сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

t

3421/2-80

28/7-80

Р17-80-239

Н.Н.Боголюбов, Н.Н.Боголюбов (мл.)

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ СТАТИСТИЧЕСКУЮ МЕХАНИКУ.

Часть II. Аспекты вторичного квантования и модельные системы в квантовой статистической физике

1980

Р17-80-239

Н.Н.Боголюбов, Н.Н.Боголюбов (мл.)

ВВЕДЕНИЕ
В КВАНТОВУЮ СТАТИСТИЧЕСКУЮ МЕХАНИКУ.

Часть II. Аспекты вторичного квантования и модельные системы в квантовой статистической физике

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие

Здесь предлагается последовательное изложение метода вторичного квантования, результаты которого широко используются в современной квантовой статистической физике, теории твердого тела, задачах теории магнетизма, теории лазеров и других проблемах теории многих тел.

Следует заметить, что метод вторичного квантования возник одновременно с окончательной формулировкой квантовой механики в работах Дирака, Фока и Вигнера /I-3/, однако развиваться он начал в послевоенное время. В этой связи фундаментальное значение имеет работа Боголюбова /4/, посвященная методу вторичного квантования. Разработке ряда математических вопросов метода вторичного квантования посвящена книга Березина /5/, где используется естественная реализация пространства состояний как пространства функционалов от функций определенного числа переменных. Такой подход позволяет рассматривать задачи вторичного квантования как задачи квантовой механики с бесконечным числом степеней свободы. В /5/ описываются пространства состояний и простейшие операторы на них, устанавливается связь между векторами и функционалами, операторами и функционалами.

Настоящий подход, в отличие от ранее известных, обладает большей общностью, простотой доказательств и естественностью постановки задач. В нашем подходе мы обсудим с единой точки зрения фундаментальные вопросы, возникающие при использовании метода вторичного квантования. Отметим, что определенный интерес к такому последовательному изложению возник в связи с развитием метода аппроксимирующих гамильтонианов /6/, который широко использует представление вторичного квантования. К тому же в большинстве учебных пособий по квантовой механике и статистической физике со ссылкой на громоздкость вычислений часто перечисляются некоторые результаты метода вторичного квантования, которые, как правило, выглядят формально и не затрагивают глубокой физической сущности этого важного метода.

В излагаемом здесь подходе уделяется внимание преобразованию динамических величин к представлению вторичного квантования (рассматриваются случаи представления аддитивных, бинарных и S-кратных величин с помощью ряда новых лемм). Изучаются системы, состоящие из нескольких сортов фермионов и бозонов. Обсуждаются уравнения движения для временной эволюции операторных функций, строятся уравнения типа "самосогласованного поля" в операторной форме. Изучаются также системы, состоящие из нескольких сортов фермионов и бозонов. Подробно изложен ряд идей, близких методу вторичного квантования, применяемых в кинетической теории классического газа.

Настоящие лекции были прочитаны в качестве спецкурса на физическом факультете МГУ им. М.В.Ломоносова. В тексте местами сохранен лекционный стиль.

§I. Матричное представление симметричных динамических операторов

Рассмотрим динамическую систему из N одинаковых частиц, состояния которой характеризуются волновыми функциями:

$$\varphi = \varphi(x_1, \dots x_N), \tag{I.I}$$

зависящими от переменных $x_1, \dots x_N$. Здесь x_j – совокупность пространственных координат и дополнительных квантовых чисел для j-той частицы:

$$x = (q, \nu) \quad ; \quad q = (q^{(1)}, q^{(2)}, q^{(3)}), \tag{I.2}$$

где $q^{(\alpha)} (\alpha = 1,2,3)$ – декартовы координаты, а ν – квантовые числа, соответствующие "внутренним степеням свободы" частицы. Если такие степени свободы учитываем, лишь задавая спин частицы, то в качестве ν можно взять проекцию спина на ось z. В этом случае для частиц со спином I/2 имеем $\nu = \pm\frac{1}{2}$, для частиц со спином I будет $\nu = -I$, 0, $+I$ и т.д. Для бесспиновых частиц ν вообще не вводится, и для них $x = q$.

Совокупность параметров (I.2) будем иногда обозначать также буквами x', y, y' с соответствующими индексами, указывающими "номер" частицы. Целесообразно будет ввести еще понятие "интегрирования по x", определив соответствующий интеграл как

интеграл по всему пространству q вместе с суммированием по дискретному индексу ν:

$$\int (\dots) dx = \sum_{(\nu)} \int (\dots) dq, \quad dq = dq^{(1)} dq^{(2)} dq^{(3)}. \tag{I.3}$$

Введем также δ-функцию:

$$\delta(x - x') = \delta(q - q') \cdot \delta(\nu - \nu'), \tag{I.4}$$

где $\delta(q)$ – трехмерная функция Дирака, $\delta(\nu)$ – символ Кронеккера; мы везде будем использовать для символа Кронеккера то же обозначение, что и для δ-функции Дирака; это не приведет к недоразумению, так как у нас аргумент у символа Кронеккера всегда дискретный, а у δ-функции Дирака – всегда непрерывный.

Иногда будет удобно обозначать всю систему x-ов $(x_1, \dots x_N)$ одной буквой X, например, $\varphi = \varphi(X)$,

$$\int (\dots) dX = \int (\dots) dx_1 \dots dx_N . \tag{I.5}$$

Рассмотрим теперь уравнение Шредингера для волновых функций (I.I):

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_t}{\partial t} = H \varphi_t . \tag{I.6}$$

Так как все частицы нашей динамической системы одинаковы, гамильтониан H не может зависеть от способа их нумерации, то есть от того, какую частицу считать первой, какую второй и т.д., ввиду чего оператор H должен быть симметричным (инвариантным) по отношению ко всем перестановкам P между частицами.

Скажем несколько слов о формальном определении свойства симметричности операторов по отношению к перестановкам P. Пусть $\mathcal{D}$ – некоторый оператор, матричное X-представление которого будет $\mathcal{D}(X, X')$. Тогда

$$(\mathcal{D}\varphi)_X = \int \mathcal{D}(X, X') \varphi(X') dX',$$

откуда

$$(\mathcal{D}P^{-1}\varphi)_X = \int \mathcal{D}(X, X') \varphi(P^{-1}X') dX'.$$

Совершим в интеграле, стоящем в правой части, замену переменных:

$$X' \longrightarrow PX',$$

очевидно, не меняющую dX'. Получим

$$(\mathcal{D}P^{-1}\varphi)_X = \int \mathcal{D}(X, PX')\varphi(X')dX'$$

и

$$(\{P\mathcal{D}P^{-1}\}\varphi)_X = \int \mathcal{D}(PX, PX')\varphi(X')dX'.$$

Таким образом, $\mathcal{D}(PX,PX')$ будет матричным X -представлением для оператора $P\mathcal{D}P^{-1}$, и наоборот:

$$P\mathcal{D}P^{-1} \rightleftarrows \mathcal{D}(PX, PX'). \qquad (I.7)$$

Как видно, $\mathcal{D}(PX,PX')$ представляет собой выражение $\mathcal{D}(X,X')$ после того, как над номерами частиц I,2,3,... совершена перестановка P.

