Дрогобицький державний педагогічний університет
імені Івана Франка

Василь БОЙЧУК, Роман ЛЕШКО

ТЕОРІЯ БОЗОН-ФЕРМІОННИХ СИСТЕМ

Частина 1

ТЕКСТИ ЛЕКЦІЙ

Дрогобич, 2018

УДК 53.(075.8)
Б 77

Рекомендовано до друку вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка
(протокол № 7 від 17.05.2018 р.)

Рецензенти:
Білинський Ігор Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка;

Попович Володимир Дмитрович, кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри технологічної та професійної освіти Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

Відповідальний за випуск:
Гольський Віталій Богданович, кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

Бойчук В.І., Лешко Р.Я.

Б 77 **Теорія бозон-ферміонних систем. Частина 1** : тексти лекцій [для студентів фізичних спеціальностей]. / **Василь Бойчук, Роман Лешко.** – Дрогобич : Редакційно-видавничий відділ Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка, 2018. – 48 с.

Навчальний посібник написаний відповідно до робочої навчальної програми «Теорія бозон-ферміонних систем», затвердженої вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. У цій частині охарактеризовані основи вторинного квантування частинок з цілим спіном (бозонів). Міститься теоретичний матеріал з поясненнями і виведеннями, перелік завдань для самоконтролю. Для студентів другого (магістерського) рівня вищої освіти.

Бібліографія 7 назв

Зміст

Розділ 1. Бозони

§1. Лінійний гармонічний осцилятор

Математичний апарат сучасної квантової механіки базується, в основному, на тому, що називають представленням чисел заповнення. Стан квантової системи характеризується набором цілих чисел, які показують скільки частинок (або квазічастинок) перебуває у кожному зі станів, які належать певному вибраному базису. В основі цього апарату лежить одна з найпростіших та найвідоміших задач фізики – задача про лінійний гармонічний осцилятор.

Нехай частинка масою m рухається в одному вимірі (наприклад, вздовж осі x) під дією сили $-gx$; тоді класичне рівняння руху має вигляд:

$$m\ddot{x} = -gx. \tag{1.1}$$

Це рівняння має розв'язок

$$x = x_0 e^{i\omega t}, \tag{1.2}$$

де ω – частота, яка дорівнює

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{m}}. \tag{1.3}$$

Рівняння (1.1) можна отримати за допомогою класичної функції Гамільтона

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} g x^2, \tag{1.4}$$

якщо узагальнений імпульс

$$p = m\dot{x}.$$

У квантовій теорії енергія осцилятора квантується; енергетичні рівні подаються виразом:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \tag{1.5}$$

де n=0,1,2, … . Як отримується цей результат? Звичайний метод полягає в тому, щоб подати імпульс у вигляді диференційного оператора і шукати розв'язок рівняння Шредінгера звичайними аналітичними методами. Проте існує і більш витончена процедура, яка базується на співвідношеннях комутації для спряжених операторів $x, \hat{p}_x$:

$$\left[x, \hat{p}_x \right] = x\hat{p}_x - \hat{p}_x x = i\hbar. \tag{1.6}$$

Фактично ми просто намагаємося подати суму квадратів з рівняння (1.4) у вигляді двох спеціальних операторів $\hat{b}, \hat{b}^+$, які визначаються формулами:

$$\begin{aligned} \hat{b} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \left(\frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m}} - i\sqrt{g}\,x \right), \\ \hat{b}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \left(\frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m}} + i\sqrt{g}\,x \right). \end{aligned} \tag{1.7}$$

Коефіцієнти тут вибрані так, щоб ці оператори задовольняли таке співвідношення комутації:

$$\left[\hat{b}, \hat{b}^+ \right] = 1, \tag{1.8}$$

яке отримується безпосередньо з формул (1.7), якщо врахувати (1.6) і (1.3). Це чи ненайпростіше співвідношення між некомутативними операторами з усіх, які можна собі уявити, тому воно таке важливе.

Виразимо гамільтоніан (1.4) через нові оператори. Для цього слід розв'язати систему (1.6) відносно $\hat{p}_x, x$ і ці величини підставити у (1.4). Знаходимо

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{b}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b} \right) = \hbar\omega\left(\hat{b}^+\hat{b} + \frac{1}{2} \right). \tag{1.9}$$

Звідси випливає, що спроба подати гамільтоніан у вигляді добутку операторів $\hat{b}, \hat{b}^{+}$ є невдалою, бо оператори $\hat{p}_x, x$ не комутують.

Наступний крок полягає у знаходженні матричного зображення операторів $\hat{b}, \hat{b}^{+}$, які задовольняють співвідношення комутації (1.8) і в якому гамільтоніан буде діагональним. Для цього подамо набір базисних функцій або векторів станів такими співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \hat{b}\left|n\right\rangle &= n^{1/2}\left|n-1\right\rangle, \\ \hat{b}^{+}\left|n\right\rangle &= (n+1)^{1/2}\left|n+1\right\rangle. \end{aligned} \tag{1.10}$$

Кожна функція характеризується цілим числом *n*. Оператор $\hat{b}$ перетворює функцію з індексом *n* у функцію з індексом $n+1$; навпаки оператор $\hat{b}^{+}$ збільшує індекс на одиницю.

Легко перевірити, що це зображення не суперечить співвідношенням комутації (1.8). Наприклад, подіємо комутатором операторів $\hat{b}, \hat{b}^{+}$ на одну з базисних функцій:

$$\begin{aligned} \left[\hat{b}\ ,\hat{b}^{+}\right]\left|n\right\rangle &= \hat{b}\ \hat{b}^{+}\left|n\right\rangle - \hat{b}^{+}\hat{b}\left|n\right\rangle = \\ &= \hat{b}\left(n+1\right)^{1/2}\left|n+1\right\rangle - \hat{b}^{+}n^{1/2}\left|n-1\right\rangle = \\ &= \left(n+1\right)^{1/2}\hat{b}\left|n+1\right\rangle - n^{1/2}\hat{b}^{+}\left|n-1\right\rangle = \\ &= \left(n+1\right)^{1/2}\left(n+1\right)^{1/2}\left|n\right\rangle - n^{1/2}n^{1/2}\left|n\right\rangle = \\ &= \left(n+1\right)\left|n\right\rangle - n\left|n\right\rangle = \left|n\right\rangle. \end{aligned} \tag{1.11}$$

Інакше кажучи, комутатор перетворює кожну базисну функцію саму в себе. Якщо базисні функції утворюють повну систему, то оператор $\left[\hat{b}\ ,\hat{b}^{+}\right]$ еквівалентний одиничному, що і вимагається, зважаючи на співвідношення комутації.

Повертаючись до гамільтоніана (1.9), легко бачити, що кожна власна функція $|n\rangle$ є власною функцією оператора $\hat{\mathbf{H}}$. Математичне доведення цього проводиться точно так само, як і у випадку (1.11), змінюється лише знак у другому доданку. Таким чином,

$$\hat{\mathbf{H}}|n\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega(2n+1)|n\rangle = E_n|n\rangle. \qquad (1.12)$$

Функція $|n\rangle$ є власною функцією гамільтоніану, що належить до енергетичного рівня E_n. Вираз для останнього подається формулою (1.5). Цим і завершується процедура квантування енергії лінійного гармонічного осцилятора.

§2. Оператори народження і знищення

Оператори, що визначаються формулами (1.7), мають ряд цікавих властивостей і знаходять різне застосування. Оскільки оператор $\hat{b}$ зменшує кількість квантів у системі на одиницю, то його називають *оператором знищення*; оператор $\hat{b}^+$ є *оператором народження* кванту енергії збудження. Добуток операторів $\hat{b}^+\hat{b}$ – це оператор, що дає *числа заповнення* певного стану системи, а його власними функціями є $|n\rangle$. Отже, гамільтонан осцилятора (1.9) можна назвати гамільтоніаном осцилятора в зображенні чисел заповнення або у зображенні вторинного квантування.

Мета цього підходу полягає в тому, щоб сформулювати всю теорію, максимально зберігаючи простоту властивостей векторів станів. Нам не потрібно нічого знати про вектори станів як про хвильові функції, тобто як про явні аналітичні функції змінної *x*. Крім того, до (1.10) потрібно додати лише ще одну властивість векторів стану. Оскільки вектори стану – це власні функції гамільтоніану, то їх можна вважати ортонормованими, тобто

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}. \tag{2.1}$$

Далі, згідно з правилами (1.10), можна отримати усі стани, багаторазово діючи оператором народження на основний (вакуумний) стан $|0\rangle$:

$$|n\rangle = (n!)^{1/2} \left(\hat{b}^{+}\right)^{n} |0\rangle. \tag{2.2}$$

З іншого боку, при дії оператора знищення на основний стан отримуємо нуль. Справді з (1.10) маємо

$$\hat{b}|0\rangle = 0. \tag{2.3}$$

Це означає, що число заповнення не може бути від’ємним. У цьому випадку такий висновок є цілком зрозумілим.

Установлені правила можна використовувати при розрахунку будь-яких квантово-механічних властивостей системи. Ознайомимося з методом операторів народження і знищення на конкретному прикладі. Нехай, наприклад, необхідно знайти середнє значення величини x^4 в основному стані осцилятора. Щоб виразити оператор x через $\hat{b}, \hat{b}^{+}$, скористаємося формулою (1.7):

$$x = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2g}}\left(\hat{b} - \hat{b}^{+}\right). \tag{2.4}$$

Тоді

$$\begin{aligned} \langle x^4 \rangle &= \langle 0 | x^4 | 0 \rangle = \left(\frac{\hbar\omega}{2g}\right)^2 \left\langle 0 \left| \left(\hat{b} - \hat{b}^{+}\right)^4 \right| 0 \right\rangle = \\ &= \left(\frac{\hbar\omega}{2g}\right)^2 \left\{ \langle 0 | \hat{b}^4 | 0 \rangle - \langle 0 | \hat{b}^3 \hat{b}^{+} | 0 \rangle - \langle 0 | \hat{b}^2 \hat{b}^{+} \hat{b} | 0 \rangle \ldots + \left\langle 0 \left| \left(\hat{b}^{+}\right)^4 \right| 0 \right\rangle \right\}. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Для обчислення матричних елементів корисно використовувати кілька простих правил. Так, усі члени, в яких кількість операторів знищення не дорівнює кількості операторів народження, автоматично перетворюється в нуль. Дійсно, діючи на стани $|0\rangle$, що знаходиться праворуч, ми отримуємо стан з $n \neq 0$, який ортогональний стану $\langle 0|$, зважаючи на властивості (2.1).

