

может быть задано набором чисел (N_1, N_2, \dots) , указывающим, что N_1 частиц находится в состоянии ψ_1 , N_2 частиц — в состоянии ψ_2 и т. д. Вектор состояния системы в этом случае обозначают $|N_1, N_2, \dots\rangle$. О таким описании системы говорят как об описании в пространстве чисел заполнения или в представлении вторичного квантования.

Для ферми-системы в каждом состоянии может находиться не более одной частицы, $N_i=0, 1$. Для бозе-систем N_i может быть любым неотрицательным целым числом, $N_i=0, 1, \dots, N$. В пространстве чисел заполнения можно рассматривать системы с произвольным числом частиц. Оператор a_i^\dagger , переводящий состояние системы $|N_1, \dots, N_i, \dots\rangle$ в состояние, у которого на i -уровне находится N_i+1 частиц,

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle &= \\ = \sqrt{N_i+1} |N_1, \dots, N_i+1, \dots\rangle, \end{aligned} \quad (1)$$

наз. оператором рождения. Оператор, a_i^- , который удаляет частицу с i -уровня,

$$a_i^- |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle = \sqrt{N_i} |N_1, \dots, N_i-1, \dots\rangle, \quad (2)$$

наз. оператором уничтожения. Коэф. $\sqrt{N_i+1}$ и $\sqrt{N_i}$ в (1) и (2) определяются из условия того, что оператор $a_i^\dagger a_i^-$ является оператором числа частиц в состоянии i , т. е.

$$a_i^\dagger a_i^- |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle = N_i |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle.$$

Операторы рождения и уничтожения удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, [a_i^-, a_j^-] = 0, [a_i^-, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (3a)$$

для статистики Бозе — Эйнштейна (квадратные скобки, как обычно, означают коммутатор, т. е. $[b, c] = bc - cb$) и

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0, \{a_i^-, a_j^-\} = 0, \{a_i^\dagger, a_j^-\} = \delta_{ij} \quad (3b)$$

для статистики Ферми — Дирака (фигурные скобки означают антикоммутатор, т. е. $\{b, c\} = bc + cb$; δ_{ij} — Кронекера символ). Пространство чисел заполнения для бесконечного числа частиц наз. пространством Фока.

Любые квантовомеханические операторы, заданные, напр., в конфигурационном представлении, можно записать при помощи операторов рождения и уничтожения в представлении В. к. Напр., гамильтониан

$$H = \sum_f H_f^{(1)} + \sum_{f, g} U^{(2)}(x_f, x_g),$$

где $H_f^{(1)} = -(\hbar^2/2m)\Delta_f + U^{(1)}(x_f)$ — одиночечный гамильтониан, $U^{(2)}(x_f, x_g)$ — потенциал двухчастичного взаимодействия, в представлении В. к. записывается в виде:

$$H = \sum_{i, k} H_{ik}^{(1)} a_i^+ a_k^- + \frac{1}{2} \sum_{i, k, l, m} U_{ik, lm}^{(2)} a_i^+ a_k^+ a_l^- a_m^-,$$

где

$$H_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(x) H^{(1)} \psi_k(x) dx,$$

$U_{ik, lm}^{(2)} = \int \psi_i^*(x) \psi_k^*(x') U^2(x, x') \psi_l(x) \psi_m(x) dx dx'$, a_i^+, a_i^- — соответственно операторы рождения и уничтожения частиц в состоянии ψ_i одиночечного гамильтониана (без учёта взаимодействия между частицами).

Гамильтониан в представлении В. к. может быть записан в более компактной форме, если ввести операторы $\hat{\psi}$ и $\hat{\psi}^+$,

$$\hat{\psi} = \sum_i a_i^- \psi_i, \quad \hat{\psi}^+ = \sum_i a_i^+ \psi_i^*,$$

действующие на векторы состояния $|N_1, N_2, \dots\rangle$ в пространстве чисел заполнения:

$$H = \int \hat{\psi}^+(x) H^{(1)} \hat{\psi}(x) dx + \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(x') \times \\ \times U^{(2)} \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x') dx dx'.$$

Выражения для операторов $\hat{\psi}$ аналогичны разложению произвольной волновой функции по полной системе волновых функций ψ_i . Поскольку, однако, коэффициенты разложения являются не числами, а операторами, $\hat{\psi}$ и $\hat{\psi}^+$ наз. вторично квантованными (отсюда назв. метода — «В. к.»).

Достоинство метода В. к. в применении к системам взаимодействующих частиц состоит в том, что с его помощью естественным образом описываются переходы между состояниями системы, вызванные взаимодействием частиц. Эти переходы сводятся к исчезновению частиц в одном состоянии и появлению их в другом. Одновременно аппарат В. к. приспособлен и к рассмотрению процессов с первым числом частиц — описывает рождение или уничтожение частиц в результате взаимодействия. В квантовой механике всякое слабо возбуждённое состояние системы взаимодействующих частиц может быть представлено как совокупность элементарных возбуждений — квазичастиц. Числа N_i в представлении чисел заполнения в этом случае интерпретируются как числа квазичастиц. Напр., слабо возбуждённое состояние твёрдого тела, обусловленное колебаниями атомов кристаллической решётки, описывается как совокупность квазичастиц — фононов, свободно движущихся в объёме тела. При этом энергию возбуждения системы можно рассматривать как энергию идеального газа фононов. Оси состояния системы, в которых отсутствуют квазичастицы, можно рассматривать как вакуум, вектор состояния к-рого удовлетворяет условию $a_i^- |0\rangle = 0$. Для слабо взаимодействующего неидеального бозе-газа операторы рождения и уничтожения квазичастиц связаны с операторами рождения и уничтожения исходных частиц Боголюбова каноническими преобразованиями.

Квантование системы гармонических осцилляторов. Рассмотрим важный частный случай — систему n квантовых взаимодействующих гармонич. осцилляторов (единичной массы) с гамильтонианом

$$H = \sum_{i=1}^n H_i(\hat{p}_i, \hat{q}_i), \quad H_i(\hat{p}_i, \hat{q}_i) = \frac{1}{2} (\hat{p}_i^2 + \omega_i^2 \hat{q}_i^2).$$

Здесь \hat{q}_i , \hat{p}_i — операторы обобщённых координат и импульса i -осциллятора, а параметры ω_i имеют смысл частоты колебаний. Для перехода в представление В. к. вводятся операторы уничтожения и рождения

$$\begin{aligned} a_i^- &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_i}} (\omega_i \hat{q}_i + i \hat{p}_i), \\ a_i^+ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_i}} (\omega_i \hat{q}_i - i \hat{p}_i). \end{aligned}$$

Тогда гамильтониан принимает вид

$$H = \sum_{i=1}^n \frac{\hbar\omega_i}{2} (a_i^+ a_i^- + a_i^- a_i^+). \quad (4)$$

Операторы a_i^\pm удовлетворяют перестановочным соотношениям (3a). Обозначим через Ψ_{0i} решение ур-ния $a_i^- \Psi_{0i} = 0$; оно интерпретируется как вакуумное состояние i -осциллятора. Введём вакуумное состояние системы n осцилляторов: $|0\rangle = \prod_{i=1}^n \Psi_{0i}$. Состояние

$$|K_1, \dots, K_n\rangle = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{K_i!}} (a_i^+)^{K_i} |0\rangle \quad (5)$$