Поэтому для того, чтобы оператор $\mathcal{D}$ не зависел от способа нумерации частиц, т.е. был симметричным по отношению к любым перестановкам P, надо потребовать, чтобы

$$\mathcal{D}(PX, PX') = \mathcal{D}(X, X').$$

Следовательно, ввиду (I.7) условие симметрии оператора $\mathcal{D}$ по отношению к перестановкам P будет

$$P\mathcal{D}P^{-1} = \mathcal{D}$$

или

$$P\mathcal{D} = \mathcal{D}P. \qquad (I.8)$$

Таким образом, гамильтониан H, будучи симметричным, должен коммутировать со всеми перестановками P, которые, следовательно, оказываются интегралами движения:

$$PH - HP = 0. \qquad (I.9)$$

Возьмем какую-либо транспозицию T, то есть перестановку только между двумя неравными элементами, например, i-тым и j-тым, рассмотрим два случая:

А. Допустимые волновые функции симметричны. Тогда для любой транспозиции T среди $x_1, \dots x_N$ будет

$$T\varphi = \varphi.$$

Поскольку любая перестановка P среди N элементов получается путем последовательного применения транспозиций, в данном случае имеем также для любого P

$$P\varphi = \varphi. \qquad (I.10)$$

Б. Допустимые волновые функции антисимметричны. Тогда

$$T\varphi = -\varphi,$$

и потому для любого P

$$P\varphi = (-1)^P \varphi, \qquad (I.11)$$

где $(-1)^P = 1$, если перестановка P четная, т.е. состоит из четного числа транспозиций, и $(-1)^P = -1$, если P нечетная, т.е. состоит из нечетного числа транспозиций.

Поскольку P являются интегралами движения, то, если соотношения (I.10) или соотношения (I.11) выполняются для какого-то одного момента времени, они останутся справедливыми всегда. Таким образом, свойство симметрии волновых функций и свойство антисимметрии их не изменяются с течением времени. Отсюда возникают две возможности: для некоторых частиц всегда реализуются лишь симметричные состояния, а для других – только антисимметричные состояния.

Эти две возможности приводят к различным статистикам: статистике Бозе, принимающей в качестве допустимых лишь симметричные состояния, и статистике Ферми, принимающей в качестве допустимых лишь антисимметричные состояния. Как теперь установлено, все до сих пор известные частицы являются или бозонами, т.е. подчиняются статистике Бозе, или фермионами, подчиняющимися статистике Ферми. Поэтому в дальнейшем мы ограничимся рассмотрением только указанных двух случаев: случая А – симметричных волновых функций φ системы одинаковых частиц, и случая Б – антисимметричных волновых функций φ.

Скажем несколько слов по поводу возможной конструкции симметричных операторов.

Возьмем некоторый оператор A, действующий на функцию $\varphi(x)$ одной точки x, и обозначим через $A(x,x')$ соответствующую матрицу в x -представлении. Введем оператор A_j, представляющий собой тот же оператор A, только действующий на j -тую точку. Полное матричное X -представление для A_j мы получим, умножая $A(x_j, x_j')$ на единичную матрицу, действующую на остальные аргументы:

$$A_j(X, X') = A(x_j, x_j')\prod_{i \atop (i\neq j)} \delta(x_i - x_i'). \qquad (I.12)$$

Нетрудно заметить, что если среди $(x_1,\dots x_N)$, $(x_1',\dots x_N')$ мы совершим одну и ту же перестановку P, заменяющую x_j, x_j' соответственно на x_i, x_i' $(i=P_j)$, то из $A_j(X,X')$ получим в результате $A_i(X,X')$:

$$A_j(PX,PX')=A_{P_j}(X,X') \tag{I.I3}$$

или ввиду (I.7)

$$PA_jP^{-1}=A_{P_j}.$$

Следовательно,

$$P\sum_{1\le j\le N}A_jP^{-1}=\sum_{1\le j\le N}A_{P_j}. \tag{I.I4}$$

Но какова бы ни была данная перестановка P, когда j пробегает N значений, $j=1,2,\dots N$, индекс P_j пробегает те же значения, только в другом порядке. Поэтому

$$\sum_{1\le j\le N}A_{P_j}=\sum_{1\le j\le N}A_j$$

и, таким образом, оператор

$$\mathfrak{A}=\sum_{1\le j\le N}A_j \tag{I.I5}$$

удовлетворяет условию симметрии:

$$P\mathfrak{A}P^{-1}=\mathfrak{A}. \tag{I.I6}$$

Операторы $\mathfrak{A}$ вида (I.I5) условимся называть симметричными аддитивными операторами.

Возьмем некоторый оператор B, действующий на функцию $\varphi(x,y)$ двух точек, и обозначим через $B(x,y;y',x')$ соответствующее матричное представление. Будем рассматривать только случай симметричных B, когда

$$B(x,y;y',x')=B(y,x;x',y'). \tag{I.I7}$$

Введем оператор B_{j_1,j_2}, являющийся оператором B, действующим на j_1-тый и j_2-тый аргументы волновой функции $\varphi(x_1,\dots x_N)$. Благодаря (I.I7) $B_{j_1,j_2}=B_{j_2,j_1}$. Поэтому бинарный оператор

$$\mathfrak{B}=\sum_{1\le j_1<j_2\le N}B_{j_1,j_2} \tag{I.I8}$$

можно представить также в форме

$$\mathfrak{B}=\frac{1}{2}\sum_{(1\le j_1\le N;\,1\le j_2\le N;\,j_1\ne j_2)}B_{j_1,j_2}. \tag{I.I9}$$

Возьмем полное матричное представление $B_{j_1,j_2}(X,X')$, получающееся в результате умножения матрицы $B(X_{j_1},X_{j_2};X_{j_2}',X_{j_1}')$ на единичную матрицу по отношению к $(\dots x_i\dots)$ $(i\ne j_1,j_2)$:

$$B_{j_1,j_2}(X,X')=B(x_{j_1},x_{j_2};x_{j_2}',x_{j_1}')\prod_{(i)(i\ne j_1,j_2)}\delta(x_i-x_i'). \tag{I.20}$$

Отсюда, как и в случае операторов A, вытекает, что

$$B_{j_1,j_2}(PX,PX')=B_{P_{j_1},P_{j_2}}(X,X'), \tag{I.2I}$$

то есть

$$PB_{j_1,j_2}P^{-1}=B_{P_{j_1},P_{j_2}}.$$

Суммируя здесь по всем различным $j_1,j_2=1,\dots N$, получим благодаря (I.I9)

$$P\mathfrak{B}P^{-1}=\frac{1}{2}\sum_{\left(\substack{1\le j_1\le N,\\ 1\le j_2\le N}\;j_1\ne j_2\right)}B_{P_{j_1},P_{j_2}}. \tag{I.22}$$

Но когда j_1 и j_2 пробегают все свои различные $N(N-1)$ значений, P_{j_1}, P_{j_2} пробегают те же значения, только в другом порядке, и потому из (I.22) следует

$$P\mathfrak{B}P^{-1}=\mathfrak{B}. \tag{I.23}$$

Итак, бинарный оператор (I.I8) является симметричным.

Нетрудно будет несколько обобщить описанные построения и ввести в рассмотрение симметричные операторы S-кратного типа.

Пусть S будет некоторым симметричным оператором, действующим на функции $\varphi(y_1,\dots y_s)$ от S точек. Обозначим через

$$S_{j_1,\dots j_s}\;;\quad \begin{matrix} j_1=1,2,\dots N, \\ \vdots \\ j_s=1,2,\dots N \end{matrix}\;;\quad j_\alpha\ne j_\beta, \tag{I.24}$$

тот же оператор S, только действующий соответственно на j_1-тый ... j_s-тый аргументы волновой функции $\varphi(x_1,\dots x_N)$. Введем S-кратный оператор $\mathfrak{S}^{(s)}$, положив

$$\sigma^{(s)} = \sum_{(1\le j_1<j_2<\dots<j_s\le N)} S_{j_1,\dots j_s} \quad . \tag{I.25}$$

Так как S является симметричным оператором, выражение $S_{j_1,\dots j_s}$ инвариантно по отношению к любой перестановке между индексами $j_1,\dots j_s$. Поэтому $\sigma^{(s)}$ можно привести к форме

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{S!}\sum_{\left(\substack{1\le j_\alpha\le N\\ j_\alpha\ne j_\beta}\right)} S_{j_1,\dots j_s} \quad . \tag{I.26}$$

Обозначим через $S(y_1,\dots y_s; y_s',\dots y')$ принятое матричное представление оператора S. Тогда, как и ранее,

$$S_{j_1,\dots j_s}(X,X') = S(x_{j_1},\dots x_{j_s}; x_{j_s}',\dots x_{j_1}')\prod_{(i\ne i_1,\dots i_s)}^{i}\delta(x_i - x_i'), \tag{I.27}$$

откуда

$$S_{j_1,\dots j_s}(PX,PX') = S_{P_{j_1},\dots P_{j_s}}(X,X') \tag{I.28}$$

или

$$P\,S_{j_1,\dots j_s}P^{-1} = S_{P_{j_1},\dots P_{j_s}} \quad .$$

Ввиду (I.26) отсюда получим

$$P\sigma^{(s)}P^{-1} = \frac{1}{S!}\sum_{\left(\substack{1\le j_\alpha\le N\\ j_\alpha\ne j_\beta}\right)} S_{P_{j_1},\dots P_{j_s}} = \sigma^{(s)}. \tag{I.29}$$

Итак, S-кратная динамическая величина, представленная выражением типа (I.25), будет симметричным оператором. Как видно, при $S=1$ она переходит в аддитивную величину, при $S=2$ – в бинарную.

