

К 100-летию академика Л.Д. Ландау

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
И НАУКИ УКРАИНЫ**

**ХАРЬКОВСКИЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени В.Н. Каразина**

А.М. ЕРМОЛАЕВ, Г.И. РАШБА

**Л Е К Ц И И
ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ
И КИНЕТИКЕ**

2. Вторичное квантование

Учебно-методическое пособие

Харьков 2008

УДК 530.145, 530.1 (075.8)
ББК 22.317я73

Авторский знак Е74

*Рекомендовано кафедрой теоретической физики
имени академика И.М. Лифшица (протокол № 5 от 29 марта 2007 г.)*

*Утверждено Ученым советом физического факультета
Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина
(протокол № 5 от 18 мая 2007 г.)*

Рецензенты:

А.С. Ковалев, доктор физ.-мат. наук, вед. научн. сотр. ФТИНТ НАН
Украины, профессор;
В.В. Ульянов, доктор физ.-мат. наук, профессор (ХНУ).

Ермолаев А.М., Рашба Г.И.

Лекции по квантовой статистике и кинетике.

2. Вторичное квантование:

Учебно-методическое пособие для студентов физических специальностей
университетов. – Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2008. – 69 с.

В учебно-методическом пособии изложен формализм современной квантовой статистики и кинетики, основанный на методах квантовой теории поля. Основное внимание уделено применению метода квантовых функций Грина и функциональных методов в теории конденсированного состояния вещества.

Во второй главе изложен метод вторичного квантования бозонов и фермионов. Формализм используется для описания электронов проводимости в проводниках при наличии магнитного поля и без него. Кратко излагается боголюбовская теория сверхтекучести и сверхпроводимости.

УДК 530.145, 530.1 (075.8)
ББК 22.317я73

© ХНУ имени В.Н. Каразина, 2008

© А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, 2008

© И.Н. Дончик, макет обложки, 2008

Содержание

2.	Вторичное квантование.....	4
2.1.	Волновая функция бозонов в представлении вторичного квантования.....	4
2.2.	Операторы уничтожения и рождения бозонов.....	9
2.3.	Перестановочные соотношения для операторов уничтожения и рождения бозонов.....	13
2.4.	Преобразование операторов уничтожения и рождения при изменении базиса.....	14
2.5.	Полевые операторы.....	15
2.6.	Операторы физических величин в представлении вторичного квантования.....	18
2.7.	Неидеальный бозе-газ.....	22
2.8.	Вторичное квантование фермионов.....	30
2.9.	Гамильтониан взаимодействующих электронов.....	43
2.10.	Частично-дырочный формализм.....	53
2.11.	Взаимодействующие электроны.....	57
	Приложение.....	63
	Задачи.....	67

2. Вторичное квантование

2.1. Волновая функция бозонов в представлении вторичного квантования

В этой главе мы рассмотрим популярный метод в квантовой теории – метод вторичного квантования. Он интенсивно используется в теории квантовых полей, в теории многочастичных систем. Ввиду широкой распространенности метода вторичного квантования его справедливо считают языком теоретической физики. Начнем изложение этого метода с краткого обзора свойств системы бозонов.

Рассмотрим два одинаковых бозона в произвольном внешнем поле не зависящем от времени. Будем предполагать, что они не взаимодействуют друг с другом. Тогда гамильтониан H_0 пары бозонов аддитивен:

$$H_0 = H_1 + H_2,$$

где H_a ($a = 1, 2$) – гамильтониан бозона a во внешнем поле. Однако, волновая функция пары Φ не является мультипликативной:

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \neq \varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2).$$

Здесь $\varphi_a(\vec{r}_a)$ – волновая функция стационарного состояния бесспинового бозона a в координатном представлении. Согласно принципу тождественности частиц волновая функция бозонов Φ должна быть симметричной относительно перестановки частиц. Правильная волновая функция пары, удовлетворяющая этому принципу, имеет вид

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) + \varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1) \right]. \quad (2.1)$$

Множитель $\sqrt{2}$ выбран из условия нормировки функций $\varphi_a(\vec{r}_a)$ ($a=1,2$) и Φ на единицу. Волновая функция стационарного состояния бозонов зависит от времени по закону

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_0t\right),$$

где $E_0 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ – их энергия.

Обобщение формулы (2.1) на случай N одинаковых независимых бозонов в произвольном статическом внешнем поле известно (см. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Квантовая механика, 1989):

$$\begin{aligned} \Phi_{\kappa_1\kappa_2...\kappa_N}(q_1, q_2, \dots, q_N) = & \left(\frac{n_{\kappa_1}! n_{\kappa_2}! \dots}{N!} \right)^{1/2} \times \\ & \times \sum_P \varphi_{\kappa_1}(q_1) \varphi_{\kappa_2}(q_2) \dots \varphi_{\kappa_N}(q_N), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где $\varphi_{\kappa_a}(q_a)$ – волновая функция стационарного состояния бозона a в состоянии $|\kappa_a\rangle$ (в набор квантовых чисел κ_a входят орбитальные квантовые числа бозона в рассматриваемом поле и спиновое квантовое число σ_a), $q_a = (\vec{r}_a, \alpha_a)$ (α_a – спиновая переменная), n_{κ} – число бозонов в состоянии $|\kappa\rangle$, $N = \sum_{\kappa} n_{\kappa}$ – полное число бозонов, $\sum_P$ сумма по всем перестановкам различных индексов κ или аргументов различных функций $\varphi_{\kappa}(q)$. Энергия системы равна

$$E_0 = \sum_{\kappa} \varepsilon_{\kappa} n_{\kappa}, \quad (2.3)$$

где ε_{κ} – энергия одного бозона в состоянии $|\kappa\rangle$. Входящие в формулы (2.2), (2.3) числа $n_{\kappa} = 0, 1, 2, \dots$ называются числами

заполнения одночастичных состояний $|\kappa\rangle$. Волновая функция (2.2) является решением уравнения Шредингера

$$H_0\Phi = E_0\Phi \quad (2.4)$$

для системы невзаимодействующих друг с другом бозонов. В координатном представлении гамильтониан этой системы равен

$$H_0 = \sum_{a=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_a + U(\vec{r}_a) \right], \quad (2.5)$$

где m – масса частицы, $U(\vec{r})$ – ее потенциальная энергия во внешнем поле, Δ – оператор Лапласа.

Одночастичные волновые функции $\varphi_\kappa(q) = \langle q|\kappa\rangle$, фигурирующие в формуле (2.2), могут служить векторами одночастичного базиса при описании системы бозонов. Условия ортонормированности и полноты этого базиса известны (см. (1.27) и (1.28)):

$$\langle \kappa|\kappa'\rangle = \delta_{\kappa\kappa'}, \quad \sum_{\kappa} |\kappa\rangle\langle\kappa| = 1. \quad (2.6)$$

Тогда функции (2.2) можно считать векторами многочастичного базиса $\{\langle q_1\dots q_N|\kappa_1\dots\kappa_N\rangle\}$. Этот базис также ортонормированный и полный:

$$\begin{aligned} \langle \kappa_1\dots\kappa_N|\kappa'_1\dots\kappa'_N\rangle &= \delta_{\kappa_1\kappa'_1}\dots\delta_{\kappa_N\kappa'_N}, \\ \sum_{\kappa_1\dots\kappa_N} |\kappa_1\dots\kappa_N\rangle\langle\kappa_1\dots\kappa_N| &= 1, \end{aligned} \quad (2.7)$$

Базисному вектору $|\kappa_1 \dots \kappa_N\rangle$ соответствует определенное распределение бозонов по одночастичным состояниям. На рис. 2.1 показано распределение, соответствующее вектору

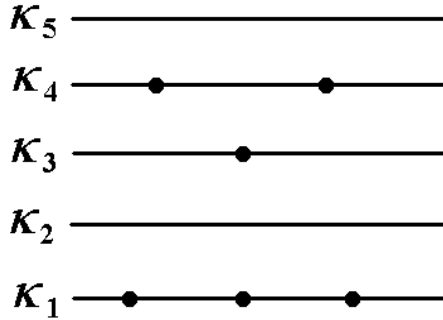


Рис. 2.1. Распределение бозонов по одночастичным состояниям $|n_{\kappa_1} = 3, n_{\kappa_2} = 0, n_{\kappa_3} = 1, n_{\kappa_4} = 2, n_{\kappa_5} = 0, \dots\rangle$.

Часто в качестве одночастичного базиса выбирают плоские волны

$$\langle \vec{r} \alpha | \vec{p} \sigma \rangle = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \alpha | \sigma \rangle = V^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) \chi_{\sigma}(\alpha), \quad (2.8)$$

нормированные на единицу в объеме V . Здесь $\vec{p}$ – импульс частицы, $\chi_{\sigma}(\alpha)$ – спиновая волновая функция. Тогда $\kappa = (\vec{p} \sigma)$, $n_{\vec{p} \sigma}$ – число бозонов с импульсом $\vec{p}$ и проекцией спина σ на ось квантования.

Когда внешнего поля нет, а бозоны не взаимодействуют друг с другом, импульсы отдельных частиц в системе сохраняются. Сохраняются и числа заполнения состояний $n_{\vec{p} \sigma}$. При наличии взаимодействия частиц друг с другом импульсы частиц и числа заполнения уже не будут сохраняться. Если в системе без взаимодействия существовали стационарные состояния с определенными числами заполнения

одночастичных состояний $n_{\vec{p}\sigma}$, то в системе взаимодействующих частиц эти числа уже не будут иметь определенных значений. (Это относится и к числам n_k .) Мы можем говорить лишь о вероятностях тех или иных значений чисел заполнения. Следовательно, необходимо ввести амплитуду вероятности иметь в системе взаимодействующих бозонов в момент t n_{k_1} бозонов в состоянии k_1 , n_{k_2} — в состоянии k_2 и т. д. Обозначим эту амплитуду

$$C(n_1, n_2, \dots, t).$$

Таким образом, возникает необходимость считать независимыми переменными волновой функции системы числа заполнения, а не координаты или импульсы частиц. Формализм, в котором числа заполнения и время выступают в качестве независимых переменных волновой функции называется вторичным квантованием. Он применим и в том случае, когда число частиц в системе переменное. Метод вторичного квантования для бозонов предложил П. Дирак в 1927 году.

Отметим, что использование чисел заполнения не означает потерю информации о системе. В системе тождественных частиц распределение частиц по состояниям (типа показанного на рис. 2.1) полностью характеризуется числами заполнения, поскольку нет смысла указывать, какие именно частицы находятся в состоянии k . В соответствии с этим кет-вектор, соответствующий базисной волновой функции системы (2.2) может быть обозначен символом $|n_1 n_2 \dots\rangle$. Тогда условия ортонормированности и полноты многочастичного базиса имеют вид

$$\langle n_1 n_2 \dots | n'_1 n'_2 \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots, \quad \sum_{n_1 n_2 \dots} |n_1 n_2 \dots\rangle \langle n_1 n_2 \dots| = 1. \quad (2.9)$$

Вектор произвольного состояния $|\psi(t)\rangle$ системы взаимодействующих бозонов может быть разложен по базисным векторам $|n_1 n_2 \dots\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1 n_2 \dots} C(n_1, n_2, \dots, t) |n_1 n_2 \dots\rangle, \quad (2.10)$$

где C – упомянутая выше амплитуда вероятности, а $|C(n_1, n_2, \dots, t)|^2$ – вероятность обнаружить в момент t в состоянии $|\psi(t)\rangle$ n_1 бозонов с квантовыми числами κ_1 , n_2 – с κ_2 и т. д. Амплитуда C представляет собой волновую функцию бозонов в представлении вторичного квантования. Из формул (2.9) и (2.10) следует, что

$$C(n_1, n_2, \dots, t) = \langle n_1 n_2 \dots | \psi(t) \rangle.$$

Вектор (2.10) уже не является решением уравнения (2.4). Стационарное состояние ψ системы взаимодействующих бозонов удовлетворяет уравнению Шредингера

$$H\psi = E\psi, \quad (2.11)$$

в котором в гамильтониан H включено межчастичное взаимодействие V :

$$H = H_0 + V. \quad (2.12)$$

Энергия системы E уже не имеет простого вида суммы энергий отдельных частиц (2.3). Найти ее – одна из задач теории систем многих частиц.

2.2. Операторы уничтожения и рождения бозонов

Переходим к построению операторов, соответствующих физическим величинам бозе-системы, в представлении вторичного квантования. Эти операторы выражаются через два исходных оператора – оператор уничтожения бозона в одночастичном состоянии κ и оператор рождения бозона в

этом состоянии. Эти операторы действуют на числа заполнения n_k , введенные в предыдущем разделе.

Оператор уничтожения бозона в состоянии $|\kappa\rangle$ обозначим a_k . Из формулы (2.10) видно, что достаточно постулировать правило действия этого оператора на кет-вектор состояния системы бозонов с определенными числами заполнения. Тогда правило действия на произвольное состояние будет определено.

Постулируем правило действия

$$a_k |n_1 n_2 \dots n_k \dots\rangle = \sqrt{n_k} |n_1 n_2 \dots n_k - 1 \dots\rangle \quad (2.13)$$

Оно означает, что в результате действия оператора a_k на состояние с определенными числами заполнения это состояние переходит в другое состояние, в котором число бозонов с квантовыми числами k на единицу меньше. По этой причине оператор a_k называется оператором уничтожения.

Оператору a_k в базисе $\{|n_1 \dots n_k \dots\rangle\}$ можно сопоставить матрицу

$$\langle n'_1 \dots n'_k \dots | a_k | n_1 \dots n_k \dots \rangle = \sqrt{n_k} \delta_{n'_1 n_1} \dots \delta_{n'_k (n_k - 1)} \dots, \quad (2.14)$$

где учтено условие ортонормированности базиса (2.9). Эта матрица диагональна по числам n'_k ($n'_k \neq n_k$). Записывая ее в сокращенном виде

$$\langle n'_k | a_k | n_k \rangle = \sqrt{n_k} \delta_{n'_k (n_k - 1)}, \quad (2.15)$$

получаем

$$\|a\| = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & \dots \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & \dots \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Здесь n'_k – номер строки, а n_k – номер столбца матрицы $\|a\|$.

В качестве примера рассмотрим случай, когда κ принимает единственное значение. Тогда матрица (2.14) равна

$$\langle n' | a | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n'(n-1)}.$$

Она совпадает с (2.16).

Используя формулы (2.13)-(2.16), получим правило действия эрмитово сопряженного оператора a_{κ}^{+} на базисное состояние. Из определения эрмитово сопряженного оператора (1.25) и (2.14) следует, что

$$\begin{aligned} \langle n'_1 \dots n'_\kappa \dots | a_{\kappa} | n_1 \dots n_{\kappa} \dots \rangle^* &= \langle n_1 \dots n_{\kappa} \dots | a_{\kappa}^{+} | n'_1 \dots n'_\kappa \dots \rangle = \\ &= \sqrt{n_{\kappa}} \delta_{n'_1 n_1} \dots \delta_{n'_\kappa (n_{\kappa}-1)} \dots \end{aligned}$$

Меняя здесь местами штрихованные и нештрихованные величины, находим

$$\langle n'_1 \dots n'_\kappa \dots | a_{\kappa}^{+} | n_1 \dots n_{\kappa} \dots \rangle = \sqrt{n_{\kappa} + 1} \delta_{n'_1 n_1} \dots \delta_{n'_\kappa (n_{\kappa}+1)} \dots \quad (2.17)$$

Отсюда следует, что оператор a_{κ}^{+} действует на состояние $|n_1 \dots n_{\kappa} \dots\rangle$ по правилу

$$a_{\kappa}^{+} |n_1 \dots n_{\kappa} \dots\rangle = \sqrt{n_{\kappa} + 1} |n_1 \dots (n_{\kappa} + 1) \dots\rangle. \quad (2.18)$$

Матрица этого оператора в базисе $\{|n_1 \dots n_{\kappa} \dots\rangle\}$ равна

$$\|a^{+}\| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Поскольку оператор a_{κ}^{+} переводит состояние $|\dots n_{\kappa} \dots\rangle$ в состояние $|\dots n_{\kappa} + 1 \dots\rangle$, в котором число бозонов с квантовыми числами κ на единицу больше, он называется оператором рождения бозона.