Далі ми повинні виключити всі члени, в яких оператор знищення стоїть безпосередньо перед вектором $|0\rangle$, і всі члени, в яких за $\langle 0|$ йде оператор $\hat{b}^{+}$. Перше твердження тривіальне, це наслідок умови (2.3). Проте останню рівність можна записати і у вигляді

$$\langle 0|\hat{b}^{+} = 0. \tag{2.6}$$

Справді, з (1.7) видно, що оператор $\hat{b}^{+}$ ермітово спряжений з $\hat{b}$. Таким чином, співвідношення (2.6) можна отримати з формули (2.3) шляхом ермітового спряження. Рівності (2.3) і (2.6) мають простий зміст: згідно з ними, не існує стану, діючи на який оператором народження можна було б отримати вакуум. Важливо пам'ятати, що самі собою оператори $\hat{b}, \hat{b}^{+}$ – не ермітові, і що оператор $\hat{b}^{+}$ – не просто вираз, комплексно спряжений з $\hat{b}$ в звичайному алгебраїчному значенні. Справді, оператор імпульсу – «уявний». Тому надалі ми всюди будемо використовувати «хрестик» для позначення операції ермітового спряження.

Отже, у виразі (2.5) залишаються тільки два доданки. Їх можна перетворити, використовуючи правила (1.10). Однак цікавіше використати співвідношення комутації (2.6). Тоді члени $\hat{b}\hat{b}^{+}\hat{b}\hat{b}^{+}$ можна записати у вигляді

$$\left(\hat{b}\hat{b}^{+}\right)\left(\hat{b}\hat{b}^{+}\right) = \left(\hat{b}^{+}\hat{b}+1\right)\left(\hat{b}^{+}\hat{b}+1\right) = \left(\hat{n}+1\right)^{2}, \tag{2.7}$$

оскільки оператор числа заповнення $\hat{b}^{+}\hat{b}$ діагональний у цьому зображенні. Аналогічно

$$\hat{b}\hat{b}\hat{b}^{+}\hat{b}^{+} = \hat{b}\left(\hat{b}^{+}\hat{b}+1\right)\hat{b}^{+} =$$
$$= \hat{b}\hat{b}^{+}\hat{b}\hat{b}^{+} + \hat{b}\hat{b}^{+} = \left(\hat{n}+1\right)^{2} + \left(\hat{n}+1\right). \tag{2.8}$$

В основному стані середні значення цих операторів дають у сумі 3, тому

$$\left\langle x^{4}\right\rangle = \frac{3}{4}\frac{\hbar^{2}}{mg}. \tag{2.9}$$

Зрозуміло, ми могли б отримати цей результат і за допомогою аналітичного координатного зображення для хвильової функції основного стану

$$\left|0\right\rangle = \alpha^{1/2}\pi^{-1/4}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^{2}x^{2}\right), \tag{2.10}$$

де

$$\alpha = \frac{mg}{\hbar^{2}} \tag{2.11}$$

Наш операторний метод еквівалентний обчисленню середнього значення $\left\langle x^{4}\right\rangle$ за допомогою інтегрування частинами. Аналогічно рівність (2.2), що слугує для побудови базисних функцій, є ніщо інше, як рекурентна формула стандартної теорії, за допомогою якої поліноми Ерміта можна отримати шляхом багаторазового диференціювання хвильової функції основного стану (2.10).

§3. Система лінійних незв'язаних осциляторів

Тепер узагальнимо отримані результати для одного осцилятора на систему незв'язаних осциляторів. Для цього припустимо, що окремі осцилятори, координати x яких будемо відрізняти індексом k, коливаються незалежно один від одного. Маси частинок також можуть бути різними і ми відрізнятимемо їх також індексом k. Тоді класична функція Гамільтона системи буде визначатися сумою функцій Гамільтона всіх окремих осциляторів:

$$H = \sum_k H_k \,, \tag{3.1}$$

де

$$H = \frac{1}{2m_k} p_k^{\,2} + \frac{m_k}{2} \omega_k^2 x_k^{\,2}, \tag{3.2}$$

Тут і надалі ми розглядаємо *x*-складові імпульсів: $\vec{p}_k = \vec{i} p_{x_k} = \vec{i} p_k$.

Для переходу до квантової механіки проводимо заміну імпульсу на оператор імпульсу. Далі, проводячи аналогічні перетворення до (1.7) для кожного осцилятора, отримаємо:

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_k \hbar\omega_k \left(\hat{b}_k^{\,+} \hat{b}_k + \frac{1}{2} \right). \tag{3.3}$$

Тут сума $\sum_k \frac{1}{2}\hbar\omega_k$ називається *нульовою енергією*. Оскільки ця сума є константою, то посунемо відлік енергії на цю величину і надалі $\sum_k \frac{1}{2}\hbar\omega_k$ у виразі (1.26) не писатимемо. Тоді рівняння Шредінгера матиме вигляд:

$$\left\{ \hbar\omega_1 \hat{b}_1^{\,+} \hat{b}_1 + \hbar\omega_2 \hat{b}_2^{\,+} \hat{b}_2 + \ldots + \hbar\omega_N \hat{b}_N^{\,+} \hat{b}_N \right\} \Phi = E\Phi. \tag{3.4}$$

Тут знову важливе значення має переставне співвідношення:

$$\hat{b}_k \hat{b}_k^{\,+} - \hat{b}_k^{\,+} \hat{b}_k = \left[\hat{b}_k , \hat{b}_k^{\,+} \right] = 1. \tag{3.5}$$

Водночас з цим співвідношенням ще слід вказати співвідношення для різних індексів *k*. Оскільки оператори $\hat{b}_k, \hat{b}_k^{\,+}$ містять оператори

$\hat{p}_k = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x_k}$, x_k, які комутують з $\hat{p}_{k'} = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x_{k'}}$, $x_{k'}$ при $k \neq k'$, то можна записати:

$$\hat{b}_k \hat{b}_{k'}^{+} - \hat{b}_{k'}^{+} \hat{b}_k = \left[\hat{b}_k , \hat{b}_{k'}^{+} \right] = \delta_{k,k'}. \tag{3.6}$$

Такими самими міркуваннями можна отримати ще два співвідношення для операторів народження і знищення:

$$\begin{aligned} &\hat{b}_k \hat{b}_{k'} - \hat{b}_{k'} \hat{b}_k = \left[\hat{b}_k , \hat{b}_{k'} \right] = 0, \\ &\hat{b}_k^{+} \hat{b}_{k'}^{+} - \hat{b}_{k'}^{+} \hat{b}_k^{+} = \left[\hat{b}_k^{+} , \hat{b}_{k'}^{+} \right] = 0. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Оператори, для яких виконуються співвідношення (3.6) і (3.7) називаються *бозе-операторами*.

Тепер покажемо як, використовуючи співвідношення комутації (3.6) і (3.7), можна отримати власні значення енергії і власні вектори системи осциляторів, що не взаємодіють. При цьому будемо вважати, що Φ_0 – найнижчий стан системи, а відповідну енергію позначимо E_0. Тепер домножимо (3.4) зліва на $\hat{b}_l$, і використовуючи переставні співвідношення (3.6) і (3.7), отримаємо:

$$\left\{ \hbar\omega_1 \hat{b}_1^{+} \hat{b}_1 \hat{b}_l + \hbar\omega_2 \hat{b}_2^{+} \hat{b}_2 \hat{b}_l + \ldots + \hbar\omega_l \left(\hat{b}_l^{+} \hat{b}_l + 1 \right) \hat{b}_l + \ldots + \hbar\omega_N \hat{b}_N^{+} \hat{b}_N \hat{b}_l \right\} \Phi_0 = E_0 \hat{b}_l \Phi_0. \tag{3.8}$$

Переносимо $\hbar\omega_l \hat{b}_l \Phi_0$ у праву частину рівняння, отримаємо

$$\left\{ \hbar\omega_1 \hat{b}_1^{+} \hat{b}_1 \hat{b}_l + \hbar\omega_2 \hat{b}_2^{+} \hat{b}_2 \hat{b}_l + \ldots + \hbar\omega_l \hat{b}_l^{+} \hat{b}_l \hat{b}_l + \ldots + \hbar\omega_N \hat{b}_N^{+} \hat{b}_N \hat{b}_l \right\} \Phi_0 = \left(E_0 - \hbar\omega_l \right) \hat{b}_l \Phi_0. \tag{3.9}$$

Звідси випливає, що $\hat{b}_l \Phi_0$ є новою власною функцією з ще меншою власною енергією, що суперечить попередньому твердженню, що E_0 – найменша енергія. Щоб цю суперечність усунути, треба, щоб

$$\hat{b}_l \Phi_0 = 0\,. \qquad (3.10)$$

Оскільки індекс *l* може бути довільним, то (3.10) має виконуватися для усіх *l*=1,2,…,*N*. Одночасно звідси відпливає, що $E_0 = 0$.

