«Вторичное квантование» теории Клейна-Гордона

Степанов Николай

14 февраля 2018

Тут и далее, когда мы будем иметь дело с релятивистскими теориями поля (а теория Клейна-Гордона к таковым относится), мы условимся на следующих обозначениях. Жирным шрифтом — $\boldsymbol{x}$ — мы будем обозначать трёхмерные вектора; так что выражение $\boldsymbol{px}$ обозначает стандартное скалярное произведение. Обычным шрифтом (там где это не вызовет путаницы) мы будем обозначать четыре-вектора $x = (t, \boldsymbol{x})$, и выражение $px = p^\mu x^\mu = Et - \boldsymbol{px}$ (подразумевается метрика Минковского $\eta^{\mu\nu} = \mathrm{diag}(1, -1, -1, -1)$; и мы не будем различать ковариантные p^μ и контравариантные p_μ вектора). Наконец, мы, как всегда, работаем в god-given системе единиц $\hbar = c = 1$.

«Вторичное квантование» поля Клейна-Гордона

Ранее мы получили выражение для квантовой теории поля Клейна-Гордона:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\int d\boldsymbol{x}(\hat{\pi}^2(\boldsymbol{x}) + (\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{x}))^2 + m^2\hat{\phi}^2(\boldsymbol{x})), \quad [\hat{\phi}(\boldsymbol{x}), \hat{\pi}(\boldsymbol{y})] = i\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) \tag{1}$$

Давайте попробуем найти спектр этого Гамильтониана, а заодно поучимся работать с квантовой теорией поля. Причина, по которой это оказывается возможным сделать достаточно просто, заключается в том, что гамильтониан квадратичен по полям, и, как следствие, уравнения движения (в том числе и операторные) — линейны. Для диагонализации квантового гармонического осциллятора, мы переходили к операторам, которые диагонализуют классические уравнения движения; предлагается поступить в данной задаче точно так же.

Циклические переменные и лестничные операторы

Как было обсуждено на первой лекции, полевые операторы удовлетворяют классическим уравнениям движения; в чём, в принципе, можно убедиться и непосредственно:

$$\frac{d\hat{\phi}(\boldsymbol{x})}{dt} = i[\hat{H}, \hat{\phi}(\boldsymbol{x})] = \frac{i}{2}\int d\boldsymbol{y}[\hat{\pi}^2(\boldsymbol{y}), \hat{\phi}(\boldsymbol{x})] = \hat{\pi}(\boldsymbol{x}) \tag{2}$$

$$\frac{d\hat{\pi}(\boldsymbol{x})}{dt} = i[\hat{H}, \hat{\pi}(\boldsymbol{x})] = \frac{i}{2}\int d\boldsymbol{y}[(\nabla\hat{\phi}(\boldsymbol{y}))^2 + m^2(\hat{\phi}(\boldsymbol{y}))^2, \hat{\pi}(\boldsymbol{x})] = \nabla^2\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) - m^2\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) \tag{3}$$

Поскольку система трансляционно инвариантна, то первый шаг к диагонализации такого гамильтониана — это преобразование Фурье. Для удобства и методологической простоты, мы поместим систему в трёхмерный ящик размера $V = L_x \times L_y \times L_z$ и на классическое поле $\phi(\boldsymbol{x})$ наложим периодические граничные условия; тогда интересующий нас Фурье-базис представляет собой набор плоских волн $\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{px}}$, а допустимые импульсы параметризуются тройкой целых чисел согласно $\boldsymbol{p} = (p_x, p_y, p_z) \equiv (\frac{2\pi}{L_x}n_x, \frac{2\pi}{L_y}n_y, \frac{2\pi}{L_z}n_z)$. В таком случае, разложение Фурье запишется следующим образом[1]:

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}}\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{px}}, \quad \hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}}\int d\boldsymbol{x}\hat{\phi}(\boldsymbol{x})e^{-i\boldsymbol{px}} \tag{4}$$

«Коэффициенты» Фурье не являются произвольными — поскольку исходно мы имели дело с вещественной теорией поля, то

$$\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \hat{\phi}(\boldsymbol{x}) \Rightarrow \hat{\phi}^\dagger_{\boldsymbol{p}} = \hat{\phi}_{-\boldsymbol{p}}, \tag{5}$$

об этом ограничении стоит помнить. Всё вышесказанное, разумеется, относится и к $\hat{\pi}(\boldsymbol{x})$. Выпишем коммутационные соотношения:

[1] Полевые операторы можно точно так же раскладывать в ряды и интегралы Фурье, как и обычные функции. Понимать под этим можно следующее: матричные элементы операторов по произвольным волновым функциям $f(\boldsymbol{x}) = \langle\psi_1|\,\hat{\phi}(\boldsymbol{x})\,|\psi_2\rangle$ являются самыми обыкновенными функциями, и эти функции уже можно раскладывать в ряд Фурье.