Рассмотрим оператор $a_{\kappa}^{+} a_{\kappa}$. По правилу перемножения матриц получаем

$$\begin{aligned}
\langle n'_\kappa | a_\kappa^+ a_\kappa | n_\kappa \rangle &= \sum_{n''_\kappa} \langle n'_\kappa | a_\kappa^+ | n''_\kappa \rangle \langle n''_\kappa | a_\kappa | n_\kappa \rangle = \\
&= \sum_{n''_\kappa} \sqrt{n''_\kappa + 1} \delta_{n'_\kappa(n''_\kappa + 1)} \sqrt{n_\kappa} \delta_{n''_\kappa(n_\kappa - 1)} = n_\kappa \delta_{n'_\kappa n_\kappa}.
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Эта матрица диагональна в базисе $\{| \dots n_\kappa \dots \rangle\}$. На ее главной диагонали стоят числа заполнения n_κ . К этому результату можно прийти, используя правила (2.13), (2.18):

$$a_\kappa^+ a_\kappa | \dots n_\kappa \dots \rangle = n_\kappa | \dots n_\kappa \dots \rangle. \tag{2.20}$$

Это означает, что собственными числами оператора $a_\kappa^+ a_\kappa$ являются числа заполнения, а собственными векторами – кет-векторы состояний с определенными числами заполнения. По этой причине оператор $a_\kappa^+ a_\kappa$ называется оператором числа частиц в состоянии κ :

$$n_\kappa = a_\kappa^+ a_\kappa. \tag{2.21}$$

Оператор полного числа частиц в системе равен

$$N = \sum_{\kappa} a_\kappa^+ a_\kappa. \tag{2.22}$$

Состояние системы, в котором все числа заполнения равны нулю, называется вакуумным состоянием:

$$|00\dots 0\dots\rangle = |0\rangle. \tag{2.23}$$

Из (2.13) следует, что $a_\kappa |0\rangle = 0$ для всех κ . Действуя операторами рождения бозонов на вакуумное состояние, можем получать состояния $|n_1 \dots n_\kappa \dots\rangle$ с произвольным числом бозонов. В частности, в рассмотренном выше примере состояние с n бозонами равно

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle, \tag{2.24}$$

где учтено

$$\langle 0|0\rangle = 1, \quad \langle n|n\rangle = 1. \quad (2.25)$$

См. задачу 2.

2.3. Перестановочные соотношения для операторов уничтожения и рождения бозонов

Рассмотрим действие оператора $a_{\kappa}a_{\kappa}^{+}$ на состояние с определенными числами заполнения. Используя правила (2.13) и (2.18), получаем

$$\begin{aligned} a_{\kappa}a_{\kappa}^{+}|\dots n_{\kappa}\dots\rangle &= a_{\kappa}\sqrt{n_{\kappa}+1}|\dots n_{\kappa}+1\dots\rangle = \\ &= \sqrt{n_{\kappa}+1}\sqrt{n_{\kappa}+1}|\dots n_{\kappa}\dots\rangle = (n_{\kappa}+1)|\dots n_{\kappa}\dots\rangle. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Следовательно, собственные числа оператора $a_{\kappa}a_{\kappa}^{+}$ равны $n_{\kappa}+1$, а собственными векторами являются состояния с определенными числами заполнения. Вычитая из соотношения (2.26) равенство (2.20), получаем

$$(a_{\kappa}a_{\kappa}^{+} - a_{\kappa}^{+}a_{\kappa})|\dots n_{\kappa}\dots\rangle = |\dots n_{\kappa}\dots\rangle.$$

Поскольку это равенство справедливо для базисного вектора $|\dots n_{\kappa}\dots\rangle$, оно справедливо и для любого вектора (2.10). Это означает, что коммутатор операторов уничтожения и рождения бозонов равен

$$[a_{\kappa}, a_{\kappa}^{+}] = 1. \quad (2.27)$$

Аналогично получаем

$$[a_{\kappa}, a_{\kappa'}^{+}] = 0 \quad (\kappa \neq \kappa'). \quad (2.28)$$

Получим также коммутатор $[a_{\kappa}, a_{\kappa'}]$:

$$\begin{aligned} (a_{\kappa}a_{\kappa'} - a_{\kappa'}a_{\kappa})|\dots n_{\kappa}\dots n_{\kappa'}\dots\rangle &= \\ &= (\sqrt{n_{\kappa}}\sqrt{n_{\kappa'}} - \sqrt{n_{\kappa'}}\sqrt{n_{\kappa}})|\dots n_{\kappa}-1\dots n_{\kappa'}-1\dots\rangle. \end{aligned}$$

Отсюда следует

$$[a_{\kappa}, a_{\kappa'}] = 0. \quad (2.29)$$

Коммутатор эрмитово сопряженных операторов также равен нулю:

$$[a_{\kappa}^+, a_{\kappa'}^+] = 0. \quad (2.30)$$

Следовательно, перестановочные соотношения для операторов уничтожения и рождения бозонов таковы:

$$[a_{\kappa}, a_{\kappa'}^+] = \delta_{\kappa\kappa'}, \quad [a_{\kappa}, a_{\kappa'}] = 0, \quad [a_{\kappa}^+, a_{\kappa'}^+] = 0. \quad (2.31)$$

Напомним, что $\delta_{\kappa\kappa'}$ является произведением символов Кронекера в случае дискретных квантовых чисел и дельта-функций в случае непрерывных.

2.4. Преобразование операторов уничтожения и рождения при изменении базиса

Напомним, что одночастичный базис $\{|\kappa\rangle\}$, использованный в предыдущих разделах, произвольный. Произвольный и многочастичный базис $\{|\dots n_{\kappa} \dots\rangle\}$. Условно будем называть его «латинским» базисом. Он ортонормированный и полный (см. (2.6) и (2.9)). Операторы, действующие на числа n_{κ} , мы обозначили a_{κ} , a_{κ}^+ . Наряду с базисом $\{|\kappa\rangle\}$ введем другой базис $\{|\eta\rangle\}$, который будем называть «греческим». Он также ортонормированный и полный:

$$\langle \eta | \eta' \rangle = \delta_{\eta\eta'}, \quad \sum_{\eta} |\eta\rangle \langle \eta| = 1. \quad (2.32)$$

Операторы вторичного квантования, действующие на числа заполнения n_{η} , обозначим b_{η} , b_{η}^+ .

Одночастичные состояния $|k\rangle$ и $|\eta\rangle$ можно получить, действуя операторами рождения на вакуумное состояние:

$$|k\rangle = a_k^+ |0\rangle, \quad |\eta\rangle = b_\eta^+ |0\rangle. \quad (2.33)$$

Подставим эти векторы в формулы разложения ортов одного базиса по ортам другого (см. гл. 1):

$$|\eta\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|\eta\rangle, \quad |k\rangle = \sum_\eta |\eta\rangle \langle \eta|k\rangle,$$

где $\langle k|\eta\rangle = \langle \eta|k\rangle^*$ – функция преобразования. Получим

$$\begin{aligned} b_\eta^+ |0\rangle &= \sum_k a_k^+ |0\rangle \langle k|\eta\rangle, \\ a_k^+ |0\rangle &= \sum_\eta b_\eta^+ |0\rangle \langle \eta|k\rangle. \end{aligned}$$

Опуская $|0\rangle$, находим

$$\begin{aligned} b_\eta^+ &= \sum_k a_k^+ \langle k|\eta\rangle, \\ a_k^+ &= \sum_\eta b_\eta^+ \langle \eta|k\rangle. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Отсюда получаем эрмитово сопряженные соотношения:

$$\begin{aligned} b_\eta &= \sum_k a_k \langle \eta|k\rangle, \\ a_k &= \sum_\eta b_\eta \langle \eta|k\rangle^*. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Формулы (2.34) и (2.35) представляют собой правила преобразования операторов уничтожения и рождения при переходе от «латинского» базиса к «греческому» и наоборот.

2.5. Полевые операторы

В этом разделе мы по-прежнему будем считать базис $\{|k\rangle\}$ произвольным, а базис $\{|\eta\rangle\}$ конкретизируем. В качестве

η выберем $q = (\vec{r}, \alpha)$, где $\vec{r}$ – радиус-вектор частицы, а α – спиновая переменная. Тогда $|q\rangle = |\vec{r}\alpha\rangle$ – состояние с определенными координатами частицы и проекцией спина. Базис $\{|q\rangle\}$ полный и ортонормированный:

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q'), \quad \int dq |q\rangle\langle q| = 1, \quad (2.36)$$

где

$$\delta(q - q') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\alpha\alpha'}, \quad \int dq = \int d\vec{r} \sum_{\alpha}.$$

Операторы, действующие на числа заполнения n_q , обозначим

$$b_q = \psi(q), \quad b_q^+ = \psi^+(q).$$

Это операторы уничтожения и рождения частицы в точке $\vec{r}$ с проекцией спина α . Они называются полевыми операторами.

Формулы (2.34) и (2.35) связывают полевые операторы ψ и ψ^+ с операторами вторичного квантования a и a^+ :

$$\psi(q) = \sum_k a_k \varphi_k(q), \quad \psi^+(q) = \sum_k a_k^+ \varphi_k^*(q), \quad (2.37)$$

$$a_k = \int dq \psi(q) \varphi_k^*(q), \quad a_k^+ = \int dq \psi^+(q) \varphi_k(q).$$

Здесь мы использовали стандартное обозначение для волновой функции состояния $|k\rangle$ в координатном представлении:

$$\varphi_k(q) = \langle q|k\rangle. \quad (2.38)$$

Выберем в качестве $|k\rangle$ состояние частицы $|\vec{p}\sigma\rangle$ с определенным импульсом и определенным спиновым квантовым числом σ . Тогда (см. (2.8))

$$\langle \vec{r}\alpha | \vec{p}\sigma \rangle = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \alpha | \sigma \rangle = V^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}\right) \delta_{\alpha\sigma}. \quad (2.39)$$

В результате формулы (2.37), связывающие полевые операторы с операторами уничтожения $a_{\vec{p}\sigma}$ и рождения $a_{\vec{p}\sigma}^+$ бозонов в состоянии $|\vec{p}\sigma\rangle$, принимают вид

$$\begin{aligned}
\psi_{\alpha}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}\alpha} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}\right), \\
\psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}\alpha}^{+} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}\right).
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Получим перестановочные соотношения для полевых операторов. Для этого подставим разложения (2.37) в коммутатор

$$[\psi(q), \psi^{+}(q')] = \sum_{kk'} \varphi_k(q) \varphi_{k'}^{*}(q') [a_k, a_{k'}^{+}].$$

Учитывая (2.31) и условие полноты одночастичного базиса, получаем

$$[\psi(q), \psi^{+}(q')] = \delta(q - q'). \tag{2.41}$$

Аналогично находим

$$\begin{aligned}
[\psi(q), \psi(q')] &= 0, \\
[\psi^{+}(q), \psi^{+}(q')] &= 0.
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Выразим оператор числа частиц (2.22) через полевые операторы:

$$\begin{aligned}
N &= \sum_k a_k^{+} a_k = \\
&= \int dq \int dq' \psi^{+}(q) \psi(q') \sum_k \varphi_k(q) \varphi_k^{*}(q') = \\
&= \int dq \psi^{+}(q) \psi(q).
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Отсюда следует, что оператор плотности частиц в точке $\vec{r}$ в представлении вторичного квантования имеет вид

$$n(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{+}(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}). \quad (2.44)$$

Эрмитовость этого оператора очевидна.

2.6. Операторы физических величин в представлении вторичного квантования

Как уже отмечалось в р. 2.2, операторы физических величин в методе вторичного квантования выражаются через операторы рождения и уничтожения бозонов. В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением операторов двух типов – аддитивных и бинарных. Аддитивный оператор $F^{(1)}$ имеет вид суммы по частицам

$$F^{(1)} = \sum_{a=1}^N f_a^{(1)}, \quad (2.45)$$

где оператор $f_a^{(1)}$ действует на координаты частицы a . Примером аддитивного оператора является гамильтониан (2.5) бозонов во внешнем поле. Необходимо выразить оператор (2.45) через операторы рождения и уничтожения бозонов.

Потребуем, чтобы матричные элементы оператора (2.45) между базисными состояниями (2.2) в координатном представлении совпадали с матричными элементами в представлении вторичного квантования:

$$\begin{aligned} \int dq_1 \dots dq_N \Phi_{k'_1 \dots k'_N}^* (q_1, \dots, q_N) F^{(1)} \Phi_{k_1 \dots k_N} (q_1, \dots, q_N) = \\ = \langle n'_1 \dots | \mathfrak{T}^{(1)} | n_1 \dots \rangle, \end{aligned} \quad (2.46)$$

где $\mathfrak{F}^{(1)}$ – оператор аддитивной величины $F^{(1)}$ в представлении вторичного квантования. В дальнейшем будем обозначать его той же буквой $F^{(1)}$.

Диагональные элементы матрицы в левой части равенства (2.46) равны средним значениям величины $F^{(1)}$ в состояниях (2.2):

$$\begin{aligned} \overline{F^{(1)}} &= \int dq_1 \dots dq_N \Phi_{k_1 \dots k_N}^* (q_1, \dots, q_N) F^{(1)} \Phi_{k_1 \dots k_N} (q_1, \dots, q_N) = \\ &= \sum_k n_k f_{kk}^{(1)}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

где

$$f_{kk}^{(1)} = \int dq \varphi_k^* (q) f^{(1)} \varphi_k (q) \quad (2.48)$$

– одночастичные матричные элементы оператора $f^{(1)}$ в базисе $\{\varphi_k(q)\}$. Недиагональные матричные элементы переходов одной частицы из состояния l в состояние k равны

$$\langle \dots n_k \dots n_l - 1 \dots | F^{(1)} | \dots n_k - 1 \dots n_l \dots \rangle = f_{kl}^{(1)} \sqrt{n_k n_l}. \quad (2.49)$$

Здесь мы использовали обозначения Дирака для матричных элементов матрицы в левой части равенства (2.46). Троеточиями отмечены числа заполнения, одинаковые в начальном и конечном состояниях, по которым матрица (2.49) диагональна. Недиагональные матричные элементы переходов двух или большего числа частиц равны нулю. Вывод формул (2.47) и (2.49) содержится в приложении.

Легко убедиться в том, что равенство (2.46) будет выполняться, если аддитивный оператор (2.45) в представлении вторичного квантования имеет вид

$$F^{(1)} = \sum_{kl} f_{kl}^{(1)} a_k^+ a_l . \quad (2.50)$$

Действительно, используя правила действия операторов вторичного квантования (2.13) и (2.18), а также условие ортонормированности базисных векторов (2.9), для среднего значения оператора (2.50) получаем

$$\begin{aligned} & \langle \dots n_k \dots n_l \dots | \sum_{kl} f_{kl}^{(1)} a_k^+ a_l | \dots n_k \dots n_l \dots \rangle = \\ & = \sum_{kl} f_{kl}^{(1)} \sqrt{n_k + 1} \sqrt{n_l} \langle \dots n_k \dots n_l \dots | \dots n_k + 1 \dots n_l - 1 \dots \rangle . \end{aligned}$$

Если $k \neq l$, входящее сюда скалярное произведение равно нулю в силу (2.9). Если же в сумме $\sum_l$ остается лишь одно слагаемое с $l = k$, находим

$$\langle \dots n_k \dots | \sum_k f_{kk}^{(1)} a_k^+ a_k | \dots n_k \dots \rangle = \sum_k f_{kk}^{(1)} n_k .$$

Это выражение совпадает с (2.47). Аналогично недиагональный матричный элемент оператора (2.50) равен

$$\langle \dots n_k \dots n_l - 1 \dots | \sum_{kl} f_{kl}^{(1)} a_k^+ a_l | \dots n_k - 1 \dots n_l \dots \rangle = f_{kl}^{(1)} \sqrt{n_k n_l} ,$$

что совпадает с (2.49).

