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

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

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

Здесь $\varphi_a\left(\vec{r}_a\right)$ – 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

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

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

$$\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0 t\right),$$

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):

$$\Phi_{\kappa_1\kappa_2\ldots\kappa_N}\left(q_1,q_2,\ldots,q_N\right)=\left(\frac{n_{\kappa_1}!\,n_{\kappa_2}!\ldots}{N!}\right)^{1/2}\times$$
$$\times\sum_P\varphi_{\kappa_1}\left(q_1\right)\varphi_{\kappa_2}\left(q_2\right)\ldots\varphi_{\kappa_N}\left(q_N\right)\ , \tag{2.2}$$

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

$$E_0=\sum_\kappa\varepsilon_\kappa n_\kappa\ , \tag{2.3}$$

где ε_κ – энергия одного бозона в состоянии $\left|\kappa\right\rangle$. Входящие в формулы (2.2), (2.3) числа $n_\kappa=0,1,2,\ldots$ называются числами заполнения одночастичных состояний $|\kappa\rangle$. Волновая функция (2.2) является решением уравнения Шредингера

$$H_0\Phi = E_0\Phi \tag{2.4}$$

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

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

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

Одночастичные волновые функции $\varphi_\kappa\left(q\right) = \langle q|\kappa\rangle$, 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)):

$$\langle\kappa|\kappa'\rangle = \delta_{\kappa\kappa'}, \qquad \sum_{\kappa}|\kappa\rangle\langle\kappa| = 1. \tag{2.6}$$

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

$$\begin{gathered}\langle\kappa_1 ... \kappa_N|\kappa_1' ... \kappa_N'\rangle = \delta_{\kappa_1\kappa_1'} ... \delta_{\kappa_N\kappa_N'}, \\ \sum_{\kappa_1 ... \kappa_N}|\kappa_1 ... \kappa_N\rangle\langle\kappa_1 ... \kappa_N| = 1,\end{gathered} \tag{2.7}$$

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

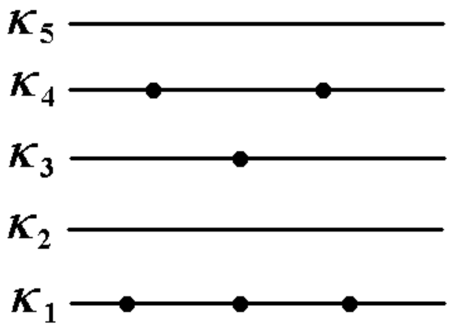

Рис. 2.1. Распределение бозонов по одночастичным состояниям $\left|n_{\kappa_1} = 3, n_{\kappa_2} = 0, n_{\kappa_3} = 1, n_{\kappa_4} = 2, n_{\kappa_5} = 0, ...\right\rangle$.

Часто в качестве одночастичного базиса выбирают плоские волны

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

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_{κ}.) 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_{κ_1} бозонов в состоянии κ_1, n_{κ_2} – в состоянии κ_2 и т. д. Обозначим эту амплитуду

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

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 переменно. 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 κ. В соответствии с этим кет-вектор, соответствующий базисной волновой функции системы (2.2) может быть обозначен символом $|n_1 n_2 ...\rangle$. Тогда условия ортонормированности и полноты многочастичного базиса имеют вид

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

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

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_{n_1 n_2 ...} C(n_1, n_2, ..., t)\left|n_1 n_2 ...\right\rangle, \tag{2.10}$$

где C – упомянутая выше амплитуда вероятности, а $\left|C(n_1, n_2, ..., t)\right|^2$ – вероятность обнаружить в момент t в состоянии $\left|\psi(t)\right\rangle$ 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

$$C(n_1, n_2, ..., t) = \left\langle n_1 n_2 ... \middle| \psi(t)\right\rangle.$$

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

$$H\psi = E\psi, \tag{2.11}$$

в котором в гамильтониан H включено межчастичное взаимодействие V:

$$H = H_0 + V. \tag{2.12}$$

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_κ, введенные в предыдущем разделе.

Оператор уничтожения бозона в состоянии $|\kappa\rangle$ обозначим a_κ. 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

$$a_\kappa |n_1 n_2 ... n_\kappa ...\rangle = \sqrt{n_\kappa}\, |n_1 n_2 ... n_\kappa - 1 ...\rangle \tag{2.13}$$

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

Оператору a_κ в базисе $\{|n_1 ... n_\kappa ...\rangle\}$ можно сопоставить матрицу

$$\langle n_1' ... n_\kappa' ... | a_\kappa | n_1 ... n_\kappa ...\rangle = \sqrt{n_\kappa}\, \delta_{n_1' n_1} ... \delta_{n_\kappa' (n_\kappa - 1)} \cdots, \tag{2.14}$$

где учтено условие ортонормированности базиса (2.9). Эта матрица диагональна по числам n_κ' $\left(n_\kappa' \neq n_\kappa\right)$. Записывая ее в сокращенном виде

$$\langle n_\kappa' | a_\kappa | n_\kappa \rangle = \sqrt{n_\kappa}\, \delta_{n_\kappa' (n_\kappa - 1)}, \tag{2.15}$$

получаем

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

Здесь n_κ' – номер строки, а n_κ – 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

$$\langle n_1'...n_\kappa'...|a_\kappa|n_1...n_\kappa...\rangle^* = \langle n_1...n_\kappa...|a_\kappa^+|n_1'...n_\kappa'...\rangle =$$
$$= \sqrt{n_\kappa}\,\delta_{n_1'n_1}...\delta_{n_\kappa'(n_\kappa-1)}...$$

Меняя здесь местами штрихованные и нештрихованные величины, находим

$$\langle n_1'...n_\kappa'...|a_\kappa^+|n_1...n_\kappa...\rangle = \sqrt{n_\kappa+1}\,\delta_{n_1'n_1}...\delta_{n_\kappa'(n_\kappa+1)}... \qquad (2.17)$$

Отсюда следует, что оператор a_κ^+ действует на состояние $|n_1...n_\kappa...\rangle$ по правилу

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

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

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

Поскольку оператор a_κ^+ переводит состояние $|...n_\kappa...\rangle$ в состояние $|...n_\kappa+1...\rangle$, 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

$$\left\langle n'_\kappa \left| a^+_\kappa a_\kappa \right| n_\kappa \right\rangle = \sum_{n''_\kappa} \left\langle n'_\kappa \left| a^+_\kappa \right| n''_\kappa \right\rangle \left\langle n''_\kappa \left| a_\kappa \right| n_\kappa \right\rangle =$$
$$= \sum_{n''_\kappa} \sqrt{n''_\kappa + 1}\,\delta_{n'_\kappa (n''_\kappa + 1)} \sqrt{n_\kappa}\,\delta_{n''_\kappa (n_\kappa - 1)} = n_\kappa \delta_{n'_\kappa n_\kappa} . \tag{2.19}$$

