

В случае ферми-систем a_f и a_f^+ имеют тот же смысл О. изменения на единицу числа n_f , но учёт антисимметрии базисных ϕ -ций по отношению к перестановкам индексов частиц и ограничение чисел заполнения двумя значениями 0, 1 приводят к перестановочным соотношениям антикоммутиации:

$$[a_f, a_{f'}^+]_+ = a_f a_{f'}^+ + a_{f'}^+ a_f = \Delta(f - f');$$

$$[a_f, a_{f'}]_+ = [a_f^+, a_{f'}^+]_+ = 0.$$

В ряде задач, когда гамильтониан системы целиком выражается в терминах спиновых О., удобны О. рождения и уничтожения с коммутац. соотношениями смешанного типа:

$$[a_f, a_{f'}^+]_+ = 1, \text{ но } [a_f, a_{f'}^+]_- = 0 \text{ для } f' \neq f,$$

$$[a_f, a_{f'}]_- = [a_f^+, a_{f'}^+]_- = 0.$$

По своей матем. природе они тождественны бозе-О., но действуют в урезанном пространстве чисел заполнения, допускающем значения $n_f = 0$ и $n_f = 1$. Их называют и а у л и - О., т. к. они непосредственно связаны со спиновыми матрицами Паули:

$$\sigma_f^x = a_f^+ + a_f; \quad \sigma_f^y = i(a_f^+ - a_f); \quad \sigma_f^z = 1 - 2a_f^+ a_f.$$

Во всех случаях О. $n_f = a_f^+ a_f$ является О. числа частиц в состоянии f и имеет собств. значения $n_f = 0, 1, 2, \dots$ для бозе-систем и $n_f = 0, 1$ для ферми- и паули-систем.

Чаще всего в приложениях индекс f означает импульс и спин $f = (p, \sigma)$ частицы, т. е. в качестве базисных ϕ -ций $|\dots, n_f, \dots\rangle$ выбираются симметризов. или антисимметризов. произведения ϕ -ций $\phi_f(x) = u_\sigma(s) \phi_k(r)$, где $\phi_k(r) = (1/\sqrt{V}) \exp(ikr)$ — плоская волна (V — объём системы), $u_\sigma(s) = \Delta(\sigma - s)$ — спиновая ϕ -ция. Тогда a_f^+ и a_f — О. рождения и уничтожения частицы с данным значением импульса и спина. Возможно и «координатное» (или к.-л. иное) представление этих О., определяемое с помощью преобразования типа Фурье-преобразования:

$$[x = (r, s)], \quad \Psi(x) = \sum_f a_f \phi_f(x), \quad \Psi^+(x) = \sum_f a_f^+ \phi_f^*(x).$$

О. динамич. величин в представлении вторичного квантования строятся след. образом: величинам аддитивного динамич. типа, таким, что $F = \sum_{1 \leq i \leq N} F(x_i)$ (напр., полный импульс системы из N частиц, их полная кинетич. энергия, энергия взаимодействия с внеш. полем и т. д.) соответствуют О.

$$\hat{F} = \int \Psi^+(x) \hat{F}(x) \Psi(x) dx = \sum_{f, f'} \langle f | F | f' \rangle a_f^+ a_{f'},$$

где $\langle f | F | f' \rangle = 0$. \hat{F} в f -представлении, матричные элементы к-рого рассчитываются с помощью ϕ -ций $\phi_f(x)$; величинам бинарного типа $G = \sum_{1 \leq i \leq j \leq N} G(x_i, x_j)$ (напр., энергии взаимодействия частиц друг с другом) соответствуют О.

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \int \Psi^+(x_1) \Psi^+(x_2) \hat{G}(x_1, x_2) \Psi(x_2) \Psi(x_1) dx_1 dx_2 =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2, f'_1, f'_2} \langle f_1, f_2 | G | f'_1, f'_2 \rangle a_{f'_1}^+ a_{f'_2}^+ a_{f_2} a_{f_1},$$

414 где $\langle f_1 f_2 | G | f'_1 f'_2 \rangle$ — матричный элемент О. \hat{G} в f -пред-

ставлении, рассчитанный с помощью системы ϕ -ций $\phi_f(x)$, и т. д.