Если в качестве базисных векторов $\{\varphi_k(q)\}$ выбрать собственные векторы одночастичного оператора $f^{(1)}$,

удовлетворяющие уравнению

$$f^{(1)}|k\rangle = f_k^{(1)}|k\rangle \quad (2.51)$$

($f_k^{(1)}$ – собственные числа оператора $f^{(1)}$), то матрица (2.48) в этом базисе становится диагональной

$$f_{kl}^{(1)} = f_k^{(1)}\delta_{kl}, \quad (2.52)$$

а оператор (2.50) принимает вид

$$F^{(1)} = \sum_k f_k^{(1)} a_k^+ a_k. \quad (2.53)$$

В качестве примера приведем оператор Гамильтона системы невзаимодействующих бозонов:

$$H_0 = \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma}. \quad (2.54)$$

Собственные функции гамильтониана бозона $\left(-\hbar^2 \Delta / 2m\right)$ равны (2.39), а собственное значение

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (2.55)$$

совпадает с энергией частицы с массой m и импульсом $\vec{p}$.

Читателю предоставляется возможность самостоятельно убедиться в том, что оператор бинарного типа

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} f_{ab}^{(2)} \quad (2.56)$$

в представлении вторичного квантования равен

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{iklm} \langle ik | f^{(2)} | lm \rangle a_i^+ a_k^+ a_m a_l, \quad (2.57)$$

где i, k, l, m – индексы одночастичных состояний,

$$\langle ik | f^{(2)} | lm \rangle = \int dq_1 \int dq_2 \varphi_i^*(q_1) \varphi_k^*(q_2) f^{(2)} \varphi_l(q_1) \varphi_m(q_2) \quad (2.58)$$

– двухчастичные матричные элементы оператора $f^{(2)}$ в базисе $\{\varphi_k(q)\}$. В (2.58) он действует на координаты q_1 и q_2 двух частиц.

Используя формулы (2.37) и (2.48), выразим оператор (2.50) через полевые операторы:

$$\begin{aligned} F^{(1)} &= \sum_{ik} f_{ik}^{(1)} a_i^+ a_k = \sum_{ik} \int dq \varphi_i^*(q) f^{(1)} \varphi_k(q) a_i^+ a_k = \\ &= \int dq \left(\sum_i \varphi_i^*(q) a_i^+ \right) f^{(1)} \left(\sum_k \varphi_k(q) a_k \right) = \\ &= \int dq \psi^+(q) f^{(1)} \psi(q). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Здесь, как и в формулах (2.37), базисные функции (2.38) обозначены $\varphi_k(q)$.

Оператор (2.57) связан с полевыми операторами соотношением

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \int dq_1 \int dq_2 \psi^+(q_1) \psi^+(q_2) f^{(2)}(q_1, q_2) \psi(q_2) \psi(q_1). \quad (2.60)$$

Отметим, что входящие в формулы (2.57) и (2.60) операторы уничтожения (и рождения) бозонов коммутируют. Поэтому порядок двух первых и двух последних операторных множителей в (2.57) и (2.60) безразличен. В случае фермионов это не так. Формулы (2.57) и (2.60) написаны так, чтобы они были пригодными и для фермионов.

2.7. Неидеальный бозе-газ

Хорошей иллюстрацией метода вторичного квантования бозонов является предложенная Н.Н. Боголюбовым в 1947 году теория слабо неидеального бозе-газа (см. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Статистическая физика, ч.2, 2000; В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин, Курс теоретической физики, т. 2, 1971). Коротко изложим эту теорию.

Рассмотрим систему N бесспиновых взаимодействующих друг с другом бозонов в объеме V . Условие слабой неидеальности газа означает, что радиус действия межчастичных сил r_0 мал по сравнению со средним расстоянием между частицами:

$$r_0 \ll \left(\frac{V}{N} \right)^{1/3}. \quad (2.61)$$

Кроме того, в случае слабого возбуждения системы импульсы частиц удовлетворяют неравенству

$$\frac{pr_0}{\hbar} \ll 1. \quad (2.62)$$

Известно, что при столкновении медленных частиц амплитуда взаимного рассеяния одинаковых частиц с массой m стремится к постоянному пределу, который в первом борновском приближении равен (см. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Квантовая механика, 1989)

$$-a = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \nu_0, \quad (2.63)$$

где

$$\nu_0 = \int d\vec{r} \, v(\vec{r})$$

– нулевая компонента Фурье энергии $v(\vec{r})$ взаимодействия двух частиц. Величина a называется длиной рассеяния. Она положительна, если частицы отталкиваются. С учетом второго борновского приближения величина ν_0 связана с длиной рассеяния соотношением

$$\nu_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \left[1 - \frac{4\pi\hbar^2 a}{mV} \sum_{\vec{p}'_1} \frac{2m}{p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2} \right], \quad (2.64)$$

где $\vec{p}_1$ и $\vec{p}_2$ – импульсы сталкивающихся частиц, а $\vec{p}'_1$ и $\vec{p}'_2$ – их импульсы после рассеяния.

Из формул (2.54) и (2.57) следует, что гамильтониан бозонов в представлении вторичного квантования равен

$$H = \sum_{\vec{p}} \varepsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{p}'_1 \vec{p}'_2} \langle \vec{p}'_1 \vec{p}'_2 | \nu | \vec{p}_1 \vec{p}_2 \rangle a_{\vec{p}'_1}^+ a_{\vec{p}'_2}^+ a_{\vec{p}_2} a_{\vec{p}_1}, \quad (2.65)$$

где $\nu(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ – энергия взаимодействия двух частиц, зависящая от расстояния $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ между ними. В качестве одночастичного базиса в (2.65) выбраны плоские волны (2.39). Оператор потенциальной энергии взаимодействия частиц друг с другом (второе слагаемое в правой части (2.65)) учитывает парные столкновения частиц с импульсами $\vec{p}_1$ и $\vec{p}_2$. В результате рассеяния эти частицы оказываются в состояниях $\vec{p}'_1$ и $\vec{p}'_2$.

Вычислим двухчастичные матричные элементы величины ν в базисе (2.39):

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}'_1 \vec{p}'_2 | \nu | \vec{p}_1 \vec{p}_2 \rangle &= \frac{1}{V^2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \nu(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \times \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} (-\vec{p}'_1 \vec{r}_1 - \vec{p}'_2 \vec{r}_2 + \vec{p}_1 \vec{r}_1 + \vec{p}_2 \vec{r}_2) \right]. \end{aligned} \quad (2.66)$$

В этом выражении удобно перейти к интегрированию по относительным координатам и координатам центра масс пары частиц

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2). \quad (2.67)$$

Тогда матричный элемент (2.66) принимает вид

$$\langle \vec{p}'_1 \vec{p}'_2 | \nu | \vec{p}_1 \vec{p}_2 \rangle = \frac{1}{V} \delta_{\vec{p}'_1 + \vec{p}'_2, \vec{p}_1 + \vec{p}_2} \nu \left(\frac{\vec{p}'_1 - \vec{p}_1}{\hbar} \right), \quad (2.68)$$

где

$$\nu(\vec{q}) = \int d\vec{r} \nu(\vec{r}) \exp(-i\vec{q}\vec{r}) \quad (2.69)$$

– компонента фурье энергии взаимодействия двух частиц, $\hbar\vec{q} = \vec{p}'_1 - \vec{p}_1$ – передача импульса частице при столкновении. Символ Кронекера учитывает закон сохранения импульса пары сталкивающихся частиц. В (2.68) учтено

$$\int d\vec{R} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \vec{R} \right] = V \delta_{\vec{p}_1 \vec{p}_2}. \quad (2.70)$$

На плоские волны (2.39) в объеме V наложены периодические граничные условия. В результате спектр импульса частицы становится квазидискретным.

Подставляя (2.68) в гамильтониан (2.65), получаем

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\vec{k}} \varepsilon_k a_k^+ a_{\vec{k}}^- + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_1' + \vec{k}_2'} v(\vec{k}_1' - \vec{k}_1) a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ a_{\vec{k}_2}^- a_{\vec{k}_1}^- = \\ &= \sum_{\vec{k}} \varepsilon_k a_k^+ a_{\vec{k}}^- + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{q}} v(\vec{q}) a_{\vec{k}_1 + \vec{q}}^+ a_{\vec{k}_2 - \vec{q}}^+ a_{\vec{k}_2}^- a_{\vec{k}_1}^-, \end{aligned} \quad (2.71)$$

где вместо импульса частицы введен ее волновой вектор $\vec{k} = \vec{p} / \hbar$. Суммирование в (2.71) выполняется по тем $\vec{k}$, которые удовлетворяют закону сохранения импульса.

Определим собственные значения гамильтониана (2.71) в случае слабого возбуждения системы. Учтем тот факт, что в отсутствие взаимодействия между частицами в основном состоянии все бозоны обладают нулевым импульсом:

$$n_{\vec{k}} = N \delta_{\vec{k} 0}.$$

Они образуют бозе-конденсат. Если же система слабо возбуждена, лишь небольшое число частиц будет находиться в состояниях с $\vec{k} \neq 0$. Следует ожидать, что в случае слабо неидеального газа эта ситуация практически не изменится. В основном и в слабо возбужденных состояниях почти все частицы находятся в конденсате. Лишь небольшое их число обладает ненулевыми импульсами. Это означает, что собственные числа оператора $a_0^+ a_0$ велики по сравнению с единицей и близки к N , а собственные числа оператора $a_k^+ a_{\vec{k}}^-$ —

числа частиц $n_{\vec{k}}$ в надконденсатных состояниях малы по сравнению с N . Тогда в перестановочном соотношении $[a_0, a_0^+] = 1$ единицу можно опустить, т. е. считать a_0 и a_0^+ обычными числами (с-числами), причем $a_0 \sim a_0^+ \sim \sqrt{N}$. Сказанное позволяет упростить гамильтониан (2.71), разложив его по $a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^+ (\vec{k} \neq 0)$.

Нулевой член разложения содержит $a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 = a_0^4$. Члены 1-го порядка отсутствуют ввиду невозможности соблюдения в них закона сохранения импульса. Квадратичные члены дают приближенное выражение для вклада в оператор энергии взаимодействия частиц:

$$\frac{\nu_0}{2V} a_0^2 \sum_{\vec{k} \neq 0} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + 4a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}), \quad (2.72)$$

где мы положили $\nu(\vec{q}) \approx \nu_0$ в соответствии с требованием (2.62).

Ограничиваясь членами второго порядка малости по $a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^+ (\vec{k} \neq 0)$, мы можем a_0^2 в (2.72) заменить на N . В членах же нулевого порядка необходимо учесть, что собственное значение оператора

$$a_0^2 + \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}$$

равно N . В результате

$$\begin{aligned} a_0^4 + a_0^2 \sum_{\vec{k} \neq 0} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + 4a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}) = \\ = N^2 + N \sum_{\vec{k} \neq 0} (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + 2a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}). \end{aligned}$$

Это приводит к следующему выражению для гамильтониана (2.71):

$$H = \frac{N^2}{2V} \nu_0 + \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \frac{N}{2V} \nu_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} (a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ + 2a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}^-). \quad (2.73)$$

Первое слагаемое в правой части (2.73) дает энергию основного состояния газа в линейном приближении по ν_0 :

$$E_0 = \frac{N^2 \nu_0}{2V}. \quad (2.74)$$

Производная $\frac{\partial E_0}{\partial N}$ равна химическому потенциалу газа при нулевой температуре:

$$\mu = \frac{N \nu_0}{V}. \quad (2.75)$$

Остальные слагаемые в (2.73) определяют поправку к E_0 и спектр элементарных возбуждений системы.

Константу ν_0 в (2.73) выразим через длину рассеяния a . В членах второго порядка для этого достаточно учесть (2.63). В первом же слагаемом в правой части (2.73) необходимо учесть формулу (2.64), учитывающую второе борновское приближение в амплитуде рассеяния. Поскольку рассматривается столкновение двух частиц конденсата, в (2.64) необходимо взять $\vec{p}_1 = \vec{p}_2 = 0$, $\vec{p}'_1 = -\vec{p}'_2 = \vec{p}$. Тогда

$$\nu_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \left(1 + \frac{4\pi\hbar^2 a}{V} \sum_{\vec{p} \neq 0} \frac{1}{p^2} \right).$$

Подставляя эту формулу в (2.73), получаем приближенное выражение для гамильтониана бозонов:

$$H = \frac{2\pi\hbar^2 a N^2}{mV} \left(1 + \frac{4\pi a}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{1}{k^2} \right) + \frac{2\pi\hbar^2 a N}{mV} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(a_{\vec{k}}^- a_{-\vec{k}}^- + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ + 2a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}^- \right) + \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}^-. \quad (2.76)$$

Гамильтониан (2.76) приводится к диагональному виду линейным преобразованием операторов вторичного квантования:

$$a_{\vec{k}}^- = u_{\vec{k}}^- b_{\vec{k}}^- + v_{\vec{k}}^- b_{-\vec{k}}^+, \quad a_{\vec{k}}^+ = u_{\vec{k}}^- b_{\vec{k}}^+ + v_{\vec{k}}^- b_{-\vec{k}}^-, \quad (2.77)$$

где $b_{\vec{k}}^-$ и $b_{\vec{k}}^+$ – новые операторы, а $u_{\vec{k}}^-$ и $v_{\vec{k}}^-$ – неизвестные вещественные функции. Потребуем, чтобы новые операторы удовлетворяли перестановочным соотношениям (2.31):

$$[b_{\vec{k}}^-, b_{\vec{k}'}^-] = 0, \quad [b_{\vec{k}}^+, b_{\vec{k}'}^+] = 0, \quad [b_{\vec{k}}^-, b_{\vec{k}'}^+] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}. \quad (2.78)$$

Эти соотношения выполняются, если

$$u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1. \quad (2.79)$$

Тогда преобразование (2.77) можно записать в виде

$$a_{\vec{k}}^- = \frac{b_{\vec{k}}^- + L_{\vec{k}}^- b_{-\vec{k}}^+}{\sqrt{1 - L_{\vec{k}}^2}}, \quad a_{\vec{k}}^+ = \frac{b_{\vec{k}}^+ + L_{\vec{k}}^- b_{-\vec{k}}^-}{\sqrt{1 - L_{\vec{k}}^2}}, \quad (2.80)$$

где $L_{\vec{k}}^-$ – новая неизвестная функция. Подберем ее так, чтобы в гамильтониане (2.76) выпали недиагональные члены $b_{\vec{k}}^- b_{-\vec{k}}^-, b_{\vec{k}}^+ b_{-\vec{k}}^+$. Это дает

$$L_{\vec{k}}^- = \frac{1}{mu^2} \left[E(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - mu^2 \right], \quad (2.81)$$

где

$$E(\vec{k}) = \left[\hbar^2 u^2 k^2 + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (2.82)$$

$$u = \left(\frac{4\pi\hbar^2 a N}{m^2 V} \right)^{1/2}. \quad (2.83)$$

В новых переменных гамильтониан (2.76) равен

$$H = E_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} E(\vec{k}) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}, \quad (2.84)$$

где

$$E_0 = \frac{N}{2} m u^2 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left[E(\vec{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - m u^2 + \frac{m^3 u^4}{\hbar^2 k^2} \right]. \quad (2.85)$$

Сравнение формул (2.54) и (2.84) показывает, что при слабом возбуждении слабо неидеального бозе-газа его энергия состоит из двух слагаемых

$$E = E_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} E(\vec{k}) N_{\vec{k}}, \quad (2.86)$$

где первое слагаемое E_0 – энергия основного состояния, а второе – энергия возбуждения. Она имеет вид суммы энергий независимых частиц, называемых квазичастицами. Импульс квазичастицы равен $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, а ее энергия дается формулой (2.82). Числа заполнения квазичастиц равны $N_{\vec{k}} = 0, 1, \dots$. Они подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна.