В результате, *коэффициенты* такого разложения будут, в свою очередь, являться операторами (матричные элементы которых определены как соответствующие коэффициенты разложения в ряд Фурье матричных элементов исходных операторов). Но в целом, с такого рода разложениями можно работать весьма свободно.

$$[\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}'}] = \frac{1}{V}\int d\boldsymbol{x}d\boldsymbol{x}' e^{-i\boldsymbol{p}\boldsymbol{x}-i\boldsymbol{p}'\boldsymbol{x}'}[\hat{\phi}(\boldsymbol{x}), \hat{\pi}(\boldsymbol{x}')] = \frac{i}{V}\int d\boldsymbol{x} e^{-i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\boldsymbol{x}} = i\delta_{\boldsymbol{p},-\boldsymbol{p}'} \tag{6}$$

Гамильтониан в этих переменных запишется следующим образом:

$$\hat{H} = \frac{1}{2V}\sum_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\int d\boldsymbol{x}\left[\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}'} + (i\boldsymbol{p}\cdot i\boldsymbol{p}' + m^2)\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}'}\right] e^{i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\boldsymbol{x}} = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{p}}\left[\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}\hat{\pi}_{-\boldsymbol{p}} + E^2_{\boldsymbol{p}}\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}\hat{\phi}_{-\boldsymbol{p}}\right], \quad E^2_{\boldsymbol{p}} \equiv \boldsymbol{p}^2 + m^2. \tag{7}$$

а уравнения движения примут следующий вид:

$$\frac{d\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}] = \frac{i}{2}\sum_{\boldsymbol{q}}\left[\hat{\pi}_{\boldsymbol{q}}\hat{\pi}_{-\boldsymbol{q}}, \hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}\right] = \frac{i}{2}\sum_{\boldsymbol{q}}\left(\hat{\pi}_{\boldsymbol{q}}\left[\hat{\pi}_{-\boldsymbol{q}}, \hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}\right] + [\hat{\pi}_{\boldsymbol{q}}, \hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}]\hat{\pi}_{-\boldsymbol{q}}\right) = \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}} \tag{8}$$

$$\frac{d\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}] = \frac{i}{2}\sum_{\boldsymbol{q}} E^2_{\boldsymbol{q}}\left[\hat{\phi}_{\boldsymbol{q}}\hat{\phi}_{-\boldsymbol{q}}, \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}\right] = \frac{i}{2}\sum_{\boldsymbol{q}} E^2_{\boldsymbol{q}}(\hat{\phi}_{\boldsymbol{q}}[\hat{\phi}_{-\boldsymbol{q}}, \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}] + [\hat{\phi}_{\boldsymbol{q}}, \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}]\hat{\phi}_{-\boldsymbol{q}}) = -E^2_{\boldsymbol{p}}\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} \tag{9}$$

Это — обычные уравнения гармонического осциллятора, и диагонализуются циклическими переменными[2] $\hat{A}_{\boldsymbol{p}} = \hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}$:

$$\frac{d\hat{A}_{\boldsymbol{p}}}{dt} = \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}} - iE_{\boldsymbol{p}}\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} = -iE_{\boldsymbol{p}}\hat{A}_{\boldsymbol{p}} \Rightarrow \hat{A}_{\boldsymbol{p}}(t) = \hat{A}_{\boldsymbol{p}}e^{-iE_{\boldsymbol{p}}t} \tag{10}$$

Определим коммутационные соотношения построенных операторов:

$$[\hat{A}_{\boldsymbol{p}}, \hat{A}_{\boldsymbol{p}'}] = [\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\phi}_{\boldsymbol{p}'} + \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}'}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}'}] = \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}[\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\phi}_{\boldsymbol{p}'}] + \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}'}}[\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}'}] = 0 \tag{11}$$

$$[\hat{A}_{\boldsymbol{p}}, \hat{A}^\dagger_{\boldsymbol{p}'}] = [\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\phi}_{-\boldsymbol{p}'} - \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}'}}\hat{\pi}_{-\boldsymbol{p}'}] = \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}[\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\phi}_{-\boldsymbol{p}'}] - \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}'}}[\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\pi}_{-\boldsymbol{p}'}] = \frac{2}{E_{\boldsymbol{p}}}\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'} \tag{12}$$

