psi_1 \dots \psi_N \rangle = |c|^2,$$

следовательно, вектор $\hat{a}(\varphi) \hat{a}^+(\varphi) | \psi_1 \dots \psi_N \rangle$ N -частичный, и, таким образом, оператор $\hat{a}(\varphi)$ переводит $(N+1)$ -частичное состояние в N -частичное, уничтожая одно состояние. Определим теперь действие оператора уничтожения на N -частичное состояние.

Вычислим матричный элемент

$$C(\varphi) = \langle \chi_1 \dots \chi_{N-1} | \hat{a}(\varphi) | \psi_1 \dots \psi_N \rangle =$$

$$= (\langle \psi_1 \dots \psi_N | \hat{a}^+(\varphi) | \chi_1 \dots \chi_{N-1} \rangle)^* = \langle \psi_1 \dots \psi_N | \varphi, \chi_1 \dots \chi_{N-1} \rangle^*.$$

Согласно определению скалярного произведения N -частичных состояний (2.16) получаем

$$C^*(\varphi) = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \psi_k | \varphi \rangle \langle \psi_1 \dots \psi_{k-1} \psi_{k+1} \dots \psi_N | \chi_1 \dots \chi_{N-1} \rangle.$$

Окончательно, учитывая произвольность $(N-1)$ -частичного состояния $\langle \chi_1 \dots \chi_{N-1} |$, имеем

$$\hat{a}(\varphi) |\psi_1 \dots \psi_N\rangle = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi | \psi_k \rangle |\psi_1 \dots \psi_{k-1}, \psi_{k+1} \dots \psi_N\rangle. \quad (3.6)$$

Определим теперь перестановочные соотношения для введенных операторов рождения и уничтожения. Легко видеть, что

$$\hat{a}^+(\varphi_1) \hat{a}^+(\varphi_2) = \zeta \hat{a}^+(\varphi_2) \hat{a}^+(\varphi_1). \quad (3.7)$$

Соответственно для операторов уничтожения также

$$\hat{a}(\varphi_1) \hat{a}(\varphi_2) = \zeta \hat{a}(\varphi_2) \hat{a}(\varphi_1).$$

Иными словами, операторы рождения и соответственно операторы уничтожения между собой коммутируют для бозе-частиц и антикоммутируют для ферми-частиц.

Получим теперь перестановочные соотношения между операторами рождения и уничтожения. Имеем

$$\begin{aligned} \hat{a}(\varphi_1) \hat{a}^+(\varphi_2) |\psi_1 \dots \psi_N\rangle &= \hat{a}(\varphi_1) |\varphi_2, \psi_1 \dots \psi_N\rangle = \\ &= \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle |\psi_1 \dots \psi_N\rangle + \sum_{k=1}^N \zeta^k \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle |\varphi_2, \psi_1 \dots \psi_{k-1}, \psi_{k+1} \dots \psi_N\rangle. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Действие операторов в обратном порядке дает

$$\begin{aligned} \hat{a}^+(\varphi_2) \hat{a}(\varphi_1) |\psi_1 \dots \psi_N\rangle &= \\ &= \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle \hat{a}^+(\varphi_2) |\psi_1 \dots \psi_{k-1}, \psi_{k+1} \dots \psi_N\rangle = \\ &= \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle |\varphi_2, \psi_1 \dots \psi_{k-1}, \psi_{k+1} \dots \psi_N\rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Умножим выражение (3.9) на ζ и вычтем его из (3.8). В результате получим

$$\hat{a}(\varphi_1) \hat{a}^+(\varphi_2) - \zeta \hat{a}^+(\varphi_2) \hat{a}(\varphi_1) = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle. \quad (3.10)$$

Если одночастичные состояния представляют собой ортонормированный базис $|\alpha\rangle$, коммутатор (3.10) принимает простой вид:

$$\hat{a}_\alpha \hat{a}_{\alpha'}^+ - \zeta \hat{a}_{\alpha'}^+ \hat{a}_\alpha = \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (3.11)$$