Тепер ми можемо послідовним застосуванням операторів $\hat{b}_j^{\,+}$, як і для одного осцилятора, утворити загальний власний стан оператора Гамільтона (3.3), який має вигляд:

$$\Phi_{n_1,n_2,\ldots,n_N} = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!\ldots n_N!}}\left(\hat{b}_1^{\,+}\right)^{n_1}\ldots\left(\hat{b}_N^{\,+}\right)^{n_N}\Phi_0, \qquad (3.11)$$

де n_j – цілі числа ≥0 і 0!=1, $\left(\hat{b}^+\right)^0 = 1$.

$$E = \hbar\omega_1 n_1 + \hbar\omega_2 n_2 \ldots + \hbar\omega_N n_N + E_{zero}, \qquad (3.12)$$

де нульова енергія

$$E_{zero} = (1/2)\hbar\left(\omega_1 + \ldots + \omega_N\right). \qquad (3.13)$$

Надалі нульову енергію не пишемо. Вирази (3.11) та (3.13) можна записати у скороченій формі

$$\Phi_{\{n_k\}} = \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k!}}\left(\hat{b}_k^{\,+}\right)^{n_k}\Phi_0, \qquad (3.14)$$

$$E = \sum_k \hbar\omega_k n_k\,. \qquad (3.15)$$

Такі записи мають перевагу, що ми можемо використовувати їх і тоді, коли *k* – не цілі числа, а, наприклад, вектори. Формально в зображенні (3.11) чи (3.14) для функції стану присутні усі n_k, навіть якщо вони дорівнюють нулю. На рис.1 (а) показано відповідний приклад. Тут сукупність {n} має вигляд $\{n\} = (0,1,0,3,0,0,2,0)$.

Відповідно можливе й інше зображення, у якому слід враховувати тільки $n_k > 0$. У цьому випадку індекси осциляторів пов'язані нерівностями $k_1 < k_2 < ... < k_M$. У нашому прикладі $k_1 = 2,\ k_2 = 4,\ k_3 = 7$ (рис. 2(б)).

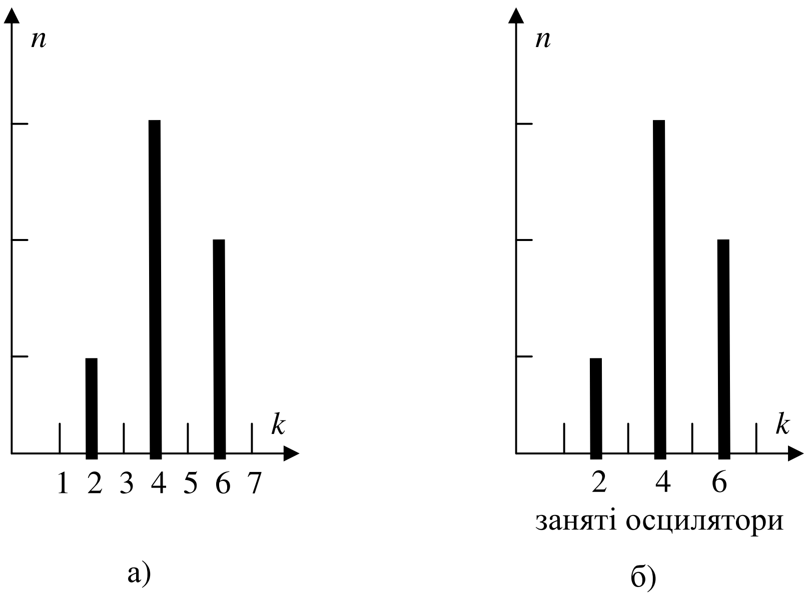

Рис. 1. Два способи опису станів

Тоді ми пишемо

$$\Phi_{\{n\}} = \frac{1}{\sqrt{n_{k_1}!n_{k_2}!...n_{k_M}!}} \left(\hat{b}_{k_1}{}^{+}\right)^{n_{k_1}} ... \left(\hat{b}_{k_M}{}^{+}\right)^{n_{k_M}} \Phi_0, \tag{3.16}$$

де усі $n_{k_j} > 0$.

§4. Потенціальна енергія атомів у простому одномірному кристалі

У попередніх параграфах ми розглядали кристал як ідеальне утворення, яке можна побудувати шляхом безмежного, закономірного повторення в просторі однакових структурних одиниць, які ми назвали елементарними комірками. Багато властивостей кристала можна зрозуміти, якщо прийняти до уваги трансляційну симетрію кристала. Однак далеко не всі. Якщо зацікавитися явищами переносу тепла чи заряду через кристал (явища теплопровідності, теплоємності, електропровідності і т. д.), то необхідно врахувати і те, що атоми чи молекули, які утворюють базис кристала, коливаються навколо своїх положень рівноваги.

Розглянемо це питання детальніше. Будемо вважати, що потенціальна енергія взаємодії двох атомів (молекул) залежить лише від відстані між ядрами атомів R (рис. 2). Один з атомів є в точці $R=0$, а інший – в будь-якій точці осі OX.

Відомо, що сила, яка діє на частинку, визначається градієнтом її потенціальної енергії:

$$\vec{\mathbf{F}} = -gradU = \frac{dU}{dR}\frac{\vec{\mathbf{R}}}{R}. \tag{4.1}$$

Таким чином, в тих точках, де $\frac{dU}{dR} > 0,\, R > R_0$ (сила $\vec{\mathbf{F}}$ є антипаралельною до вектора $\vec{\mathbf{R}}$) і мають місце сили притягання, а в тих, де $\frac{dU}{dR} < 0$ – сили відштовхування. З рис.2 видно, що в точці $R = R_0$ система двох атомів перебуває у стані стійкої рівноваги.

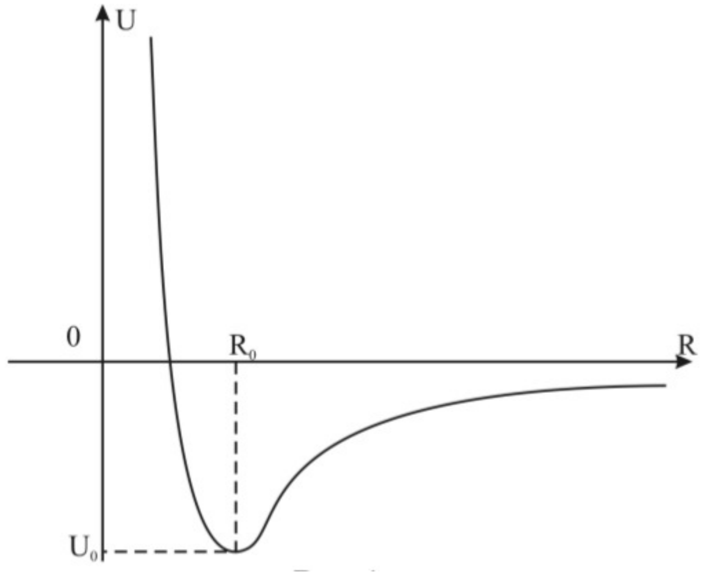

Рис.2. Потенціальна енергія електрона в кристалі

Нехай атом, що рухається, є біля точки R_0, тобто $R - R_0 \equiv x$ – мала величина. Тоді потенціальна енергія має вигляд:

$$U(R) = U(R_0) + \left(\frac{dU}{dR}\right)_{R=R_0}(R - R_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R=R_0}(R - R_0)^2 + \dots \quad (4.2)$$

Якщо за нульовий рівень вибрати $U(R_0)$ і врахувати, що $R = R_0$ – точка рівноваги, та обмежитися першими трьома відмінними від нуля доданками, то отримаємо:

$$U(x) = \frac{1}{2}\beta x^2 + \frac{1}{6}\gamma x^3 + \frac{1}{24}\delta x^4 + \dots \quad (4.3)$$

Тоді сила, з якою взаємодіють два розглядувані атоми, задається формулою:

$$F = -\beta x + \frac{1}{2}\gamma x^2 - \frac{1}{6}\delta x^3 + \dots \quad (4.4)$$

У більшості випадків для кристалів перший доданок є набагато більшим за наступні, тобто сила взаємодії між двома сусідніми атомами кристала буде майже пружною (квазіпружною).

§5. Коливання атомів у простому одномірному кристалі

З точки зору класичної механіки, атоми у вузлах кристалічної гратки можуть перебувати лише при абсолютному нулі температури. При температурі, відмінній від нуля, атоми рухаються. Цей рух матиме коливальний характер, що видно з вигляду потенціальної енергії. Ми розглянемо спочатку простіший випадок коливання однакових атомів одномірного кристалу. Далі узагальнимо одержані закономірності на випадок тривимірного кристала. Необхідно також врахувати, що використовувати співвідношення класичної фізики можна лише при високих температурах, тому, щоб вивчати рух атомів при низьких температурах, необхідно буде зробити перехід від класичної до квантової механіки.

Нехай маємо лінійний ланцюжок однакових атомів з масами m. Відхилення атомів від їхніх рівноважних положень у вузлах ґратки з номерами (n-1)*,* n*,* (n+1) позначимо через u_{n-1}, u_n, u_{n+1}.

Будемо для простоти використовувати наближення найближчих сусідів, тобто будемо враховувати взаємодію лише сусідніх атомів. Сила, яка діє на n-й атом, визначається відносним зміщенням цього атома відносно (n-1)-го та (n+1)-го атома:

$$f_n = -\beta\left(u_n - u_{n-1}\right) - \beta\left(u_n - u_{n+1}\right) = -\beta\left(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}\right). \qquad (5.1)$$

Рівняння руху n-го атома має вигляд:

$$m\ddot{u}_n = -\beta\left(u_n - u_{n-1}\right) - \beta\left(u_n - u_{n+1}\right) = -\beta\left(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}\right). \quad (5.2)$$

Для усіх атомів маємо систему диференціальних рівнянь, бо прискорення n-го атома залежить від зміщення не лише цього атома, а й сусідніх. Отже, ми маємо справу з сукупністю матеріальних точок, що взаємодіють між собою, коливаються, або, як кажуть, систему осциляторів, що взаємодіють. Розв'язком рівняння (5.2) буде функція, що має вигляд плоскої хвилі:

$$u_n = A\exp\left[i\left(qan - \omega t\right)\right], \quad (5.3)$$

де ω – частота, q – проекція хвильового вектора (хвильове число), (an) – координата n-го вузла кристала. Правильність такого розв'язку легко встановити прямою підстановкою (5.3) в рівняння (5.2). Одержимо, що (5.3) буде розв'язком тоді, коли виконується умова:

$$\omega^2 = \frac{4\beta}{m}\sin^2\frac{qa}{2}. \quad (5.4)$$

Звідси отримаємо

$$\omega = \omega_m\left|\sin\frac{qa}{2}\right|, \;\; \omega_m = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}. \quad (5.5)$$

Залежність частоти коливань атомів від хвильового числа (вектора) називають *законом дисперсії* коливань. Функцію $\omega = \omega(q)$ називають ще гілкою коливань чи гілкою дисперсії. З формули (5.5) видно, що $\omega(q=0)=0$. Збільшення величини хвильового вектора приводить до монотонного зростання частоти, яка стає найбільшою на межі зони Брілюена $q = \pi / a$. Отже, для простої одновимірної ґратки одержали одну вітку коливань. Можна довести, що для простого кристала кількість віток коливань дорівнює вимірності кристала. У тривимірному простому кристалі буде, взагалі кажучи, три гілки коливань.

