Лекція №4

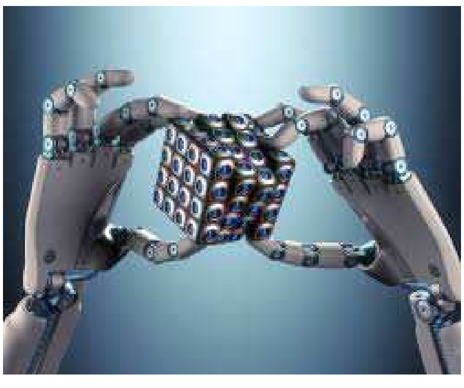
Вторинне квантовання.

Оператори народження та знищення частинок.

При описі квантових систем багатьох частинок, до числа яких відносяться й конденсовані середовища, доводиться мати справу з ансамблями тотожних частинок. Для квантово-механічного опису таких систем можна виходити з квантово-механічних станів однієї частинки. Якщо індексом i позначити сукупність квантових чисел, що характеризують стан однієї частинки (це може бути, наприклад, імпульс частинки та одна з проекцій її спіну, або повний момент частинки і його проекція на будь-яку вісь), то, задавши число частинок n_i, що мають набір квантових чисел i (або, як кажуть, число частинок, що знаходяться в індивідуальному стані i), ми повністю визначимо деякий стан системи тотожних частинок. Такий стан із певними числами частинок n_i у різних індивідуальних станах i (вони називаються числами заповнення) позначаються символами

$$\left|...n_i,...,n_j,...\right\rangle,$$

а метод опису станів системи, при якому задаються числа заповнення n_i, носить назву **методу вторинного квантування**.



Якщо частинки є бозонами, тобто, підкоряються статистиці Бозе-Ейнштейна, то числа заповнення n_i можуть приймати будь-які значення,

$n_i = 0,1,2,...$; якщо ж частинки є ферміонами, то числа заповнення можуть приймати тільки два значення, $n_i = 0,1$.

Стани $\left|...n_i,...,n_j,...\right\rangle$, які ми будемо припускати ортонормованим, утворюють повну систему векторів у гільбертовому просторі всієї системи

$$...\sum_{n_i}...\sum_{n_j}...\left|...n_i,...,n_j,...\right\rangle\left\langle...n_j,...,n_i,...\right| = 1 \qquad .(1)$$

Для визначення в формалізмі вторинного квантування операторів, що відповідають різним фізичним величинам, уводяться до розгляду оператори народження $\hat{a}_i^+$ та знищення $\hat{a}_i$ частинки в стані i. Розглянемо спочатку систему тотожних бозонів. Оператори $\hat{a}_i^+$ та $\hat{a}_i$ визначаються співвідношеннями

$$\hat{a}_i^+\left|...n_i,...\right\rangle = \sqrt{n_i+1}\left|...n_i+1,...\right\rangle, \qquad \hat{a}_i\left|...n_i,...\right\rangle = \sqrt{n_i}\left|...n_i-1,...\right\rangle. \quad (2)$$

Із цих формул витікає, що

$$\hat{a}_i^+\hat{a}_i\left|...n_i,...\right\rangle = n_i\left|...n_i,...\right\rangle, \qquad (3)$$

тобто, оператор $\hat{a}_i^+\hat{a}_i$ є оператором числа частинок у стані i.

Із визначень (2) випливають умови комутації для операторів $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\right] \equiv \hat{a}_i\hat{a}_j^+ - \hat{a}_j^+\hat{a}_i = \delta_{ij}, \left[\hat{a}_i, \hat{a}_j\right] = \left[\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\right] = 0. \qquad (4)$$

Стан, в якому всі числа заповнення дорівнюють нулю, носить назву стану вакууму. Його зазвичай позначають символом $\left|0\right\rangle$. Очевидно, що

$$\hat{a}_i\left|0\right\rangle = 0, \quad \hat{a}_i^+\left|0\right\rangle = \left|...1_i,...\right\rangle.$$

Звідси випливає, що вектори типу $\left|...n_i,...,n_j,...\right\rangle$ можуть бути побудовані дією операторів народження на стан вакууму

$$\left|...n_i,...,n_j,...\right\rangle = \left(...n_i!...n_j!\right)^{-1/2}...\left(\hat{a}_i^+\right)^{n_i}...\left(\hat{a}_j^+\right)^{n_j}...\left|0\right\rangle, \qquad (5)$$

де

$$\left(\hat{a}_i^+\right)^n \equiv \underbrace{\hat{a}_i^+ \ldots \hat{a}_i^+}_{n}$$