Установим сейчас, основываясь на соотношении (I.28), одно важное тождество, которое в дальнейшем будет нами использовано. Пусть $\vartheta(X)$, $\varphi(X)$ – какие-то две волновые функции: или обе симметричные, или обе антисимметричные. Тогда, очевидно, в обоих случаях

$$\vartheta(PX)\varphi(PX) = \vartheta(X)\varphi(X) \quad . \tag{I.30}$$

Рассмотрим интеграл

$$\int\vartheta(X)(\sigma^{(s)}\varphi)_X\,dX = \int\vartheta(X)\sigma^{(s)}(X,X')\varphi(X')\,dX'dX$$

или, учитывая представление (I.25),

$$\int\vartheta(X)(\sigma^{(s)}\varphi)_X\,dX = \sum_{1\le j_1<j_2<\dots<j_s\le N}\int\vartheta(X)S_{j_1,\dots j_s}(X,X')\varphi(X')\,dX'dX. \tag{I.31}$$

Возьмем какой-нибудь отдельный член в этой сумме и совершим в интеграле замену переменных:

$$X\to PX \; ; \; X'\to PX' .$$

Получим

$$\int\vartheta(X)S_{j_1,\dots j_s}(X,X')\varphi(X')\,dX'dX =$$

$$= \int\vartheta(PX)S_{j_1,\dots j_s}(PX,PX')\varphi(PX')\,dX'dX.$$

Отсюда и на основании (I.28) и (I.30) видим, что

$$\int\vartheta(X)S_{j_1,\dots j_s}(X,X')\varphi(X')\,dX'dX =$$

$$= \int\vartheta(X)S_{P_{j_1},\dots P_{j_s}}(X,X')\varphi(X')\,dX'dX.$$

Здесь P–произвольная перестановка среди $(1,2,\dots N)$. Выберем ее так для данных $j_1,\dots j_s$, чтобы $P_{j_1}=1,\ P_{j_2}=2,\dots\ P_{j_s}=S$.

Таким образом, убеждаемся, что все члены в сумме (I.31) одинаковы и равны

$$\int \vartheta(X) S_{1,2,\dots s}(X,X')\varphi(X')dX'dX.$$

Поскольку число различных $j_1, j_2, \dots j_s$, удовлетворяющих неравенствам

$$1 \le j_1 < j_2 < j_3 < \dots < j_s \le N,$$

есть

$$\frac{N(N-1)\dots(N-S+1)}{S!},$$

находим окончательно

$$\int \vartheta(X)(\mathcal{G}^{(s)}\varphi)_X dX =$$

$$= \frac{N(N-1)\dots(N-S+1)}{S!}\int \vartheta(X) S_{1,2,\dots s}(X,X')\varphi(X')dX'dX. \tag{I.32}$$

Запишем это тождество в более развернутой форме. Учитывая выражение (I.27) для $S_{1,\dots s}(X,X')$, имеем

$$\int \vartheta(x_1,\dots x_N)(\mathcal{G}^{(s)}\varphi)_{x_1,\dots x_N} dx_1\dots dx_N =$$

$$= \frac{N(N-1)\dots(N-S+1)}{S!}\int \vartheta(x_1,\dots x_N) S(x_1,\dots x_s; x_s',\dots x_1')\varphi(x_1',\dots x_s'; x_{s+1}\dots x_N)\otimes \tag{I.33}$$

$$\otimes dx_1'\dots dx_s' dx_1 \dots dx_N.$$

Отсюда, взяв $S=1$, получим для аддитивных операторов

$$\int \vartheta(x_1,\dots x_N)(\mathfrak{A}\varphi)_{x_1,\dots x_N} dx_1,\dots dx_N =$$

$$= N\int \vartheta(x_1,\dots x_N) A(x_1,x_1')\varphi(x_1', x_2,\dots x_N)dx_1'dx_1\dots dx_N, \tag{I.34}$$

при $S=2$ будем иметь для бинарных операторов

$$\int \vartheta(x_1,\dots x_N)(\mathfrak{B}\varphi)_{x_1,\dots x_N} dx_1\dots dx_N =$$

$$= \frac{N(N-1)}{2}\int \vartheta(x_1,\dots x_N) B(x_1,x_2; x_2',x_1')\varphi(x_1',x_2',x_3\dots x_N)dx_1'dx_2'dx_1\dots dx_N. \tag{I.35}$$

Соотношения (I.33), (I.34), (I.35) будут использованы далее для преобразования динамических переменных к представлению вторичного квантования.

Обратимся теперь к гамильтониану H. В обычных задачах квантовой механики системы одинаковых частиц гамильтониан H состоит из аддитивной симметричной суммы индивидуальных энергий частиц и бинарной симметричной суммы энергий взаимодействия различных пар частиц:

$$H = \sum_{1\le j\le N} T_j + \sum_{1\le j_1<j_2\le N} U_{j_1,j_2}. \tag{I.36}$$

Матрицы

$$T(x_1,x_1') \quad ; \quad U(x_1,x_2; x_2' x_1'), \tag{I.37}$$

определяющие одночастичный T и парный U операторы, должны обладать свойством самосопряженности:

$$T^*(x_1,x_1') = T(x_1',x),$$

$$U^*(x_1,x_2; x_2',x_1') = U(x_1',x_2'; x_2,x_1),$$

обеспечивающим эрмитовость гамильтониана H.

Весьма важным, часто рассматриваемым случаем является случай гамильтониана вида

$$H = -\sum_{1\le j\le N}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{q_j} + \sum_{1\le j_1<j_2\le N}\Phi(q_{j_1}-q_{j_2}), \tag{I.38}$$

состоящего из аддитивной суммы кинетических энергий частиц и из бинарной суммы не зависящей от спина потенциальной энергии пар. Эта потенциальная энергия взаимодействия характеризуется вещественной функцией, инвариантной по отношению к отражению:

$$\Phi(q) = \Phi(-q). \tag{I.39}$$

Как видно, такой гамильтониан (I.38) является симметричным оператором вышерассмотренной конструкции, причем для него функциями (I.38) будут соответственно

$$T(x,x') = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q \delta(x-x') = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q \delta(q-q')\delta(\nu-\nu'),$$

$$U(x_1,x_2;x_2',x_1') = \Phi(q_1-q_2)\delta(x_1-x_1')\delta(x_2-x_2') =$$
$$= \Phi(q_1-q_2)\delta(q_1-q_1')\delta(q_2-q_2')\delta(\nu_1-\nu_1')\delta(\nu_2-\nu_2'). \tag{I.40}$$

Если такая динамическая система находится во внешнем поле, характеризуемом потенциальной энергией $U(q)$, то к выражению (I.38) надо добавить еще аддитивный член вида

$$\sum_{1\le j\le N} U(q_j) . \tag{I.41}$$

По поводу гамильтониана типа (I.36) заметим в заключение, что вообще было бы возможно ввести в него еще тройные, четверные и т.п. взаимодействия, но этого обычно не делают, так как уже учет одних только бинарных взаимодействий приводит к исключительно трудным задачам, которые, как правило, пытаются решать лишь с помощью различных приближенных методов.