Из формулы (2.82) следует, что

$$E(k) = \begin{cases} \hbar u k, & \hbar k \ll m u, \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, & \hbar k \gg m u. \end{cases} \quad (2.87)$$

Входящая в формулы (2.82), (2.83), (2.87) величина u равна скорости звука в газе:

$$u = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}}.$$

Здесь P – давление, а $\rho = mN/V$ – плотность газа.

2.8. Вторичное квантование фермионов

Метод вторичного квантования для фермионов – частиц с полужелым спином – разработан Е. Вигнером и П. Йорданом в 1928 году. Излагая этот метод, мы следуем подходу, изложенному в предыдущих разделах для бозонов.

Известно, что волновая функция системы одинаковых фермионов антисимметрична относительно перестановки частиц. Это означает, что волновая функция стационарного состояния двух не взаимодействующих друг с другом фермионов в произвольном внешнем поле, не зависящем от времени, равна

$$\Phi_{\kappa_1 \kappa_2}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{\kappa_1}(q_1) \varphi_{\kappa_2}(q_2) - \varphi_{\kappa_1}(q_2) \varphi_{\kappa_2}(q_1)], \quad (2.88)$$

где κ_1 и κ_2 – индексы состояний, в которых находятся две частицы, $\varphi_{\kappa}(q) = \langle q | \kappa \rangle$ – волновая функция частицы в состоянии κ в q -представлении. Полный набор квантовых чисел κ включает орбитальные квантовые числа и спиновое квантовое число, а q , как и в р. 2.1, равно $q = (\vec{r}, \alpha)$.

Множитель $\sqrt{2}$ в (2.88) выбран из условия нормировки φ и Φ на единицу. Двухчастичная волновая функция (2.88) может быть записана в виде определителя

$$\Phi_{\kappa_1 \kappa_2}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{\kappa_1}(q_1) & \varphi_{\kappa_1}(q_2) \\ \varphi_{\kappa_2}(q_1) & \varphi_{\kappa_2}(q_2) \end{vmatrix}. \quad (2.89)$$

Из (2.88) и (2.89) видно, что $\Phi_{\kappa_1 \kappa_1} = 0$, т. е. два фермиона не могут находиться в одном полном образом описанном состоянии в соответствии с принципом Паули.

Обобщение формул (2.88) и (2.89) на систему N невзаимодействующих друг с другом фермионов известно (см. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Квантовая механика, 1989; С. Реймс, Теория многоэлектронных систем, 1976):

$$\Phi_{\kappa_1 \kappa_2 \dots \kappa_N}(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \times \quad (2.90)$$

$$\times P \left[\varphi_{\kappa_1}(q_1) \varphi_{\kappa_2}(q_2) \dots \varphi_{\kappa_N}(q_N) \right]$$

или

$$\Phi_{\kappa_1 \kappa_2 \dots \kappa_N}(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\kappa_1}(q_1) & \varphi_{\kappa_1}(q_2) & \dots & \varphi_{\kappa_1}(q_N) \\ \varphi_{\kappa_2}(q_1) & \varphi_{\kappa_2}(q_2) & \dots & \varphi_{\kappa_2}(q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{\kappa_N}(q_1) & \varphi_{\kappa_N}(q_2) & \dots & \varphi_{\kappa_N}(q_N) \end{vmatrix}, \quad (2.91)$$

где P – оператор некоторой перестановки координат N частиц, p – число отдельных парных транспозиций в перестановке P , $\sum_P$ – сумма по всем перестановкам.

Определитель (2.91) называется детерминантом Фока-Слэтера.

Неопределенность со знаком функции (2.91) устраним, выбрав определенный порядок следования одночастичных функций в строках определителя. Например, функции $\varphi_{\kappa}(q)$ в строках будем располагать так, чтобы росли номера состояний $\kappa_1 < \kappa_2 < \dots < \kappa_N$, а в столбцах – как указано в (2.91). Этой функции приписываем знак $+$. При перестановке двух строк или столбцов знак определителя меняется.

Как и в случае бозонов, функции $\{\varphi\}$ образуют одночастичный базис, а $\{\Phi\}$ – многочастичный, причем

функции (2.91) являются собственными функциями гамильтониана невзаимодействующих фермионов в произвольном внешнем поле:

$$H_0\Phi = E_0\Phi, \quad (2.92)$$

где H_0 имеет вид (2.5), а E_0 – энергия системы. Базисные кет-векторы образуют ортонормированную полную систему векторов:

$$\langle \kappa | \kappa' \rangle = \delta_{\kappa\kappa'}, \quad \sum_{\kappa} |\kappa\rangle \langle \kappa| = 1, \quad (2.93)$$

$$\langle \kappa_1 \dots \kappa_N | \kappa'_1 \dots \kappa'_N \rangle = \delta_{\kappa_1 \kappa'_1} \dots \delta_{\kappa_N \kappa'_N}, \quad (2.94)$$

$$\sum_{\kappa_1 \dots \kappa_N} |\kappa_1 \dots \kappa_N\rangle \langle \kappa_1 \dots \kappa_N| = 1.$$

Вектор $|\kappa_1 \dots \kappa_N\rangle$ соответствует определенному распределению фермионов по одночастичным состояниям. Чтобы охарактеризовать это распределение, достаточно указать числа заполнения n_{κ} . В соответствии с принципом Паули каждое из них принимает лишь два значения: $n_{\kappa} = 0, 1$. Следовательно, вектор состояния с определенными числами заполнения будем записывать в виде $|n_{\kappa_1} n_{\kappa_2} \dots\rangle$ или $|n_1 n_2 \dots\rangle$. Соответствующая функция Φ равна $\Phi_{n_1 n_2 \dots}(q_1, q_2, \dots, q_N)$.

При наличии межчастичного взаимодействия волновая функция (2.91) уже не является решением уравнения Шредингера

$$H\psi = E\psi, \quad (2.95)$$

где

$$H = H_0 + V, \quad (2.96)$$

V – гамильтониан взаимодействия. В системе с гамильтонианом (2.96) числа заполнения уже не имеют

определенных значений. Можно говорить лишь о вероятностях тех или иных значений этих чисел. Другими словами, необходимо ввести соответствующую амплитуду вероятности $C(n_1, n_2, \dots, t)$. Эта функция играет роль коэффициента разложения произвольного состояния системы с взаимодействием по базисным состояниям $|n_1 n_2 \dots\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1 n_2 \dots} C(n_1, n_2, \dots, t) |n_1 n_2 \dots\rangle. \quad (2.97)$$

Здесь $|C(n_1, n_2, \dots, t)|^2$ – вероятность обнаружить в момент t в состоянии $|\psi(t)\rangle$ n_1 фермионов с квантовыми числами κ_1 , n_2 – с κ_2 и т. д. Величина C представляет собой волновую функцию фермионов в представлении вторичного квантования.

Операторы в методе вторичного квантования выражаются через операторы уничтожения a_κ и рождения a_κ^+ фермионов. Постулируем правило действия оператора уничтожения на состояние с определенными числами заполнения:

$$a_\kappa |\dots n_\kappa \dots\rangle = (-1)^{\sigma_\kappa} n_\kappa |\dots n_\kappa - 1 \dots\rangle. \quad (2.98)$$

Здесь $n_\kappa = 0, 1$, а $\sigma_\kappa = n_1 + n_2 + \dots + n_{\kappa-1}$ – сумма чисел заполнения в состояниях, расположенных ниже состояния κ . Множитель $(-1)^{\sigma_\kappa}$ появился в результате следующей договоренности. Будем считать, что если κ_1 – номер первой строки в определителе (2.91), то в результате действия оператора a_{κ_1} на состояние (2.91) знак перед n_{κ_1} в (2.98) не меняется. При этом состояние с N фермионами Φ^N превращается в $(N-1)$ -частичное состояние, первая строка определителя (2.91) вычеркивается, а максимальный аргумент волновой функции становится равным q_{N-1} :

$$a_{\kappa_1} \Phi_{\kappa_1 \kappa_2 \dots \kappa_N}^N = \Phi_{\kappa_2 \kappa_3 \dots \kappa_N}^{N-1} =$$

$$= \frac{1}{[(N-1)!]^{1/2}} \sum_P (-1)^P P \left[\varphi_{\kappa_2}(q_1) \varphi_{\kappa_3}(q_2) \dots \varphi_{\kappa_N}(q_{N-1}) \right].$$

Если же κ – номер произвольной строки, то ее необходимо предварительно переставить через $\kappa - 1$ строк на первое место, а затем удалить. В результате перестановок появляется множитель $(-1)^{\sigma_\kappa}$. Множитель n_κ в (2.98) учитывает принцип Паули. При $n_\kappa = 0$ правая часть равенства (2.98) равна нулю.

Эрмитово сопряженный оператор a_κ^+ действует на базисное состояние следующим образом:

$$a_\kappa^+ | \dots n_\kappa \dots \rangle = (-1)^{\sigma_\kappa} (1 - n_\kappa) | \dots n_\kappa + 1 \dots \rangle. \quad (2.99)$$

Множитель $1 - n_\kappa$ учитывает принцип Паули: при $n_\kappa = 1$ правая часть равенства (2.99) обращается в нуль. По-прежнему считаем, что строка с номером κ в волновой функции Φ^{N+1} в правой части равенства (2.99) первоначально располагается выше первой строки. При этом знак определителя не меняется. Лишь в результате перестановки верхней строки на свое место возникает множитель $(-1)^{\sigma_\kappa}$. Например,

$$a_\kappa^+ \Phi_{\kappa_1 \kappa_2 \dots \kappa_N}^N = \Phi_{\kappa \kappa_1 \kappa_2 \dots \kappa_N}^{N+1} =$$

$$= \frac{1}{[(N+1)!]^{1/2}} \sum_P (-1)^P P \left[\varphi_\kappa(q_1) \varphi_{\kappa_1}(q_2) \dots \varphi_{\kappa_N}(q_{N+1}) \right].$$

При $\kappa_1 < \kappa < \kappa_2$ имеем отсюда

$$a_\kappa^+ \Phi_{\kappa_1 \kappa_2 \dots \kappa_N}^N = -\Phi_{\kappa_1 \kappa \kappa_2 \dots \kappa_N}^{N+1}.$$

В базисе $\{|n_1 n_2 \dots\rangle\}$ операторы a_κ и a_κ^+ изображаются матрицами:

$$\begin{aligned} \|a_\kappa\| &= \begin{pmatrix} \langle 0|a_\kappa|0\rangle & \langle 0|a_\kappa|1\rangle \\ \langle 1|a_\kappa|0\rangle & \langle 1|a_\kappa|1\rangle \end{pmatrix} = (-1)^{\sigma_\kappa} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \|a_\kappa^+\| &= \begin{pmatrix} \langle 0|a_\kappa^+|0\rangle & \langle 0|a_\kappa^+|1\rangle \\ \langle 1|a_\kappa^+|0\rangle & \langle 1|a_\kappa^+|1\rangle \end{pmatrix} = (-1)^{\Sigma_\kappa} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.100)$$

В формулах (2.98) и (2.99) троеточиями обозначены числа заполнения, которые не изменяются в результате действия операторов. В (2.100) эти троеточия опущены.

Обычно операторы a_κ и a_κ^+ определяются по их действию не на динамические переменные n_κ , а на индексы состояния $n_\kappa^{(0)}$, как это принято в (2.98) и (2.99). Результат их действия на произвольную функцию $C(n_1, n_2, \dots)$ чисел заполнения определяется следующим образом (см. Д.А. Киржниц, Полевые методы теории многих частиц, 1963):

$$\begin{aligned} a_\kappa C(\dots, n_\kappa, \dots) &= (-1)^{\sigma_\kappa} \sqrt{1 + n_\kappa} C(\dots, n_\kappa + 1, \dots), \\ a_\kappa^+ C(\dots, n_\kappa, \dots) &= (-1)^{\sigma_\kappa} \sqrt{2 - n_\kappa} C(\dots, n_\kappa - 1, \dots). \end{aligned} \quad (2.101)$$

Действуя этими операторами на волновую функцию $\langle n_1 n_2 \dots | n_1^{(0)} n_2^{(0)} \dots \rangle$, получаем выражения, пропорциональные

$$\begin{aligned} \delta_{n_1, n_1^{(0)}} \dots \delta_{n_\kappa + 1, n_\kappa^{(0)}} \dots &= \delta_{n_1, n_1^{(0)}} \dots \delta_{n_\kappa, n_\kappa^{(0)} - 1} \dots, \\ \delta_{n_1, n_1^{(0)}} \dots \delta_{n_\kappa - 1, n_\kappa^{(0)}} \dots &= \delta_{n_1, n_1^{(0)}} \dots \delta_{n_\kappa, n_\kappa^{(0)} + 1} \dots \end{aligned}$$

Таким образом, определения (2.98), (2.99) и (2.101) эквивалентны, поскольку $\sqrt{1 - n_\kappa^{(0)}} = (1 - n_\kappa^{(0)})$ при $n_\kappa^{(0)} = 0, 1$.

Оператор числа фермионов в состоянии κ равен

$$n_\kappa = a_\kappa^+ a_\kappa. \quad (2.102)$$

Оператор полного числа фермионов

$$N = \sum_{\kappa} a_{\kappa}^+ a_{\kappa}. \quad (2.103)$$

Используя правила (2.98) и (2.99), получаем

$$n_{\kappa} |...n_{\kappa}...\rangle = n_{\kappa} |...n_{\kappa}...\rangle, \quad (2.104)$$

т.е. собственными векторами оператора n_{κ} являются векторы состояний с определенными числами заполнения, а собственными числами – числа заполнения.

Состояние, в котором нет частиц, называется вакуумным состоянием:

$$|00...\rangle = |0\rangle.$$

Из (2.98) следует

$$a_{\kappa} |0\rangle = 0 \quad (2.105)$$

для любого κ . Базисные состояния $|n_1 n_2...\rangle$ получаем, действуя на вакуум операторами рождения:

$$|n_1 n_2...n_{\kappa}...\rangle = (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} ... (a_{\kappa}^+)^{n_{\kappa}} ... |0\rangle. \quad (2.106)$$

Метод вторичного квантования удобен и в том случае, когда число частиц в системе не фиксировано, а может принимать любые целочисленные значения $N = 0, 1, 2, 3, ...$. Базисные векторы в пространстве состояний системы с нефиксированным числом частиц могут быть выбраны такими: $|0\rangle, |100...\rangle, |010...\rangle, ... , |110...\rangle, |011...\rangle, ...$. Произвольный вектор состояния такой системы является линейной суперпозицией этих базисных векторов. Пространство, образованное такими векторами, называется пространством Фока.