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

$$a^+_\kappa a_\kappa \left|...n_\kappa...\right\rangle = n_\kappa \left|...n_\kappa...\right\rangle . \tag{2.20}$$

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:

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

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

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

где учтено

$$\langle 0|0\rangle = 1, \qquad\qquad \langle n|n\rangle = 1. \tag{2.25}$$

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

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

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

$$\left(a_\kappa a_\kappa^+ - a_\kappa^+ a_\kappa\right)|...n_\kappa...\rangle = |...n_\kappa...\rangle.$$

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

$$\left[a_\kappa, a_\kappa^+\right] = 1. \tag{2.27}$$

Аналогично получаем

$$\left[a_\kappa, a_{\kappa'}^+\right] = 0 \qquad (\kappa \neq \kappa'). \tag{2.28}$$

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

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

Отсюда следует

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

Коммутатор эрмитово сопряженных операторов также равен нулю:

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

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

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

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 $\{|...n_{\kappa}...\rangle\}$. 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:

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

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:

$$|k\rangle = a_k^+|0\rangle, \qquad |\eta\rangle = b_\eta^+|0\rangle. \tag{2.33}$$

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

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

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

$$b_\eta^+|0\rangle = \sum_k a_k^+|0\rangle\langle k|\eta\rangle,$$

$$a_k^+|0\rangle = \sum_\eta b_\eta^+|0\rangle\langle\eta|k\rangle.$$

Опуская $|0\rangle$, находим

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

Отсюда получаем эрмитово сопряженные соотношения:

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

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:

$$\langle q|q'\rangle=\delta(q-q'), \qquad \int dq|q\rangle\langle q|=1, \tag{2.36}$$

где

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

Операторы, действующие на числа заполнения n_q, обозначим

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

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^+:

$$\begin{aligned} &\psi(q)=\sum_k a_k\varphi_k(q), \qquad \psi^+(q)=\sum_k a_k^+\varphi_k^*(q),\\ &a_k=\int dq\psi(q)\varphi_k^*(q), \quad a_k^+=\int dq\psi^+(q)\varphi_k(q). \end{aligned} \tag{2.37}$$

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

$$\varphi_k(q)=\langle q|k\rangle . \tag{2.38}$$

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

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

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

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

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

$$\left[\psi(q),\psi^+(q')\right] = \sum_{kk'}\varphi_k(q)\varphi^*_{k'}(q')\left[a_k,a^+_{k'}\right].$$

Учитывая (2.31) и условие полноты одночастичного базиса, получаем

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

Аналогично находим

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

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

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

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

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

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:

$$\begin{aligned} &\int dq_1 ... dq_N \Phi_{k_1' ... k_N'}^{*}(q_1, ..., q_N) F^{(1)} \Phi_{k_1 ... k_N}(q_1, ..., q_N) = \\ &= \langle n_1' ... | \mathfrak{I}^{(1)} | n_1 ... \rangle, \end{aligned} \tag{2.46}$$

где $\mathfrak{I}^{(1)}$ – 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):

$$\begin{aligned}\overline{F^{(1)}} &= \int dq_1 ... dq_N \Phi^*_{k_1...k_N}\left(q_1,...,q_N\right) F^{(1)} \Phi_{k_1...k_N}\left(q_1,...,q_N\right) = \\ &= \sum_k n_k f^{(1)}_{kk},\end{aligned} \tag{2.47}$$

где

$$f^{(1)}_{k'k} = \int dq\, \varphi^*_{k'}\left(q\right) f^{(1)} \varphi_k\left(q\right) \tag{2.48}$$

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

$$\left\langle ...n_k ... n_l - 1 ... \left| F^{(1)} \right| ... n_k - 1 ... n_l ... \right\rangle = f^{(1)}_{kl} \sqrt{n_k n_l}\ . \tag{2.49}$$

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

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

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

$$\left\langle ...n_k...n_l... \right| \sum_{kl} f_{kl}^{(1)} a_k^+ a_l \left| ...n_k...n_l... \right\rangle =$$
$$= \sum_{kl} f_{kl}^{(1)} \sqrt{n_k+1}\sqrt{n_l} \left\langle ...n_k...n_l... \middle| ...n_k+1...n_l-1... \right\rangle .$$

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

$$\left\langle ...n_k... \right| \sum_{k} f_{kk}^{(1)} a_k^+ a_k \left| ...n_k... \right\rangle = \sum_{k} f_{kk}^{(1)} n_k \ .$$

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

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

что совпадает с (2.49).

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

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

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

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

а оператор (2.50) принимает вид

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

В качестве примера приведем оператор Гамильтона системы невзаимодействующих бозонов:

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

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

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} \tag{2.55}$$

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

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

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

в представлении вторичного квантования равен

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

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

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

– 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:

$$F^{(1)} = \sum_{ik} f_{ik}^{(1)} a_i^+ a_k = \sum_{ik} \int dq\, \varphi_i^*(q)\, f^{(1)} \varphi_k(q) a_i^+ a_k =$$

$$= \int dq \left(\sum_i \varphi_i^*(q) a_i^+ \right) f^{(1)} \left(\sum_k \varphi_k(q) a_k \right) = \qquad (2.59)$$

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

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

Оператор (2.57) связан с полевыми операторами соотношением

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

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:

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

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

$$\frac{pr_0}{\hbar} << 1. \qquad (2.62)$$

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)

$$-a = -\frac{m}{4\pi\hbar^2}\upsilon_0, \qquad (2.63)$$

где

$$\upsilon_0 = \int d\vec{r}\,\upsilon(\vec{r})$$

– нулевая компонента Фурье энергии $\upsilon(\vec{r})$ взаимодействия двух частиц. Величина a называется длиной рассеяния. Она положительна, если частицы отталкиваются. С учетом второго борновского приближения величина υ_0 связана с длиной рассеяния соотношением

$$\upsilon_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\left[1 - \frac{4\pi\hbar^2 a}{mV}\sum_{\vec{p}_1'}\frac{2m}{p_1^2 + p_2^2 - p_1'^2 - p_2'^2}\right], \qquad (2.64)$$

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

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

где $\upsilon\left(\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|\right)$ – энергия взаимодействия двух частиц, зависящая от расстояния $\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|$ 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 υ в базисе (2.39):

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

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

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

Тогда матричный элемент (2.66) принимает вид

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

где

$$\upsilon\left(\vec{q}\right) = \int d\vec{r} \, \upsilon\left(\vec{r}\right) \exp\left(-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}\right) \quad (2.69)$$

– 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

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

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

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

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 $a_{\vec{k}}^{+}a_{\vec{k}}$ –

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

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:

$$\frac{\upsilon_0}{2V} a_0^2 \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(a_{\vec{k}}\, a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + 4 a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \right), \tag{2.72}$$

где мы положили $\upsilon\left(\vec{q}\right) \approx \upsilon_0$ в соответствии с требованием (2.62).