§2. Переход от непрерывного к дискретному представлению. Введение чисел заполнения

Чтобы ввести понятие чисел заполнения более наглядным образом, будет целесообразно перейти для волновых функций

$$\varphi = \varphi(x_1, \dots x_N) \tag{2.1}$$

от непрерывного x -представления к дискретному представлению.

Возьмем для этого систему функций:

$$\varphi_k(q), \tag{2.2}$$

заданную во всем трехмерном пространстве точек q и зависящую от дискретного индекса k, обладающую свойствами ортонормированности и полноты:

$$\int \varphi_k^*(q)\cdot\varphi_{k'}(q)\,dq = \delta(k-k'), \tag{2.3}$$

$$\sum_{(k)} \varphi_k(q)\cdot\varphi_k^*(q') = \delta(q-q'). \tag{2.4}$$

В качестве такой системы (2.2) можем взять, например, систему собственных функций для трехмерного гармонического осциллятора. В этом случае индекс k характеризуется совокупностью трех целых чисел.

Рассмотрим теперь разложение Фурье для волновой функции одной точки x :

$$\varphi(x) = \varphi(q,\nu).$$

Имеем

$$\varphi(x) = \sum_{(k)} \varphi_k(q)\int \varphi(q,\nu)\varphi_k^*(q)\,dq = \tag{2.5}$$
$$= \sum_{(k,\sigma)} \varphi_k(q)\delta(\nu-\sigma)\left\{\sum_{(\nu)}\int \varphi(q,\nu)\delta(\nu-\sigma)\varphi_k^*(q)\,dq\right\}.$$

Полагая

$$f = (k,\sigma)\ ;\ \psi_f(x) = \varphi_k(q)\delta(\nu-\sigma)\ , \tag{2.6}$$

получим отсюда

$$\varphi(x)=\sum_{(f)}\psi_f(x)\int\varphi(x)\overset{*}{\psi}_f(x)\,dx\;. \qquad (2.7)$$

Как видим, система (2.6) будет ортонормированной и полной:

$$\int\overset{*}{\psi}_f(x)\psi_{f'}(x)\,dx=\delta(f-f'), \qquad (2.8)$$

$$\sum_{(f)}\psi_f(x)\overset{*}{\psi}_f(x')=\delta(x-x'). \qquad (2.9)$$

Применяя разложение (2.7) к каждому из аргументов x_j волновой функции (2.1), будем иметь

$$\varphi(x_1,\dots x_N)=\sum_{(f_1,\dots f_N)}F(f_1,\dots f_N)\psi_{f_1}(x_1)\cdots\psi_{f_N}(x_N), \qquad (2.10)$$

где

$$F(f_1,\dots f_N)=\int\varphi(x_1,\dots x_N)\overset{*}{\psi}_{f_1}(x_1)\cdots\overset{*}{\psi}_{f_N}(x_N)\,dx_1\dots dx_N. \qquad (2.11)$$

Ясно, что $F(f_1,\dots f_N)$ будет волновой функцией рассматриваемой динамической системы в дискретном f-представлении. Из определения (2.11) нетрудно заключить также, что если φ – симметрична, то и F – симметрична, если φ – антисимметрична, то и F – антисимметрична. Разложение (2.10) показывает и обратное утверждение: из симметрии F следует симметрия φ и из антисимметрии F вытекает антисимметрия φ.

Таким образом, свойства симметрии и антисимметрии будут одинаковыми для обоих представлений волновой функции.

В ряде случаев, особенно для задач статистической механики динамических систем с гамильтонианом (1.38), оказывается удобным использовать дискретное импульсное представление. Чтобы сделать импульсное представление дискретным, прибегают к следующему искусственному приему: рассматривается ситуация, в которой все

частицы нашей динамической системы находятся внутри конечного большого объема V:

$$-\frac{L}{2}<q^{(\alpha)}<\frac{L}{2}\;;\quad \alpha=1,2,3\,,\qquad V=L^3. \qquad (2.12)$$

В качестве граничных условий выбирают так называемые циклические граничные условия, то есть условия периодичности волновых функций (2.1) по каждой из пространственных координат с периодом L:

$$\mathcal{D}_j^{(\alpha)}\varphi=\varphi\;;\qquad j=1,2,\dots N\;;\quad \alpha=1,2,3\,, \qquad (2.13)$$

где $\mathcal{D}_j^{(\alpha)}$ – оператор, заменяющий $q_j^{(\alpha)}$ на $q_j^{(\alpha)}+L$ и оставляющий все остальные координаты в выражении φ неизменными.

Тогда в качестве системы (2.2) можем принять

$$\varphi_k(q)=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i(k\cdot q)}, \qquad (2.14)$$

$$k=\left(\frac{2\pi n^{(1)}}{L},\;\frac{2\pi n^{(2)}}{L},\;\frac{2\pi n^{(3)}}{L}\right)\;;\quad V=L^3, \qquad (2.15)$$

где $n^{(\alpha)}$ – целые числа, принимающие все значения между $\pm\infty$. Полученная система функций (2.14) с дискретным импульсом $p=\hbar k$, очевидно, будет ортонормированной и полной в объеме V (2.12). Иначе говоря, в соотношениях (2.3) мы должны проводить интеграцию не по всему трехмерному пространству, а лишь по всему "основному объему" V. В соотношениях (2.4) мы должны теперь подразумевать, что точки q и q' лежат внутри V.

Вводя функции $\psi_f(x)$ по формуле (2.6), сделаем аналогичные замечания и в отношении равенств (2.9), (2.8), (2.11). Вообще, подчеркнем, не оговаривая этого в дальнейшем, что в принятом дискретном импульсном представлении интеграция по пространственным переменным совершается лишь по всему объему V.

Скажем еще несколько слов по поводу условий периодичности (2.13). Эти условия будут совместимы с уравнением Шредингера, если H коммутирует со всеми $\mathcal{D}_j^{(\alpha)}$:

$$[\mathcal{D}_j^{(\alpha)}; H] = 0. \qquad (2.16)$$

Действительно, в таком случае $\mathcal{D}_j^{(\alpha)}$ будут интегралами движения, и потому, если условия периодичности (2.13) выполняются в один какой-то момент времени, они будут выполняться и для всех t. Но оператор кинетической энергии

$$-\sum_{1 \le j \le N} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{q},$$

входящий в H, очевидно, коммутирует со всеми трансляциями координат. Если бы $\Phi(q)$ была периодической функцией координат с периодом L, то, очевидно, и потенциальная энергия

$$U = \sum_{1 \le j_1 < j_2 \le N} \Phi(q_{j_1} - q_{j_2})$$

была бы периодической функцией координат $q_j^{(\alpha)}$ с периодом L. Но тогда, взяв любую функцию:

$$\Phi = \Phi(q_1, \nu_1; q_2, \nu_2; \dots q_N, \nu_N),$$

мы получим

$$\mathcal{D}_j^{(\alpha)} U \Phi = U \mathcal{D}_j^{(\alpha)} \Phi,$$

т.е. $\mathcal{D}_j^{(\alpha)}$ коммутирует с U, а тем самым и с H, и условия (2.16) выполняются.

Здесь мы сталкиваемся с некоторой формальной трудностью. Дело в том, что на самом деле $\Phi(q)$ есть функция, стремящаяся к нулю при $|q| \to \infty$. Нам надо, следовательно, построить для $\Phi(q)$ аппроксимирующее ее при $L \to \infty$ выражение, которое при конечном L обладало бы указанным свойством периодичности.

Для этого возьмем интегральное представление Фурье:

$$\Phi(q) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(k \cdot q)} f(k)\, dk, \qquad (2.17)$$

в котором

$$f(k) = \int \Phi(q)\, e^{-i(k \cdot q)} dq; \qquad (2.17a)$$

интеграция в (2.17a) берется по всему трехмерному пространству. Заменим теперь интеграл в (2.17) суммой, взятой по решетке (2.15). Поскольку для нее

$$\Delta k^{(1)} \cdot \Delta k^{(2)} \cdot \Delta k^{(3)} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V},$$

напишем вместо (2.17)

$$\Phi(q) = \frac{1}{V} \sum_{(k)} e^{i(k \cdot q)} f(k). \qquad (2.18)$$

Это выражение уже будет периодической функцией $q^{(1)}, q^{(2)}, q^{(3)}$ с периодом L.