Используя правила (2.98) и (2.99), получим перестановочные соотношения для фермиевских операторов a_{κ} и a_{κ}^+ . Для этого подействуем оператором $a_{\kappa} a_{\kappa}^+$ на состояние $|...n_{\kappa}...\rangle$:

$$\begin{aligned}
a_{\kappa} a_{\kappa}^{+} | \dots n_{\kappa} \dots \rangle &= a_{\kappa} (-1)^{\sigma_{\kappa}} (1 - n_{\kappa}) | \dots n_{\kappa} + 1 \dots \rangle = \\
&= (-1)^{\sigma_{\kappa}} (1 - n_{\kappa}) (-1)^{\sigma_{\kappa}} (n_{\kappa} + 1) | \dots n_{\kappa} \dots \rangle = \\
&= (1 - n_{\kappa}^2) | \dots n_{\kappa} \dots \rangle.
\end{aligned}$$

Складывая это выражение с (2.104) и учитывая $n_{\kappa}^2 = n_{\kappa}$ при $n_{\kappa} = 0, 1$, получаем

$$a_{\kappa} a_{\kappa}^{+} + a_{\kappa}^{+} a_{\kappa} = 1.$$

Получим теперь антикоммутатор

$$\{a_{\kappa}, a_l^{+}\} = a_{\kappa} a_l^{+} + a_l^{+} a_{\kappa},$$

где $\kappa \neq l$. Для определенности считаем $\kappa < l$. Тогда

$$\begin{aligned}
& (a_{\kappa} a_l^{+} + a_l^{+} a_{\kappa}) | \dots n_{\kappa} \dots n_l \dots \rangle = \\
&= a_{\kappa} (-1)^{\sigma_l} (1 - n_l) | \dots n_{\kappa} \dots n_l + 1 \dots \rangle + a_l^{+} (-1)^{\sigma_{\kappa}} n_{\kappa} | \dots n_{\kappa} - 1 \dots n_l \dots \rangle = \\
&= (-1)^{\sigma_l} (1 - n_l) (-1)^{\sigma_{\kappa}} n_{\kappa} | \dots n_{\kappa} - 1 \dots n_l + 1 \dots \rangle + \\
&+ (-1)^{\sigma_{\kappa}} n_{\kappa} (-1)^{\sigma_l - 1} (1 - n_l) | \dots n_{\kappa} - 1 \dots n_l + 1 \dots \rangle = 0.
\end{aligned}$$

Множитель $(-1)^{\sigma_l - 1}$ во втором слагаемом появился потому, что в результате действия оператора a_{κ} число частиц в состоянии κ уменьшилось на единицу.

Аналогично получаем

$$\{a_{\kappa}, a_l\} = 0, \quad \{a_{\kappa}^{+}, a_l^{+}\} = 0.$$

Таким образом, перестановочные соотношения для фермиевских операторов вторичного квантования отличаются от таковых для бозевских операторов заменой коммутаторов антикоммутаторами:

$$\{a_{\kappa}, a_l\} = 0, \quad \{a_{\kappa}^{+}, a_l^{+}\} = 0, \quad \{a_{\kappa}, a_l^{+}\} = \delta_{\kappa l}. \quad (2.107)$$

Отсюда следует

$$(a_{\kappa})^2 = 0, \quad (a_{\kappa}^{+})^2 = 0, \quad (2.108)$$

т.е. уничтожение и рождение двух (и большего числа) частиц в одном состоянии невозможно.

Полевые операторы фермионов $\psi(q)$ и $\psi^+(q)$ связаны с операторами вторичного квантования соотношениями (2.37):

$$\psi(q) = \sum_{\kappa} a_{\kappa} \varphi_{\kappa}(q), \quad \psi^+(q) = \sum_{\kappa} a_{\kappa}^+ \varphi_{\kappa}^*(q), \quad (2.109)$$

$$a_{\kappa} = \int dq \psi(q) \varphi_{\kappa}^*(q), \quad a_{\kappa}^+ = \int dq \psi^+(q) \varphi_{\kappa}(q).$$

Из формул (2.107) и условия полноты базисных функций $\varphi_{\kappa}(q)$ получаем перестановочные соотношения для фермиевских полевых операторов:

$$\begin{aligned} \{\psi(q), \psi(q')\} &= 0, \\ \{\psi^+(q), \psi^+(q')\} &= 0, \\ \{\psi(q), \psi^+(q')\} &= \delta(q - q'). \end{aligned} \quad (2.110)$$

Приведенные в р. 2.6 формулы (2.53), (2.57), (2.59) и (2.60) для операторов физических величин в представлении вторичного квантования бозонов остаются справедливыми и для фермионов. Аддитивный оператор (2.45) равен

$$F^{(1)} = \sum_{\kappa l} f_{\kappa l}^{(1)} a_{\kappa}^+ a_l, \quad (2.111)$$

$$F^{(1)} = \int dq \psi^+(q) f^{(1)} \psi(q), \quad (2.112)$$

где

$$f_{\kappa l}^{(1)} = \int dq \varphi_{\kappa}^*(q) f^{(1)} \varphi_l(q). \quad (2.113)$$

Если в качестве одночастичного базиса выбраны собственные векторы оператора $f^{(1)}$, оператор (2.111) принимает вид

$$F^{(1)} = \sum_{\kappa} f_{\kappa}^{(1)} a_{\kappa}^+ a_{\kappa}$$

(см. (2.53)). Оператор бинарного типа (2.56) равен

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{iklm} \langle ik | f^{(2)} | lm \rangle a_i^+ a_k^+ a_m a_l, \quad (2.114)$$

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \int dq_1 \int dq_2 \psi^+(q_1) \psi^+(q_2) f^{(2)}(q_1, q_2) \psi(q_2) \psi(q_1), \quad (2.115)$$

где

$$\langle ik | f^{(2)} | lm \rangle = \int dq_1 \int dq_2 \varphi_i^*(q_1) \varphi_k^*(q_2) f^{(2)} \varphi_l(q_1) \varphi_m(q_2). \quad (2.116)$$

Оператор числа фермионов равен

$$N = \int dq \psi^+(q) \psi(q). \quad (2.117)$$

Оператор F любого типа выражается через полевые операторы соотношением (см. Д.А. Киржниц, Полевые методы теории многих частиц, 1963):

$$F = \frac{1}{N!} \int dq_1 \dots dq_N \psi^+(q_N) \dots \psi^+(q_1) F \psi(q_1) \dots \psi(q_N). \quad (2.118)$$

Эрмитовость этого оператора очевидна. Для доказательства этого равенства достаточно учесть требование (2.46) неизменности матричных элементов оператора F при переходе от координатного представления к представлению вторичного квантования. Запишем (2.46) в виде

$$\langle \psi_{n'_0} | F | \psi_{n_0} \rangle = \int dq \Phi_{n'_0}^*(q) F \Phi_{n_0}(q), \quad (2.119)$$

где $|\psi_{n_0}\rangle = |\dots n_0 \dots\rangle$ – кет-вектор состояния системы фермионов

с фиксированными числами частиц $n_0 = (n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, \dots)$,

$\Phi_{n_0}(q) = \langle q | n_0 \rangle$ – базисная функция (2.91), $q = (q_1, \dots, q_N)$,

$dq = \prod_{a=1}^N dq_a$. Формула (2.119) вытекает из соотношения

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \psi(q_1) \dots \psi(q_N) | \psi_{n_0} \rangle = \Phi_{n_0}(q) | 0 \rangle. \quad (2.120)$$

Действительно, подставляя (2.118) и (2.120) в левую часть равенства (2.119), получаем правую часть:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{n'_0} | F | \psi_{n_0} \rangle &= \\
&= \frac{1}{N!} \langle \psi_{n'_0} | \int dq \psi^+(q_N) \dots \psi^+(q_1) F \psi(q_1) \dots \psi(q_N) | \psi_{n_0} \rangle = \\
&= \int dq \langle 0 | \Phi_{n'_0}^*(q) F \Phi_{n_0}(q) | 0 \rangle = \int dq \Phi_{n'_0}^*(q) F \Phi_{n_0}(q).
\end{aligned}$$

Убедимся в справедливости равенства (2.120). Для этого предварительно прокоммутируем операторы $\psi(q)$ и N :

$$\begin{aligned}
[\psi(q), N] &= \int dq' [\psi(q), \psi^+(q') \psi(q')] = \\
&= \int dq' \delta(q - q') \psi(q') = \psi(q).
\end{aligned} \tag{2.121}$$

Произведение операторов ψ в левой части равенства (2.120), действуя на состояние $|\dots n_0 \dots\rangle$, уничтожает все частицы, превращая это состояние в вакуумное. Каждый акт уничтожения сопровождается появлением в левой части равенства одночастичной волновой функции $\varphi_k(q)$, причем возникающее произведение этих функций будет, как и исходное произведение ψ -операторов, антисимметричным относительно перестановки координат частиц. В результате левая часть равенства (2.120) совпадает с правой, если только нормировочный коэффициент в (2.120) правильный. Убедимся в этом.

Из формулы (2.94) и $\langle 0 | 0 \rangle = 1$ следует, что норма вектора в правой части равенства (2.120) равна единице. Норма левой части равна

$$(N!)^{-1} \int dq \langle \psi_{n_0} | \psi^+(q_N) \dots \psi^+(q_1) \psi(q_1) \dots \psi(q_N) | \psi_{n_0} \rangle.$$

Если входящий сюда оператор

$$N = \int dq_1 \psi^+(q_1) \psi(q_1)$$

прокоммутировать с $\psi(q_2)$, получим

$$(N!)^{-1} \int dq_3 \dots dq_N \langle \psi_{n_0} | \psi^+(q_N) \dots \psi^+(q_3) \times \\ \times N(N-1) \psi(q_3) \dots \psi(q_N) | \psi_{n_0} \rangle,$$

где

$$N = \int dq_2 \psi^+(q_2) \psi(q_2).$$

Продолжая этот процесс, находим

$$(N!)^{-1} \langle \psi_{n_0} | N(N-1)(N-2) \dots | \psi_{n_0} \rangle = (N!)^{-1} \langle \psi_{n_0} | N! | \psi_{n_0} \rangle = 1,$$

т.е. норма вектора в правой части равенства (2.120) действительно равна единице.

Из общей формулы (2.118) в случаях аддитивного и бинарного операторов получаем выражения (2.112) и (2.115). Подставляя в них разложения (2.109), приходим к формулам (2.111) и (2.114), выражающим операторы $F^{(1)}$ и $F^{(2)}$ через операторы вторичного квантования.

Прежде чем переходить к изложению применений метода вторичного квантования, коротко резюмируем сказанное в рр. 2.1-2.8.

Известно, что состояние частицы в квантовой механике описывается вектором комплексного пространства Гильберта. Это пространство реализуется при помощи функций с суммируемым квадратом, заданных на некотором множестве M , снабженном мерой. Для векторов пространства Гильберта определены операции сложения и умножения на комплексные числа, удовлетворяющие известным требованиям алгебры. Базис в этом пространстве мы обозначали $\{|\kappa\rangle\}$.

Если система состоит из N частиц, то ее состояние описывается волновыми функциями с суммируемым квадратом N переменных $q_1, \dots, q_N$. Это пространство обычно обозначается H_N . Скалярное произведение векторов Φ и Ψ в H_N задается формулой

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int dq_1 \dots dq_N \Phi^*(q_1, \dots, q_N) \Psi(q_1, \dots, q_N).$$

Норма вектора Φ обозначается $\|\Phi\|$ и равна конечному числу $(\langle\Phi|\Phi\rangle)^{1/2}$. Базис в многочастичном пространстве мы выше обозначали $\{|\kappa_1 \dots \kappa_N\rangle\}$.

Если система состоит из N одинаковых частиц, множества M_a , на которых определены одночастичные волновые функции, совпадают. В этом случае нет необходимости рассматривать все пространство Гильберта H_N . Достаточно ограничиться подпространствами симметричных функций для бозонов и антисимметричных для фермионов.

Состояния системы, состоящей из переменного числа частиц, описываются векторами пространства H , которое является прямой суммой одномерного пространства H_0 , которое отвечает отсутствию частиц, и упомянутых выше пространств H_N :

$$H = \sum_{N=0}^{\infty} \oplus H_N.$$

Пространство H называется пространством Фока. Вектор ψ в этом пространстве может описывать систему, число частиц которой не является интегралом движения. Его удобно представить в виде столбца

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1(q_1) \\ \psi_2(q_1, q_2) \\ \vdots \end{pmatrix},$$

где ψ_N принадлежит H_N . Скалярное произведение векторов Φ и ψ определяется соотношением

$$\langle\Phi|\psi\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \int dq_1 \dots dq_N \Phi_N^*(q_1, \dots, q_N) \psi_N(q_1, \dots, q_N).$$

Норма вектора ψ равна

$$\|\psi\| = \left[\sum_{N=0}^{\infty} \|\psi_N\|^2 \right]^{1/2}.$$

Операторы вторичного квантования и операторы физических величин действуют в пространстве Фока.

Система, состоящая из одинаковых бозонов, описывается с помощью подпространства $H_B \subset H$ симметричных функций, а система с переменным числом фермионов описывается векторами из подпространства $H_F \subset H$ антисимметричных функций. Эти подпространства образуют пространства состояний бозонов и фермионов, использованные в рр. 2.1-2.8.

2.9. Гамильтониан взаимодействующих электронов

А. Исходным понятием нерелятивистской квантовой теории является оператор Гамильтона рассматриваемой системы. В этом разделе мы более подробно рассмотрим гамильтониан электронов в проводнике. В координатном представлении он равен

$$H = H_0 + V, \quad (2.122)$$

где

$$H_0 = \sum_{a=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_a + U(\vec{r}_a) \right] \quad (2.123)$$

– гамильтониан электронов с массой m в потенциальном поле $U(\vec{r})$, а

$$V = \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} v_{ab}$$

– оператор энергии парного взаимодействия электронов друг с другом. Если в качестве одночастичного базиса выбрать

собственные векторы гамильтониана электрона во внешнем поле, т.е.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right] |\kappa\rangle = \varepsilon_\kappa |\kappa\rangle, \quad (2.124)$$

то оператор (2.123) в представлении вторичного квантования будет иметь вид

$$H_0 = \sum_{\kappa} \varepsilon_\kappa a_\kappa^+ a_\kappa \quad (2.125)$$

(см. р. 2.8). Часто роль базиса в методе вторичного квантования играют плоские волны (2.39). Тогда оператор H_0 равен

$$H_0 = \sum_{\vec{p}\sigma} \varepsilon_p a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma} + \sum_{\vec{p}\vec{p}'\sigma} \langle \vec{p}' | U | \vec{p} \rangle a_{\vec{p}'\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma} . \quad (2.126)$$

Здесь ε_p – энергия электрона с импульсом $\vec{p}$, $\langle \vec{p}' | U | \vec{p} \rangle$ – одночастичная матрица энергии электрона в поле $U(\vec{r})$ (см. (2.113)).

В базисе (2.39) гамильтониан парного взаимодействия электронов имеет вид

$$V = \frac{1}{2} \sum_{iklm} \langle ik | \nu | lm \rangle a_i^+ a_k^+ a_m a_l, \quad (2.127)$$

где каждый из индексов i, k, l, m равен $(\vec{p}, \sigma)$, $\nu(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ – потенциальная энергия взаимодействия двух электронов. Предполагаем, что она зависит лишь от расстояния $(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ между ними.

Из формул (2.39) и (2.116) следует, что входящая в (2.127) двухэлектронная матрица равна

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1' \sigma_1', \vec{k}_2' \sigma_2' | \nu | \vec{k}_1 \sigma_1, \vec{k}_2 \sigma_2 \rangle &= \frac{1}{V^2} \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha_2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \times \\ &\times \exp \left[i \left(-\vec{k}_1' \vec{r}_1 - \vec{k}_2' \vec{r}_2 + \vec{k}_1 \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \vec{r}_2 \right) \right] \chi_{\sigma_1'}^* (\alpha_1) \chi_{\sigma_2'}^* (\alpha_2) \times \\ &\times \chi_{\sigma_1} (\alpha_1) \chi_{\sigma_2} (\alpha_2) \nu(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \end{aligned}$$

Здесь $\chi_\sigma(\alpha) = \langle \alpha | \sigma \rangle = \delta_{\alpha\sigma}$ – спиновые волновые функции. Они ортонормированы:

$$\sum_{\alpha_1} \chi_{\sigma'_1}^*(\alpha_1) \chi_{\sigma_1}(\alpha_1) = \delta_{\sigma'_1\sigma_1}. \quad (2.129)$$

Следовательно, матричный элемент (2.128) содержит множитель $\delta_{\sigma'_1\sigma_1} \delta_{\sigma'_2\sigma_2}$, выражающий закон сохранения проекции спина каждого электрона при рассеянии. Как и в р. 2.7, удобно перейти к переменным интегрирования (2.67) и учесть (2.70). Тогда матричный элемент (2.128) становится равным

$$\frac{1}{V} \delta_{\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2, \vec{k}_1 + \vec{k}_2} \delta_{\sigma'_1\sigma_1} \delta_{\sigma'_2\sigma_2} \nu(\vec{k}'_1 - \vec{k}_1), \quad (2.130)$$

где $\nu(\vec{q})$ – фурье-компонента (2.69) энергии взаимодействия двух электронов

$$\nu(\vec{q}) = \int d\vec{r} v(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}}. \quad (2.131)$$

Символ Кронекера $\delta_{\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2, \vec{k}_1 + \vec{k}_2}$ связан с законом сохранения импульса при столкновении двух электронов. Как и в р. 2.7, мы перешли в (2.130) к волновым векторам электронов $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$.

