Многочастичная квантовая механика и вторичное квантование

Побойко Игорь

1 марта 2017

Постановка задачи

Рассмотрим типичную задачу многочастичной квантовой механики. Пусть имеются N частиц, координаты которых $\{\boldsymbol{x}_n\}_{n=1}^N$. Волновая функция, описывающая такую систему, является функцией N координат, и записывается как $\Psi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)$. Если, к примеру, при этом частицы находятся в некотором потенциале $V(\boldsymbol{x})$, и взаимодействуют парным образом согласно потенциалу $U(\mathbf{x})$, то Гамильтониан такой системы записывается следующим образом:

$$H = \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{\boldsymbol{p}_n^2}{2m} + U(\boldsymbol{x}_n) \right) + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} U(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}_m). \tag{1}$$

Тождественность частиц

Квантовая механика учит нас, что одинаковые частицы неразличимы. Это условие накладывает определённые ограничения на все возможные волновые функции: если частицы — *фермионы*, то полная волновая функция $\Psi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)$ должна быть антисимметрична по отношению перестановке пары произвольных координат; если же частицы — *бозоны*, то симметричной. Это условие можно записать следующим образом:

$$\begin{Bmatrix} \Psi^{(F)} \\ \Psi^{(B)} \end{Bmatrix} (\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N) \equiv \begin{Bmatrix} \mathrm{sign}\sigma \\ 1 \end{Bmatrix} \cdot \Psi(\boldsymbol{x}_{\sigma_1}, \boldsymbol{x}_{\sigma_2}, \ldots, \boldsymbol{x}_{\sigma_N}), \quad \forall \sigma \in S_N \tag{2}$$

(σ — произвольная перестановка N чисел; верхний вариант соответствует фермионам, а нижний — бозонам). Пространство всех волновых функций N частиц, обладающих нужными свойствами симметрии, мы будем обозначать $\mathcal{F}_N^{(B/F)}$, и называть *Фоковским пространством* N частиц (B для бозонов и F для фермионов; дальше верхний индекс мы будем опускать). Пространство $\mathcal{F}_1$ очевидным образом совпадает для бозонов и фермионов, и именно в нём мы обычно работаем.

Симметризация

Что же мы имеем в виду, когда говорим, что первая частица находится в состоянии $\psi_1(\mathbf{x})$, вторая — $\psi_2(\mathbf{x})$, и так далее (это могут быть, например, атомные орбитали, или плоские волны)? Если бы мы забыли о том, что частицы тождественны, то это бы означало, что полная волновая функция является попросту произведением одночастичных волновых функций: $\Psi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N) = \psi_1(\mathbf{x}_1) \ldots \psi_N(\mathbf{x}_N)$. Условие тождественности частиц в действительности означает, что это определение необходимо модифицировать, а именно — симметризовать. Симметризация происходит достаточно прямолинейно[1]:

$$\begin{Bmatrix} \Psi^{(F)} \\ \Psi^{(B)} \end{Bmatrix} (\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N) = \sum_{\sigma \in S_N} \begin{Bmatrix} \mathrm{sign}\sigma \\ 1 \end{Bmatrix} \psi_{\sigma_1}(\boldsymbol{x}_1) \ldots \psi_{\sigma_N}(\boldsymbol{x}_N) \tag{3}$$

Для фермионов такой объект носит название определителя Слэтера — действительно, несложно видеть, что

$$\Psi^{(F)}(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N) = \det \begin{pmatrix} \psi_1(\boldsymbol{x}_1) & \psi_1(\boldsymbol{x}_2) & \ldots & \psi_1(\boldsymbol{x}_N) \\ \psi_2(\boldsymbol{x}_1) & \psi_2(\boldsymbol{x}_2) & \ldots & \psi_2(\boldsymbol{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\boldsymbol{x}_1) & \psi_N(\boldsymbol{x}_2) & \ldots & \psi_N(\boldsymbol{x}_N) \end{pmatrix} \tag{4}$$

Работать с такими объектами уже достаточно сложно, ведь волновая функция содержит $N!$ слагаемых. Даже вычисление нормировки является достаточно неприятной задачей (особенно, если волновые функции не ортогональны). Тут мы постараемся построить язык, на котором с этими объектами окажется удобно работать — а именно, язык *вторичного квантования*.