Итак, чтобы сделать наложенные условия периодичности для волновых функций совместимыми с уравнением Шредингера, следует заменить интегральное представление (2.17) для потенциальной функции $\Phi(q)$ соответствующей дискретной суммой (2.18). Чтобы устранить искусственность такой замены, как и вообще нефизичность требования периодичности волновых функций, мы должны всегда иметь в виду предельный переход: $V \to \infty$, когда объем V (2.12) распространяется на все трехмерное пространство и дискретная сумма (2.18) переходит в правильное интегральное представление (2.17) для потенциальной функции.

Подчеркнем, что при $V \to \infty$ мы должны устремить к бесконечности также и число частиц $N \to \infty$ таким образом, чтобы плотность числа частиц на единицу объема в пределе была конечной величиной, отличной от нуля:

$$V \to \infty, \quad N \to \infty; \quad \rho = \frac{N}{V} \to const. \qquad (2.19)$$

Так как в процессе этого предельного перехода спектр волновых векторов k приближается к непрерывному, рассматриваемое импульсное представление называется также квазидискретным представлением.

Отметим, что предельный переход (2.I9) следует всегда иметь в виду в задачах статистической физики. В этих задачах физический смысл имеют, как правило, лишь величины, вычисляемые в пределе (2.I9), который здесь называют термодинамическим пределом.

После этих замечаний рассмотрим волновые функции

$$F(f_1, \dots f_N)$$

в дискретном f-представлении в любом из случаев – или в случае истинного дискретного представления, или в случае квазидискретного импульсного представления, но в этом последнем – до перехода к пределу $V \to \infty$. В обоих этих случаях f характеризуется конечным набором целых чисел, например, тремя целыми числами и спиновым индексом ν.

Множество $(\dots f \dots)$ всех f является, как говорят в математике, счетным множеством. Мы можем поэтому установить взаимно однозначное соответствие между элементами этого множества и натуральным рядом:

$$f \rightleftarrows \lambda \quad , \quad \lambda = 0, 1, 2, \dots \quad . \qquad (2.20)$$

Короче говоря, счетное множество можем занумеровать одним индексом λ = 0,I,2,3,4,... Отсюда вытекает, что мы можем полностью упорядочить множество f, т.е. так определить понятие "больше" ($>$) или "меньше" ($<$), что для любых двух $f \neq f'$ будет или $f > f'$, или $f < f'$. Именно, будем говорить, что $f > f'$, если для соответствующих по (2.20) λ будет $\lambda > \lambda'$, и наоборот $f < f'$ при $\lambda < \lambda'$. Разумеется, такое упорядочение зависит от способа нумерации f, и потому неоднозначно. Нам, однако, достаточно иметь дело с упорядочением, основанным на какой-то данной фиксированной системе соответствия (2.20).

Как уже отмечалось, волновые функции в f-представлении будут или симметричными (для случая системы одинаковых бозонов), или антисимметричными (для случая системы одинаковых фермионов). В обоих этих случаях вместо аргументов $f_1, \dots f_N$ введем систему чисел заполнения $(\dots n_f \dots)$, положив

$n_f = 0$, если f нет среди $f_1, f_2, \dots f_N$,

$n_f = m$, если f встречается m раз среди $f_1, \dots f_N$.

Так как всего f_j в системе $(f_1, \dots f_N)$ будет N, то

$$\sum_{(f)} n_f = N. \qquad (2.2I)$$

В случае фермионов функция $F(f_1, \dots f_N)$ вследствие свойства антисимметрии обращается в нуль, если среди $(f_1, \dots f_N)$ будет хотя бы одна пара равных f. Следовательно, в этом случае мы можем считать, что все $f_1, \dots f_N$ различны между собой. Но тогда какое-либо значение f может встречаться среди $f_1, \dots f_N$ не более одного раза, ввиду чего

$$n_f = 0, 1 \quad \text{(ферми-статистика).} \qquad (2.22)$$

В случае же статистики Бозе функция $F(f_1, \dots f_N)$ является симметричной, и потому нам надлежит рассматривать произвольные совокупности $(f_1, \dots f_N)$, в том числе и такие, у которых некоторые из f_j равны между собой. Следовательно, здесь числа заполнения могут принимать произвольные значения, согласующиеся с (2.2I):

$$n_f = 0, 1, 2, 3, \dots N \quad \text{(бозе-статистика).} \qquad (2.23)$$

Ясно, что задание системы $(f_1, \dots f_N)$ однозначно определяет соответствующую систему чисел заполнения $(\dots n_f \dots)$, удовлетворяющую условию (2.2I). Возьмем теперь, наоборот, некоторую систему чисел заполнения $(\dots n_f \dots)$, удовлетворяющую условию (2.2I), и рассмотрим все те системы $(f_1, \dots f_N)$, для которых

$$(f_1, \dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots) , \qquad (2.24)$$

т.е. для которых $(\dots n_f \dots)$ является соответствующей системой чисел заполнения.

Возьмем все те f, для которых n_f отличны от нуля:

$$f = g_1, \dots g_s ,$$

нумерацию здесь выберем в порядке возрастания g, т.е.

$$g_1 < \dots < g_s .$$

Таким образом, $\quad n_{g_j} \geq 1 \quad , \quad j = 1, 2, \dots s;$

из (2.2I) видим, что

$$S \le N.$$

Как видим из самого определения чисел заполнения, среди $f_1, \dots f_N$ из (2.24) n_{g_1} элементов будут равны $g_1, \dots$, n_{g_s} элементов будут равны g_s. Любое распределение N элементов $f_1, \dots f_N$ по S группам g_1, $g_2, \dots$, соответственно из n_{g_1}, n_{g_2}, ... элементов, приводит к той же системе чисел заполнения $(\dots n_f \dots)$.

Таким образом, данная система чисел заполнения $(\dots n_f \dots)$ определяет $(f_1, \dots f_N)$ с точностью до перестановок между N элементами по S группам из $n_{g_1}, \dots n_{g_s}$ элементов, и потому число $\mathcal{N}(\dots n_f \dots)$ всех возможных $(f_1, \dots f_N)$, соответствующих $(\dots n_f \dots)$, будет

$$\mathcal{N} = \sum_{\{(f_1, \dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots)\}} 1 = \frac{N!}{n_{g_1}! \dots n_{g_s}!}. \tag{2.25}$$

Поскольку $0! = 1!$, можем написать также

$$\mathcal{N}(\dots n_f \dots) = \frac{N!}{\prod_{(f)} \{n_f!\}}. \tag{2.26}$$

В случае статистики Бозе функция $F(f_1, \dots f_N)$ не меняется от перестановок между $(f_1, \dots f_N)$ и, следовательно, ее значения однозначно задаются системой чисел заполнения. Можно поэтому ввести в рассмотрение волновые функции как функции $C(\dots n_f \dots)$ от чисел заполнения. Определим их следующим образом:

А) для $\sum_{(f)} n_f = N$,

$$C(\dots n_f \dots) = \sqrt{\mathcal{N}(\dots n_f \dots)} \cdot F(f_1, \dots f_N), \text{ где } (f_1, \dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots), \tag{2.27}$$

Б) для $\sum_{(f)} n_f \ne N$, $C(\dots n_f \dots) = 0$.