Покажемо, що хвильове число q неоднозначно визначає хвилю (5.3). Замінимо у виразі (5.3) q на $q' = q + \frac{2\pi g}{a}$, де g – ціле число. Тоді новій хвилі відповідає зміщення n –го атома u_n':

$$u_n' = A\exp\left[i\left(q'an - \omega t\right)\right] = A\exp\left[i\left(qan - \omega t\right)\right]\exp[2\pi\, gn] = u_n. \tag{5.6}$$

Видно, що хвиля u_n' тотожна хвилі u_n в усіх точках у будь-який момент часу. А це означає, що q' *і* q фізично тотожні, еквівалентні. Інакше кажучи, достатньо розглядати q в довільній області величиною $\frac{2\pi}{a}$. Тобто, ми знову приходимо до необхідності введення зони Брілюена. Як і для електрона, виберемо як основний інтервал (першу зону Брілюена) область:

$$-\frac{\pi}{a} \le q \le \frac{\pi}{a}. \tag{5.7}$$

З формули (5.3) можна зробити висновок, що коливний рух атомів кристала відбувається таким чином, ніби по кристалу поширюється повздовжня хвиля. Макроскопічні кристали складаються з великої кількості атомів (N). Сили взаємодії між атомами розповсюджуються на відстані сталої ґратки, тому умови, в яких є крайні атоми, не впливають на коливання всередині ланцюжка. Використаємо найпростіші граничні умови для u_n. Аналогічно до хвильової функції електрона, використаємо умову періодичності u_n:

$$u_n = u_{n+N}. \tag{5.8}$$

Звідси отримаємо

$$q = \frac{2\pi}{a}\frac{\nu}{N}\ , \ -\frac{N}{2} \le \nu \le \frac{N}{2}. \tag{5.9}$$

Одержані результати такі самі, як і для електрона. Хвильове число змінюється в зоні Брілюена квазідискретно (квазінеперервно).

§6. Енергія коливань простого одновимірного кристала

Ми розглянули коливання і хвилі в лінійному ланцюжку з однакових атомів і показали, що гармонійні коливання є розв'язками рівняння для зміщень атомів. Окрема гармонічна хвиля (5.3) не є найбільш загальним розв'язком рівняння (5.2). Загальний розв'язок цього рівняння є лінійною суперпозицією всіх можливих хвиль типу (5.3). Кожна хвиля буде відрізнятись хвильовим числом q, відповідною йому частотою $\omega = \omega_q$ і амплітудою A_q. У найбільш загальному випадку рух атомів описується формулою:

$$u_n = \sum_q \left(A_q e^{i(qan-\omega t)} + A_q^* e^{-i(qan-\omega t)} \right) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(a_q e^{iqan} + a_q^* e^{-iqan} \right). \qquad (6.1)$$

Варто зауважити, що u_n у вигляді (6.1) є дійсною функцією, на відміну від розв'язку (5.3). При цьому ми вважаємо, що на ґратку накладено умови циклічності, тому підсумовування в (6.1) проводиться за N дискретними значеннями:

$$q = \frac{2\pi}{aN}\nu, \quad \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots . \qquad (6.2)$$

Як побачимо далі, величини a_q, або точніше деякі прості комбінації з них, є нормальними координатами і відповідними нормальними імпульсами. Для цього розглянемо вирази для кінетичної і потенціальної енергії атомного ланцюжка, які мають вигляд:

$$T=\frac{m}{2}\sum_{n=1}^{N}\dot{u}_n^2, \tag{6.3}$$

$$\Phi=\frac{\beta}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(u_n-u_{n-1}\right)^2. \tag{6.4}$$

Підставивши (6.1) в (6.3) та (6.4) і виконавши підсумовування за *n*, одержимо:

$$T=\frac{m}{2}\sum_{q}^{N}\omega_q^2\left(2a_qa_q^*-a_qa_{-q}-a_q^*a_{-q}^*\right), \tag{6.5}$$

$$\Phi=\frac{m}{2}\sum_{q}^{N}\omega_q^2\left(2a_qa_q^*+a_qa_{-q}+a_q^*a_{-q}^*\right). \tag{6.6}$$

Тоді повна енергія матиме досить простий вигляд:

$$E=T+\Phi=2m\sum_{q}^{N}\omega_q^2a_qa_q^*. \tag{6.7}$$

Визначимо величини x_q *і* p_q за допомогою рівнянь:

$$x_q=a_q+a_q^*=2\,\mathrm{Re}\left\{a_q\right\},\quad p_q=\frac{m\omega_q}{i}(a_q-a_q^*)=\frac{m\omega_q}{i}2\,\mathrm{Im}\left\{a_q\right\}. \tag{6.8}$$

З рівняння (6.8) легко одержати:

$$a_q=\frac{1}{2}\left(x_q+i\frac{p_q}{m\omega_q}\right),\quad a^*{}_q=\frac{1}{2}\left(x_q-i\frac{p_q}{m\omega_q}\right). \tag{6.9}$$

Підставимо a_q, $a^*{}_q$ з (6.9) у вираз (6.7):

$$E=\sum_q\left\{\frac{p_q^2}{2m}+\frac{1}{2}m\,\omega_q^2x_q^2\right\}=H\ . \tag{6.10}$$

Величини x_q, p_q відіграють роль узагальнених координат і спряжених до них імпульсів, а вираз (6.10) є функцією Гамільтона, яка виражена через ці змінні. Отже, повну енергію *E* коливного руху атомів кристала можна подати як суму енергії нормальних коливань, які поводять себе аналогічно лінійним гармонічним осциляторам з частотами ω_q і масами m.

Використовуючи формулу (6.10) для функції Гамільтона коливань атомів кристала, легко перейти (за всіма правилами квантової механіки) до вигляду оператора Гамільтона системи, що розглядається:

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_q \left\{ \frac{\hat{p}_q}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_q^2 x_q^2 \right\}, \tag{6.11}$$

де $\hat{p}_q$ – оператор імпульсу. Розв'язавши стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$\hat{\mathbf{H}}\psi = \mathrm{E}\psi, \tag{6.12}$$

можна отримати енергію коливань атомів, яка ґрунтується на квантово-механічному описі системи. Гамільтоніан системи дорівнює сумі гамільтоніанів лінійних гармонійних осциляторів, для яких розв'язок рівняння Шредінгера відомий:

$$\mathrm{E}_{n_q} = \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right), \tag{6.13}$$

$$\varphi_{n_q}\left(x_q\right) = \left[n_q! 2^n \sqrt{\pi}\right]^{-\frac{1}{2}} \mathrm{H}_{n_q}(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2} \right), \tag{6.14}$$

де $\xi_q = x_q \sqrt{\dfrac{m\omega_q}{\hbar}}$, $\mathrm{H}_{n_q}(\xi)$ – поліноми Ерміта, $n_q = 0, 1, 2, 3...$ – квантове число. Тоді енергія коливань кристала виразиться через суму енергій (6.13):

$$E = \sum_{n_q} \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right), \tag{6.15}$$

а повна хвильова функція буде добутком функцій $\phi_{n_q}\left(x_q\right)$:

$$\psi = \prod_{n_q} \phi_{n_q}\left(x_q\right). \tag{6.16}$$

Отримані результати можна формалізувати, перейшовши до представлення вторинного квантування (представлення чисел заповнення).

Уведемо формально оператори b_q^+, b_q аналогічно як в (1.7):

$$\hat{b}_q = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_q}}\left(\frac{\hat{p}_q}{\sqrt{m}} - i\sqrt{m}\omega_q x_q\right),$$
$$\hat{b}_q^{\,+} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_q}}\left(\frac{\hat{p}_q}{\sqrt{m}} + i\sqrt{m}\omega_q x_q\right). \tag{6.17}$$

Тоді рівняння Шредінгера для одного осцилятора зведеться до компактного вигляду:

$$\hbar\omega_q\left(\hat{b}_q^+\hat{b}_q + \frac{1}{2}\right)\phi_{n_q} = \mathrm{E}_{n_q}\phi_{n_q}. \tag{6.18}$$

Зрозуміло, що через ці оператори можна записати гамільтоніан системи, координати u_n та оператор $\hat{p}_n$. Зокрема, гамільтоніан коливань буде мати вигляд:

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_q \hbar\omega_q\left(\hat{b}_q^+\hat{b}_q + \frac{1}{2}\right). \tag{6.19}$$

Величини u_n та оператор $\hat{p}_n$ задаються формулами:

$$u_n = \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_q}}\left(\hat{b}_q - \hat{b}_q^+\right)e^{iq_n a},$$
$$\hat{p}_n = -i\sum_q \sqrt{\frac{\hbar m\omega_q}{2N}}\left(\hat{b}_q - \hat{b}_q^+\right)e^{iq_n a}. \tag{6.20}$$

Як було сказано, n_q – це кількість квантів енергії $\hbar\omega_q$. З іншого боку, n_q можна трактувати як кількість деяких частинок (квазічастинок) з енергією $\hbar\omega_q$ та імпульсом $\hbar q$. Ці частинки називають *фононами*. Отримані результати можна узагальнити на випадок реального тривимірного кристалу.

§7. Квантування вільного електромагнітного поля

Для послідовного квантово-механічного опису явищ, які спостерігаються при взаємодії атома речовини з електромагнітним полем, нам необхідно провести квантування поля. Нагадаємо, що першим поштовхом до створення самої квантової теорії став постулат Планка про квантування енергії електромагнітного поля. Важливим є також і те, що в результаті побудови квантової теорії електромагнітного поля узагальнювались ідеї та поняття, потрібні для створення квантової теорії поля як фундаменту фізики елементарних частинок.