Ограничиваясь членами второго порядка малости по $a_{\vec{k}}$, $a_{\vec{k}}^+$ $\left(\vec{k} \neq 0\right)$, 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

$$a_0^4 + a_0^2 \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(a_{\vec{k}}\, a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ + 4 a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \right) =$$

$$= N^2 + N \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(a_{\vec{k}}\, a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ + 2 a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \right).$$

Это приводит к следующему выражению для гамильтониана (2.71):

$$H=\frac{N^2}{2V}\upsilon_0+\sum_{\vec{k}}\frac{\hbar^2k^2}{2m}a_{\vec{k}}^{+}a_{\vec{k}}+$$
$$+\frac{N}{2V}\upsilon_0\sum_{\vec{k}\neq 0}\left(a_{\vec{k}}\,a_{-\vec{k}}+a_{\vec{k}}^{+}a_{-\vec{k}}^{+}+2a_{\vec{k}}^{+}a_{\vec{k}}\right). \tag{2.73}$$

Первое слагаемое в правой части (2.73) дает энергию основного состояния газа в линейном приближении по υ_0:

$$E_0=\frac{N^2\upsilon_0}{2V}\,. \tag{2.74}$$

Производная $\partial E_0/\partial N$ равна химическому потенциалу газа при нулевой температуре:

$$\mu=\frac{N\upsilon_0}{V}\,. \tag{2.75}$$

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

Константу υ_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

$$\upsilon_0=\frac{4\pi\hbar^2a}{m}\left(1+\frac{4\pi\hbar^2a}{V}\sum_{\vec{p}\neq 0}\frac{1}{p^2}\right).$$

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

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

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

$$a_{\vec{k}}=u_{\vec{k}}b_{\vec{k}}+\upsilon_{\vec{k}}b_{-\vec{k}}^{+}, \qquad a_{\vec{k}}^{+}=u_{\vec{k}}b_{\vec{k}}^{+}+\upsilon_{\vec{k}}b_{-\vec{k}}, \tag{2.77}$$

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

$$\left[b_{\vec{k}},b_{\vec{k}'}\right]=0,\quad \left[b_{\vec{k}}^{+},b_{\vec{k}'}^{+}\right]=0,\quad \left[b_{\vec{k}},b_{\vec{k}'}^{+}\right]=\delta_{\vec{k}\vec{k}'}. \tag{2.78}$$

Эти соотношения выполняются, если

$$u_k^2-\upsilon_k^2=1. \tag{2.79}$$

Тогда преобразование (2.77) можно записать в виде

$$a_{\vec{k}}=\frac{b_{\vec{k}}+L_{\vec{k}}b_{-\vec{k}}^{+}}{\sqrt{1-L_{\vec{k}}^2}},\qquad a_{\vec{k}}^{+}=\frac{b_{\vec{k}}^{+}+L_{\vec{k}}b_{-\vec{k}}}{\sqrt{1-L_{\vec{k}}^2}}, \tag{2.80}$$

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

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

где

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

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

В новых переменных гамильтониан (2.76) равен

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

где

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

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

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

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 $N_{\vec{k}}=0,1,\ldots$ Они подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна.

Из формулы (2.82) следует, что

$$E\left(k\right)=\begin{cases}\hbar uk, & \hbar k\ll mu,\\ \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}, & \hbar k\gg mu.\end{cases} \tag{2.87}$$

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 полуцелым спином – разработан Е. Вигнером и П. Иорданом 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

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

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

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

Из (2.88) и (2.89) видно, что $\Phi_{\kappa_1\kappa_1}=0$, т. е. два фермиона не могут находиться в одном полным 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):

$$\Phi_{\kappa_1\kappa_2\ldots\kappa_N}(q_1,q_2,\ldots,q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\mathrm{P}}(-1)^p\times \times\mathrm{P}\left[\varphi_{\kappa_1}(q_1)\varphi_{\kappa_2}(q_2)\ldots\varphi_{\kappa_N}(q_N)\right] \tag{2.90}$$

или

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

где P – оператор некоторой перестановки координат N частиц, p – число отдельных парных транспозиций в перестановке P, $\sum\limits_{\mathrm{P}}$ – 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 $\kappa_1<\kappa_2<\ldots<\kappa_N$, 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:

$$H_0\Phi = E_0\Phi\,, \tag{2.92}$$

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

$$\langle\kappa|\kappa'\rangle = \delta_{\kappa\kappa'}\,, \qquad \sum_{\kappa}|\kappa\rangle\langle\kappa| = 1\,, \tag{2.93}$$

$$\langle\kappa_1...\kappa_N|\kappa'_1...\kappa'_N\rangle = \delta_{\kappa_1\kappa'_1}...\delta_{\kappa_N\kappa'_N}\,,$$

$$\sum_{\kappa_1...\kappa_N}|\kappa_1...\kappa_N\rangle\langle\kappa_1...\kappa_N| = 1\,. \tag{2.94}$$

Вектор $|\kappa_1...\kappa_N\rangle$ 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 $|n_{\kappa_1}n_{\kappa_2}...\rangle$ или $|n_1 n_2...\rangle$. Соответствующая функция Φ равна $\Phi_{n_1 n_2...}(q_1, q_2, ..., q_N)$.