Заметим прежде всего, что благодаря (Б) мы можем рассматривать $\dots n_f \dots$ как независимые аргументы, могущие принимать любые значения из натурального ряда:

$$n_f = 0, 1, 2, \dots$$

Ясно далее, что симметричная функция $F(f_1, \dots f_N)$ полностью определяет функцию $C(\dots n_f \dots)$, и наоборот, любая функция C от чисел заполнения, удовлетворяющая условию (2.27Б), однозначно определяет симметричную функцию $F(f_1, \dots f_N)$. Такое взаимно однозначное соответствие будем записывать для краткости в форме

$$F \rightleftarrows C.$$

Заметим, наконец, что нормировочный множитель $\sqrt{\mathcal{N}}$ введен в определение (2.27А), чтобы сохранить скалярное произведение при переходе от F к C, поскольку число различных систем $(f_1, \dots f_N)$, соответствующих одной данной системе чисел заполнения, как раз и равно $\mathcal{N}$. В самом деле, перестроив сумму по $(f_1, \dots f_N)$ в скалярном произведении

$$(F_1, F_2) = \sum_{(f_1 \dots f_N)} F_1^*(f_1 \dots f_N) \cdot F_2(f_1, \dots f_N) \tag{2.28}$$

к сумме по системамы чисел заполнения:

$$\sum_{(f_1, \dots f_N)} = \sum_{\left(\substack{\dots n_f \dots \\ \sum n_f = N}\right)} \cdot \sum_{\left(\substack{f_1, \dots f_N \\ (f_1, \dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots)}\right)}, \tag{2.29}$$

видим, учитывая (2.27А), что все члены в сумме

$$\sum_{\left(\substack{f_1, \dots f_N \\ (f_1, \dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots)}\right)} \tag{2.30}$$

равны произведению

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\right)^2 \cdot C_1^*(\dots n_f \dots) C_2(\dots n_f \dots),$$

где C_1, C_2 – соответствующие функциям F_1, F_2 волновые функции в представлении чисел заполнения, а число таких членов в (2.30) равно $\mathcal{N}$. Таким образом, число $\mathcal{N}$ компенсирует квадрат множителя $1/\sqrt{\mathcal{N}}$ и, следовательно,

$$(F_1, \cdot F_2) = (C_1, C_2). \tag{2.31}$$

Таким образом, видим, что введение нормировочного множителя в определение (2.27А) действительно обеспечивает неизменность скалярного произведения при переходе от волновых функций F к соответствующим волновым функциям C.

Рассмотрим теперь случай статистики Ферми. Как уже отмечалось, в этом случае числа заполнения могут принимать значения 0,I. Поэтому

$$\mathcal{N} = N!$$

Возьмем какую-либо систему чисел заполнения, для которой

$$\sum_{(f)} n_f = N, \tag{2.32}$$

и рассмотрим те f, для которых $n_f > 0$, т.е. $n_f = 1$. Их число благодаря (2.20) будет равно N. Занумеруем эти f в порядке возрастания :

$$f = g_1, g_2, \dots g_N \ ; \qquad g_1 < g_2 < g_3 < \dots < g_N. \tag{2.33}$$

Ясно, что не только данная система чисел заполнения $(\dots n_f \dots)$ (с условием (2.20)) однозначно определяет систему (2.33), но и наоборот, так что

$$(g_1 < \dots < g_N) \rightleftarrows (\dots n_f \dots). \tag{2.34}$$

По аналогии со случаем статистики Бозе введем волновые функции в представлении чисел заполнения, положив по определению:

А) если $\sum\limits_{(f)} n_f = N$,

$$C(\dots n_f \dots) = \sqrt{N!}\, F(g_1, \dots g_N), \text{ где } (g_1 < \dots < g_N) \rightleftarrows (\dots n_f \dots) \tag{2.35}$$

Б) если $\sum\limits_{(f)} n_f \neq N$, $\quad C(\dots n_f \dots) = 0.$

Благодаря (Б) мы можем рассматривать $\dots n_f \dots$ как независимые аргументы, могущие принимать два значения: 0, I.

Точно так же, как и в случае статистики Бозе, в рассматриваемом случае статистики Ферми нетрудно убедиться, что из-за включения в (2.35А) нормировочного множителя $\sqrt{\mathcal{N}} = \sqrt{N!}$ скалярное произведение остается неизменным при переходе от F к соответствующим C. Здесь дело в том, что произведение двух антисимметричных функций является симметричной функцией, так что

$$F_1^*(f_1, \dots f_N) F_2(f_1, \dots f_N) = F_1^*(g_1, \dots g_N) F_2(g_1, \dots g_N)$$

для

$$(f_1, \dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots) \rightleftarrows (g_1, \dots g_N).$$

§3. Представление вторичного квантования для волновых функций в случае статистики Бозе и Ферми

Чтобы преобразовать динамические переменные, представленные операторами, действующими на обычные волновые функции, к операторам, действующим на волновые функции $C(\dots n_f \dots)$, целесообразно ввести в рассмотрение так называемые квантованные амплитуды Бозе или Ферми.

А. Случай статистики Бозе

При исследовании задач об одномерном гармоническом осцилляторе вводятся операторы a, a^+, действующие на волновые функции

$$f(n), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

зависящие от целочисленного аргумента n :

$$(af)_n = \sqrt{n+1} \cdot f(n+1) \quad ; \quad (a^+ f)_n = \sqrt{n} \cdot f(n-1). \tag{3.1}$$

В матричном представлении

$$(a)_{n,n'} = \sqrt{n+1} \cdot \delta(n+1-n') \, ; \quad (a^+)_{n,n'} = \sqrt{n'+1}\, \delta(n'+1-n) = \sqrt{n} \cdot \delta(n-1-n'). \tag{3.2}$$

Отсюда может показаться, что a^+ уменьшает n, а a увеличивает n на I. На самом деле справедливо, очевидно, противоположное утверждение.

Пусть, действительно, мы взяли волновую функцию, для которой оператор $n=\overset{+}{a}a$ имеет определенное фиксированное значение m:

$$(n-m)f_m(n)=0 \ .$$

Имеем тогда

$$f_m(n)=\mathcal{K}\cdot\delta(n-m),$$

где $\mathcal{K}$ – некоторая постоянная. Поэтому ввиду (3.2)

$$(af_m)_n=\sqrt{n+1}\cdot\mathcal{K}\cdot\delta(n+1-m)=\sqrt{n+1}\cdot f_{m-1}(n),$$

$$(\overset{+}{a}f_m)_n=\sqrt{n}\cdot\mathcal{K}\cdot\delta(n-1-m)=\sqrt{n}\cdot f_{m+1}(n) \ .$$

Таким образом, оператор a уменьшает число n на единицу, а оператор $\overset{+}{a}$ увеличивает это число на единицу. Нетрудно заметить также, что всегда

$$\begin{aligned}&(a\overset{+}{a}f)_n=(n+1)f(n),\\&(\overset{+}{a}af)_n=n\cdot f(n)\end{aligned} \qquad (3.3)$$

или

$$\overset{+}{a}a=n \ ,$$

$$a\overset{+}{a}-\overset{+}{a}a=1 \ . \qquad (3.4)$$

Возьмем волновую функцию

$$f_0(n)=\delta(n), \qquad (3.5)$$

соответствующую нулевому собственному значению оператора $\overset{+}{a}a=n$. На основании (3.I) имеем

$$(af_0)_n=\sqrt{n+1}\cdot\delta(n+1) \ ,$$

то есть

$$af_0=0. \qquad (3.6)$$

Далее, благодаря (3.I)

$$\begin{aligned}&\overset{+}{a}f_0=\sqrt{n}\,\delta(n-1)=\delta(n-1),\\&(\overset{+}{a})^2f_0=\sqrt{n}\cdot\sqrt{n-1}\cdot\delta(n-2)=\sqrt{2}\,\delta(n-2),\\&\dots\\&(\overset{+}{a})^mf_0=\sqrt{m!}\,\delta(n-m).\end{aligned} \qquad (3.7)$$

После этих предварительных замечаний перейдем к рассмотрению волновых функций

$$C(\dots n_g\dots), \qquad (3.8)$$

зависящих от системы чисел заполнения $(\dots n_g\dots)$. Введем операторы a_f, a_f^+, являющиеся теми же операторами a, a^+, действующими только на f-тое число заполнения n_f. Поэтому на основании (3.3), (3,4) имеем

$$\overset{+}{a}_f a_f=n_f \ , \qquad (3.9)$$

$$a_f a_f^+ - a_f^+ a_f = 1 \ . \qquad (3.10)$$

Заметим далее, что a_f, $\overset{+}{a}_f$ и $a_{f'}$, $\overset{+}{a}_{f'}$ при $f\neq f'$ действуют на разные аргументы волновой функции C, и потому они коммутируют между собой.