Будемо виходити з класичного опису електромагнітного поля і представимо його у вигляді набору гармонічних осциляторів. Далі за звичайною схемою квантової механіки здійснимо перехід від класичних осциляторів до квантових. Тим самим ми будемо розглядати електромагнітне поле як сукупність квантових осциляторів. Задача полягає у знаходженні явного вигляду операторів фізичних величин поля (гамільтоніан, векторний потенціал, напруженості електричного і магнітного полів), обчисленні його енергетичних рівнів та хвильових функцій. Це дасть також змогу ввести поняття фотона.

Для виконання цієї програми діємо таким чином. При відсутності зарядів і струмів, тобто для вільного електромагнітного поля, його скалярний потенціал може бути вибраний рівним нулеві. Векторний потенціал $\vec{A} = \vec{A}(\vec{r}, t)$ як функція просторових координат r і часу t задовольняє умову попередності поля

$$div\vec{A} = 0, \qquad (7.1)$$

напруженості електричного та магнітного полів

$$\vec{\varepsilon} = -\frac{1}{c}\dot{\vec{A}}, \;\; \vec{H} = rot\vec{A}. \qquad (7.2)$$

Рівняння Максвелла зводиться до хвильового рівняння

$$\frac{1}{c^2}\ddot{\vec{A}} - \nabla^2\vec{A} = 0. \qquad (7.3)$$

Будемо розглядати поля у скінченій області об'єму V, яка має форму куба з ребром L, $V{=}L^3$. Розкладаємо векторний потенціал $\vec{A} = \vec{A}\left(\vec{r}, t\right)$ в ряд Фур'є, накладаючи граничні умови періодичності:

$$\vec{A} = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}}\sum_{\vec{k}}\left(\vec{a}_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\vec{r}} + a^*_{\vec{k}}e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right). \qquad (7.4)$$

Такий запис ряду Фур'є підкреслює, що $\vec{A}$ – величина дійсна, $A^*{=}A$; множник перед сумою введений для зручності.

З умови попередності поля випливає, що комплексні вектори $\vec{a}_{\vec{k}}$ є ортогональними до хвильового вектора $\vec{k}$:

$$\left(\vec{k} \cdot \vec{a}_{\vec{k}}\right) = 0.$$

Із хвильового рівняння отримуємо рівняння гармонічного осцилятора для $\vec{a}_{\vec{k}}$:

$$\frac{1}{c^2}\ddot{\vec{a}}_{\vec{k}} + k^2\vec{a}_{\vec{k}} = 0. \qquad (7.5)$$

У зв'язку з цим, коефіцієнти $\vec{a}_{\vec{k}}$ мають гармонічну залежність від часу з частотою $\omega_{\vec{k}} = ck$,

$$a_{\vec{k}} \sim e^{-i\omega_{\vec{k}}t}$$

Для $\vec{a}_{\vec{k}}$ у показнику експоненти фіксуємо знак "–", тоді для $\vec{a}_{\vec{k}}{}^{*}$ матимемо знак"+". Узагалі кажучи, ми повинні взяти для $\vec{a}_{\vec{k}}$ та $\vec{a}_{\vec{k}}{}^{*}$ лінійну комбінацію гармонік із додатними та від'ємними частотами. Однак остаточний результат залишиться тим самим, якщо під знаком суми за $\vec{k}$ в доданках з додатною частотою для $\vec{a}_{\vec{k}}$ та від'ємною частотою для $\vec{a}_{\vec{k}}{}^{*}$замінити $\vec{k}$ на $-\vec{k}$ і провести прості перепозначення.

Обчислимо повну енергію електромагнітного поля в об'ємі V:

$$E = \frac{1}{8\pi}\int\left(\varepsilon^2 + H^2\right)d\vec{r} = \frac{1}{8\pi}\int\left(\frac{1}{c^2}\dot{A}^2 + \left[\nabla\times\vec{A}\right]^2\right)d\vec{r}\ . \qquad (7.6)$$

Підставляючи у вираз для енергії розклад векторного потенціалу, запишемо енергію поля через величини $\vec{a}_{\vec{k}}$ та $\vec{a}_{\vec{k}}{}^{*}$. При цьому двократне підсумовування за хвильовими векторами, що виникає у виразі для E внаслідок його квадратичної форми за A, зводиться після інтегрування за просторовими змінними з використанням інтегрального представлення символа Кронекера

$$\delta_{\vec{k},\vec{k}'} = \frac{1}{V}\int e^{i\vec{r}(\vec{k}-\vec{k}')}d\vec{r}$$

до однократного:

$$E = \frac{c^2}{2}\sum_{\vec{k}}\left\{\begin{array}{l}\frac{1}{c^2}\dot{\vec{a}}_{\vec{k}}\dot{\vec{a}}_{-\vec{k}} + \frac{2}{c^2}\dot{\vec{a}}_{\vec{k}}\dot{\vec{a}}^{*}_{\vec{k}} + \frac{1}{c^2}\dot{\vec{a}}^{*}_{\vec{k}}\dot{\vec{a}}^{*}_{-\vec{k}} + \left(\left[\vec{k}\times\vec{a}_{\vec{k}}\right]\cdot\left[\vec{k}\times\vec{a}_{-\vec{k}}\right]\right) + \\ +2\left(\left[\vec{k}\times\vec{a}_{\vec{k}}\right]\cdot\left[\vec{k}\times\vec{a}^{*}_{\vec{k}}\right]\right) + \left(\left[\vec{k}\times\vec{a}^{*}_{\vec{k}}\right]\cdot\left[\vec{k}\times\vec{a}^{*}_{-\vec{k}}\right]\right)\end{array}\right\}. \qquad (7.7)$$

Далі, використовуючи рівності

$$\dot{\vec{a}}_{\vec{k}} = -i\omega_{\vec{k}}\dot{\vec{a}}_{\vec{k}} \qquad \dot{\vec{a}}^{*}_{\vec{k}} = i\omega_{\vec{k}}\dot{\vec{a}}^{*}_{\vec{k}}\ ,$$

що випливають із часової залежності величини $\vec{a}_{\vec{k}}$, розписуємо доданки з векторними добутками. Наприклад,

$$\left(\left[\vec{k}\times\vec{a}_{\vec{k}}\right]\cdot\left[\vec{k}\times\vec{a}_{-\vec{k}}\right]\right)=\left(\left[\vec{a}_{\vec{k}}\times\left[\vec{k}\times\vec{a}_{-\vec{k}}\right]\right]\cdot\vec{k}\right)=k^2\left(\vec{a}_{\vec{k}}\cdot\vec{a}_{-\vec{k}}\right),,$$

де враховано умову поперечності. У результаті отримуємо, що перший і четвертий та третій та останній доданки у виразі для E скорочуються, а решта дають

$$E=2\sum_{\vec{k}}\omega_{\vec{k}}^2\left|\vec{a}_{\vec{k}}\right|^2. \tag{7.8}$$

Перейдемо тепер від комплексних величин $\vec{a}_{\vec{k}}$ та $\vec{a}_{\vec{k}}^{\,*}$ до дійсних

$$\vec{Q}_k=\vec{a}_{\vec{k}}+\vec{a}_{\vec{k}}^{*}\quad \dot{\vec{Q}}_{\vec{k}}=i\omega_{\vec{k}}(a_{\vec{k}}^{*}-\vec{a}_{\vec{k}}). \tag{7.9}$$

Обернені рівності:

$$\vec{a}_{\vec{k}}=\frac{1}{2}\left(\vec{Q}_{\vec{k}}-\frac{\dot{\vec{Q}}_{\vec{k}}}{i\omega_{\vec{k}}}\right),\quad \vec{a}_{\vec{k}}^{*}=\frac{1}{2}\left(\vec{Q}_{\vec{k}}+\frac{\dot{\vec{Q}}_{\vec{k}}}{i\omega_{\vec{k}}}\right). \tag{7.10}$$

У нових величинах повна енергія поля

$$E=\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}\left(\dot{Q}_{\vec{k}}^{\,2}+\omega_k^2 Q_{\vec{k}}^{\,2}\right). \tag{7.11}$$

Унаслідок поперечності поля вектор $\vec{a}_{\vec{k}}$ є перпендикулярним до хвильового вектора $\vec{k}$, тобто вектори $\vec{a}_{\vec{k}}$, а також $\vec{Q}_{\vec{k}}$ лежать у площині, перпендикулярній до $\vec{k}$. Тому у цій площині $\vec{Q}_k$ має дві компоненти $Q_{\vec{k},1}$ та $Q_{\vec{k},2}$:

$$\vec{Q}_{\vec{k}}=\sum_{\alpha=1,2}\vec{e}_{\vec{k},\alpha}Q_{\vec{k},\alpha},$$

де $e_{\vec{k},\alpha}$ – одиничний вектор поляризації,

$$e_{\vec{k},\alpha}e_{\vec{k},\alpha'}=\delta_{\alpha,\alpha'}.$$

З урахуванням цього повна енергія електромагнітного поля набуває вигляду

$$E=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{2}\sum_{\vec{k}}\left(\dot{Q}_{\vec{k},\alpha}{}^{2}+\omega_k^2 Q_{\vec{k},\alpha}{}^{2}\right). \tag{7.12}$$

Цей вираз є ніщо інше, як сума енергій сукупності гармонічних осциляторів з узагальненими координатами $Q_{\vec{k},\alpha}$ і масами m=1. Це дає змогу нам інтерпретувати поле як сукупність гармонічних осциляторів, причому кожну гармоніку поля з хвильовим вектором $\vec{k}$, частотою $\omega_{\vec{k}}=ck$ і поляризацією α зіставляємо з лінійним гармонічним осцилятором. Процедуру, яку ми провели, називають розкладом поля на гармонічні осцилятори.