3.2. Представление чисел заполнения

Условимся, как нумеровать одночастичные состояния. Рассмотрим вначале бозе-частицы. Очевидно, для описания одночастичных состояний удобно выбрать *ортонормированный базис* $|\beta_i\rangle$, где β_i – полный набор квантовых чисел, необходимых для описания данных одночастичных состояний. Можно пронумеровать в порядке возрастания какой-либо величины, скажем, энергии. Тогда N -частичное состояние можно записать как $|\beta_1, \beta_2 \dots \beta_N\rangle$, где $\beta_1 \leq \beta_2 \dots \beta_N$ для бозе-частиц.

Обозначим полный набор квантовых чисел ферми-частиц α_i . Поскольку ферми-частицы не могут находиться в одинаковых состояниях $|\alpha_i\rangle$, следует оставить строгие неравенства в определении N -частичного состояния

$|\alpha_1, \alpha_2, \dots \alpha_N\rangle$ и $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N$. Полученное так N -частичное состояние для ферми-частиц нормировано, а для бозе-частиц не будет нормированным, если в $|\beta_i\rangle$ состоянии находится $n_i > 1$ частиц. Нормировка достигается делением на корень квадратный из соответствующего числа перестановок. Таким образом, можно записать:

$$\begin{aligned} & \frac{|\beta_1, \beta_2 \dots \beta_N\rangle}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}}; \beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_N \text{ для бозе-частиц,} & (3.12) \\ & |\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle; \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N \text{ для ферми-частиц.} \end{aligned}$$

Итак, совокупность состояний (3.12) составляет базис в пространстве N -частичных состояний соответственно бозе- и ферми-систем. Если мы рассматриваем системы с переменным числом частиц, пространство состояний таких систем должно быть *прямой суммой* пространств всех возможных N -частичных состояний:

$$|\Psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle \oplus |\psi^{(2)}\rangle \oplus \dots \oplus |\psi^{(N)}\rangle \oplus \dots = \sum_{N=1} \oplus |\psi^{(N)}\rangle. \quad (3.13)$$

Очевидно, *по определению* состояния с разным числом частиц определены в подпространствах, поэтому скалярное произведение векторов (3.13) как сумма скалярных произведений векторов в подпространствах с одинаковым числом частиц. Обычно вместо знака прямой суммы пишут знак обычного суммирования, полагая такое представление очевидным. Мы также для простоты в дальнейшем

будем писать вместо знака \oplus знак обычного суммирования, полагая, что это не приведет в дальнейшем к недоразумениям. Пространство состояний (3.13) называется *пространством Фока*.

Для системы тождественных частиц, по сути дела, *не имеет смысла* перечислять все одночастичные состояния, в которых находятся N частиц, тем более если мы рассматриваем состояние, которое представляется суперпозицией некоторых базисных состояний. Действительно, для системы ферми-частиц никакое одночастичное состояние *не может повториться*, поэтому есть смысл только указать, представлено ли данное одночастичное состояние или нет. Для системы бозе-частиц никаких ограничений на этот счет нет, поэтому нам нужно знать только *сколько частиц* находится в данном одночастичном состоянии. Иными словами, следует перейти от избыточно детального представления (2.14) и соответственно базиса (3.12) к представлению, в котором содержится информация только о том, представлено ли данное одночастичное состояние в рассматриваемом N частичном и сколько частиц в нем находится. Такое представление называется *представлением чисел заполнения*. Для построения данного представления следует рассмотреть случаи бозе- и ферми-частиц отдельно.