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

$$H\psi = E\psi\,, \tag{2.95}$$

где

$$H = H_0 + V\,, \tag{2.96}$$

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 $C(n_1, n_2, ..., t)$. Эта функция играет роль коэффициента разложения произвольного состояния системы с взаимодействием по базисным состояниям $|n_1 n_2 ...\rangle$:

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

Здесь $|C(n_1, n_2, ..., t)|^2$ – 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:

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

Здесь $n_\kappa = 0,1$, а $\sigma_\kappa = n_1 + n_2 + ... + n_{\kappa-1}$ – 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}:

$$a_{\kappa_1}\Phi^{N}_{\kappa_1\kappa_2\ldots\kappa_N} = \Phi^{N-1}_{\kappa_2\kappa_3\ldots\kappa_N} =$$

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

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:

$$a_\kappa^+ \left|\ldots n_\kappa \ldots\right\rangle = (-1)^{\sigma_\kappa} (1-n_\kappa) \left|\ldots n_\kappa + 1 \ldots\right\rangle . \qquad (2.99)$$

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,

$$a_\kappa^+\Phi^{N}_{\kappa_1\kappa_2\ldots\kappa_N} = \Phi^{N+1}_{\kappa\kappa_1\kappa_2\ldots\kappa_N} =$$

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

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

$$a_\kappa^+\Phi^{N}_{\kappa_1\kappa_2\ldots\kappa_N} = -\Phi^{N+1}_{\kappa_1\kappa\kappa_2\ldots\kappa_N} .$$

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

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

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 $C(n_1, n_2, ...)$ чисел заполнения определяется следующим образом (см. Д.А. Киржниц, Полевые методы теории многих частиц, 1963):

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

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

$$
\delta_{n_1, n_1^{(0)}} ... \delta_{n_\kappa + 1, n_\kappa^{(0)}} ... = \delta_{n_1, n_1^{(0)}} ... \delta_{n_\kappa, n_\kappa^{(0)} - 1} ...,
$$

$$
\delta_{n_1, n_1^{(0)}} ... \delta_{n_\kappa - 1, n_\kappa^{(0)}} ... = \delta_{n_1, n_1^{(0)}} ... \delta_{n_\kappa, n_\kappa^{(0)} + 1} ...
$$

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

Оператор числа фермионов в состоянии κ равен

$$
n_\kappa = a_\kappa^+ a_\kappa . \tag{2.102}
$$

Оператор полного числа фермионов

$$N = \sum_{\kappa} a_{\kappa}^{+} a_{\kappa} \,. \tag{2.103}$$

Используя правила (2.98) и (2.99), получаем

$$n_{\kappa} \left| ...n_{\kappa}... \right\rangle = n_{\kappa} \left| ...n_{\kappa}... \right\rangle, \tag{2.104}$$

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:

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

Из (2.98) следует

$$a_{\kappa} \left| 0 \right\rangle = 0 \tag{2.105}$$

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

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

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: $\left| 0 \right\rangle$, $\left| 100... \right\rangle$, $\left| 010... \right\rangle$, … , $\left| 110... \right\rangle$, $\left| 011... \right\rangle$, … 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 $\left| ...n_{\kappa}... \right\rangle$:

$$a_\kappa a_\kappa^+ |...n_\kappa...\rangle = a_\kappa (-1)^{\sigma_\kappa} (1-n_\kappa)|...n_\kappa+1...\rangle =$$
$$= (-1)^{\sigma_\kappa} (1-n_\kappa)(-1)^{\sigma_\kappa} (n_\kappa+1)|...n_\kappa...\rangle =$$
$$= \left(1-n_\kappa^2\right)|...n_\kappa...\rangle.$$

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

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

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

$$\left(a_\kappa a_l^+ + a_l^+ a_\kappa\right)|...n_\kappa...n_l...\rangle =$$
$$= a_\kappa (-1)^{\sigma_l} (1-n_l)|...n_\kappa...n_l+1...\rangle + a_l^+ (-1)^{\sigma_\kappa} n_\kappa |...n_\kappa-1...n_l...\rangle =$$
$$= (-1)^{\sigma_l} (1-n_l)(-1)^{\sigma_\kappa} n_\kappa |...n_\kappa-1...n_l+1...\rangle +$$
$$+ (-1)^{\sigma_\kappa} n_\kappa (-1)^{\sigma_l-1} (1-n_l)|...n_\kappa-1...n_l+1...\rangle = 0.$$

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

$$\{a_\kappa, a_l\} = 0, \qquad \left\{a_\kappa^+, a_l^+\right\} = 0.$$

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

$$\{a_\kappa, a_l\} = 0, \quad \left\{a_\kappa^+, a_l^+\right\} = 0, \quad \left\{a_\kappa, a_l^+\right\} = \delta_{\kappa l}. \tag{2.107}$$

Отсюда следует

$$(a_\kappa)^2 = 0, \qquad \left(a_\kappa^+\right)^2 = 0, \tag{2.108}$$

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):

$$\psi(q)=\sum_\kappa a_\kappa \varphi_\kappa(q), \qquad \psi^+(q)=\sum_\kappa a_\kappa^+ \varphi_\kappa^*(q),$$
$$a_\kappa=\int dq\psi(q)\varphi_\kappa^*(q), \quad a_\kappa^+=\int dq\psi^+(q)\varphi_\kappa(q). \tag{2.109}$$

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

$$\{\psi(q),\psi(q')\}=0,$$
$$\{\psi^+(q),\psi^+(q')\}=0, \tag{2.110}$$
$$\{\psi(q),\psi^+(q')\}=\delta(q-q').$$

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

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

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

где

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

где $\left| \psi_{n_0} \right\rangle = | ... n_0 ... \rangle$ – кет-вектор состояния системы фермионов с фиксированными числами частиц $n_0 = \left(n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, ... \right)$, $\Phi_{n_0}(q) = \langle q | n_0 \rangle$ – базисная функция (2.91), $q = (q_1, ..., q_N)$, $dq = \prod_{a=1}^{N} dq_a$. Формула (2.119) вытекает из соотношения

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

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

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

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

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

Произведение операторов ψ в левой части равенства (2.120), действуя на состояние $|...n_0...\rangle$, 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

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

Если входящий сюда оператор

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

прокоммутировать с $\psi(q_2)$, получим

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

где

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

Продолжая этот процесс, находим

$$(N!)^{-1}\left\langle \psi_{n_0} \middle| N(N-1)(N-2)... \middle| \psi_{n_0} \right\rangle = (N!)^{-1}\left\langle \psi_{n_0} \middle| N! \middle| \psi_{n_0} \right\rangle = 1,$$

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

Из общей форомулы (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 pp. 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 $q_1,...,q_N$. Это пространство обычно обозначается H_N. Скалярное произведение векторов Φ и Ψ в H_N задается формулой

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

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

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:

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

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

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

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 $\mathrm{H}_B \subset \mathrm{H}$ симметричных функций, а система с переменным числом фермионов описывается векторами из подпространства $\mathrm{H}_F \subset \mathrm{H}$ 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

$$H = H_0 + V\,, \tag{2.122}$$

где

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

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

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

– оператор энергии парного взаимодействия электронов друг с другом. Если в качестве одночастичного базиса выбрать собственные векторы гамильтониана электрона во внешнем поле, т.е.