Напр., гамильтониан системы нерелятивистских частиц с центр. их взаимодействием $\Phi(r_i, r_j) = \Phi(r_i - r_j)$, находящихся во внеш. поле $U(r)$, в представлении вторичного квантования имеет вид

$$\hat{H} = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_k^+ a_k + \frac{1}{V} \sum_{k, \kappa} u^*(\kappa) a_{k+\kappa}^+ a_k +$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{k, k'} v(\kappa) a_{k+\kappa}^+ a_{k-\kappa}^+ a_k a_{k'},$$

где $v(\kappa)$ и $u(\kappa)$ — Фурье-образы потенциалов Φ и U , причём для частиц со спином нижний индекс у a^+ и a помимо волнового вектора k включает и спиновый индекс s : $k = (k, s)$, $k + \kappa = (k + \kappa, s)$ и т. д. Каждое слагаемое этого О. имеет наглядный смысл: общая кинетич. энергия представлена как сумма по всем k кинетич. энергий $\hbar^2 k^2 / 2m$, умноженных на числа частиц $a_k^+ a_k = n_k$ с этой энергией, каждое слагаемое из второй суммы учитывает рассеяние частицы $k \rightarrow k + \kappa$ на Фурье-компоненте внеш. поля $u(\kappa)$, а из третьей суммы — рассеяние двух частиц $(k, k') \rightarrow (k + \kappa, k' - \kappa)$ на Фурье-компоненте потенциала их взаимодействия $v(\kappa)$.

Помимо модели прямого взаимодействия частиц, возможной только в нерелятивистской теории, рассматривается взаимодействие частиц с разл. полями, переносящими это взаимодействие: в электродинамике с эл. магн. полем (полем фотонов), в статистич. физике — с полем фононов и т. д. В гамильтониан системы в этом случае необходимо добавить свободную энергию этого поля $\sum_k \omega(k) b_k^+ b_k$ и О. взаимодействия его с частицами системы, имеющий вид

$$\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\kappa, k} f(\kappa) (a_{k+\kappa}^+ a_k b_\kappa + a_{k-\kappa}^+ a_k b_\kappa^+),$$

причём элементарный акт этого взаимодействия имеет характер рассеяния частицы с испусканием (или поглощением) кванта поля b . Подобные наглядные представления о взаимодействии послужили одним из стимулов развития диаграммной техники в квантовой теории поля и в квантовой статистике.

О. энергии и производные О. по времени. В квантовой теории О. энергии определяется как первая производная по времени, $\hat{\mathcal{E}} = \hbar \partial / \partial t$. С его помощью записываются ур-ние Шрёдингера — осн. ур-ние квантовой механики, являющееся ур-нием движения для волновой ϕ -ции, $(\hat{\mathcal{E}} - \hat{H})\psi(t) = 0$. После подстановки $\psi(t) = \exp(-i\hat{\mathcal{E}}t/\hbar)\psi$ оно превращается в ур-ние на собств. значения гамильтониана, $(\hat{\mathcal{E}} - \hat{H})\psi = 0$, и определяет стационарные состояния системы. О. производной по времени \hat{F} физ. величины F определяется в соответствии с ур-нием движения для ψ как

$$\hat{F} \equiv \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{F}]_-,$$

что позволяет определять в квантовой механике О. величин типа скоростей, ускорений и т. д. Если величина F не зависит явно от времени и коммутатор $[\hat{H}, \hat{F}]_- = 0$, то эта величина является интегралом движения.

В релятивистской теории помимо ур-ний, содержащих О. $\hat{\mathcal{E}}$ в первой степени, напр. Дирака уравнение $(\hat{\mathcal{E}} - H_D)\psi = 0$, используются ур-ния второго порядка по $\hat{\mathcal{E}}$ (Клейна—Гордона уравнение), $[\hat{\mathcal{E}}^2 - (c^2 \hat{p}^2 + m^2 c^4)]\psi = 0$, для однокомпонентной ψ -функции частицы без спина, а также для векторных 4-компонентных ϕ -ций и тензорных более высокого ранга. Оператор $\hat{\mathcal{E}}$ можно рассматривать как нулевой компоненту релятивистского О. энергии-импульса $\hat{P}_\mu = (\hat{\mathcal{E}}/c, i\hat{p})$, $\mu = 0, 1, 2, 3$, что по-