3.3. Операторы рождения и уничтожения в пространстве чисел заполнения

Бозе-частицы. Этот случай в некотором смысле проще, поэтому рассмотрим его первым. Как следует из вводных замечаний к этому параграфу, нужно ограничиться только рассмотрением базисных состояний (3.12). Для бозе-частиц запишем:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} |\underbrace{\beta_1 \dots \beta_1}_{n_1}, \underbrace{\beta_2 \dots \beta_2}_{n_2}, \dots\rangle. \quad (3.14)$$

Если предположить, что каждое n_β может принимать *любое* целое неотрицательное значение ($n_\beta = 0, 1, 2, \dots$), множество всех векторов (3.14) составляет базис в пространстве состояний (3.13). Для базисных ортонормированных одночастичных состояний операторы рождения и уничтожения удовлетворяют простым коммутационным соотношениям, которые в точности совпадают с коммутационными соотношениями для повышающих и понижающих

операторов системы связанных гармонических осцилляторов:

$$[a_\beta, a_{\beta'}] = [a_\beta^+, a_{\beta'}^+] = 0, \quad [a_\beta, a_{\beta'}^+] = \delta_{\beta\beta'}. \quad (3.15)$$

Заметим, что в физике очень часто возбужденные состояния можно описать как системы элементарных возбуждений – квазичастиц, которые описываются бозевскими или фермиевскими функциями. В общем случае коммутационные соотношения (3.15) следуют из свойств симметрии относительно перестановки частиц.

Подействуем оператором рождения на состояния (3.14):

$$\begin{aligned} a_\beta^+ |n_1, n_2, \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} |\underbrace{\beta_i, \beta_1, \dots}_{n_1}, \underbrace{\beta_2, \dots}_{n_2}, \dots, \underbrace{\beta_i, \dots}_{n_i}, \dots\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} |\beta_1, \dots, \beta_2, \dots, \underbrace{\beta_i, \dots}_{n_i+1}, \dots\rangle = \\ &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Теперь подействуем оператором уничтожения на состояния (3.14):

$$\begin{aligned} a_{\beta_i} |n_1, n_2, \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} a_{\beta_i} |\underbrace{\beta_1, \dots}_{n_1}, \underbrace{\beta_2, \dots}_{n_2}, \dots, \underbrace{\beta_i, \dots}_{n_i}, \dots\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} \sum_{\beta_i} |\underbrace{\beta_1, \dots}_{n_1}, \underbrace{\beta_2, \dots}_{n_2}, \dots, \underbrace{\beta_i, \dots}_{n_i-1}, \dots\rangle = \\ &= \frac{n_i}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots}} |\underbrace{\beta_1, \dots}_{n_1}, \underbrace{\beta_2, \dots}_{n_2}, \dots, \underbrace{\beta_i, \dots}_{n_i-1}, \dots\rangle = \\ &= \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Таким образом, для операторов рождения и уничтожения произвольного одночастичного состояния β имеем:

$$\begin{aligned} a_\beta^+ |n_1, n_2, \dots\rangle &= \sqrt{n_\beta + 1} |n_1, n_2, \dots, n_\beta + 1, \dots\rangle, \\ a_\beta |n_1, n_2, \dots\rangle &= \sqrt{n_\beta} |n_1, n_2, \dots, n_\beta - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Легко видеть, что эрмитов оператор

$$N_\beta = a_\beta^+ a_\beta \quad (3.19)$$

есть оператор числа частиц в данном одночастичном состоянии. Соответственно оператор полного числа частиц есть

$$\widehat{N} = \sum_{\beta} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta}. \quad (3.20)$$

Для **ферми-частиц** базисное состояние (3.12) можно записать как

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = |\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle, \quad \text{где } n_{\alpha} = 0, 1. \quad (3.21)$$

Операторы рождения и уничтожения для ферми-частиц удовлетворяют *антикоммутационным* соотношениям:

$$\{a_{\alpha}, a_{\alpha'}\} = \{a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\alpha'}^{\dagger}\} = 0, \quad \{a_{\alpha}, a_{\alpha'}^{\dagger}\} = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (3.22)$$