[1] Будучи так записанной, волновая функция не нормирована

Построение базиса в $\mathcal{F}_N$

Пусть имеется произвольный ортонормированный одночастичный базис $\{\psi_\lambda(\boldsymbol{x})\}$ (базис в $\mathcal{F}_1$). Пусть $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$ — какой-то набор из N базисных состояний (при этом, вообще говоря, какие-то из λ_n могут встречаться по несколько раз, а какие-то — не встречаться вовсе). Обозначим за $|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle$ нормированную симметричную (или антисимметричную, если мы имеем дело с фермионами) комбинацию базисных волновых функций. В координатном представлении, оно имеет вид:

$$\langle \boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_N | \lambda_1, \dots, \lambda_N \rangle \underset{def}{\equiv} \begin{Bmatrix} \Psi^{(F)}_{\lambda_1 \dots \lambda_N} \\ \Psi^{(B)}_{\lambda_1 \dots \lambda_N} \end{Bmatrix} (\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_N) = \begin{Bmatrix} \frac{1}{\sqrt{N!}} \\ \frac{1}{\sqrt{N! \prod_\lambda (n_\lambda!)}} \end{Bmatrix} \sum_{\sigma \in S_N} \begin{Bmatrix} \mathrm{sign}\sigma \\ 1 \end{Bmatrix} \psi_{\lambda_{\sigma_1}}(\boldsymbol{x}_1) \dots \psi_{\lambda_{\sigma_N}}(\boldsymbol{x}_N) \tag{5}$$

Тут мы привели кроме всего прочего ещё и нормировочный множитель, который для бозонов содержит дополнительный комбинаторный множитель, зависящий от того, сколько раз та или иная λ повторяется (за что отвечают числа n_λ). Если в фермионном случае какая-то из λ встречается дважды , то несложно видеть, что это приводит к тождественному занулению всей волновой функции (это утверждение носит название принципа Паули): $|\dots, \lambda_i, \dots, \lambda_i, \dots\rangle \equiv 0$.

Кроме того, очевидно, что если переставить какие-то из λ_n, то получится (с точностью до ± 1) точно такая же волновая функция. Если мы выбросим все такие совпадения — например, будем рассматривать упорядоченные по неубыванию наборы[2] — мы получим ортонормированный базис в $\mathcal{F}_N$. Если мы фиксируем порядок, то вместо набора $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$ можно описывать вектора набором чисел заполнения $\{n_\lambda\}$ (таких что $\sum_\lambda n_\lambda = N$), которые говорят нам, сколько раз каждая из λ встречается в наборе. Такое представление носит название *представления чисел заполнения*, а волновые функции в этом представлении обозначаются следующим образом:

$$|n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle \underset{def}{\equiv} |\lambda_1 \le \lambda_2 \le \dots \le \lambda_N\rangle \tag{6}$$

Для фермионов допустимые числа заполнения, в силу принципа Паули, $n_\lambda \in \{0, 1\}$; в то время как для бозонов — $n_\lambda \in \{0, 1, 2, \dots\}$.

Операторы рождения и уничтожения частиц

Пространство Фока и вакуум

Даже если мы работаем с фиксированным числом частиц N[3], оказывается удобным избавиться от фиксирующего условия $\sum_\lambda n_\lambda = N$, и рассмотреть полное Фоковское пространство $\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{F}_N \oplus \dots$. Тут мы добавили весьма искусственный объект $\mathcal{F}_0$ — пространство Фока 0 частиц. Это — одномерное пространство, в котором лежит один-единственный вектор, который мы будем называть вакуумом $|0\rangle$. С точки зрения представления чисел заполнения, вакуум представляет собой вектор $|n_\lambda \equiv 0\rangle$.

Теперь мы вплотную подошли к введению операторов рождения и уничтожения частиц — операторов $\hat{a}^\dagger_\lambda : \mathcal{F}_i \mapsto \mathcal{F}_{i+1}$ и $\hat{a}_\lambda : \mathcal{F}_{i+1} \mapsto \mathcal{F}_i$. Введём эти операторы конструктивно — а именно, зададим их действие на базисные вектора. Для бозонов и фермионов эти операторы, конечно же, вводятся по-разному.