Таким образом,

$$\begin{aligned}&a_f a_{f'}-a_{f'}a_f=0,\\&\overset{+}{a}_f\overset{+}{a}_{f'}-\overset{+}{a}_{f'}\overset{+}{a}_f=0.\end{aligned} \qquad (3.11)$$

Поскольку эти равенства тривиальны при $f=f'$, они имеют место для всех f, f'. Далее, a_f коммутирует с $a_{f'}^+$ при $f\neq f'$, а при $f=f'$ имеем (3.I0). Следовательно,

$$a_f a_{f'}^+ - a_{f'}^+ a_f = \delta(f-f'). \qquad (3.12)$$

Введенные операторы с перестановочными соотношениями (3.II), (3.I2) называются <u>квантовыми бозе-операторами</u>. Так как a_f^+ увеличивает значение n_f на I, а a_f уменьшает это значение на единицу, a_f^+ можно называть <u>амплитудами рождения</u>, а a_f – <u>амплитудами уничтожения</u>.

Рассмотрим вакуумную волновую функцию:

$$C_{vac} = \prod_{(g)} \delta(n_g) \quad , \qquad (C_{vac}, C_{vac}) = 1 \qquad (3.13)$$

или в обозначениях Дирака:

$$C_{vac} = |0> . \qquad (3.14)$$

Как видно, для C_{vac} все n_f имеют значения, равные нулю. Ввиду (3.6) ясно, что для всех f

$$a_f \cdot C_{vac} = 0. \qquad (3.15)$$

Учитывая (3.7), видим также, что

$$(\overset{+}{a}_f)^m \cdot C_{vac} = \sqrt{m!}\,\delta(n_f - m)\prod_{\substack{g \\ (g\neq f)}}\delta(n_g). \qquad (3.16)$$

Рассмотрим теперь выражение

$$\overset{+}{a}_{f_1} \cdots \overset{+}{a}_{f_N} C_{vac} \qquad (3.17)$$

и обозначим через $(\ldots n_f'\ldots)$ систему чисел заполнения, соответствующую системе $(f_1,\ldots f_N)$:

$$(\ldots n_f'\ldots) \backsim (f_1,\ldots f_N) \; ; \quad \sum_{(f)} n_f' = N. \qquad (3.18)$$

Так как все операторы $\overset{+}{a}_f$ коммутируют между собой, выражение (3.17) инвариантно по отношению ко всем перестановкам между $(f_1,\ldots f_N)$, и тем самым мы можем представить (3.17) в виде

$$\overset{+}{a}_{f_1} \cdots \overset{+}{a}_{f_N} C_{vac} = \Big\{\prod_{(f)} (\overset{+}{a}_f)^{n_f'}\Big\} \cdot C_{vac} . \qquad (3.19)$$

Умножение здесь совершается по тем f, которые встречаются среди $f_1,\ldots f_N$. Но для остальных f будет $n_f'=0$, и оператор

$$\{\overset{+}{a}_f\}^{n_f'}$$

оказывается единичным. Поэтому мы можем распространить умножение в (3.19) вообще на все f. Тогда благодаря (3.16) имеем

$$\overset{+}{a}_{f_1} \cdots \overset{+}{a}_{f_N} C_{vac} = \Big\{\prod_{(f)} \sqrt{n_f'!}\Big\}\prod_{(g)}\delta(n_g - n_g'). \qquad (3.20)$$

Воспользовавшись этим тождеством, можем представить выражения (2.27) для C через $F(f_1,\ldots f_N)$ с помощью линейной комбинации из (3.20). Действительно, учитывая (2.27Б), имеем

$$C(\ldots n_f \ldots) = \sum_{\substack{(\ldots n_f' \ldots) \\ (\sum n_f' = N)}} C(\ldots n_f' \ldots)\prod_{(g)}\delta(n_g - n_g'),$$

то есть

$$C(\ldots n_f \ldots) = \sum_{\substack{(\ldots n_f' \ldots) \\ (\sum_f n_f' = N)}} \frac{C(\ldots n_f' \ldots)}{\prod_f \sqrt{n_f'!}}\,\overset{+}{a}_{f_1} \cdots \overset{+}{a}_{f_N} \cdot C_{vac},$$

$$(f_1 \ldots f_N) \backsim (\ldots n_f \ldots). \qquad (3.21)$$

Перестроим здесь суммирование по $(\ldots n_f'\ldots)$ к суммированию по $f_1,\ldots f_N$. Так как число различных систем $(f_1,\ldots f_N)$, соответствующих одной и той же системе чисел заполнения $(\ldots n_f'\ldots)$, равно

$$\mathfrak{N}(\ldots n_f' \ldots) = \frac{N!}{\prod_f n_f'!},$$

то на основании (2.27А) можем представить (3.21) в форме

$$C(\ldots n_f \ldots) = \sum_{(f_1 \ldots f_N)} \frac{1}{\mathfrak{N}(\ldots n_f' \ldots)}\,\frac{\sqrt{\mathfrak{N}(\ldots n_f' \ldots)}}{\prod_f \sqrt{n_f'!}}\,F(f_1 \ldots f_N)\,\overset{+}{a}_{f_1} \cdots \overset{+}{a}_{f_N} \cdot C_{vac},$$

где с учетом формулы (2.26)*/

---

*/ Так как для бозе-газа

$$\mathfrak{N}(\ldots n_f \ldots) = \frac{N!}{\prod_f (n_f!)} .$$

$$\frac{1}{N(\ldots n_f'\ldots)}\cdot\frac{\sqrt{N(\ldots n_f'\ldots)}}{\sqrt{\prod_f n_f'!}} = \frac{1}{\sqrt{N(\ldots n_f'\ldots)}\cdot\sqrt{\prod_{(f)} n_f'!}} = \frac{1}{\sqrt{N!}}.$$

Таким образом, получим окончательное выражение для волновой функции в представлении чисел заполнения через волновую функцию в f -представлении :

$$C(\ldots n_f\ldots) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{(f_1,\ldots f_N)} F(f_1,\ldots f_N)\,\overset{+}{a}_{f_1}\cdots\overset{+}{a}_{f_N}\cdot C_{vac}. \qquad (3.22)$$

Б. Случай статистики Ферми

Как известно, при рассмотрении состояний со спином I/2 вводятся матрицы

$$\begin{vmatrix}0&0\\1&0\end{vmatrix} \quad ; \quad \begin{vmatrix}0&1\\0&0\end{vmatrix}.$$

действующие на двухкомпонентный вектор или, что то же самое, на функцию $f(n)$ аргумента n, принимающего только два значения: $n=0$, $n=1$.

Обозначим соответствующие операторы через $b,\ b^+$:

$$(b)_{n,n'} = \delta(n)\cdot\delta(n'-1),$$
$$(b^+)_{n,n'} = \delta(n-1)\delta(n'). \qquad (3.23)$$

Из такого определения сразу следует, что

$$b(-1)^n + (-1)^n b = 0,$$
$$b^+(-1)^n + (-1)^n b^+ = 0. \qquad (3.24)$$

Далее, видим из (3.23), что

$$(bf)_n = \delta(n)f(1),$$
$$(b^+f)_n = \delta(n-1)f(0). \qquad (3.25)$$

Поэтому если возьмем волновую функцию $f_0(n)$:

$$f_0(n) = \delta(n),$$

для которой число n равно нулю, то

$$b f_0 = 0,$$
$$b^+ f_0 = \delta(n-1). \qquad (3.26)$$

Если же возьмем волновую функцию $f_1(n)$:

$$f_1(n) = \delta(n-1),$$

для которой число n равно единице, то

$$b f_1 = \delta(n),$$
$$b^+ f_1 = 0.$$

Таким образом, оператор b уменьшает число n на единицу, а оператор b^+ увеличивает его на единицу.