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

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

$$H_0=\sum_\kappa \varepsilon_\kappa a_\kappa^+ a_\kappa \tag{2.125}$$

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

$$H_0=\sum_{\vec{p}\sigma}\varepsilon_p a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma}+\sum_{\vec{p}\vec{p}'\sigma}\left\langle\vec{p}'\left|U\right|\vec{p}\right\rangle a_{\vec{p}'\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma}\,. \tag{2.126}$$

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

В базисе (2.39) гамильтониан парного взаимодействия электронов имеет вид

$$V=\frac{1}{2}\sum_{iklm}\left\langle ik\left|\upsilon\right|lm\right\rangle a_i^+ a_k^+ a_m a_l\,, \tag{2.127}$$

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

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

$$\left\langle\vec{k}_1'\sigma_1',\vec{k}_2'\sigma_2'\left|\upsilon\right|\vec{k}_1\sigma_1,\vec{k}_2\sigma_2\right\rangle=\frac{1}{V^2}\sum_{\alpha_1}\sum_{\alpha_2}\int d\vec{r}_1\int d\vec{r}_2\,\times$$

$$\times\exp\left[\mathrm{i}\left(-\vec{k}_1'\vec{r}_1-\vec{k}_2'\vec{r}_2+\vec{k}_1\vec{r}_1+\vec{k}_2\vec{r}_2\right)\right]\chi_{\sigma_1'}^*\left(\alpha_1\right)\chi_{\sigma_2'}^*\left(\alpha_2\right)\times$$

$$\times\chi_{\sigma_1}\left(\alpha_1\right)\chi_{\sigma_2}\left(\alpha_2\right)\upsilon\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right).$$

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

$$\sum_{\alpha_1} \chi^*_{\sigma_1'}(\alpha_1)\chi_{\sigma_1}(\alpha_1) = \delta_{\sigma_1'\sigma_1}. \tag{2.129}$$

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

$$\frac{1}{V}\delta_{\vec{k}_1'+\vec{k}_2',\vec{k}_1+\vec{k}_2}\delta_{\sigma_1'\sigma_1}\delta_{\sigma_2'\sigma_2}\upsilon\left(\vec{k}_1'-\vec{k}_1\right), \tag{2.130}$$

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

$$\upsilon(\vec{q}) = \int d\vec{r}\,\upsilon(\vec{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}}. \tag{2.131}$$

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

$$V = \frac{1}{2V}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{q}}\upsilon(\vec{q})\,a^+_{(\vec{k}_1+\vec{q})\sigma_1}a^+_{(\vec{k}_2-\vec{q})\sigma_2}a_{\vec{k}_2\sigma_2}a_{\vec{k}_1\sigma_1}. \tag{2.132}$$

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

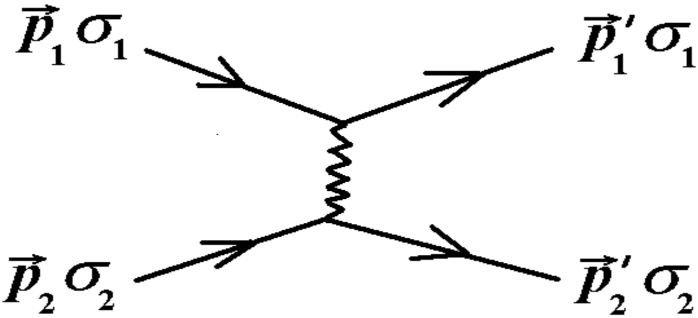

Рис. 2.2. Акт взаимного рассеяния двух электронов

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

$$H=\sum_{\vec{k}\sigma}\varepsilon_k a^+_{\vec{k}\sigma}a_{\vec{k}\sigma}+\sum_{\vec{k}\vec{k}'\sigma}U_{\vec{k}'\vec{k}}a^+_{\vec{k}'\sigma}a_{\vec{k}\sigma}+$$
$$+\frac{1}{2V}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{q}}\upsilon(\vec{q})a^+_{(\vec{k}_1+\vec{q})\sigma_1}a^+_{(\vec{k}_2-\vec{q})\sigma_2}a_{\vec{k}_2\sigma_2}a_{\vec{k}_1\sigma_1}. \tag{2.133}$$

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

$$H_0=\sum_a h_a ,$$

где

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

– 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

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

где $\kappa = \left(n, k_y, k_z\right)$ – орбитальные квантовые числа Ландау, $u\left(\vec{r} - \vec{r}_j\right)$ – 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:

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

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

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

где

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

– матричные элементы плоской волны в базисе Ландау,

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

– компонента Фурье плотности примесных атомов

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

В результате гамильтониан (2.135) равен

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

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

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

В этом случае гамильтониан (2.139) принимает вид

$$U=\frac{1}{V}\sum_{\vec{k}\vec{q}\sigma} u\left(\vec{q}\right)\rho\left(\vec{q}\right)a^{+}_{\left(\vec{k}+\vec{q}\right)\sigma}a_{\vec{k}\sigma}. \qquad (2.141)$$

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

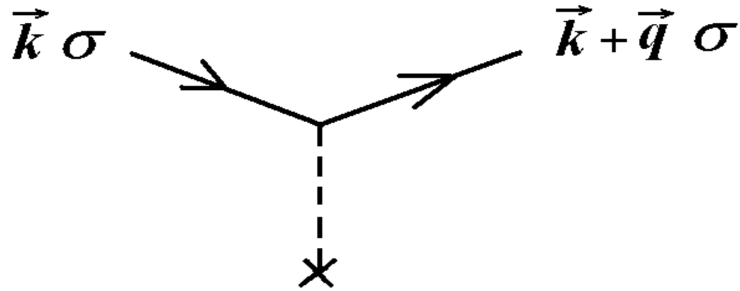

Рис. 2.3. Акт электронно-примесного рассеяния

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 $\vec{\mathrm{H}}$, а колебания ионов, образующих решетку, считаем малыми.