Фермионы

Удобнее всего оператор рождения определить по действию на вектора даже не в представлении чисел заполнения, а на шаг раньше — на детерминанты Слэтера, следующим образом:

$$\hat{a}^\dagger_\lambda |\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \underset{def}{\equiv} \begin{cases} |\lambda, \lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle, & \lambda \notin \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} \\ 0, & \lambda \in \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} \end{cases} \tag{7}$$

(таким образом, он дописывает λ в начало — *рождает* частицу в состоянии λ). Если вспомнить, что эти волновые функции антисимметричны по произвольной перестановке двух λ, то видно, что произвольные операторы $\hat{a}^\dagger_\lambda$ и $\hat{a}^\dagger_\lambda$, *антикоммутируют* — то есть $\{\hat{a}^\dagger_\lambda, \hat{a}^\dagger_\mu\} = 0$ (тут введено обозначение антикоммутатора $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$). Для того, чтобы понять, как оператор $\hat{a}^\dagger_\lambda$ действует на волновые функции в представлении чисел заполнения — достаточно вспомнить, что после добавления λ в начало необходимо упорядочить набор. При перестановке двух соседних λ_n меняется знак волновой функции; а меняться он будет ровно столько раз, сколько $\lambda_n \le \lambda$ имеются в наборе. Таким образом, мы можем записать следующее тождество:

[2] Для этого, вообще говоря, квантовые числа нужно тоже как-то упорядочить — сказать, какое из состояний идёт «раньше», а какое — «позже». В дальнейшем мы увидим, что от этого порядка, впрочем, ничего не зависит

[3] А часто это бывает не так — например, большой канонический ансамбль в статистической физике представляет собой ансамбль систем с нефиксированным числом частиц

$$\hat{a}^\dagger_\lambda |n_1,\dots,n_\lambda,\dots\rangle = \begin{cases} (-1)^{\sum_{k=1}^{\lambda-1} n_k} |n_1,\dots,n_\lambda+1,\dots\rangle\,, & n_\lambda = 0 \\ 0, & n_\lambda = 1 \end{cases} \tag{8}$$

Наконец, оператор $\hat{a}_\lambda \equiv (\hat{a}^\dagger_\lambda)^\dagger$ можно построить просто как эрмитово сопряжение. Можно легко убедиться, что этот оператор действует следующим образом:

$$\hat{a}_\lambda |n_1,\dots,n_\lambda,\dots\rangle = \begin{cases} 0, & n_\lambda = 0 \\ (-1)^{\sum_{k=1}^{\lambda-1} n_k} |n_1,\dots,n_\lambda+1,\dots\rangle\,, & n_\lambda = 1 \end{cases} \tag{9}$$

(и тем самым, он *уничтожает* частицу в состоянии λ). Непосредственной проверкой можно убедиться, что построенные таким образом операторы удовлетворяют следующей алгебре:

$$\{\hat{a}^\dagger_\lambda, \hat{a}^\dagger_\mu\} = \{\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu\} = 0, \quad \{\hat{a}_\lambda, \hat{a}^\dagger_\mu\} = \delta_{\lambda\mu}. \tag{10}$$

Эта алгебра очень похожа на алгебру осцилляторов, с единственным отличием (отражающим то, что мы имеем дело с фермионами) — операторы антикоммутируют вместо коммутации.

Наконец, несложно заметить, что оператор числа частиц имеет вид $\hat{n}_\lambda = \hat{a}^\dagger_\lambda \hat{a}_\lambda$:

$$\hat{a}^\dagger_\lambda \hat{a}_\lambda |\dots,n_\lambda,\dots\rangle = \begin{cases} 0, & n_\lambda = 0 \\ |\dots,n_\lambda=1,\dots\rangle\,, & n_\lambda = 1 \end{cases} \equiv n_\lambda |\dots,n_\lambda,\dots\rangle \tag{11}$$

Бозоны

С бозонами — чуть проще, поскольку никаких лишних множителей «-1» нигде не возникает. Лестничные операторы — операторы рождения и уничтожения — определим следующим образом:

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger_\lambda |\dots,n_\lambda,\dots\rangle & \underset{def}{\equiv} \sqrt{n_\lambda+1}\,|n_1,\dots,n_\lambda,\dots\rangle \\ \hat{a}_\lambda |\dots,n_\lambda,\dots\rangle & \underset{def}{\equiv} \sqrt{n_\lambda}\,|n_1,\dots,n_{\lambda-1},\dots\rangle \end{cases} \tag{12}$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что построенные таким образом операторы являются действительно эрмитово сопряжёнными; они коммутируют между собой; а их алгебра записывается следующим образом:

$$[\hat{a}^\dagger_\lambda, \hat{a}^\dagger_\mu] = [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu] = 0, \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}^\dagger_\mu] = \delta_{\lambda\mu}$$

(собственно, численные факторы $\sqrt{n_\lambda+1}$ и $\sqrt{n_\lambda}$ специально были подобраны так, чтобы алгебра совпала со стандартной алгеброй лестничных операторов для осциллятора). При этом оператор же числа частиц в состоянии λ опять выглядит как $\hat{n}_\lambda = \hat{a}^\dagger_\lambda \hat{a}_\lambda$.

Замена базиса

До сих пор при построении набора операторов рождения и уничтожения, мы привязывались к конкретному выбору одночастичного базиса $\{\psi_\lambda(\mathbf{x})\}$. На самом деле, если мы повторим процедуру для другого произвольного базиса $\{\psi'_\lambda(\mathbf{x})\}$, то соответствующие им операторы $\hat{a}_{\lambda'}$ будут связаны с исходными линейным преобразованием, которое можно найти из следующей тривиальной цепочки равенств:

$$|\lambda'\rangle = \hat{a}^\dagger_{\lambda'} |0\rangle \equiv \sum_\lambda |\lambda\rangle \langle\lambda|\lambda'\rangle = \sum_\lambda \hat{a}^\dagger_\lambda \langle\lambda|\lambda'\rangle |0\rangle \tag{13}$$

Следовательно, если мы захотим работать в ином базисе, преобразование операторов рождения и уничтожения происходит следующим образом[4]

$$\hat{a}^\dagger_{\lambda'} = \sum_\lambda \hat{a}^\dagger_\lambda \langle\lambda|\lambda'\rangle\,, \quad \hat{a}_{\lambda'} = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda \langle\lambda'|\lambda\rangle \tag{14}$$

Несложно проверить, что определённые таким образом операторы сохраняют коммутационные соотношения:

$$\left[\hat{a}_{\lambda'}, \hat{a}^\dagger_{\mu'}\right]_\mp = \sum_{\lambda\mu} \langle\lambda'|\lambda\rangle \langle\mu|\mu'\rangle \left[\hat{a}_\lambda, \hat{a}^\dagger_\mu\right]_\mp = \sum_\lambda \langle\lambda'|\lambda\rangle \langle\lambda|\mu'\rangle = \langle\lambda'|\mu'\rangle = \delta_{\lambda'\mu'}$$

[4]Приведенное тут рассуждение, вообще говоря, показывает лишь, что эти операторы одинаково действуют на вакуум $|0\rangle$, но не доказывает операторное тождество — по-хорошему, его нужно проверять на всех базисных векторах полного пространства Фока. Тем не менее, это рассуждение достаточно интуитивно, и поэтому доказывать мы его не будем.

В частности, в качестве базиса можно выбирать и непрерывные квантовые числа — например, координатный базис. Полученные таким образом операторы стандартно обозначают как $\hat{a}_{\lambda'} = \hat{a}_{\boldsymbol{x}} \equiv \hat{\psi}(\boldsymbol{x})$, и по физическому смыслу, оператор $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ уничтожает частицу в точке $\boldsymbol{x}$, а $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ — рождает её. В этом представлении операторы рождения и уничтожения являются полевыми операторами, и называются пси-операторами. При этом, формулы перехода к этому базису и обратно, а также алгебра записываются следующим образом:

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda \psi_\lambda(\boldsymbol{x}), \quad \hat{a}_\lambda = \int \hat{\psi}(\boldsymbol{x})\psi^*_\lambda(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \tag{15}$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \sum_\lambda \hat{a}^\dagger_\lambda \psi^*_\lambda(\boldsymbol{x}), \quad \hat{a}^\dagger_\lambda = \int \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\psi_\lambda(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \tag{16}$$

$$[\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{y})]_\mp = [\hat{\psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}(\boldsymbol{y})]_\mp = 0, \quad [\hat{\psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{y})]_\mp = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \tag{17}$$

Эти тождества подводят нас вплотную к квантовой теории поля.