После подстановки (2.130) в (2.127) и сдвига индексов суммирования находим

$$V = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{q}} \nu(\vec{q}) a_{(\vec{k}_1 + \vec{q})\sigma_1}^+ a_{(\vec{k}_2 - \vec{q})\sigma_2}^+ a_{\vec{k}_2\sigma_2} a_{\vec{k}_1\sigma_1}. \quad (2.132)$$

Здесь $\hbar\vec{q} = \vec{p}'_1 - \vec{p}_1$ – передача импульса первой частице в процессе рассеяния. Гамильтониан (2.132) описывает акты

взаимного рассеяния электронов $(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \rightarrow (\vec{p}'_1, \vec{p}'_2)$ без изменения ориентации спина, показанные на рис. 2.2.

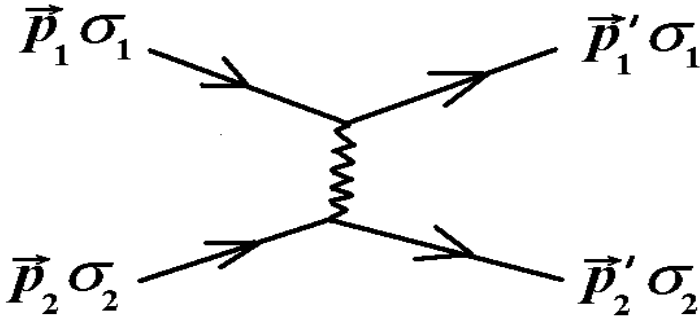


Рис. 2.2. Акт взаимного рассеяния двух электронов

Суммируя операторы (2.126) и (2.132), получаем гамильтониан взаимодействующих электронов во внешнем поле U :

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_k a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'\sigma} U_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}'\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} + \\
 & + \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{q}} v(\vec{q}) a_{(\vec{k}_1+\vec{q})\sigma_1}^+ a_{(\vec{k}_2-\vec{q})\sigma_2}^+ a_{\vec{k}_2\sigma_2} a_{\vec{k}_1\sigma_1}.
 \end{aligned} \tag{2.133}$$

Б. Рассмотрим гамильтониан взаимодействия электронов в проводнике с N_i примесными атомами, расположенными в случайных точках $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_i}$, при наличии постоянного и однородного магнитного поля $\vec{H}$, параллельного оси z . Векторный потенциал магнитного поля выберем в виде $\vec{A} = (0, Hx, 0)$. Гамильтониан электронов в магнитном поле в координатном представлении равен

$$H_0 = \sum_a h_a ,$$

где

$$h = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \vec{\mu} \vec{H}, \quad (2.134)$$

– гамильтониан одного электрона. Здесь e – величина заряда электрона, $\vec{\mu}$ – оператор его спинового магнитного момента, c – скорость света. В качестве одноэлектронного базиса выберем собственные функции гамильтониана (2.134). Они равны (1.146), а собственные значения оператора h равны (1.147). В этом базисе гамильтониан взаимодействия электронов с примесными атомами равен

$$U = \sum_{\kappa\kappa'\sigma} \langle \kappa' | \sum_{j=1}^{N_i} u(\vec{r} - \vec{r}_j) | \kappa \rangle a_{\kappa'\sigma}^+ a_{\kappa\sigma}, \quad (2.135)$$

где $\kappa = (n, k_y, k_z)$ – орбитальные квантовые числа Ландау, $u(\vec{r} - \vec{r}_j)$ – энергия взаимодействия электрона, находящегося в точке $\vec{r}$, с примесью в точке $\vec{r}_j$. Мы считаем, что она не зависит от спиновых переменных электрона и примеси.

Используем фурье-преобразование энергии u :

$$u(\vec{r} - \vec{r}_j) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} u(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}_j)}.$$

Это позволяет записать матричный элемент, входящий в (2.135), в виде

$$\langle \kappa' | \sum_{j=1}^{N_i} u(\vec{r} - \vec{r}_j) | \kappa \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} u(\vec{q}) I_{\kappa'\kappa}(\vec{q}) \rho(\vec{q}), \quad (2.136)$$

где

$$I_{\kappa'\kappa}(\vec{q}) = \langle \kappa' | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \kappa \rangle \quad (2.137)$$

– матричные элементы плоской волны в базисе Ландау,

$$\rho(\vec{q}) = \sum_{j=1}^{N_i} e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} \quad (2.138)$$

– компонента Фурье плотности примесных атомов

$$n_i(\vec{r}) = \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j).$$

В результате гамильтониан (2.135) равен

$$U = \frac{1}{V} \sum_{\kappa\kappa'\sigma\vec{q}} u(\vec{q}) \rho(\vec{q}) I_{\kappa'\kappa}(\vec{q}) a_{\kappa'\sigma}^+ a_{\kappa\sigma}. \quad (2.139)$$

В отсутствие магнитного поля в роли κ выступает волновой вектор электрона, а матрица (2.137) равна

$$I_{\vec{k}\vec{k}'}(\vec{q}) = \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q}}. \quad (2.140)$$

В этом случае гамильтониан (2.139) принимает вид

$$U = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\vec{q}\sigma} u(\vec{q}) \rho(\vec{q}) a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma}. \quad (2.141)$$

Этот гамильтониан описывает акты рассеяния электронов, показанные на рис. 2.3. Электрон с импульсом $\hbar\vec{k}$, упруго

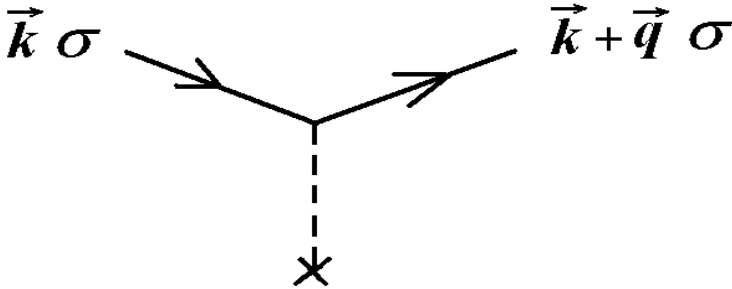


Рис. 2.3. Акт электронно-примесного рассеяния

сталкиваясь с примесным атомом, приобретает импульс $\hbar\vec{q}$ без изменения проекции спина.

В. Получим гамильтониан взаимодействия электронов в идеальном проводнике с колебаниями атомов простой кристаллической решетки. По-прежнему считаем, что на электроны действует магнитное поле $\vec{H}$, а колебания ионов, образующих решетку, считаем малыми.

Гамильтониан электрона в поле ионов и в магнитном поле равен

$$h = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \sum_n \nu(\vec{r} - \vec{r}_n), \quad (2.142)$$

где $\nu(\vec{r} - \vec{r}_n)$ – потенциальная энергия электрона в поле n -го иона. Его положение $\vec{r}_n = \vec{r}_n^0 + \vec{u}_n$, где $\vec{r}_n^0$ – положение равновесия, а $\vec{u}_n$ – смещение из этого положения. Поскольку смещение $\vec{u}_n$ считается малым по сравнению с постоянной решетки, можем разложить $\nu(\vec{r} - \vec{r}_n^0 - \vec{u}_n)$ по степеням $\vec{u}_n$. Ограничиваясь линейным членом, получаем

$$\nu(\vec{r} - \vec{r}_n) = \nu(\vec{r} - \vec{r}_n^0) - \vec{u}_n \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \nu(\vec{r} - \vec{r}_n^0),$$

что дает

$$h = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \sum_n \nu(\vec{r} - \vec{r}_n^0) - \sum_n \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \nu(\vec{r} - \vec{r}_n^0) \vec{u}_n. \quad (2.143)$$

Здесь $\vec{u}_n$ – оператор смещения n -го иона, $\sum_n$ – суммирование по узлам решетки. Первые два слагаемых в правой части (2.143) имеют отношение к проблеме блоховского электрона в магнитном поле, а последнее слагаемое представляет собой гамильтониан взаимодействия электронов с колебаниями ионов.

В представлении вторичного квантования гамильтониан взаимодействия электронов с колебаниями решетки равен

$$U = \sum_{\kappa \kappa' \sigma} \langle \kappa' | - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \sum_n \nu(\vec{r} - \vec{r}_n^0) \vec{u}_n | \kappa \rangle a_{\kappa' \sigma}^+ a_{\kappa \sigma}, \quad (2.144)$$

где κ – орбитальные числа Ландау. Используем фурье-разложение функции ν . Тогда гамильтониан (2.144) принимает вид

$$U = -\frac{i}{V} \sum_{\kappa\kappa'\sigma} \sum_{n\vec{q}} \nu(\vec{q})(\vec{q}\vec{u}_n) e^{-i\vec{q}\vec{r}_n^0} I_{\kappa'\kappa}(\vec{q}) a_{\kappa'\sigma}^+ a_{\kappa\sigma}. \quad (2.145)$$

В идеальной решетке оператор смещения иона из положения равновесия может быть разложен по плоским волнам (см. А.М. Косевич, Теория кристаллической решетки, 1988):

$$\vec{u}_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN_0}} \sum_{\vec{f}j} \frac{\vec{e}_{\vec{f}j}}{\sqrt{\omega_{\vec{f}j}}} (b_{\vec{f}j} + b_{-\vec{f}j}^+) \exp(i\vec{f}\vec{r}_n^0), \quad (2.146)$$

где M – масса иона, N_0 – число ионов, $b_{\vec{f}j}$ и $b_{\vec{f}j}^+$ – бозевские операторы уничтожения и рождения фононов с волновым вектором $\vec{f}$ и частотой $\omega_{\vec{f}j}$, j – номер колебательной ветви, $\vec{e}_{\vec{f}j}$ – поляризационные орты. Подставляя это разложение в (2.145), получаем гамильтониан взаимодействия электронов с фононами в магнитном поле:

$$U = -\frac{i}{V} \sqrt{\frac{\hbar N_0}{2M}} \sum_{\vec{f}j} \sum_{\kappa\kappa'\sigma} \frac{\vec{f}\vec{e}_{\vec{f}j}}{\sqrt{\omega_{\vec{f}j}}} \nu(\vec{f}) I_{\kappa'\kappa}(\vec{f}) (b_{\vec{f}j} + b_{-\vec{f}j}^+) a_{\kappa'\sigma}^+ a_{\kappa\sigma}. \quad (2.147)$$

При выводе этой формулы мы учли

$$\sum_n \exp[i(\vec{f} - \vec{q})\vec{r}_n^0] = N_0 \delta_{\vec{f}\vec{q}}$$

и отбросили вклад процессов переброса.

В отсутствие магнитного поля гамильтониан (2.147) равен

$$U = -\frac{i}{V} \sqrt{\frac{\hbar N_0}{2M}} \sum_{\vec{f}j} \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\vec{f}\vec{e}_{\vec{f}j}}{\sqrt{\omega_{\vec{f}j}}} \nu(\vec{f}) \left(a_{(\vec{k}+\vec{f})\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} b_{\vec{f}j} + a_{(\vec{k}-\vec{f})\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} b_{\vec{f}j}^+ \right), \quad (2.148)$$

где учтено $\bar{e}_{-\vec{f}j} = -\bar{e}_{\vec{f}j}$, $\nu(-\vec{f}) = \nu(\vec{f})$.

Гамильтониан (2.148) описывает однофоновые акты рассеяния электронов, показанные на рис. 2.4. Первое

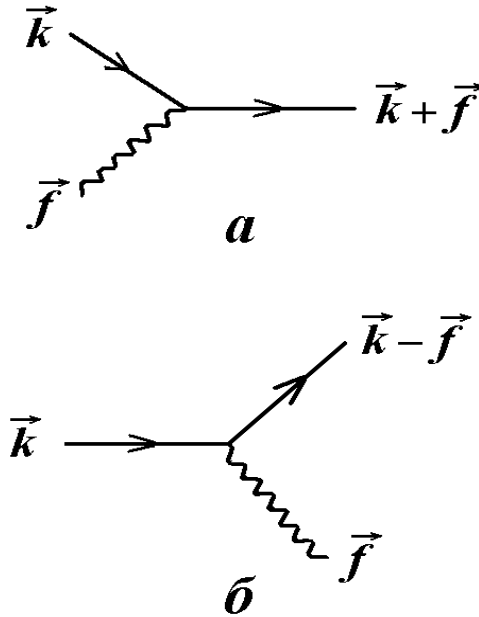


Рис. 2.4. Акты поглощения (а) и излучения (б) фононов электронами

слагаемое описывает процесс поглощения фонона электроном, а второе – процесс излучения. В этих процессах выполняется закон сохранения импульса.

Г. Удобным одночастичным базисом при описании электронов в кристаллической решетке является базис Блоха. Этот базис образуют собственные функции гамильтониана электрона в периодическом поле ионов. Они характеризуются квазиволновым вектором $\vec{k}$, спиновым квантовым числом σ и номером энергетической зоны s . Здесь, краткости ради, мы

будем опускать индексы σ и s . Тогда набор состояний $\{|\vec{k}\rangle\}$, где $\vec{k}$ пробегает первую зону Бриллюэна, образует базис Блоха.

Наряду с блоховским базисом часто используется базис Ванье $\{|\vec{n}\rangle\}$, где $|\vec{n}\rangle$ – локализованное состояние электрона в n -ом узле решетки. Базисные векторы связаны соотношениями (см. Дж. Займан, Принципы теории твердого тела, 1974):

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{k}\vec{n}} |\vec{n}\rangle, \quad |\vec{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{n}} |\vec{k}\rangle, \quad (2.149)$$

где $\sum_{\vec{n}}$ – суммирование по узлам решетки, а $\sum_{\vec{k}}$ – по первой зоне Бриллюэна. Наборы векторов $\{|\vec{k}\rangle\}$ и $\{|\vec{n}\rangle\}$ являются полными и ортонормированными.

Разложим состояние электрона с определенными координатами $|\vec{r}\rangle$ по базису Ванье:

$$|\vec{r}\rangle = \sum_{\vec{n}} |\vec{n}\rangle \langle \vec{n} | \vec{r} \rangle = \sum_{\vec{n}} \varphi_{\vec{n}}^*(\vec{r}) |\vec{n}\rangle, \quad (2.150)$$

где $\varphi_{\vec{n}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{n} \rangle$ – функция Ванье. Тогда, в соответствии с результатами п. 2.4, положим

$$|\vec{r}\rangle = \psi^+(\vec{r})|0\rangle, \quad |\vec{n}\rangle = b_{\vec{n}}^+|0\rangle,$$

где $b_{\vec{n}}^+$ – оператор рождения электрона в узле $\vec{n}$. Подставляя эти соотношения в (2.150), находим

$$\psi^+(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} \varphi_{\vec{n}}^*(\vec{r}) b_{\vec{n}}^+. \quad (2.151)$$

Сопряженное соотношение имеет вид

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} \varphi_{\vec{n}}(\vec{r}) b_{\vec{n}}, \quad (2.152)$$

где $b_{\vec{n}}$ – оператор уничтожения электрона в узле $\vec{n}$.