До цього часу ми мали класичний опис. З метою квантування поля перейдемо від енергії до функції Гамільтона, увівши узагальнені імпульси $P_{\vec{k},\alpha}$:

$$E=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{2}\sum_{\vec{k}}\left(P_{\vec{k},\alpha}^{2}+\omega_k^2 Q_{\vec{k},\alpha}{}^{2}\right), \tag{7.13}$$

$$P_{\vec{k},\alpha}=\dot{Q}_{\vec{k},\alpha}. \tag{7.14}$$

Тепер рівняння поля набувають вигляду канонічних рівнянь Гамільтона у класичній механіці:

$$\dot{Q}_{\vec{k},\alpha}=\frac{\partial H}{\partial P_{\vec{k},\alpha}},\quad \dot{P}_{\vec{k},\alpha}=-\frac{\partial H}{\partial Q_{\vec{k},\alpha}}. \tag{7.15}$$

Якщо нагадати зв’язок вектора $Q_{\vec{k},\alpha}$ з $\vec{a}_{\vec{k}}$, то ми знову отримаємо звідси рівняння для $\vec{a}_{\vec{k}}$, яке є хвильовим рівнянням векторного потенціалу, до якого зводиться у нашому випадку рівняння Максвелла.

Тепер за загальною схемою квантової механіки вводимо відповідні оператори. Оператор Гамільтона має вигляд:

$$\hat{\mathbf{H}}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{2}\sum_{\vec{k}}\left(\hat{P}_{\vec{k},\alpha}^{2}+\omega_k^2 \hat{Q}_{\vec{k},\alpha}{}^{2}\right). \tag{7.16}$$

Канонічно спряжені координати та імпульси замінюємо операторами, підкоряючи їх відповідним комутаційним співвідношенням

$$\hat{Q}_{\vec{k},\alpha}\hat{P}_{\vec{k}',\alpha'} - \hat{P}_{\vec{k}',\alpha'}\hat{Q}_{\vec{k},\alpha} = i\hbar\delta_{\vec{k}',\vec{k}}\delta_{\alpha',\alpha} . \qquad (7.17)$$

Знаходження власних функцій та власних значень гамільтоніан $\hat{\mathbf{H}}$, що визначають квантовий стан поля та йог енергетичні рівні, – задача нескладна, оскільки вона зводиться до осциляторної. Власні функції

$$\psi_{\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots} \equiv |\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots> = \prod_{\vec{k}}\prod_{\alpha} | N_{\vec{k},\alpha} >, \qquad (7.18)$$

Де $| N_{\vec{k},\alpha} >$— хвильова функція лінійного гармонічного осцилятора з квантовим числом $N_{\vec{k},\alpha}$=0,1,2… Енергетичні рівні

$$E_{\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots} = \sum_{\vec{k}}\sum_{\alpha}\hbar\omega_{\vec{k}}\left(N_{\vec{k},\alpha} + \frac{1}{2}\right). \qquad (7.19)$$

Таким чином, стан електромагнітного поля визначається набором квантових чисел $\{\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots\}$, які, своєю чергою, визначають номери збуджених станів осциляторів. Основний (вакуумний) стан поля – це стан, для якого всі квантові числа $N_{\vec{k},\alpha}$=0:

$$E_0 = E_{\dots,0,\dots} = \sum_{\vec{k}}\sum_{\alpha}\hbar\omega_{\vec{k}} / 2 . \qquad (7.20)$$

Якщо один з осциляторів із хвильовим вектором $\vec{k}$ і поляризацією α є в першому збудженому стані $N_{\vec{k},\alpha}$=1, а решта – в основному, то енергія поля дорівнює $E_0 + \hbar\omega_k$. Перехід поля в такий збуджений стан можна інтерпретувати як виникнення кванта електромагнітного поля – фотона, енергія якого дорівнює $\hbar\omega_k$, хвильовий вектор – $\vec{k}$, поляризація – *а*. Збільшення значення числа $N_{\vec{k},\alpha}$ означає народження нових фотонів цього ж “сорту”. Отже, число $N_{\vec{k},\alpha}$ – це є число фотонів із частотою $\omega_{\vec{k}} = ck$, напрямком поширення $\vec{k}$ і поляризацією α.

У зв’язку з інтерпретацією поля як сукупності фотонів, зручно, замість операторів $\hat{Q}_{\vec{k},\alpha}$, $\hat{P}_{\vec{k},\alpha}$ ввести їхні лінійні комбінації – так звані оператори породження та знищення фотонів. Ці оператори добре відомі у задачі про лінійний гармонічний осцилятор. Аналогічно введемо оператори породження $\hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha}$ і знищення $\hat{B}_{\vec{k},\alpha}$ в теорії електромагнітного поля та перепишемо наведені формули з урахуванням того, що ми маємо не один, а сукупність незалежних осциляторів. Отже,

$$\hat{B}_{\vec{k},\alpha} = \sqrt{\frac{\omega_{\vec{k}}}{2\hbar}}\left(\hat{Q}_{\vec{k},\alpha} - \frac{\hat{P}_{\vec{k},\alpha}}{i\omega_k}\right),$$

$$\hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha} = \sqrt{\frac{\omega_{\vec{k}}}{2\hbar}}\left(\hat{Q}_{\vec{k},\alpha} + \frac{\hat{P}_{\vec{k},\alpha}}{i\omega_{\vec{k}}}\right).$$

Обернені рівності:

$$\hat{Q}_{\vec{k},\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{k}}}}\left(\hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha} + \hat{B}_{\vec{k},\alpha}\right),$$

$$\hat{P}_{\vec{k},\alpha} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2}}\left(\hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha} - \hat{B}_{\vec{k},\alpha}\right)$$

Комутаційні співвідношення:

$$\hat{B}_{\vec{k},\alpha}\hat{B}^{+}_{\vec{k}',\alpha'} - \hat{B}^{+}_{\vec{k}',\alpha'}\hat{B}_{\vec{k},\alpha} = \delta_{\vec{k}'\vec{k}}\delta_{\alpha\alpha'}$$

$$\hat{B}_{\vec{k},\alpha}\hat{B}_{\vec{k}',\alpha'} - B_{\vec{k}',\alpha'}\hat{B}_{\vec{k},\alpha} = 0$$

$$\hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha}\hat{B}^{+}_{\vec{k}',\alpha'} - B^{+}_{\vec{k}',\alpha'}\hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha} = 0$$

гамільтоніан поля

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}}\hbar\omega_{\vec{k}}\left(\hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha}\hat{B}_{\vec{k},\alpha} + \frac{1}{2}\right). \tag{7.21}$$

Дії операторів на стан поля:

$$\hat{B}_{\vec{k},\alpha}\psi_{\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots} = \sqrt{N_{\vec{k},\alpha}}\psi_{\dots,N_{\vec{k},\alpha}-1,\dots}$$

$$\hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha}\psi_{\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots} = \sqrt{N_{\vec{k},\alpha}+1}\psi_{\dots,N_{\vec{k},\alpha}+1,\dots}$$

Звідси випливає очевидна інтерпретація цих операторів як операторів знищення та породження фотонів із квантовими числами $\vec{k}$, α. Оператор

$$\hat{N}_{\vec{k},\alpha} = \hat{B}^{+}_{\vec{k},\alpha}\hat{B}_{\vec{k},\alpha}$$

називають оператором кількості фотонів, оскільки його власні значення дорівнюють числу фотонів:

$$\hat{N}_{\vec{k},\alpha}\psi_{\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots} = N_{\vec{k},\alpha}\psi_{\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots}.$$

Вакуумний стан поля визначається рівнянням

$$\hat{B}_{\vec{k},\alpha}\psi_{\dots,N_{\vec{k},\alpha},\dots} = 0.$$

Перейдемо тепер до визначення інших операторів фізичних величин, що характеризують поле. Почнемо з векторного потенціалу. Для знаходження відповідного йому оператора необхідно коефіцієнти $\vec{a}_{\vec{k}}$ та $\vec{a}^{*}_{\vec{k}}$ в розкладі Фур'є для $\vec{A}$ замінити операторами. Оскільки

$$a_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha}\vec{e}_{\vec{k},\alpha}\left(Q_{\vec{k},\alpha} - \frac{P_{\vec{k},\alpha}}{i\omega_{\vec{k}}}\right),$$

$$a_{\vec{k}} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha}\vec{e}_{\vec{k},\alpha}\left(Q_{\vec{k},\alpha} + \frac{P_{\vec{k},\alpha}}{i\omega_{\vec{k}}}\right)$$

то квантування здійснюємо заміною координат та імпульсів операторами. З урахуванням означення операторів породження і знищення для квантування слід виконати такі зміни:

$$a_{\vec{k}} \to \sum_{\alpha} \vec{e}_{\vec{k},\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{k}}}} \hat{B}_{\vec{k},\alpha}$$

$$a^*_{\vec{k}} \to \sum_{\alpha} \vec{e}_{\vec{k},\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\vec{k}}}} \hat{B}^+_{\vec{k},\alpha}$$

Таким чином, оператор векторного потенціалу

$$\hat{\vec{A}} = \sum_{\vec{k},\alpha} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{V\omega_{\vec{k}}}} \vec{e}_{\vec{k},\alpha} \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{B}_{\vec{k},\alpha} + e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{B}^+_{\vec{k},\alpha} \right). \tag{7.22}$$

Оператори напруженостей електричного та магнітного полів отримуємо елементарно з їх зв’язку з векторним потенціалом. Для класичних величин маємо:

$$\vec{\varepsilon} = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{i\omega_{\vec{k}}}{c} \left(a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} - a^*_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right),$$

$$\vec{H} = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{V}} \sum_{\vec{k}} \left(i[\vec{k} \times a_{\vec{k}}] e^{i\vec{k}\vec{r}} - i[\vec{k} \times a^*_{\vec{k}}] e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right).$$

Відповідні їм оператори:

$$\hat{\vec{\varepsilon}} = i \sum_{\vec{k},\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{\vec{k}}}{V}} \vec{e}_{\vec{k},\alpha} \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{B}_{\vec{k},\alpha} - e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{B}^+_{\vec{k},\alpha} \right), \tag{7.23}$$

$$\hat{\vec{H}} = i \sum_{\vec{k},\alpha} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{V\omega_{\vec{k}}}} [\vec{k} \times \vec{e}_{\vec{k},\alpha}] \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{B}_{\vec{k},\alpha} - e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{B}^+_{\vec{k},\alpha} \right)$$

Ми провели квантування вільного електромагнітного поля: знайшли вигляд операторів поля (гамільтоніана, векторного потенціалу, напруженостей електричного та магнітного полів), визначили енергетичні рівні поля. Математичний апарат операторів породження і знищення є адекватним щодо моделі електромагнітного поля як сукупність фотонів.