Отметим, что при произвольном импульсе $\boldsymbol{p}$, среди четырёх операторов $\{\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\phi}_{-\boldsymbol{p}}, \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}, \hat{\pi}_{-\boldsymbol{p}}\}$ имеются лишь две независимые (комплексные) степени свободы; циклические переменные $\hat{A}_{\boldsymbol{p}}$ и $\hat{A}_{-\boldsymbol{p}}$ также образуют две линейно-независимые комплексные степени свободы. Таким образом, мы по пути ничего не потеряли, такое преобразование обратимо. Наконец, видно, что последние два соотношения с точностью до константы реализуют лестничную осцилляторную алгебру. В результате мы можем ввести лестничные операторы в следующем виде:

$$\hat{a}_{\boldsymbol{p}} = \sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{p}}}{2}}\left(\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} + \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}\right), \quad \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}} = \sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{p}}}{2}}\left(\hat{\phi}_{-\boldsymbol{p}} - \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}\hat{\pi}_{-\boldsymbol{p}}\right), \quad \hat{a}_{-\boldsymbol{p}} = \sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{p}}}{2}}\left(\hat{\phi}_{-\boldsymbol{p}} + \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}\hat{\pi}_{-\boldsymbol{p}}\right), \quad \hat{a}^\dagger_{-\boldsymbol{p}} = \sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{p}}}{2}}\left(\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} - \frac{i}{E_{\boldsymbol{p}}}\hat{\pi}_{\boldsymbol{p}}\right) \tag{13}$$

$$[\hat{a}_{\boldsymbol{p}}, \hat{a}_{\boldsymbol{p}'}] = 0, \quad [\hat{a}_{\boldsymbol{p}}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}'}] = \delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}, \quad \hat{a}_{\boldsymbol{p}}(t) = \hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{-iE_{\boldsymbol{p}}t} \tag{14}$$

Эти соотношения можно обратить, выразив полевые операторы через лестничные:

$$\hat{\phi}_{\boldsymbol{p}} = \frac{\hat{a}_{\boldsymbol{p}} + \hat{a}^\dagger_{-\boldsymbol{p}}}{\sqrt{2E_{\boldsymbol{p}}}}, \quad \hat{\pi}_{\boldsymbol{p}} = (-i)\sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{p}}}{2}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}} - \hat{a}^\dagger_{-\boldsymbol{p}}), \tag{15}$$

и, восстановив зависимость от времени, мы получаем (тут уже используются четырёхмерные обозначения $p^\mu = (E_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p})$ и $x^\mu = (t, \boldsymbol{x})$, поэтому $px = E_{\boldsymbol{p}}t - \boldsymbol{p}\boldsymbol{x}$):

$$\boxed{\begin{cases} \hat{\phi}(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{1}{\sqrt{2E_{\boldsymbol{p}}}}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{-ipx} + \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{ipx}\right) \\ \hat{\pi}(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}}(-i)\sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{p}}}{2}}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{-ipx} - \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{ipx}\right) \end{cases}} \tag{16}$$

[2]Выбор циклических переменных не единственный — разумеется, они определены с точностью до произвольного комплексного множителя. Тут мы выбрали фазу этого множителя так, чтобы обозначения совпали с принятыми в литературе; а модуль его мы определим чуть ниже

Гамильтониан и квазичастицы

Теперь единственное, что нам осталось — выразить гамильтониан через лестничные операторы. Подставляя (15) в (7), мы немедленно приходим к выводу, что гамильтониан действительно представляет собой набор независимых гармонических осцилляторов:

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{p}} E_{\boldsymbol{p}} \left(\hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}} \hat{a}_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{2} \right), \tag{17}$$

по одному осциллятору на каждое допустимое *квантовое состояние* (состояния тут нумеруются импульсом $\boldsymbol{p}$). В этом представлении волновые функции параметризуются набором *чисел заполнения* этих состояний $n_{\boldsymbol{p}} = 0, 1, 2, \ldots$ (эти числа заполнения являются собственными числами оператора $\hat{n}_{\boldsymbol{p}} = \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}} \hat{a}_{\boldsymbol{p}}$): $|\psi\rangle = \left| n_{\boldsymbol{p}_1}, n_{\boldsymbol{p}_2}, \ldots \right\rangle$.

Такое представление собственных состояний гамильтониана допускает следующую трактовку. Величины $n_{\boldsymbol{p}}$ обозначают количество *квазичастиц* в состоянии с импульсом $\boldsymbol{p}$. Поскольку такое число может быть произвольным неотрицательным, то мы явно имеем дело с *бозонами*. Операторы $\hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}}$ *рождают* частицу в состоянии с импульсом $\boldsymbol{p}$, а $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$ — уничтожают. Поскольку в этом представлении энергия волновой функции равна $E = \sum_{\boldsymbol{p}} n_{\boldsymbol{p}} E_{\boldsymbol{p}}$ (за вычетом постоянного множителя, который мы пока опустим), то каждая такая квазичастица несёт энергию $E_{\boldsymbol{p}}$.