Аналогично из

$$|\vec{k}\rangle = \sum_{\vec{n}} |\vec{n}\rangle \langle \vec{n} | \vec{k} \rangle$$

находим

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}}^+ &= \sum_{\vec{n}} \langle \vec{n} | \vec{k} \rangle b_{\vec{n}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{k}\vec{n}} b_{\vec{n}}^+, \\ a_{\vec{k}} &= \sum_{\vec{n}} \langle \vec{k} | \vec{n} \rangle b_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}} e^{-i\vec{k}\vec{n}} b_{\vec{n}}. \end{aligned} \quad (2.153)$$

Легко получить и обратные соотношения, выражающие операторы b и b^+ через ψ, ψ^+ или a, a^+ .

Подставим операторы (2.153) в гамильтониан электронов в периодическом поле ионов:

$$\sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{n}\vec{n}'} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{n}')} \varepsilon_{\vec{k}} b_{\vec{n}}^+ b_{\vec{n}'} = \sum_{\vec{n}\vec{n}'} t_{\vec{n}\vec{n}'} b_{\vec{n}}^+ b_{\vec{n}'}, \quad (2.154)$$

где

$$t_{\vec{n}\vec{n}'} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{n}')} . \quad (2.155)$$

Гамильтониан (2.154) описывает прыжки электронов между узлами решетки, причем «интенсивность» прыжка характеризуется матрицей (2.155).

Поскольку $t_{\vec{n}\vec{n}'}$ зависит от разности $\vec{n} - \vec{n}'$, легко показать, что

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} t_{\vec{n}} e^{-i\vec{k}\vec{n}} . \quad (2.156)$$

Это соотношение часто используется в электронной теории металлов.

2.10. Частично-дырочный формализм

В этом разделе мы будем различать электроны, частицы и дырки. Известно, что в основном состоянии свободного

электронного газа все одноэлектронные состояния вплоть до граничного импульса Ферми $p_F = \hbar k_F$ заполнены. Состояния с импульсами $p > p_F$ свободны (рис. 2.5(а)).

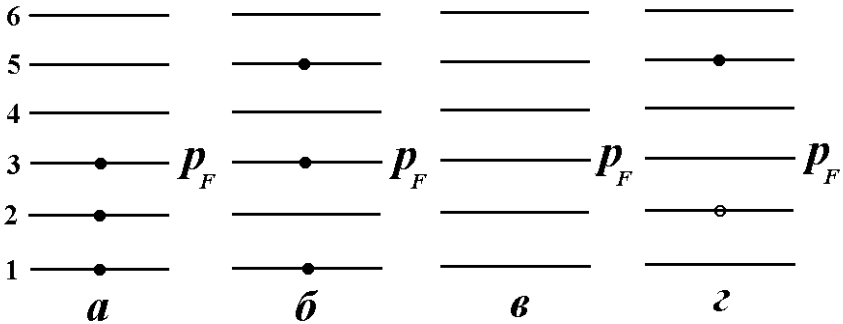


Рис. 2.5. Заполнение однофермионных состояний электронами (а,б), частицами и дырками (г)

Этому состоянию соответствует кет-вектор $|1_1 1_2 1_3 0_4 \dots\rangle$. Возбужденному состоянию на рис. 2.5(б) соответствует вектор $|1_1 0_2 1_3 0_4 1_5 0_6 \dots\rangle$. Ясно, что выписать все нули и единицы для макросистем с большим числом электронов практически невозможно. Поэтому условились основное состояние изображать так, как это показано на рис. 2.5(в), и называть его ферми-вакуумом $|0\rangle$. Что касается возбужденного состояния, то в символе вектора состояния $|\dots\rangle$ достаточно указать только изменения по сравнению с основным состоянием. На рис. 2.5(б) показано элементарное возбуждение системы, при котором электрон из состояния 2 переходит в состояние 5. В незаполненном состоянии 2 оказывается дырка (h), а в состоянии 5 – частица (p) (см. рис. 2.5(г)). Вектор возбужденного состояния на рис. 2.5(г) равен $|1_2^h 1_5^p\rangle$. Способ

описания основного и возбужденных состояний в терминах частиц и дырок удобен, если ограничиться рассмотрением лишь слабо возбужденных состояний. Ясно, что частицей в возбужденном состоянии является обычный электрон.

Из приведенного на рис. 2.5 примера видно, что элементарные возбуждения (частицы и дырки) появляются парами: частицы рождаются выше границы Ферми, а дырки – ниже. Поскольку дырка в состоянии k представляет собой результат удаления электрона из этого состояния, она отвечает также и удалению энергии. Следовательно, энергия дырки отрицательна: $\varepsilon_k^h = -\varepsilon_k$. Координатная часть волновой функции дырки остается такой же, как у электрона, а временная зависимость дается множителем $\exp\left(\frac{i}{\hbar}\varepsilon_k t\right)$.

Используя частично-дырочное описание, мы должны ввести операторы рождения и уничтожения частиц (c^+, c) и дырок (b^+, b) . Их связь с электронными операторами a^+ и a очевидна:

$$\begin{aligned} a_k &= \Theta_{k-k_F} c_k + \Theta_{k_F-k} b_k^+, \\ a_k^+ &= \Theta_{k-k_F} c_k^+ + \Theta_{k_F-k} b_k, \end{aligned} \quad (2.157)$$

где Θ – функция Хевисайда. Например, рождение электрона в состоянии $k < k_F$ эквивалентно уничтожению дырки в этом состоянии.

Операторы c, c^+ и b, b^+ подчиняются обычным перестановочным соотношениям для фермиевских операторов (2.107). Операторы же частиц и дырок антикоммутируют друг с другом, поскольку они относятся к различным состояниям.

Операторы c, c^+ и b, b^+ действуют на числа заполнения частиц n^p и дырок n^h . Поскольку в ферми-вакууме $|0\rangle$ нет частиц и дырок, имеем

$$c_p|0\rangle = 0, \quad b_p|0\rangle = 0. \quad (2.158)$$

Операторы числа частиц и дырок в состоянии k равны соответственно

$$n_k^p = c_k^+ c_k, \quad n_k^h = b_k^+ b_k, \quad (2.159)$$

причем собственными числами этих операторов являются числа частиц n_k^p и дырок n_k^h . Они являются независимыми переменными волновой функции системы при частично-дырочном подходе.

В соответствии с (2.157) полевые операторы электронов разбиваются на сумму рождающей и уничтожающей частей:

$$\begin{aligned} \psi(q) &= \sum_{k < k_F} \varphi_k(q) b_k^+ + \sum_{k > k_F} \varphi_k(q) c_k = \\ &= \psi_h^{(+)}(q) + \psi_p^{(-)}(q), \\ \psi^+(q) &= \sum_{k < k_F} \varphi_k^*(q) b_k + \sum_{k > k_F} \varphi_k^*(q) c_k^+ = \\ &= \psi_h^{(-)}(q) + \psi_p^{(+)}(q), \end{aligned} \quad (2.160)$$

где индексами $(\pm)$ обозначены операторы рождения и уничтожения частиц и дырок. Формулы (2.157) и (2.160) остаются справедливыми и при наличии не зависящего от времени внешнего поля. Только смысл полного набора квантовых чисел k иной.

Получим гамильтониан электронов во внешнем поле в частично-дырочном формализме. Для этого операторы (2.157) подставим в формулу (2.125):

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k = \\ &= \sum_{\varepsilon_k < \varepsilon_F} \varepsilon_k b_k b_k^+ + \sum_{\varepsilon_k > \varepsilon_F} \varepsilon_k c_k^+ c_k. \end{aligned} \quad (2.161)$$

Здесь $|k\rangle$ – собственный вектор гамильтониана электрона во внешнем поле, соответствующий собственному значению ε_k , символы $\sum_{\varepsilon_k < \varepsilon_F}$ и $\sum_{\varepsilon_k > \varepsilon_F}$ означают суммирование по состояниям дырок и частиц соответственно, ε_F – энергия Ферми электронов во внешнем поле.

2.11. Взаимодействующие электроны

В этом разделе мы рассмотрим теорию взаимодействующих друг с другом электронов, аналогичную теории неидеального бозе-газа в р. 2.7 (см. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Статистическая физика, 1964; А.С. Давыдов, Квантовая механика, 1973).

В р. 2.9 показано, что гамильтониан системы электронов, взаимодействующих парными силами, имеет вид

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{q}} v(\vec{q}) \times \\ \times a_{(\vec{k}_1 + \vec{q})\sigma_1}^+ a_{(\vec{k}_2 - \vec{q})\sigma_2}^+ a_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_1 \sigma_1}, \quad (2.162)$$

где

$$v(\vec{q}) = \int d\vec{r} v(r) e^{-i\vec{q}\vec{r}}. \quad (2.163)$$

Мы используем этот гамильтониан для объяснения явления сверхпроводимости металлов при низких температурах.

Теорию сверхпроводимости построили Дж. Бардин, Л. Купер и Дж. Шриффер (БКШ) в 1957 году. В 1958 году свой вариант этой теории предложил Н.Н. Боголюбов. В этой теории учитывается короткодействующее притяжение электронов, обусловленное обменом фононами. Притяжение приводит к спариванию электронов с противоположными импульсами и спинами. Пары электронов (куперовские пары) являются

бозонами, а сверхпроводимость представляет собой сверхтекучесть куперовских пар.

В соответствии с этой идеей оставим в $\sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{q}}$ слагаемые с $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2 = 0$ и $\sigma_1 = -\sigma_2$. Тогда

гамильтониан (2.162) примет вид

$$H' = \sum_{\vec{k} \sigma} \xi_{(\vec{k})} a_{\vec{k} \sigma}^+ a_{\vec{k} \sigma} - \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k} \vec{k}' \sigma} \left| v(\vec{k}' - \vec{k}) \right| a_{\vec{k}' \sigma}^+ a_{-\vec{k}' (-\sigma)}^+ a_{-\vec{k} (-\sigma)} a_{\vec{k} \sigma}. \quad (2.164)$$

Чтобы избежать необходимости следить за постоянством числа электронов в системе, мы перешли к гамильтониану большого канонического ансамбля Гиббса

$$H' = H - \mu N, \quad (2.165)$$

где μ — химический потенциал электронов. В (2.164) фигурирует

$$\xi_{(\vec{k})} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \quad (2.166)$$

— энергия электрона, отсчитанная от химпотенциала. Слагаемые с различными значениями σ дают одинаковый вклад в гамильтониан, поэтому можно написать

$$H' = 2 \sum_{\vec{k}} \xi(\vec{k}) a_{\vec{k}+}^+ a_{\vec{k}+} - \frac{1}{V} \sum_{\vec{k} \vec{k}'} \left| v_{\vec{k} \vec{k}'} \right| a_{\vec{k}'+}^+ a_{-\vec{k}'-}^+ a_{-\vec{k}-} a_{\vec{k}+}, \quad (2.167)$$

где индексы $\pm$ отвечают двум ориентациям спина электрона.

Гамильтониан (2.167) можно привести к диагональному виду при помощи преобразования Боголюбова:

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}+} &= u_{\vec{k}} b_{\vec{k}0} + v_{\vec{k}} b_{\vec{k}1}^+, \\ a_{-\vec{k}-} &= u_{\vec{k}} b_{\vec{k}1} - v_{\vec{k}} b_{\vec{k}0}^+, \end{aligned} \quad (2.168)$$

где $u_{\vec{k}}$ и $v_{\vec{k}}$ – четные вещественные функции, b и b^+ – новые операторы. Требуя, чтобы они удовлетворяли перестановочным соотношениям (2.107), находим

$$u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1. \quad (2.169)$$

Подставляя соотношения (2.168) и им сопряженные в (2.167), получаем

$$H' = E_0 + H_0 + H_1, \quad (2.170)$$

где

$$E_0 = 2 \sum_{\vec{k}} \xi(\vec{k}) v_{\vec{k}}^2 - \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} |v_{\vec{k}\vec{k}'}| u_{\vec{k}} v_{\vec{k}'} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}'}, \quad (2.171)$$

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \left\{ \xi(\vec{k}) [u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2] + \frac{2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}}{V} \sum_{\vec{k}'} |v_{\vec{k}\vec{k}'}| u_{\vec{k}} v_{\vec{k}'} \right\} \times \\ \times (b_{\vec{k}0}^+ b_{\vec{k}0} + b_{\vec{k}1}^+ b_{\vec{k}1}), \quad (2.172)$$

$$H_1 = \sum_{\vec{k}} \left\{ 2\xi(\vec{k}) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} - \frac{1}{V} (u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2) \sum_{\vec{k}'} |v_{\vec{k}\vec{k}'}| u_{\vec{k}} v_{\vec{k}'} \right\} \times \\ \times (b_{\vec{k}0}^+ b_{\vec{k}1} + b_{\vec{k}1}^+ b_{\vec{k}0}), \quad (2.173)$$

Величина E_0 (2.171) представляет собой энергию основного состояния системы, H_0 – диагональная часть гамильтониана, а H_1 – недиагональная часть. Слагаемые с произведениями четырех ферми-операторов опущены. Они малы при слабом возбуждении системы.

Подберем функции $u_{\vec{k}}$ и $v_{\vec{k}}$ так, чтобы выполнялось не только равенство (2.169), но и слагаемое H_1 в гамильтониане (2.170) обращалось в нуль:

$$2\xi(\vec{k}) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = \frac{1}{V} (u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2) \sum_{\vec{k}'} |v_{\vec{k}\vec{k}'}| u_{\vec{k}} v_{\vec{k}'}. \quad (2.174)$$

Отметим, что это равенство обеспечивает минимум энергии основного состояния (2.171) при дополнительном условии (2.169).

Из уравнений (2.169) и (2.174) получаем

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\xi(k)}{\sqrt{\Delta_k^2 + \xi^2(k)}} \right], \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\xi(k)}{\sqrt{\Delta_k^2 + \xi^2(k)}} \right], \end{aligned} \quad (2.175)$$

где

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}'} |\nu_{\vec{k}\vec{k}'}| u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} . \quad (2.176)$$

С учетом (2.175) уравнение (2.174) становится равным

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}'} \frac{|\nu_{\vec{k}\vec{k}'}| \Delta_{\vec{k}'}}{\sqrt{\Delta_{\vec{k}'}^2 + \xi^2(\vec{k}')}} . \quad (2.177)$$

Подстановка (2.175) и (2.176) в (2.172) дает диагональную часть гамильтониана:

$$H_0 = \sum_{\vec{k}} \sqrt{\xi^2(k) + \Delta_k^2} \left(b_{\vec{k}0}^+ b_{\vec{k}0} + b_{\vec{k}1}^+ b_{\vec{k}1} \right) . \quad (2.178)$$

Это выражение имеет вид гамильтониана квазичастиц со спектром

$$E(\vec{k}) = \sqrt{\xi^2(\vec{k}) + \Delta_k^2} . \quad (2.179)$$

Эти квазичастицы называются боголонами.

Величина Δ_k является энергетической щелью в спектре возбуждений сверхпроводника. Зависимость энергии

квазичастицы от волнового вектора показана на рис. 2.6.

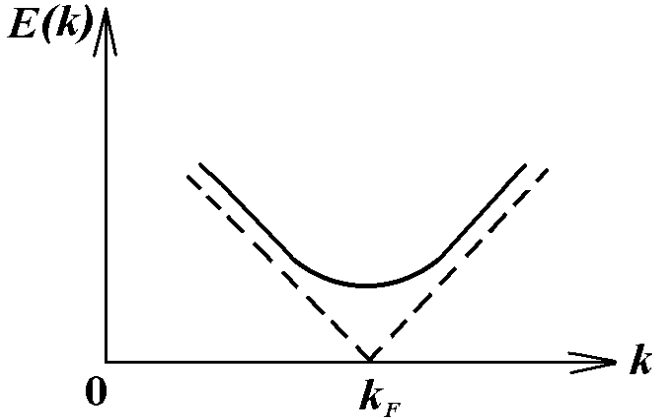


Рис. 2.6. Спектр возбуждений сверхпроводника

Штриховые линии на этом рисунке изображают спектр частиц и дырок в идеальном электронном газе. Каждому значению импульса $\hbar\vec{k}$ соответствуют два типа квазичастиц. Они характеризуются собственными состояниями новых операторов:

$$b_{\vec{k}0}^+ b_{\vec{k}0} |N_{\vec{k}0}\rangle = N_{\vec{k}0} |N_{\vec{k}0}\rangle,$$

$$b_{\vec{k}1}^+ b_{\vec{k}1} |N_{\vec{k}1}\rangle = N_{\vec{k}1} |N_{\vec{k}1}\rangle.$$

Эти состояния имеют энергии $E(\vec{k})N_{\vec{k}0}$ и $E(\vec{k})N_{\vec{k}1}$. В пределе $\Delta_k \rightarrow 0$ они переходят в энергии частиц и дырок в идеальном газе.