Гамильтониан электрона в поле ионов и в магнитном поле равен

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

где $\upsilon\left(\vec{r} - \vec{r}_n\right)$ – 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 $\upsilon\left(\vec{r} - \vec{r}_n^{\,0} - \vec{u}_n\right)$ по степеням $\vec{u}_n$. Ограничиваясь линейным членом, получаем

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

что дает

$$\begin{aligned} h = \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \sum_n \upsilon\left(\vec{r} - \vec{r}_n^{\,0}\right) - \\ - \sum_n \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \upsilon\left(\vec{r} - \vec{r}_n^{\,0}\right)\vec{u}_n. \end{aligned} \tag{2.143}$$

Здесь $\vec{u}_n$ – оператор смещения n-го иона, $\sum\limits_n$ – 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

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

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

$$U = -\frac{\mathrm{i}}{V}\sum_{\kappa\kappa'\sigma}\sum_{n\vec{q}}\upsilon(\vec{q})(\vec{q}\vec{u}_n)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}_n^{\,0}} I_{\kappa'\kappa}(\vec{q})a^{+}_{\kappa'\sigma}a_{\kappa\sigma}. \qquad (2.145)$$

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

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

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:

$$U = -\frac{\mathrm{i}}{V}\sqrt{\frac{\hbar N_0}{2M}}\sum_{\vec{f}\,j}\sum_{\kappa\kappa'\sigma}\frac{\vec{f}\,\vec{e}_{\vec{f}\,j}}{\sqrt{\omega_{\vec{f}\,j}}}\upsilon(\vec{f})I_{\kappa'\kappa}(\vec{f})\left(b_{\vec{f}\,j} + b^{+}_{-\vec{f}\,j}\right)a^{+}_{\kappa'\sigma}a_{\kappa\sigma}. \qquad (2.147)$$

При выводе этой формулы мы учли

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

и отбросили вклад процессов переброса.

В отсутствие магнитного поля гамильтониан (2.147) равен

$$U = -\frac{\mathrm{i}}{V}\sqrt{\frac{\hbar N_0}{2M}}\sum_{\vec{f}\,j}\sum_{\vec{k}\sigma}\frac{\vec{f}\,\vec{e}_{\vec{f}\,j}}{\sqrt{\omega_{\vec{f}\,j}}}\upsilon(\vec{f})\Big(a^{+}_{(\vec{k}+\vec{f})\sigma}a_{\vec{k}\sigma}b_{\vec{f}\,j} + \qquad (2.148)$$

$$+ a^{+}_{(\vec{k}-\vec{f})\sigma}a_{\vec{k}\sigma}b^{+}_{\vec{f}\,j}\Big),$$

где учтено $\vec{e}_{-\vec{f}\,j} = -\vec{e}_{\vec{f}\,j}$, $\upsilon\left(-\vec{f}\right) = \upsilon\left(\vec{f}\right)$.

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

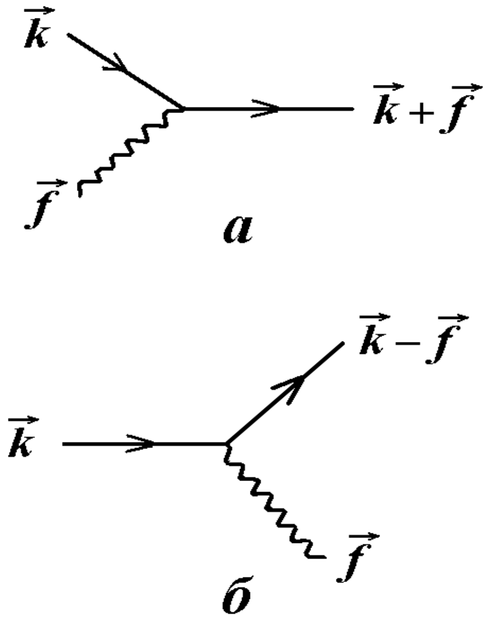

Рис. 2.4. Акты поглощения (а) и излучения (б) фононов электронами

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 $\left\{\left|\vec{k}\right\rangle\right\}$, где $\vec{k}$ пробегает первую зону Бриллюэна, образует базис Блоха.

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

$$\left|\vec{k}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\vec{n}}\left|\vec{n}\right\rangle, \qquad \left|\vec{n}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\vec{n}}\left|\vec{k}\right\rangle, \tag{2.149}$$

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

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

$$\left|\vec{r}\right\rangle = \sum_{\vec{n}}\left|\vec{n}\right\rangle\left\langle\vec{n}\middle|\vec{r}\right\rangle = \sum_{\vec{n}}\varphi_{\vec{n}}^{*}\left(\vec{r}\right)\left|\vec{n}\right\rangle, \tag{2.150}$$

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

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

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

$$\psi^{+}\left(\vec{r}\right) = \sum_{\vec{n}}\varphi_{\vec{n}}^{*}\left(\vec{r}\right)b_{\vec{n}}^{+}\,. \tag{2.151}$$

Сопряженное соотношение имеет вид

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

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

Аналогично из

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

находим

$$a_{\vec{k}}^{+} = \sum_{\vec{n}} \left\langle \vec{n}\middle|\vec{k}\right\rangle b_{\vec{n}}^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\vec{n}} b_{\vec{n}}^{+},$$
$$a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} \left\langle \vec{k}\middle|\vec{n}\right\rangle b_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\vec{n}} b_{\vec{n}}. \tag{2.153}$$

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:

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

где

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

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

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \sum_{\vec{n}} t_{\vec{n}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\vec{n}}. \tag{2.156}$$

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)).

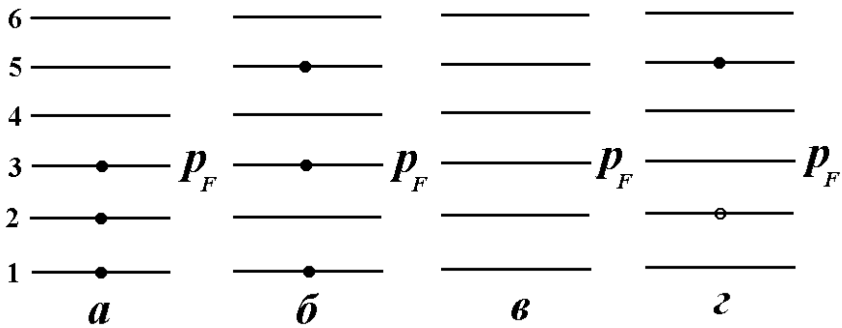

Рис. 2.5. Заполнение однофермионных состояний электронами (а,б), частицами и дырками (г)

Этому состоянию соответствует кет-вектор $\left|1_1\, 1_2\, 1_3\, 0_4 ...\right\rangle$. Возбужденному состоянию на рис. 2.5(б) соответствует вектор $\left|1_1\, 0_2\, 1_3\, 0_4\, 1_5\, 0_6 ...\right\rangle$. 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 $\left|0\right\rangle$. Что касается возбужденного состояния, то в символе вектора состояния $\left|...\right\rangle$ 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 состояние 5. В незаполненнном 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 $\left|1_2^h\, 1_5^p\right\rangle$. Способ описания основного и возбужденных состояний в терминах частиц и дырок удобен, если ограничиться расмотрением 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 $\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_\kappa t\right)$.