Основное состояние такого гамильтониана — состояние с нулевыми числами заполнения, то есть состояние без частиц — носит название *вакуума*, и обозначается как $|0\rangle$.

Энергия вакуума и ультрафиолетовые расходимости

Основное состояние — вакуум — обладает конечной энергией, которая складывается из энергии «нулевых колебаний»:

$$E_0 = \langle 0| \hat{H} |0\rangle = \sum_{\boldsymbol{p}} \frac{1}{2} E_{\boldsymbol{p}} \tag{18}$$

«Термодинамический предел» $V \to \infty$ (который, конечно же, тут везде подразумевался) строится стандартным образом путём тривиальной замены суммирований по импульсам на интегралы: $\sum_{\boldsymbol{p}} \mapsto \int \frac{V d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}$. Можно заметить, что в этом пределе энергия вакуума бесконечна, поскольку пропорциональна (бесконечно большому) объёму системы. Само по себе это не должно удивлять: ведь энергия является экстенсивной физической величиной, и она *должна быть* пропорциональна объёму.

Плотность энергии вакуума $\epsilon = \frac{E}{V} = \int \frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} E_{\boldsymbol{p}}$ уже является хорошо определённой величиной в термодинамическом пределе. Однако, к сожалению и этот интеграл расходится на больших импульсах как $\sim p^4$. Такие расходимости — расходимости на больших импульсах — называют *ультрафиолетовыми расходимостями*, и они являются источником головной болей людей, занимающихся квантовыми теориями поля.

Что же означает такая расходимость? Тут есть несколько подходов и ответов на этот вопрос. Во-первых, можно отметить, что плотность энергии вакуума не является *наблюдаемой физической величиной*. Измерима лишь разница энергий, и таким образом эту бесконечную константу можно просто игнорировать, покуда она неизмерима. Во-вторых — любопытный читатель может заметить, что тензор энергии-импульса вакуума всё-таки входит в уравнения общей теории относительности Эйнштейна и определяет величину космологической постоянной Λ, и тем самым всё-таки наблюдается. Совмещение квантовой теории поля и гравитации по сей день является нерешённой задачей, поэтому ОТО мы заниматься не будем, а на это замечание ответим гораздо более важным утверждением. Большие импульсы и энергии по дуальности соответствуют малым расстояниям и масштабам времени. *На самом деле* никто не знает, как там устроена природа, каким уравнениям она подчиняется (теория струн?). Мы знаем лишь, что в допустимых экспериментально пределах эта теория работает достаточно хорошо; но даже уже мы знаем, что не всё так просто. Частицы материи состоят из ещё более мелких частиц — лептонов и кварков, а бозоны — переносчики взаимодействия подчиняются чуть более сложным теориям, чем теория Клейна-Гордона. Так что на самом деле, всякая теория поля имеет смысл лишь как некоторое *низкоэнергетическое эффективное рассмотрение*, имеющая свои границы применимости. В частности, наличие ультрафиолетовых расходимостей лишь доказывает, что на больших энергиях наша теория попросту *неприменима*, и её выводами можно пользоваться только для достаточно малых импульсов. В теорию необходимо вводить *обрезку, регуляризацию* — например, ограничивать допустимые импульсы некоторым большим, но конечным (и, увы, неизвестным) импульсом $|\boldsymbol{p}| < \Lambda$.

Таким образом, ультрафиолетовые расходимости в некоторых физических величинах означают лишь то, что данные величины *невозможно вычислить* в рамках теории. Они зависят от поведения системы там, где теория уже не работает (зависят от обрезки Λ). Может показаться странным — а зачем тогда вообще такая теория нужна? Прелесть в том, что в *хороших* теориях (например, квантовая электродинамика) количество величин, которые невозможно вычислить в рамках теории, оказывается конечным. Если взять значения для них, скажем, из эксперимента — то с ними можно уже связать другие, менее тривиальные физические величины; тем самым, такие теории обладают всё-таки *предсказательной силой* и являются осмысленными.

Иначе проявляют себя *инфракрасные расходимости*, или расходимости в физических величинах при $|\boldsymbol{p}| \to 0$. Такие расходимости физичны, поскольку они находятся в пределах границы применимости теории, и обычно они являются указанием на *нечто интересное*, происходящее в данной системе. С такими расходимостями приходится разбираться индивидуально.