Якщо підставити вираз (5) в умову повноти, отримаємо

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i_1} \ldots \sum_{i_N} \hat{a}_{i_1}^+ \ldots \hat{a}_{i_N}^+ \left|0\right\rangle\left\langle 0\right| \hat{a}_{i_N} \ldots \hat{a}_{i_1} = 1. \qquad (6)$$

У такому вигляді умова повноти буде справедлива і для ферміонів. Зручно також ввести в розгляд вектори станів

$$\left|i_1, \ldots, i_N\right\rangle = \hat{a}_{i_1}^+ \ldots \hat{a}_{i_N}^+ \left|0\right\rangle,$$

у термінах яких можемо записати умову повноти,

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i_1} \ldots \sum_{i_N} \left|i_1, \ldots, i_N\right\rangle\left\langle i_N, \ldots, i_1\right| = 1, \qquad (7)$$

й умови ортонормування

$$\left\langle i_1, \ldots, i_N \middle| i'_{N'}, \ldots, i'_1\right\rangle = \delta_{NN'} \sum \delta_{i_1 i'_1} \ldots \delta_{i_N i'_{N'}}, \qquad (8)$$

де підсумовування поширюється на всі перестановки штрихованих індексів.

Довільний вектор $\left|\psi\right\rangle$ може бути розкладений по цій системі векторів

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i_1} \ldots \sum_{i_N} \psi\left(i_1, \ldots, i_N\right) \left|i_1, \ldots, i_N\right\rangle,$$

де

$$\psi\left(i_1, \ldots, i_N\right) = \left\langle i_1, \ldots, i_N \middle| \psi\right\rangle$$

і

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i_1} \ldots \sum_{i_N} \left|\psi\left(i_1, \ldots, i_N\right)\right|^2 = 1. \qquad (9)$$

Функція $\psi\left(i_1, \ldots, i_N\right)$, що є проекцією стану $\left|\psi\right\rangle$ на стан $\left|i_1, \ldots, i_N\right\rangle$, є хвильової функцією системи (з невизначеним числом частинок) в i представленні. Величин ж

$$\frac{1}{N!}\sum_{i_1}\dots\sum_{i_N}\left|\psi(i_1,\dots,i_N)\right|^2$$

є ймовірністю того, що система містить N частинок.

Надалі важливу роль будуть грати імпульсне й координатне уявлення. Хвильові функції $\psi(\mathbf{p}_1,\dots,\mathbf{p}_N)$ ($N=0,1,2,\dots$) системи з вектором стану $|\psi\rangle$, в імпульсному представленні відповідно до вищевикладеного мають вигляд:

$$\psi(\mathbf{p}_1,\dots,\mathbf{p}_N)=\langle 0|\hat{a}_{\mathbf{p}_1}\dots\hat{a}_{\mathbf{p}_N}|\psi\rangle.$$

Сенс операторів $\hat{a}^+_{\mathbf{p}}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ колишній - це оператори народження (знищення) частинки в квантово-механічному стані з імпульсом $\mathbf{p}$. Слід зазначити, що дія оператора $\hat{a}^+$ на вектор $|n\rangle$ відповідає дії оператора на вектор $\langle n|$. Нагадаємо також, що імпульс частинки $\mathbf{p}$ приймає дискретні значення, якщо об'єм системи кінцевий.

Відповідні хвильові функції в координатному представленні визначаються формулами:

$$\psi(\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_N)=\frac{1}{V^{N/2}}\sum_{\mathbf{p}_1\cdots\mathbf{p}_N}\psi(\mathbf{p}_1,\dots,\mathbf{p}_N)e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1\mathbf{x}_1+\dots+i\mathbf{p}_N\mathbf{x}_N)}=\langle\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_N|\psi\rangle,$$

де

$$|\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_N\rangle=\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1)\dots\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_N)|0\rangle. \tag{10}$$

Тут $\hat{\psi}^+(\mathbf{x}),\hat{\psi}(\mathbf{x})$ - оператори народження і знищення частинки в точці (їх ще називають польовими операторами)

$$\hat{\psi}(\mathbf{x})=V^{-1/2}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{px}},\quad \hat{\psi}^+(\mathbf{x})=V^{-1/2}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}^+_{\mathbf{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{px}}. \tag{11}$$

Використовуючи наведені вище комутаційні співвідношення, неважко переконатися в справедливості формул

$$\left[\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)\right]=\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2),\ \left[\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}(\mathbf{x}_2)\right]=\left[\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)\right]=0.$$