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

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

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 $\left|0\right\rangle$ нет частиц и дырок, имеем

$$c_p|0\rangle = 0, \quad b_p|0\rangle = 0. \tag{2.158}$$

Операторы числа частиц и дырок в состоянии k равны соответственно

$$n_k^p = c_k^+ c_k, \qquad n_k^h = b_k^+ b_k, \tag{2.159}$$

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:

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

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):

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

Здесь $\left|k\right\rangle$ – собственный вектор гамильтониана электрона во внешнем поле, соответствующий собственному значению ε_k, символы $\sum\limits_{\varepsilon_k<\varepsilon_F}$ и $\sum\limits_{\varepsilon_k>\varepsilon_F}$ 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

$$H=\sum_{\vec{k}\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}a^+_{\vec{k}\sigma}a_{\vec{k}\sigma}+\frac{1}{2V}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{q}}\upsilon\left(\vec{q}\right)\times \\ \times a^+_{\left(\vec{k}_1+\vec{q}\right)\sigma_1}a^+_{\left(\vec{k}_2-\vec{q}\right)\sigma_2}a_{\vec{k}_2\sigma_2}a_{\vec{k}_1\sigma_1}, \qquad (2.162)$$

где

$$\upsilon\left(\vec{q}\right)=\int d\vec{r}\upsilon\left(r\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}}\,. \qquad (2.163)$$

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

$$\begin{aligned} H' = &\sum_{\vec{k}\sigma}\xi_{(\vec{k})}a^{+}_{\vec{k}\sigma}a_{\vec{k}\sigma} - \\ &-\frac{1}{2V}\sum_{\vec{k}\vec{k}'\sigma}\left|\upsilon\left(\vec{k}'-\vec{k}\right)\right|a^{+}_{\vec{k}'\sigma}a^{+}_{-\vec{k}'(-\sigma)}a_{-\vec{k}(-\sigma)}a_{\vec{k}\sigma}. \end{aligned} \tag{2.164}$$

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

$$H' = H - \mu N, \tag{2.165}$$

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}+} &= u_{\vec{k}}b_{\vec{k}0} + \upsilon_{\vec{k}}b^{+}_{\vec{k}1}, \\ a_{-\vec{k}-} &= u_{\vec{k}}b_{\vec{k}1} - \upsilon_{\vec{k}}b^{+}_{\vec{k}0}, \end{aligned} \tag{2.168}$$

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

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

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

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

где

$$E_0 = 2\sum_{\vec{k}} \xi\left(\vec{k}\right)\upsilon_{\vec{k}}^2 - \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}\vec{k}'} \left|\upsilon_{\vec{k}'\vec{k}}\right| u_{\vec{k}'}\upsilon_{\vec{k}'}u_{\vec{k}}\upsilon_{\vec{k}} , \qquad (2.171)$$

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

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

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

$$2\xi\left(\vec{k}\right)u_{\vec{k}}\upsilon_{\vec{k}} = \frac{1}{V}\left(u_{\vec{k}}^2 - \upsilon_{\vec{k}}^2\right)\sum_{\vec{k}'} \left|\upsilon_{\vec{k}'\vec{k}}\right| u_{\vec{k}'}\upsilon_{\vec{k}'} . \qquad (2.174)$$

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

Из уравнений (2.169) и (2.174) получаем

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\xi(k)}{\sqrt{\Delta_k^2 + \xi^2(k)}}\right],$$
$$\upsilon_k^2 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\xi(k)}{\sqrt{\Delta_k^2 + \xi^2(k)}}\right], \tag{2.175}$$

где

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}'}\left|\upsilon_{\vec{k}'\vec{k}}\right| u_{\vec{k}'}\upsilon_{\vec{k}'}. \tag{2.176}$$

С учетом (2.175) уравнение (2.174) становится равным

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{2V}\sum_{\vec{k}'}\frac{\left|\upsilon_{\vec{k}'\vec{k}}\right|\Delta_{\vec{k}'}}{\sqrt{\Delta_{\vec{k}'}^2 + \xi^2\left(\vec{k}'\right)}}. \tag{2.177}$$

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

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

Это выражение имеет вид гамильтониана квазичастиц со спектром

$$E\left(\vec{k}\right) = \sqrt{\xi^2\left(\vec{k}\right) + \Delta_{\vec{k}}^2}. \tag{2.179}$$

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.

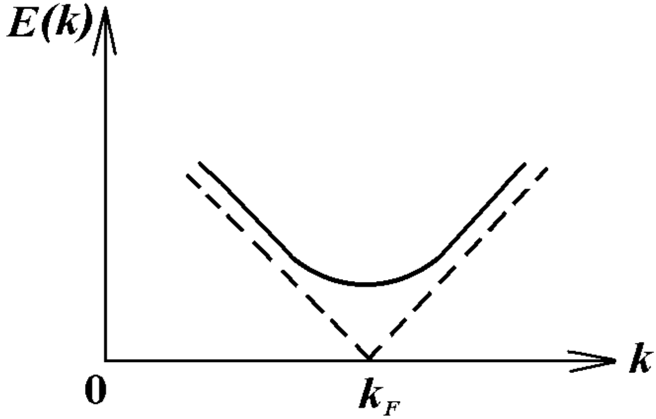

Рис. 2.6. Спектр возбуждений сверхпроводника

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:

$$b^{+}_{\vec{k}0} b_{\vec{k}0} \left| N_{\vec{k}0} \right\rangle = N_{\vec{k}0} \left| N_{\vec{k}0} \right\rangle,$$

$$b^{+}_{\vec{k}1} b_{\vec{k}1} \left| N_{\vec{k}1} \right\rangle = N_{\vec{k}1} \left| N_{\vec{k}1} \right\rangle.$$

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

Если взаимодействие $\upsilon\left(r\right)$ в гамильтониане (2.162) короткодействующее, функцию (2.163) можно заменить константой: $\upsilon\left(q\right) = -\left|\upsilon\right|$. 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 $\upsilon_{\vec{k}'\vec{k}}$ считаем равной нулю. Тогда Δ не зависит от $\vec{k}$ внутри этого интервала, и уравнение (2.177) принимает вид

$$1 = \frac{|\upsilon|}{2V}\sum_{\vec{k}}{}' \left[\Delta^2 + \xi^2\left(\vec{k}\right)\right]^{-1/2}. \qquad (2.180)$$