Вторичное квантование

Пусть имеется какой-то одночастичный эрмитов оператор $\hat{O} : \mathcal{F}_1 \mapsto \mathcal{F}_1$, со спектром $\{o_\lambda\}$ и собственными функциями $\psi_\lambda(\mathbf{x})$. В многочастичном случае, типично, мы работаем с операторами $\hat{O} : \mathcal{F}_N \mapsto \mathcal{F}_N$ вида $\hat{O} = \sum_{n=1}^N \hat{O}_n$. Такое представление для операторов называется *первично-квантованным.*

Выберем в качестве базиса для пространства Фока базис, построенный из этих самых собственных функций. В таком случае, тривиально убедиться в следующей цепочке равенств:

$$\hat{O}\left|n_1,\ldots,n_\lambda,\ldots\right\rangle = \sum_\lambda n_\lambda o_\lambda \left|n_1,\ldots,n_\lambda,\ldots\right\rangle = \sum_\lambda o_\lambda \hat{a}^\dagger_\lambda \hat{a}_\lambda \left|n_1,n_2,\ldots\right\rangle \Rightarrow \hat{O} = \sum_\lambda o_\lambda \hat{a}^\dagger_\lambda \hat{a}_\lambda \tag{18}$$

Это тождество позволяет выразить оператор $\hat{O} : \mathcal{F} \mapsto \mathcal{F}$ через лестничные операторы; операторы, записанные таким образом, называются *вторично-квантованными.* Это операторное тождество теперь можно переписать и в произвольном базисе:

$$\hat{O} = \sum_{\lambda,\mu} \left\langle\lambda\right| \hat{O} \left|\mu\right\rangle \hat{a}^\dagger_\lambda \hat{a}_\mu \tag{19}$$

(при этом $\left\langle\lambda\right| \hat{O} \left|\mu\right\rangle$ — обычный матричный элемент, взятый по *одночастичным* волновым функциям). Это тождество можно записать и в случае непрерывного спектра:

$$\hat{O} = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{O} \hat{\psi}(\mathbf{x}) \tag{20}$$

(при этом оператор $\hat{O}$ в правой части нужно понимать как его координатное представление — то есть оператор, действующий на координатную зависимость ψ-оператора[5]!). Например, из обычной квантовой механики мы помним, что $|\psi(\boldsymbol{x}_0)|^2$ обозначает плотность вероятности обнаружить частицу в точке $\boldsymbol{x}_0$. Ей соответствует одночастичный оператор $\hat{\rho}(\boldsymbol{x}_0) = \delta(\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_0)$. Значит, оператор *плотности числа частиц* во вторично-квантованном представлении имеет следующий вид:

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{x}_0) = \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_0)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}_0) \tag{21}$$

Другой пример — гамильтониан:

$$\hat{H}_0 = \sum_n \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2m} + U(\boldsymbol{x}_i)\right) \equiv \int d\boldsymbol{x} \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{x})\right] \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \tag{22}$$

Без доказательства приведём, что оператор парного взаимодействия во вторично-квантованном представлении запишется следующим образом:

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{n\neq m} V(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}_m) = \frac{1}{2}\int d\boldsymbol{x}_1 d\boldsymbol{x}_2 \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_2) V(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}_2)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}_1) \tag{23}$$

[5] Такой объект как, например, $\nabla\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ — где набла действует как бы на оператор — нужно понимать в том же смысле, в котором мы совершали преобразование Фурье операторов. А именно, если взять произвольный матричный элемент $\left\langle\psi_1\right| \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \left|\psi_2\right\rangle$, то получится обычная функция переменной $\boldsymbol{x}$. Если эту полученную функцию мы продифференцируем — мы по определению и получим действие оператора $\nabla\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$.