На закінчення цього параграфа торкнемось цікавого питання про вакуумний стан електромагнітного поля. Енергія вакууму є величиною безмежною,

$$E_0 = \sum_{\alpha}\sum_{\vec{k}} \frac{\hbar kc}{2} = 2\frac{\hbar c}{2}\frac{V}{(2\pi)^3}\int k 4\pi k^2 dk = \infty,$$

у чому проявляється внутрішня неузгодженість квантової електродинаміки. Слід, однак, зауважити, що розрахунки фізичних величин входить лише різниця енергії, з якої випадає величина E_0, тому ця трудність не призводить до непорозумінь.

Оператор кількості фотонів не комутує з операторами напруженостей електричного та магнітного полів. Це означає, що у вакуумному стані, коли кількість фотонів дорівнює нулеві, величини напруженостей поля не мають певного значення – лише їхні середні значення дорівнюють нулеві. Це вказує на те, що в основному стані поля відбуваються флуктуації напруженостей: нульові коливання поля. Виявляється, що відсутність фотонів (фотонний вакуум) є не «ніщо», а певний вакуумний стан поля з флуктуючими фізичними величинами. Енергія нульових коливань – це і є енергія основного стану E_0. Саме взаємодія електрона в атомі з цими коливаннями є причиною спонтанних переходів і приводить до того, що спектральні лінії ізольованих атомів є не безмежно вузькими, а мають деяку ширину, яку називають природною шириною спектральної лінії.

§8. Квазічастинки у системі бозонів, що взаємодіють

У попередніх параграфах було показано яким чином можна проквантувати хвильове рівняння для скалярного чи векторного поля.

При цьому важливий результат полягав у цьому, що хвильове поле набуває властивостей, що характерні частинкам, оскільки в ньому є в наявності тільки визначені кванти енергії $\hbar\omega_{\vec{k}}$.

Якщо згадати квантову механіку частинки (точки), що має масу, то там, навпаки, при квантуванні проявляється протилежний ефект. Якщо ж перейти від функції Гамільтона до оператора Гамільтона і відповідного рівняння Шредінгера, то поведінка частинки буде описуватися за допомогою неперервної в просторі функції, тобто за допомогою поля. Це поле називається полем Шредінгера. Його спочатку можна спробувати вважати класичним, а потім проквантувати його за допомогою рецептів, які були викладені у попередніх параграфах. Аналогічно з проведеним оглядом слід очікувати, що квантування знову внесе в опис корпускулярний характер, що дасть змогу краще описати процеси народження частинок. Оскільки система при цьому знову квантується, то ця процедура називається *вторинним квантуванням*, хоча насправді, якщо виходити спочатку з польового зображення, йдеться про первинне квантування. Як і при первинному, так і при вторинному квантуванні поняття «частинка» ніяк повністю не міняється поняттям «поле» і навпаки. Крім того, проявляється подвійне нове зображення: залежно від експериментальних умов, проявляються або корпускулярний або хвильовий характер поля.

Ми проведено процедуру вторинного квантування у два етапи. Спочатку займемося розглядом класичного поля, а потім проквантуємо його.

А. Класичне хвильове поле. Як класичне «хвильове» рівняння нам буде слугувати рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\left(\vec{r},t\right)+V\left(\vec{r}\right)\psi\left(\vec{r},t\right)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\vec{r},t\right), \qquad (8.1)$$

а також комплексно спряжене рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\vec{r},t)+V(\vec{r})\psi^*(\vec{r},t)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{r},t). \tag{8.2}$$

Оскільки функції $\psi(\vec{r},t),\psi^*(\vec{r},t)$ є комплексними функціями координат і часу, то ми можемо розглядати як незалежні одна від одної або їх дійсні, або їх уявні частини, або з таким самим успіхом самі функції $\psi(\vec{r},t),\psi^*(\vec{r},t)$. У подальших викладках ми будемо використовувати останнє припущення. Тепер для нас (8.1) і (8.2) є рівняннями класичного поля. Легко вказати функцію Лагранжа і рівняння Лагранжа, до якої ведуть рівняння (8.1), (8.2). Функція Лагранжа у такому випадку має вигляд:

$$L=\int\psi^*\left(i\hbar\dot{\psi}-V(\vec{r})\psi+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\right)d\vec{r}. \tag{8.3}$$

За допомогою рівняння Лагранжа зразу знаходимо

$$\frac{d}{dt}\frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}^*}-\frac{\delta L}{\delta\psi^*}=-\left(i\hbar\dot{\psi}-V(\vec{r})\psi+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\right)=0, \tag{8.4}$$

тобто просто рівняння (8.1). Функція Лагранжа (8.3) через її несиметричність відносно $\psi(\vec{r},t),\psi^*(\vec{r},t)$ є неермітовою. Можна, звісно, за допомогою штучних прийомів зробити функцію Лагранжа симетричною, але при цьому виникнуть труднощі у формулюванні перестановочних співвідношень. У зв'язку з цим, ми збережемо спрощений запис (8.3) і введемо канонічно спряжений ψ-імпульс. Як похідну від функції Лагранжа

$$\pi=\frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}}=-\frac{\hbar}{i}\psi^*. \tag{8.5}$$

Функцію Гамільтона отримаємо з функції Лагранжа за допомогою співвідношення:

$$H = \int \left(\pi \dot{\psi} - l \right) d\vec{r} = \int \left(i\hbar \dot{\psi} \psi^* - i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \psi^* \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \psi^* V\left(\vec{r}\right) \psi \right) d\vec{r}. \quad (8.6)$$

Оскільки у правій частині виразу перші два доданки взаємознищуються, то у результаті знаходимо функцію Гамільтона

$$H = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\left(\vec{r}\right) \psi \right) d\vec{r}. \quad (8.7)$$

Вираз (8.7) має такий же вигляд, як середнє значення енергію у хвильовій механіці Шредінгера.

Незважаючи на цю аналогію, або, точніше, саме завдяки їй, тут слід вказати на одну понятійну трудність, яка може спричинити багато труднощів, особливо на початку вивчення. Поняття функції Гамільтона і оператора Гамільтона виникають тепер зовсім іншим чином:

а) у початковому рівняння Шредінгера оператор Гамільтона виступає у вигляді $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V\left(\vec{r}\right)$;

б) рівняння (8.7) визначає функцію Гамільтона (яка пізніше стає оператором).

Отже, після квантування (8.7) йтиме про зовсім інший оператор, який слід чітко відрізняти від згаданого вище оператора Гамільтона.

Ще раз нагадаємо, що наш розгляд ще йде у деякій мірі в класичних рамках. Хвильові функції ψ, ψ^* тепер, як і раніше, є класичними полями. Аналогічно з розглядом коливань атомного ланцюжка, розкладемо амплітуду поля за власними функціями хвильового рівняння. Оскільки місце хвильового рівняння посідає рівняння Шредінгера, то слід використати розв’язок рівняння

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V\left(\vec{r}\right) \right) \psi_\mu = i\hbar \dot{\psi}_\mu \quad (8.8)$$

як функції, за якими проводиться розклад. Ці функції запишемо у вигляді:

$$\psi_\mu(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_\mu}\varphi_\mu(\vec{r}). \tag{8.9}$$

Розкладемо тепер функцію $\psi(\vec{r},t)$ в ряд за цими функціями φ_μ. Уведемо часовий множник з (8.9) зразу у коефіцієнти розкладу

$$\hat{b}_\mu(t) = \hat{b}_\mu(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_\mu t}, \tag{8.10}$$

тоді розклад хвильових функцій матиме вигляд:

$$\psi = \sum_\mu \hat{b}_\mu \varphi_\mu, \tag{8.11}$$

$$\psi^* = \sum_\mu \hat{b}_\mu^+ \varphi_\mu^+. \tag{8.12}$$

Тут проявляється суттєва відмінність, порівняно з хвильовим рівнянням, яка містить першу похідну по часу. Наявність другої похідної по часу веде до того, що водночас з розв’язком $e^{i\omega t}$ є розв’язок $e^{-i\omega t}$, чим ми скористалися для конструювання дійсної амплітуди. У цьому випадку ми маємо справу з диференціальним рівнянням, що містить лише першу похідну по часу, тому ми не можемо більше подати $\psi(\vec{r},t)$ як дійсну функцію шляхом сумування комплексно спряжених розв’язків. Тому слід написати розклади (8.11) і (8.12) для комплексно спряжених величин. Ця обставина, що $\psi(\vec{r},t), \psi^*(\vec{r},t)$ є незалежними змінними має важливе значення у формулюванні перестановочного співвідношення (8.15), бо коли $\psi(\vec{r},t), \psi^*(\vec{r},t)$ збігаються, то (8.15) стає суперечливим. Тому ми далі будемо вважати, що $\psi(\vec{r},t), \psi^*(\vec{r},t)$ є незалежними одна від одної змінними.

Знову скористаємося властивостями ортонормованості функцій φ_μ.

Якщо підставити тепер розклади (8.11) і (8.12) у функцію Гамільтона, то отримаємо вираз:

$$H = \sum_{\mu} E_{\mu} \hat{b}_{\mu}^{+} \hat{b}_{\mu}. \tag{8.13}$$

Виходячи з практичних міркувань, а також для того, щоб особливо зрозуміло подати аналогію з отриманими результатами, надалі будемо часто вважати $E_{\mu} = \hbar \varepsilon_{\mu}$, де ε_{μ} має розмірність частоти.