До сих пір ми мали справу з системами тотожних бозонів. Але всі здобуті основні формули справедливі і для ферміонів. Ми повинні тільки мати на увазі інші умови комутації для операторів народження і знищення ферміонів:

$$\left\{\hat{a}_i,\hat{a}_j^+\right\}\equiv\hat{a}_i\hat{a}_j^+ +\hat{a}_j^+\hat{a}_i=\delta_{ij},\ \left\{\hat{a}_i,\hat{a}_j\right\}=\left\{\hat{a}_i^+,\hat{a}_j^+\right\}=0.$$

Використовуючи визначення (11), можна отримати комутаційні співвідношення і для польових операторів ферміонів:

$$\left\{\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)\right\}=\delta(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2),\ \left\{\hat{\psi}(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}(\mathbf{x}_2)\right\}=\left\{\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1),\hat{\psi}^+(\mathbf{x}_2)\right\}=0.$$

Додамо також, що до сих пір ми вважали частки бесспіновимі, однак неважко врахувати в поданні вторинного квантування і його. Для цього треба ввести оператори народження і знищення частинки в точці $\mathbf{x}$ із даної проекцією σ ($-S\le\sigma\le S$) її спіну на яку-небудь вісь:

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})=V^{-1/2}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{px}},\qquad \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})=V^{-1/2}\sum_{\mathbf{p}}\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}^+e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{px}}. \tag{11}$$

Оператори фізичних величин.

Визначимо тепер оператори основних фізичних величин в поданні вторинного квантування. Оскільки $\hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x}),\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})$ є операторами народження та знищення частинок в точці $\mathbf{x}$ з проекцією спіну σ, легко виписати оператор числа частинок $\hat{N}$:

$$\hat{N}=\int d^3x\hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{x})\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) \tag{12}$$

(за повторюваними індексами σ мається на увазі підсумовування). Оператор спіну $\hat{\mathbf{S}}$ в цьому поданні може бути записаний у вигляді

$$\hat{\mathbf{S}} = \int d^3x \hat{\psi}^+_{\sigma_1}(\mathbf{x}) \mathbf{S}_{\sigma_1\sigma_2} \hat{\psi}_{\sigma_2}(\mathbf{x}) .$$

В останньому виразі величина $\mathbf{S}_{\sigma_1\sigma_2}$ є вектором спінових матриць. Наприклад, для спіну $S = \frac{1}{2}$ ця величина є набором матриць Паулі:

$$\sigma^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Оператори імпульсу та оператор орбітального моменту даються виразами:

$$\hat{P}_i = -\frac{i}{2} \int d^3x \left\{ \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{x}) \frac{\partial \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})}{\partial x_i} - \frac{\partial \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{x})}{\partial x_i} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) \right\}, \tag{14}$$

$$\hat{M}_i = \frac{i}{2} \int d^3x \varepsilon_{ikl} \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{x}) \left\{ x_l \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \right\} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}),$$

де ε_{ikl} – абсолютно антисиметричний тензор, так званий символ Леві-Чивіти.

Гамільтоніан $\hat{H}$ системи в випадку парного взаємодії між частинками визначається формулами:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \qquad \hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \int d^3x \nabla \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{x}) \nabla \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}), \tag{15}$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \hat{\psi}^+_{\sigma_1}(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^+_{\sigma_2}(\mathbf{x}_2) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\sigma_2}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\sigma_1}(\mathbf{x}_1),$$

де m - маса частинки.

У поданні вторинного квантування зручно описувати квантово-механічні системи багатьох частинок. Використовується воно переважно і в квазічастинковому підході до опису процесів і явищ у фізиці конденсованого стану.

Як уже згадувалося, при описі систем багатьох частинок доводиться мати справу не з чистими, а зі змішаними станами. Зважаючи на цю обставину необхідно використовувати поняття матриці густини ρ:

$$\rho = \sum_n |n\rangle w_n \langle n|. \tag{16}$$

Беручи до уваги, що вектора станів $|n\rangle$ задовольняють рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|n\rangle = \hat{H}|n\rangle, \tag{17}$$

легко отримати й рівняння, якому задовольняє матриця густини

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho = \sum_n \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|n\rangle \right) w_n \langle n| + \sum_n |n\rangle w_n i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle n|.$$

Помічаючи, що

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle n| = -\langle n|\hat{H}$$

й використовуючи (17), здобудемо

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[\hat{H}, \rho \right]. \tag{18}$$

Це рівняння називається **рівнянням Ліувілля** (або **квантовим рівнянням Ліувілля**, або **рівнянням фон Неймана**).