где

$$\{A, B\} = AB + BA \quad - \quad \text{антикоммутатор.}$$

Подействуем теперь операторами рождения и уничтожения на базисные состояния ферми-системы в представлении чисел заполнения:

$$\begin{aligned} a_{\alpha}^{\dagger} |n_1, n_2, \dots\rangle &= \begin{cases} 0, & \text{если } n_{\alpha} = 1, \\ |n_1, n_2, \dots, \underbrace{1}_{\alpha}, \dots\rangle, & \text{если } n_{\alpha} = 0, \end{cases} \\ a_{\alpha} |n_1, n_2, \dots\rangle &= \begin{cases} 0, & \text{если } n_{\alpha} = 0, \\ |n_1, n_2, \dots, \underbrace{0}_{\alpha}, \dots\rangle, & \text{если } n_{\alpha} = 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Легко видеть, то операторы числа частиц в одночастичном состоянии и соответственно полного числа частиц равны:

$$N_{\alpha} = a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}, \quad N = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}, \quad (3.24)$$

Из антикоммутационных соотношений (3.22) и определения (3.24) следует

$$a_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} = 1 - N_{\alpha}.$$

До сих пор мы рассматривали дискретные квантовые числа, между тем, с одной стороны, весьма часто базисные состояния могут определяться непрерывным спектром, а с другой стороны, часто состояния удобно описывать непрерывными волновыми

функциями. Заметим при этом, что состояния непрерывного спектра нормированы на δ -функцию. Например, пусть одночастичный базис определяет состояния с определенным значением импульса (свободные частицы) и $\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$, тогда коммутационные соотношения (3.11) переписываются следующим образом:

$$\hat{a}_{\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ - \zeta \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}'} = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}). \quad (3.25)$$

Можно также определить операторы рождения и уничтожения частицы в точке пространства \mathbf{r} . В этом случае принято вводить немного новое обозначение для полевого ψ -оператора, соответственно $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ и $\hat{\psi}(\mathbf{r})$, тогда

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) - \zeta \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (3.26)$$

Операторы рождения и уничтожения в определенном смысле эквивалентны состояниям, поэтому совершенно аналогично можно переходить от одного представления операторов к другому с помощью соответствующих матриц перехода. Например, переход от координатного к импульсному представлению осуществляется с помощью матрицы перехода, которая есть, по сути дела, волна де-Бройля, поэтому можно записать связь ¹:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}}, \\ \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}}^+. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Действительно, подействуем полевым оператором рождения $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ на некоторый (произвольный) вектор, в котором отсутствует описание частицы в точке \mathbf{r} :

$$\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) | \dots \rangle = | \mathbf{r}, \dots \rangle = | \mathbf{r} | \dots \rangle.$$

Если подействуем на это же состояние оператором рождения частицы с импульсом \mathbf{p} , получим

$$a_{\mathbf{p}}^+ | \dots \rangle = | \mathbf{p}, \dots \rangle = | \mathbf{p} | \dots \rangle.$$

Теперь перейдем от координатного к импульсному представлению:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) | \dots \rangle &= \int d\mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle | \dots \rangle = \int d\mathbf{p} \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle | \mathbf{p} \rangle | \dots \rangle = \\ &= \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}}^+ | \dots \rangle. \end{aligned}$$

¹ Иногда соотношения (3.27) определяют “несимметрично”, по отношению к обратному преобразованию, тогда знаменатель в подинтегральном выражении равен 1, а в формуле (3.28) равен $(2\pi\hbar)^3$.

В силу произвольности вектора состояния $|\dots\rangle$, получаем формулу (3.27).

Обратное преобразование имеет вид:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{p}} &= \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} \hat{\psi}(\mathbf{r}), \\ a_{\mathbf{p}}^+ &= \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{r}} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Соотношения (3.27) можно обобщить и на *любой другой*, в частности дискретный, базис. При этом легко видеть, что роль матрицы перехода будет играть соответствующая *волновая функция* дискретного одночастичного базиса $\varphi_n(\mathbf{r})$:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) a_n, \quad \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n^*(\mathbf{r}) a_n^+. \quad (3.29)$$

Соотношения (3.27) и (3.29) определяют операторы уничтожения и рождения частицы в точке \mathbf{r} , при описании ее состояний в соответствующих представлениях.