До цього моменту ми розглядали теорію, вважаючи, що $\psi(\vec{r}, t)$ є класичним полем. Тепер для того, щоб виконати програму до кінця, ми маємо проквантувати це хвильове поле поле $\psi(\vec{r}, t)$

Б. Квантування. Для квантування введемо ще, згідно з визначенням (8.5), канонічно спряжений імпульс π, причому права частина виникає у результаті застосування явного вигляду (8.3). Будемо вимагати, що між π і ψ виконувалося звичне комутаційне співвідношення

$$\left[\pi(\vec{r}), \psi(\vec{r}')\right] = -i\hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \tag{8.14}$$

Використовуючи явний вигляд π, подамо (8.14) так:

$$\left[\psi(\vec{r}'), \psi^{+}(\vec{r})\right] = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \tag{8.15}$$

Зрозуміло, що хвильові функції комутують між собою, як і канонічно спряжені імпульси. Це ми сформулюємо за допомогою переставних співвідношень:

$$\left[\psi(\vec{r}'), \psi(\vec{r})\right] = 0, \tag{8.16}$$

$$\left[\psi^{+}(\vec{r}'), \psi^{+}(\vec{r})\right] = 0. \tag{8.17}$$

Тепер можна знову безпосередньо перейти від переставних співвідношень (8.15) –(8.17) до переставних співвідношень для амплітуд

$\hat{b}_\mu, \hat{b}_\mu^+$. Для цього підставимо (8.15) – (8.17) у (8.11) і (8.12) та розв'яжемо рівняння відносно операторів $\hat{b}_\mu, \hat{b}_\mu^+$. Отримаємо

$$\left[\hat{b}_\mu, \hat{b}_\nu^{\,+}\right] = \delta_{\mu,\nu}, \tag{8.18}$$

$$\left[\hat{b}_\mu, \hat{b}_\nu\right] = 0, \tag{8.19}$$

$$\left[\hat{b}_\mu^{\,+}, \hat{b}_\nu^{\,+}\right] = 0 \tag{8.20}$$

Оскільки ми підкорили амплітуди переставним співвідношенням (8.18) – (8.20), то класична функція Гамільтона (8.13) стає оператором Гамільтона.

Якщо розглядати оператор Гамільтона одночасно з переставними співвідношеннями (8.18) – (8.20), то ми побачимо повну аналогію з задачею про квантування електромагнітного поля.

Отже,

$$\begin{gathered} \hat{\mathbf{H}}\Phi = E\Phi, \\ \hat{\mathbf{H}} = \int \psi^+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \right) \psi d\vec{r} \equiv \sum_\mu E_\mu \hat{b}_\mu^+ \hat{b}_\mu \end{gathered} \tag{8.21}$$

$$\Phi = \prod_\mu \frac{1}{\sqrt{n_\mu!}} \left(\hat{b}_\mu^{\,+}\right)^{n_\mu} \Phi_0. \tag{8.22}$$

Вакуумний стан знову визначимо аналогічно, як у §1:

$$\hat{b}_\mu \Phi_0 = 0. \tag{8.23}$$

Станам (8.22) відповідає енергія

$$E = \sum_\mu E_\mu n_\mu \qquad \left(n_\mu = 0,\ 1,\ 2,\ ....\right). \tag{8.24}$$

Результат, що поданий співвідношеннями (8.22) і (8.24), можна інтерпретувати так: із вихідного рівняння Шредінгера (8.8) встановлюються послідовність енергетичних рівнів E_μ. Ці окремі енергетичні рівні можуть, як видно з (8.24), бути зайняті визначеною кількістю n_μ квантів, або, інакше кажучи, визначеною кількістю частинок. Звідси стає зрозуміло, що квантування поля також і у випадку хвильового рівняння Шредінгера забезпечує корпускулярний характер.

Питання, задачі і тести для самоконтролю

Тестове завдання 1

Виберіть правильну відповідь

1. Яким чином може оператор народження утворити вакуумний стан:

а) подіяти певну кількість разів;

б) задіяти комутаційні співвідношення;

в) ніяк?

2. Скільки можливих проекцій поляризації враховується при розкладі електромагнітного поля на осцилятори:

а) 1;

б) 2;

в) 3?

3. Який характер сили взаємодії між атомами забезпечує можливість розкладу коливань на осцилятори:

а) лінійна залежність від координати;

б) квадратична залежність від координати;

в) кубічна залежність від координати?

4. Як виражається оператор знищення через оператори імпульсу та координату для простого лінійного гармонічного осцилятора:

а) $\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \left(\frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m}} - i\sqrt{g}\,x \right)$;

б) $\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \left(\frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m}} - \sqrt{g}\,x \right)$;

в) $\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \left(\frac{\hat{p}_x^2}{\sqrt{m}} - i\sqrt{g}\,x \right)$?

5. Що отримаємо при дії оператора знищення на вакуумний стан системи:

а) нульову енергію коливань;

б) нуль;

в) один квант?

6. Квант електромагнітного поля – це:

а) фотон;

б) фонон;

в) ферміон?

7. Сума енергії нульових коливань електромагнітного поля дорівнює…

а) нулю;

б) безмежності;

в) $\hbar\omega / 2$.

7. Формула для визначення ψ-імпульсу має можна подати у вигляді:

а) $\pi = -i\hbar\nabla$;

б) $\pi = -\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$;

в) $\pi = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}} = -\frac{\hbar}{i}\psi^{*}$.

9. Гамільтоніан у зображенні вторинного квантування має вигляд:

а) $\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$;

б) $\hat{\mathbf{H}} = \sum_{\mu} E_{\mu}\hat{b}_{\mu}^{+}\hat{b}_{\mu}$;

в) $\hat{\mathbf{H}} = \int \psi^{+}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi - i\dot{\psi}\right)d\vec{r}$.

10. Оператор кількості частинок має вигляд:

а) $\hat{b}_k^{+}\hat{b}_k$;

б) $\hat{b}_{k'}^{+}\hat{b}_k$;

в) $N = \sum_{k}\hat{b}_k\hat{b}_k$.

Відповіді: 1 – в), 2 – б), 3 – а), 4 – а), 5 – в),
6 – а), 7 – б), 8 – в), 9 – б), 10 – а).

Тестове завдання 2

Допишіть речення або дайте відповідь

1. Функція Лагранжа для хвильового поля Шредінгера має вигляд:

____

2. Запишіть комутаційні співвідношення для операторів народження і знищення для одної бозе-частинки

____

3. Запишіть комутаційні співвідношення для операторів народження і знищення для системи бозе-частинок

____

4. Дайте означення зони Брілюена у кристалі та запишіть математичне співвідношення, що їх характеризує

____

5. Запишіть повну енергію системи осциляторів, що не взаємодіють, у лінійному ланцюжку атомів

____

6. Які етапи слід реалізувати, щоб проквантувати хвильове поле Шредінгера?

____

7. У чому полягає суть розкладу електромагнітного поля на осцилятори?

____

8. Як слід враховувати енергію нульових коливань при розв'язанні конкретних задач?

____

9. Сформулюйте властивості оператора кількості частинок. Чи

комутує він з оператором Гамільтона?

____

10. Що є розв'язком рівняння Шредінгера для лінійного гармонічного осцилятора у координатному зображенні?

____

Задачі для самостійного розв'язання

1. На лінійний гармонічний осцилятор діє зовнішня сила $K(t)$. Який вигляд матиме оператор Гамільтона у зображенні вторинного квантування?

2. Обчисліть середнє значення $\left\langle x^p \right\rangle$ для лінійного гармонічного осцилятора.

3. Обчисліть $\left\langle \psi_n \left| \left(\hat{b}^+\right)^2 \right| \psi_n \right\rangle$, $\left\langle \psi_n \left| \left(\hat{b}\right)^2 \right| \psi_n \right\rangle$.

4. Нехай нормовані власні функції двох незв'язаних осциляторів Φ_{n_1,n_2}. Покажіть, що $\left\langle \Phi_{n_1,n_2} \mid \Phi_{m_1,m_2} \right\rangle = \delta_{n_1,m_1} \delta_{n_2,m_2}$.

5. Використовуючи формули §5 знайдіть фазову та групову швидкість.

6. Виведіть вираз (7.23) на основі (7.2) і (7.22).

7. Доведіть, що векторний потенціал (7.22) задовольняє калібровку Лоренца для електромагнітного поля.

9. Запишіть вираз аналогічний (5.2) з урахуванням ще і квадратичної залежності сили від зміщення.

10. Знайдіть середнє значення сумарної кінетичної енергії для системи невзаємодіючих лінійних гармонічних осциляторів.

Список використаних джерел

1. Бойчук В.І. Квантова механіка / В.І. Бойчук – Дрогобич : Редакційно-видавничий відділ ДДПУ ім. І. Франка, 2016. – 368 с.
2. Бойчук В.І. Основи фізики твердого тіла / В.І. Бойчук – Дрогобич : «Коло», 2010. – 321 с.
3. Вакарчук І.О. Квантова механіка / І.О. Вакарчук – Львів : Видавництво ЛНУ, 1998. – 615 с.
4. Давыдов А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов – М. : «Наука», 1973. – 703 с.
5. Хакен Х. Квантовополевая теория твердого тела / Х. Хакен – М. : «Наука», 1980. – 341 с.
6. Займан Д.Ж. Современная квантовая теория / Д.Ж. Займан – М. : «Мир», 1971. – 288 с.
7. Марч Н. Проблема многих тел в квантовой механике / Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар – М. : «Мир», 1969. – 496 с.

Предметний покажчик

Навчальне видання

Василь БОЙЧУК, Роман ЛЕШКО

Теорія бозон-ферміонних систем

Частина 1

ТЕКСТИ ЛЕКЦІЙ

Редакційно-видавничий відділ
Дрогобицького державного педагогічного університету
імені Івана Франка

Головний редактор
Ірина Невмержицька
Редактор
Іванна Біблий
Технічний редактор
Наталя Кізима
Коректор
Оксана Бульбах

Здано до набору 23.05.2018 р. Підписано до друку 31.05.2018 р. Формат 60х90/16. Папір офсетний. Гарнітура Times. Наклад 100 прим. Ум. друк. арк. 3, 00. Зам. 191.

Редакційно-видавничий відділ Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. (Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до державного реєстру видавців, виготівників і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 5140 від 01.07.2016 р.) 82100, Дрогобич, вул. І. Франка, 24, к. 42, тел. 2 – 23 – 78.