Если взаимодействие $v(r)$ в гамильтониане (2.162) короткодействующее, функцию (2.163) можно заменить константой: $v(q) = -|\nu|$. Будем считать, что это равенство имеет место, когда векторы $\vec{k}$ и $\vec{k}'$ лежат внутри интервала

$\vec{k}_F - \vec{q}_0, \vec{k}_F + \vec{q}_0$. Вне этого интервала функцию $v_{\vec{k}\vec{k}}$ считаем равной нулю. Тогда Δ не зависит от $\vec{k}$ внутри этого интервала, и уравнение (2.177) принимает вид

$$1 = \frac{|\nu|}{2V} \sum'_{\vec{k}} \left[\Delta^2 + \xi^2(\vec{k}) \right]^{-1/2}. \quad (2.180)$$

Здесь $\sum'_{\vec{k}}$ – суммирование по указанному выше интервалу.

Заменяя сумму интегралом по правилу

$$\sum_{\vec{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}, \quad (2.181)$$

полагая

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad \xi(k) = \frac{\hbar^2 k_F}{m} (k - k_F), \quad d\vec{k} = 4\pi k_F^2 dk,$$

получаем уравнение для Δ

$$1 = \frac{|\nu| k_F^2}{4\pi^2} \int_{-q_0}^{q_0} dx \left[\Delta^2 + \left(\frac{\hbar^2 k_F}{m} x \right)^2 \right]^{-1/2},$$

из которого следует

$$\Delta = \frac{2\hbar^2 k_F q_0}{m} \frac{e^{-1/|\nu|\nu_F}}{1 - e^{-1/|\nu|\nu_F}},$$

где

$$\nu_F = \frac{mk_F}{2\pi^2 \hbar^2}$$

– плотность электронных состояний на границе Ферми. При $|\nu|\nu_F \ll 1$ щель в спектре боголонов равна

$$\Delta = \frac{2\hbar^2 k_F q_0}{m} \exp\left(-\frac{1}{|\nu|\nu_F}\right). \quad (2.182)$$

Этот результат не может быть получен в рамках теории возмущений по межэлектронному взаимодействию. Объяснение свойств сверхпроводников со спектром возбуждений (2.179) читатель найдет в любом учебнике по теории сверхпроводимости.

Приложение

В этом приложении будет доказано, что аддитивный оператор (2.45) в представлении вторичного квантования равен (2.50) (см. Нгуен Ван Хьеу, Основы метода вторичного квантования, 1984).

Поскольку базисные функции системы бозонов (2.2) симметричны относительно перестановки координат частиц $q_1, \dots, q_N$, матричный элемент оператора (2.45) между состояниями (2.2) равен

$$\begin{aligned} \langle \dots n_j \dots | F^{(1)} | \dots m_j \dots \rangle &= N \int dq_1 \dots dq_N \times \\ &\times \Phi_{\dots n_j \dots}^*(q_1, \dots, q_N) f^{(1)}(q_1) \Phi_{\dots m_j \dots}(q_1, \dots, q_N). \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

Оператор $f^{(1)}(q_1)$ в правой части этого равенства действует на некоторую одночастичную волновую функцию $\varphi_l(q_1)$, входящую в $\Phi_{\dots m_j \dots}$. В результате она превращается в функцию $f^{(1)}(q_1)\varphi_l(q_1)$, которую можно разложить по базисным функциям $\varphi_k(q_1)$:

$$f^{(1)}(q_1)\varphi_l(q_1) = \sum_k \varphi_k(q_1) f_{kl}^{(1)}, \quad (\text{П.2})$$

где одночастичные матричные элементы $f_{kl}^{(1)}$ равны (2.48). Учитывая ортонормированность функций φ_k , получаем

$$f_{kl}^{(1)} = \sum_i f_{ki}^{(1)} \delta_{il} = \sum_i f_{ki}^{(1)} \int dq \varphi_i^*(q) \varphi_l(q).$$

Подставим это выражение в правую часть равенства (П.2):

$$f^{(1)}(q_l) \varphi_l(q_l) = \sum_{ik} f_{ki}^{(1)} \int dq \varphi_i^*(q) \varphi_k(q_l) \varphi_l(q).$$

Это соотношение позволяет переписать правую часть равенства (П.1) в виде

$$N \sum_{ik} f_{ki}^{(1)} \int dq dq_1 \dots dq_N \Phi_{...n_j...}^*(q_1, \dots, q_N) \times \\ \times \varphi_i^*(q) \varphi_k(q_l) \Phi_{...m_j...}(q, q_2, \dots, q_N).$$

Удобно ввести оператор b_{ki} , матричные элементы которого между состояниями (2.2) равны

$$\langle ...n_j... | b_{ki} | ...m_j... \rangle = N \int dq dq_1 \dots dq_N \Phi_{...n_j...}^*(q_1, \dots, q_N) \times \\ \times \varphi_i^*(q) \varphi_k(q_l) \Phi_{...m_j...}(q, q_2, \dots, q_N). \quad (\text{П.3})$$

Тогда матричные элементы (П.1) становятся равными

$$\langle ...n_j... | F^{(1)} | ...m_j... \rangle = \sum_{ik} f_{ki}^{(1)} \langle ...n_j... | b_{ki} | ...m_j... \rangle. \quad (\text{П.4})$$

Чтобы вычислить матричные элементы (П.3), перепишем волновую функцию (2.2) в виде

$$\Phi_{n_1 \dots n_r}(q_1, \dots, q_N) = \frac{\prod_j \sqrt{n_j!}}{\sqrt{N!}} \sum_{i=1}^r \varphi_i(q_1) \times \\ \times \sum_p' \varphi_1(q_2) \dots [\varphi_i(q_l)] \dots \varphi_r(q_N).$$

В этом выражении символ $[\varphi_i(q_l)]$ и штрих у знака суммы означают, что в написанном произведении множитель $\varphi_i(q_l)$ опущен, а r – число состояний, занятых бозонами (вместо n_{k_r} мы пишем n_r). С другой стороны,

$$\Phi_{n_1 \dots (n_i-1) \dots n_r} (q_2, \dots, q_N) = \frac{\sqrt{(n_i-1)!} \prod_{j \neq i} \sqrt{n_j!}}{\sqrt{(N-1)!}} \times \\ \times \sum_P' \varphi_1(q_2) \dots [\varphi_i(q_1)] \dots \varphi_r(q_N).$$

Следовательно,

$$\Phi_{n_1 \dots n_i \dots n_r} (q_1, \dots, q_N) = \sum_{i=1}^r \sqrt{\frac{n_i}{N}} \varphi_i(q_1) \Phi_{n_1 \dots (n_i-1) \dots n_r} (q_2, \dots, q_N).$$

Подставляя это выражение в правую часть соотношения (П.3), получаем

$$\langle \dots n_j \dots | b_{ki} | \dots m_j \dots \rangle = \sqrt{n_k m_i} \int dq_2 \dots dq_N \times \\ \times \Phi_{n_1 \dots (n_k-1) \dots n_r}^* (q_2, \dots, q_N) \Phi_{m_1 \dots (m_i-1) \dots m_q} (q_2, \dots, q_N).$$

Здесь мы снова воспользовались условиями ортонормировки одночастичного базиса $\{\varphi_i(q)\}$.

Введем обозначения

$$\{n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots, n_r\} = \{n_1^{\kappa}, n_2^{\kappa}, \dots, n_k^{\kappa}, \dots, n_r^{\kappa}\}, \\ \{m_1, m_2, \dots, m_i - 1, \dots, m_r\} = \{m_1^i, m_2^i, \dots, m_i^i, \dots, m_r^i\}. \quad (\text{П.5})$$

Тогда, учитывая ортонормировку $(N-1)$ -частичного базиса $\{\Phi\}$, получаем

$$\langle \dots n_j \dots | b_{ki} | \dots m_j \dots \rangle = \sqrt{n_k m_i} \delta_{n_1^{\kappa} m_1^i} \delta_{n_2^{\kappa} m_2^i} \dots \delta_{n_r^{\kappa} m_r^i}. \quad (\text{П.6})$$

Подставляя (П.6) в (П.4), получаем формулы (2.47) и (2.49).

Убедимся в том, что оператор b_{ki} с матричными элементами (П.6) равен

$$b_{ki} = a_k^+ a_i. \quad (\text{П.7})$$

Учтем матричные элементы бозевских операторов уничтожения (2.14) и рождения (2.17). Запишем их в виде

$$\begin{aligned} \langle \dots n_j \dots | a_k^+ | \dots m_j \dots \rangle &= \sqrt{m_k + 1} \delta_{n_1 m_1} \dots \delta_{(n_k - 1) m_k} \dots \delta_{n_r m_r}, \\ \langle \dots n_j \dots | a_i | \dots m_j \dots \rangle &= \sqrt{m_i} \delta_{n_1 m_1} \dots \delta_{n_i (m_i - 1)} \dots \delta_{n_r m_r}. \end{aligned}$$

В обозначениях (П.5) эти матрицы равны

$$\sqrt{m_k + 1} \delta_{n_1^\kappa m_1} \dots \delta_{n_r^\kappa m_r} \quad \text{и} \quad \sqrt{m_i} \delta_{n_1 m_1^i} \dots \delta_{n_r m_r^i} \quad \text{соответственно.}$$

Следовательно, перемножая матрицы, находим

$$\begin{aligned} \langle \dots n_j \dots | a_k^+ a_i | \dots m_j \dots \rangle &= \sum_{\dots p_j \dots} \langle \dots n_j \dots | a_k^+ | \dots p_j \dots \rangle \langle \dots p_j \dots | a_i | \dots m_j \dots \rangle = \\ &= \sum_{\dots p_j \dots} \sqrt{p_k + 1} \delta_{n_1^\kappa p_1} \dots \delta_{n_r^\kappa p_r} \sqrt{m_i} \delta_{p_1 m_1^i} \dots \delta_{p_r m_r^i} = \\ &= \sqrt{n_k m_i} \delta_{n_1^\kappa m_1^i} \dots \delta_{n_r^\kappa m_r^i}. \end{aligned}$$

Равенство (П.7) доказано.

Подставляя (П.7) в правую часть равенства (П.4), убеждаемся в том, что матричные элементы аддитивного оператора (П.1) равны матричным элементам оператора

$$F^{(1)} = \sum_{ik} f_{ki}^{(1)} a_k^+ a_i$$

в базисе $\{|n_1 n_2 \dots\rangle\}$.

Задачи

1. Напишите волновую функцию (2.2) для конфигурации шести бозонов, показанной на рис. 2.1.
2. Вычислите нормировочный множитель в формуле (2.24).
3. Убедитесь в справедливости формул (2.57) и (2.60).
4. Вычислите энергию основного состояния (2.85) неидеального бозе-газа при $a^3 N/V \ll 1$ (см. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Статистическая физика, ч. 2, 2000; К. Хуанг, Статистическая механика, 1966).
5. Найдите число истинных частиц неидеального бозе-газа в конденсате при нулевой температуре.
6. Убедитесь в том, что спектр (2.82) неидеального бозе-газа в случае отталкивания частиц ($a > 0$) удовлетворяет критерию сверхтекучести: сверхтекучесть в системе возможна, если $\min_k E(k)/k$ – вещественная положительная величина.
7. Убедитесь в том, что оператор числа электронов (2.103) коммутирует с гамильтонианом (2.126) и (2.127).
8. Покажите, что в случае фермионов при $i < k$

$$\langle 1_i 0_k | F^{(1)} | 0_i 1_k \rangle = f_{ik}^{(1)} (-1)^{\sigma(i+1, k-1)},$$

где

$$\sigma(k, l) = \sum_{m=k}^l n_m$$

– сумма чисел заполнения всех состояний от k -го до l -го.

9. Определите операторы плотностей массы, импульса, энергии, углового момента системы частиц (см. А.И. Ахиезер, С.В. Пелетминский, Методы статистической физики, 1977).

10. Покажите, что в случае кулоновского взаимодействия электронов $\nu(r) = e^2/r$ компонента Фурье (2.131) равна

$$4\pi e^2/q^2 \text{ в трехмерном случае и } 2\pi e^2/q \text{ в двумерном.}$$

11. Используя волновую функцию (1.146), покажите, что матричные элементы (2.137) равны

$$I_{k'k}(\vec{q}) = f_{n'n}(q_y) \delta_{k'_y, k_y + q_y} \delta_{k'_z, k_z + q_z},$$

где $\vec{q} = (0, q_y, q_z)$,

$$f_{n'n}(q) = \sqrt{\frac{n!}{n'!}} \xi^{\frac{1}{2}(n'-n)} \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right) L_n^{n'-n}(\xi), \quad n' \geq n;$$

$$f_{n'n}(q) = (-1)^{n-n'} f_{nn'}(q), \quad n' < n; \quad \xi = \frac{\hbar q^2}{2m\omega_c},$$

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha})$$

– обобщенные полиномы Лагерра.

12. Напишите гамильтониан взаимодействия электронов с колебаниями решетки, содержащей изотопические примесные атомы. Учтите магнитное квантование движения электронов. См. А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба, ФНТ, т. 29, стр. 1244, 2003.

13. Используя (2.156), покажите, что если $t_{\vec{n}\vec{n}'} = t \neq 0$ лишь для соседних узлов простой кубической решетки, то закон дисперсии электронов в ней дается формулой

$$\varepsilon_{\vec{k}} = 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a),$$

где a – постоянная решетки.

14. Выразите гамильтониан межэлектронного взаимодействия (2.127) через операторы уничтожения и рождения электронов в состояниях Ванье.

15. Введите магнитные функции Ванье и обсудите их свойства (см. E. Brown, Aspects of group theory in electron dynamics, Solid State Physics, 1968, v. 22, p. 313-408).
16. Выразите гамильтониан электрон-электронного взаимодействия через операторы уничтожения и рождения частиц и дырок (см. Р. Маттук, Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел, 1969).
17. Вычислите энергию основного состояния сверхпроводника (2.171).
18. Выразите гамильтониан одноатомной и двухатомной цепочки через бозевские операторы рождения и уничтожения фононов. Ограничиваясь взаимодействием лишь ближайших соседей, найдите спектр колебаний цепочки (см. Дж. Займан, Электроны и фононы, 1962).
19. Представьте гамильтониан ферромагнетика с помощью операторов рождения и уничтожения магнонов. Найдите спектр магнонов во внешнем магнитном поле (см. А.И.Ахиезер, В.Г.Барьяхтар, С.В.Пелетминский, Спиновые волны, 1967).

Навчальне видання

Єрмолаєв Олександр Михайлович

Рашба Георгій Ілліч

Лекції з квантової статистики і кінетики
2. Вторинне квантування

Російською мовою
Друкується в авторській редакції
Відповідальний за випуск О.І. Любимов
Макет обкладинки І.М. Дончик

Підп. до друку .05.08. Формат 60х84 1/16. Папір офсетний.
Друк ризографічний. Ум. друк. арк. 3.95. Обл.-вид. арк. 4.25.
Наклад 50 прим. Ціна договірна.

61077, Харків, майдан Свободи, 4
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Організаційно-видавничий відділ НМЦ

Надруковано ФОП “Петрова І.В.”
61144, Харків-144, вул. Гв. Широнінців 79-в, к. 137
Свідоцтво про державну реєстрацію ВОО № 948011
від 03.01.03