С помощью ψ -операторов можно записать оператор *плотности* числа частиц:

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (3.30)$$

и соответственно полное число частиц есть

$$N = \int d\mathbf{r} \hat{\rho}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (3.31)$$

3.4. Представление основных операторов

Получим теперь выражение основных операторов в представлении вторичного квантования. Основы для данного описания заложены в начале параграфа 3.1. Покажем, что *любой одночастичный* оператор \hat{f} можно записать в виде

$$\hat{f} = \sum_{n,k} f_{nk} |n\rangle \langle k|, \quad (3.32)$$

где $|n\rangle$ – одночастичный базис. Действительно, подействуем оператором (3.32) на произвольную одночастичную функцию:

$$\hat{f}|\psi\rangle = \sum_{n,k} f_{nk} |n\rangle \langle k|\psi\rangle = \sum_{n,k} f_{nk} c_k |n\rangle.$$

Получили выражение, совпадающее с формулой (3.1).

При описании *любой* многочастичной системы вводятся операторы, которые действуют только на состояние *одной* частицы, – *одночастичные операторы*; операторы, которые описывают взаимодействие двух частиц, – *двухчастичные операторы* и т.д. Очевидно, запись этих операторов в представлении вторичного квантования будет различной.

Определим действие одночастичных операторов на N -частичное состояние $|\psi\rangle_\zeta$. В линейной комбинации (2.14) одночастичный оператор может действовать только на одну частицу, а поскольку в системе тождественных частиц она может находиться в любом состоянии, одночастичный оператор должен подействовать на все одночастичные состояния, в которых может находиться частица.

Одночастичный оператор заменяет одно базисное состояние на другое с весом, равным соответствующему матричному элементу (3.32). Поэтому мы должны обобщить такой подход на симметризованное многочастичное базисное состояние. Пусть $|\varphi\rangle$ – одно из нормированных одночастичных базисных состояний. Определим действие оператора $a^+(\varphi_1)a(\varphi_2)$ на N -частичное состояние $|\psi\rangle_\zeta$:

$$\begin{aligned} a^+(\varphi_1)a(\varphi_2)|\psi\rangle_\zeta &= \\ &= \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi_2, \psi_k | \varphi_1, \psi_1 \dots \psi_{k-1}, \psi_{k+1} \dots \psi_N \rangle. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Заметим далее, что в формуле (3.33) можно поставить состояние $|\varphi_1\rangle$ на место состояния $|\psi_k\rangle$:

$$\begin{aligned} \zeta^{k-1} |\varphi_1, \psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle &= \\ = |\psi_1 \dots \psi_{k-1}, \varphi_1, \psi_{k+1} \dots \psi_N\rangle. \end{aligned}$$

Таким образом, *любой* одночастичный оператор можно представить в виде

$$\hat{f}^{(1)} = \sum_{m,n} f_{mn} a_m^+ a_n, \quad (3.34)$$

где $a_n \equiv a(\varphi_n)$.

Рассмотрим теперь представление операторов, описывающих взаимодействие двух частиц – *двухчастичное или парное взаимодействие*: $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$. Легко видеть, что сказанное об

одночастичном операторе аналогичным образом обобщается и на двухчастичный: здесь одновременно должны измениться два одночастичных состояния в N -частичном состоянии $|\psi\rangle_\zeta$. Пусть в качестве одночастичного базиса выбраны состояния с дискретным спектром так же, как и в формуле (3.32), тогда можно записать:

$$\widehat{V}^{(2)} = \frac{1}{2!} \sum_{m,m',n,n'} V_{mn,m'n'} a_m^+ a_n^+ a_{n'} a_{m'}, \quad (3.35)$$

где матричный элемент

$$V_{mn,m'n'} = \langle m, n | V | m', n' \rangle \equiv \langle m | \left(\langle n | \widehat{V} | n' \rangle \right) | m' \rangle,$$

а коэффициент перед знаком суммирования учитывает число перестановок одинаковых частиц.

Совершенно аналогично можно записать в представлении вторичного квантования любой оператор n -частичного взаимодействия, не забывая при этом число перестановок $n!$.