Здесь $\sum_{\vec{k}}{}'$ – суммирование по указанному выше интервалу. Заменяя сумму интегралом по правилу

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

полагая

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

получаем уравнение для Δ

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

из которого следует

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

где

$$\nu_F = \frac{m k_F}{2\pi^2\hbar^2}$$

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

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

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 $q_1,...,q_N$, матричный элемент оператора (2.45) между состояниями (2.2) равен

$$\begin{aligned}&\left\langle ...n_j... \middle| F^{(1)} \middle| ...m_j... \right\rangle = N \int dq_1...dq_N \times \\ &\times \Phi^*_{...n_j...}(q_1,...,q_N)\, f^{(1)}(q_1)\, \Phi_{...m_j...}(q_1,...,q_N).\end{aligned} \tag{П.1}$$

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

$$f^{(1)}(q_1)\varphi_l(q_1) = \sum_k \varphi_k(q_1) f^{(1)}_{kl}, \tag{П.2}$$

где одночастичные матричные элементы $f^{(1)}_{kl}$ 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):

$$f^{(1)}(q_1)\varphi_l(q_1) = \sum_{ik} f_{ki}^{(1)} \int dq\, \varphi_i^*(q)\varphi_k(q_1)\varphi_l(q).$$

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

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

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

$$\begin{aligned}\left\langle ...n_j... \middle| b_{ki} \middle| ...m_j... \right\rangle = N\int dq dq_1 ... dq_N \Phi^*_{...n_j...}(q_1,...,q_N)\times \\ \times\varphi_i^*(q)\varphi_k(q_1)\Phi_{...m_j...}(q,q_2,...,q_N).\end{aligned} \qquad (П.3)$$

Тогда матричные элементы (П.1) становятся равными

$$\left\langle ...n_j... \middle| F^{(1)} \middle| ...m_j... \right\rangle = \sum_{ik} f_{ki}^{(1)} \left\langle ...n_j... \middle| b_{ki} \middle| ...m_j... \right\rangle. \qquad (П.4)$$

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

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

В этом выражении символ $\left[\varphi_i(q_1)\right]$ и штрих у знака суммы означают, что в написанном произведении множитель $\varphi_i(q_1)$ опущен, а r – число состояний, занятых бозонами (вместо n_{k_r} мы пишем n_r). С другой стороны,

$$\Phi_{n_1\ldots(n_i-1)\ldots n_r}(q_2,\ldots,q_N)=\frac{\sqrt{(n_i-1)!}\prod\limits_{j\neq i}\sqrt{n_j!}}{\sqrt{(N-1)!}}\times$$

$$\times\sum_{P}{}'\varphi_1(q_2)\ldots[\varphi_i(q_1)]\ldots\varphi_r(q_N).$$

Следовательно,

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

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

$$\langle\ldots n_j\ldots|b_{ki}|\ldots m_j\ldots\rangle=\sqrt{n_k m_i}\int dq_2\ldots dq_N\times$$

$$\times\Phi^*_{n_1\ldots(n_k-1)\ldots n_r}(q_2,\ldots,q_N)\,\Phi_{m_1\ldots(m_i-1)\ldots m_q}(q_2,\ldots,q_N).$$

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

Введем обозначения

$$\begin{aligned}&\{n_1,n_2,\ldots,n_k-1,\ldots,n_r\}=\{n_1^\kappa,n_2^\kappa,\ldots,n_\kappa^\kappa,\ldots,n_r^\kappa\},\\&\{m_1,m_2,\ldots,m_i-1,\ldots,m_r\}=\{m_1^i,m_2^i,\ldots,m_i^i,\ldots,m_r^i\}.\end{aligned}\qquad(\text{П.5})$$

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

$$\langle\ldots n_j\ldots|b_{\kappa i}|\ldots m_j\ldots\rangle=\sqrt{n_\kappa m_i}\;\delta_{n_1^\kappa m_1^i}\delta_{n_2^\kappa m_2^i}\ldots\delta_{n_r^\kappa m_r^i}\,.\qquad(\text{П.6})$$

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

Убедимся в том, что оператор $b_{\kappa i}$ с матричными элементами (П.6) равен

$$b_{\kappa i} = a_\kappa^+ a_i \,. \qquad (\text{П.7})$$

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

$$\left\langle ...n_j... \middle| a_\kappa^+ \middle| ...m_j... \right\rangle = \sqrt{m_\kappa + 1}\, \delta_{n_1 m_1} ... \delta_{(n_\kappa - 1) m_\kappa} ... \delta_{n_r m_r} \,,$$

$$\left\langle ...n_j... \middle| a_i \middle| ...m_j... \right\rangle = \sqrt{m_i}\, \delta_{n_1 m_1} ... \delta_{n_i (m_i - 1)} ... \delta_{n_r m_r} \,.$$

В обозначениях (П.5) эти матрицы равны
$\sqrt{m_\kappa + 1}\, \delta_{n_1^\kappa m_1} ... \delta_{n_r^\kappa m_r}$ и $\sqrt{m_i}\, \delta_{n_1 m_1^i} ... \delta_{n_r m_r^i}$ соответственно.
Следовательно, перемножая матрицы, находим

$$\left\langle ...n_j... \middle| a_\kappa^+ a_i \middle| ...m_j... \right\rangle = \sum_{...p_j...} \left\langle ...n_j... \middle| a_\kappa^+ \middle| ...p_j... \right\rangle \left\langle ...p_j... \middle| a_i \middle| ...m_j... \right\rangle =$$

$$= \sum_{...p_j...} \sqrt{p_\kappa + 1}\, \delta_{n_1^\kappa p_1} ... \delta_{n_r^\kappa p_r} \sqrt{m_i}\, \delta_{p_1 m_1^i} ... \delta_{p_r m_r^i} =$$

$$= \sqrt{n_\kappa m_i}\, \delta_{n_1^\kappa m_1^i} ... \delta_{n_r^\kappa m_r^i} \,.$$

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 $\left\{ \left| n_1 n_2 ... \right\rangle \right\}$.

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 $\min E(k)/k$ – 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 $i < k$

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

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 $\upsilon(r) = e^2 / r$ компонента Фурье (2.131) равна $4\pi e^2 / q^2$ в трехмерном случае и $2\pi e^2 / q$ в двумерном.
11. Используя волновую функцию (1.146), покажите, что матричные элементы (2.137) равны

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

где $\vec{q} = (0, q_y, q_z)$,

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

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

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

– 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

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

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. Любімов
Макет обкладинки І.М. Дончик

Підп. до друку .05.08. Формат 60x84 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