Жозеф Ліувілль (фр. *Joseph Liouville*; 24 березня 1809 — 8 вересня 1882) — французький математик. (ВІКІПЕДІЯ).

Систематично досліджував розв'язність низки задач, давши строге означення поняття елементарної функції і квадратури. Зокрема, досліджував можливість інтегрування заданої функції, алгебраїчної або трансцендентної, в елементарних функціях, і розв'язність в квадратурах лінійного рівняння 2-го порядку. Довів, що спеціальне рівняння Ріккаті інтегрується в квадратурах тільки в тих випадках, які були розглянуті раніше ще Бернуллі.

Теорема Ліувілля — ключова теорема гамільтонової механіки і класичної статистичної фізики. Згідно з нею, функція розподілу (густина ймовірності) гамільтонової системи залишається сталою вздовж будь-якої траєкторії у фазовому просторі, тобто, довільна область фазового простору зберігатиме свій об'єм при еволюції гамільтонової системи.

Джон фон Не́йман чи **Джон фон Но́йман** (англ. *John von Neumann*), **Нейман Янош Лайош** (угор. *Neumann János Lajos*; **Йоганн фон Нойман** (нім. *Johann von Neumann*; 28 грудня 1903 — 8 лютого 1957) — американський математик угорського походження, що зробив значний внесок у квантову фізику, функціональний аналіз, теорію множин, інформатику, економічні науки та в інші численні розділи знань. Він став засновником теорії ігор разом із Оскаром Морґенштерном у 1944 році. Розробив архітектуру (так звану «архітектуру фон Неймана»), яка використовується в усіх сучасних комп'ютерах. (ВІКІПЕДІЯ)

Рівняння фон Неймана — рівняння квантової механіки, що описує еволюцію як чистих, так і змішаних станів квантових гамільтонових систем.

Квантові відкриті, дисипативні й негамільтонові системи описуються рівнняням Ліндблада, частинним випадком якого є рівняння фон Неймана:

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=\left[\hat{H},\rho\right]+\sum_i\gamma_i\left(\hat{L}_i\rho\hat{L}_i^+-\frac{1}{2}\left\{\hat{L}_i^+\hat{L}_i,\rho\right\}\right)$$

де $\left\{\hat{a},\hat{b}\right\}=\hat{a}\hat{b}+\hat{b}\hat{a}$ — антикомутатор, $\hat{H}$ — гамільтоніан системи, що описує унітарні аспекти динаміки, а $\hat{L}_i,\hat{L}_i^+$ — набір операторів стрибків, що описують дисипативну частину динаміки. Форма операторів стрибків описує, як середовище діє на систему, і в кінцевому рахунку повинна бути визначена з мікроскопічних моделей динаміки системи-середовища. Нарешті, $\gamma_i\geq 0$

набором невід'ємних коефіцієнтів, які називаються коефіцієнтами демпфування. Якщо всі $\gamma_i = 0$, то отримуємо рівняння фон Неймана що є квантовим аналогом класичного рівняння Ліувіля.

Знаючи гамільтоніан системи, і вміючи розв'язувати це рівняння, ми зможемо в принциповому відношенні описати поведінку системи в часі.

Але це рівняння, оскільки воно є диференціальним рівнянням першого порядку за часом, треба забезпечити «початковою умовою». У цій іпостасі зазвичай використовують так зване ергодичне співвідношення. Воно відображає простий і ясний факт, що будь-яка ізольована система, будучи надана сама собі, в результаті еволюції прийде до стану статистичної рівноваги

$$\rho(t) \underset{t\to\infty}{\rightarrow} w,$$

Статистична рівновага описується розподілом Гіббса w:

$$w = \exp\left\{\Omega - \frac{1}{T}\left(\hat{H} - \mathbf{u}\hat{P} - \mu\hat{N}\right)\right\}, \tag{19}$$

де Ω - великий термодинамічний потенціал, який визначається з умови

$$Spw = 1, \tag{20}$$

а величини T (температура), $\mathbf{u}$ (середня швидкість системи як цілого) і μ (хімічний потенціал) повинні знаходитися з рівнянь:

$$Spw\hat{H} = W,\ Spw\hat{\mathbf{P}} = \mathbf{P},\quad Spw\hat{N} = N, \tag{21}$$

де W - повна енергія системи, $\mathbf{P}$ - середній імпульс системи як цілого і N - повне число частинок в системі. Оператори відповідних фізичних величин наведені нами вище.

Рівняння (19) - (21) повністю визначають термодинаміку системи.