Из (3.25) следует, что

$$b^2 = 0 \quad , \quad (b^+)^2 = 0, \qquad (3.27)$$

а также

$$b^+ b\, f(n) = \delta(n-1) f(n) = n\cdot f(n),$$

то есть

$$b^+ b = n. \qquad (3.28)$$

Совершенно аналогично

$$b b^+ = 1 - n,$$

и потому

$$b b^+ + b^+ b = 1. \qquad (3.29)$$

Перейдем к рассмотрению волновых функций :

$$C(\ldots n_g\ldots),$$

зависящих от системы чисел заполнения $(\cdots n_g\ldots)$, причем каждое из n_g может принимать лишь два значения: 0 или I. Введем в рассмотрение операторы b_f , b_f^+ , являющиеся теми же операторами b , b^+ , только действующими лишь на f -тое число заполнения n_f. Поэтому b_f уменьшает это число на единицу, а b_f^+ увеличивает его на единицу. Из (3.27), (3.28), (3.29) видим, что

$$b_f^2=0\ ;\quad (b_f^+)^2=0\quad ;\ b_f^+b_f=n_f\ ;\quad b_f b_f^+ + b_f^+ b_f = 1. \tag{3.30}$$

Нетрудно заметить далее, что, поскольку b_f, b_f^+ действуют только на n_f, оба эти оператора коммутируют с n_g при $g \neq f$. Учитывая (3.24), получим поэтому

$$\begin{gathered} b_f(-1)^{n_f} + (-1)^{n_f} b_f = 0 \quad ; \quad b_f^+(-1)^{n_f} + (-1)^{n_f} b_f^+ = 0\ ; \\ b_f(-1)^{n_g} = (-1)^{n_g} b_f \quad ; \quad b_f^+(-1)^{n_g} = (-1)^{n_g} b_f^+ \quad \text{для } g \neq f. \end{gathered} \tag{3.31}$$

Введенные операторы b_f, b_f^+ называются иногда <u>операторами Паули.</u>

Пусть $f \neq f'$. Тогда операторы Паули с индексами f и f' действуют на разные аргументы функции C и потому коммутируют между собой:

$$\begin{gathered} b_f b_{f'} - b_{f'} b_f = 0, \\ b_f^+ b_{f'}^+ - b_{f'}^+ b_f^+ = 0, \\ b_f b_{f'}^+ - b_{f'}^+ b_f = 0 \quad \text{при} \quad f \neq f'. \end{gathered} \tag{3.32}$$

Рассмотрим вакуумную волновую функцию:

$$C_{vac} = \prod_{(g)} \delta(n_g), \tag{3.33}$$

для которой все n_f имеют значения, равные нулю. Имеем, очевидно,

$$(C_{vac}, C_{vac}) = 1 .$$

Кроме того, на основании (3.26)

$$\begin{gathered} b_f \cdot C_{vac} = 0, \\ b_f^+ C_{vac} = \delta(n_f - 1) \prod_{\substack{g \\ (g\neq f)}} \delta(n_g) \ . \end{gathered} \tag{3.34}$$

Перестановочные соотношения (3.30), (3.32) для операторов Паули представляют, однако, определенные неудобства при работе с ними – они не сохраняются при <u>унитарных</u> преобразованиях вида

$$B_\lambda = \sum_{(f)} U_{\lambda f} b_f ,$$

где λ – также дискретный индекс, а матрица $U_{\lambda f}$ удовлетворяет соотношениям унитарности:

$$\begin{gathered} \sum_{(f)} U_{\lambda f} \cdot U^*_{\lambda' f} = \delta(\lambda - \lambda'), \\ \sum_{(\lambda)} U_{\lambda f} \cdot U^*_{\lambda, f'} = \delta(f - f') . \end{gathered}$$

Для преобразованных амплитуд B_λ, B_λ^+ нельзя даже утверждать, что хотя бы одно соотношение

$$B_\lambda B_\lambda^+ + B_\lambda^+ B_\lambda = 1$$

остается справедливым для произвольного преобразования только что упомянутого типа.

Имеем, действительно,

$$\begin{aligned} B_\lambda B_\lambda^+ + B_\lambda^+ B_\lambda &= \sum_{(f,f')} U_{\lambda,f} \cdot U^*_{\lambda,f'} (b_f \cdot b_{f'}^+ + b_{f'}^+ b_f) = \\ &= \sum_{(f)} U_{\lambda f} U^*_{\lambda f} (b_f b_f^+ + b_f^+ b_f) + \\ &+ \sum_{\substack{f,f' \\ (f\neq f')}} U_{\lambda,f} \cdot U^*_{\lambda,f'} (b_f \cdot b_{f'}^+ + b_{f'}^+ b_f), \end{aligned}$$

то есть

$$B_\lambda B_\lambda^+ + B_\lambda^+ B_\lambda = 1 + \sum_{\substack{f,f' \\ (f\neq f')}} U_{\lambda f} \cdot U^*_{\lambda f'} (b_f \cdot b_{f'}^+ + b_{f'}^+ b_f) .$$

Поскольку, однако, в силу (3.32) амплитуды b_f, $b_{f'}$ (при $f\neq f'$) не антикоммутируют, а коммутируют, то присутствующая здесь сумма, дополняющая единицу, не обязана исчезать, и соотношения (3.30) не обязаны всегда выполняться для преобразованных амплитуд.

Как видно, такие соотношения были бы автоматически выполнены, если бы b_f и b_f^+ антикоммутировали $(f\neq f')$. Отсюда возникает идея о целесообразности перехода от операторных амплитуд Паули к так называемым операторам Ферми, у которых в соотношениях, заменяющих (3.32), в левой части вместо знака минус стоит знак плюс.

Для такого изменения знака воспользуемся свойством (3.31), выражающим антикоммутацию $(-1)^{n_f}$ с операторными амплитудами b_f, b_f^+. Чтобы построить операторные амплитуды Ферми, домножим b_f, b_f^+ на знакопеременный множитель

$$(-1)^{\sum\limits_{g<f} n_g}. \tag{3.35}$$

Благодаря (3.31) этот множитель можем ставить и слева, и справа от b_f, b_f^+, поскольку он с ними коммутирует.

Итак, положим

$$\begin{aligned} a_f &= (-1)^{\sum\limits_{g<f} n_g} b_f = b_f (-1)^{\sum\limits_{g<f} n_g}, \\ a_f^+ &= (-1)^{\sum\limits_{g<f} n_g} b_f^+ = b_f^+ (-1)^{\sum\limits_{g<f} n_g}. \end{aligned} \tag{3.36}$$

Тогда из (3.30) следует, что

$$a_f^+ a_f = n_f \tag{3.37}$$

и

$$a_f^2 = 0\ , \quad (a_f^+)^2 = 0\ , \quad a_f a_f^+ + a_f^+ a_f = 1. \tag{3.38}$$

Ясно из определения (3.36), что про операторы a_f, a_f^+ уже нельзя говорить, что они действуют только на аргумент n_f функции C – они действуют и на все "предыдущие" аргументы n_g при $g<f$.

Чтобы рассмотреть свойства коммутации, возьмем два произвольных индекса f, f', причем положим для определенности

$$f < f', \tag{3.39}$$

тогда

$$\begin{aligned} a_f a_{f'}^+ + a_{f'}^+ a_f &= b_f (-1)^{\sum\limits_{g<f} n_g} \cdot (-1)^{\sum\limits_{g<f'} n_g} b_{f'}^+ + \\ &+ b_{f'}^+ (-1)^{\sum\limits_{g<f'} n_g} \cdot (-1)^{\sum\limits_{g<f} n_g} b_f = \\ &= b_f (-1)^{\sum\limits_{f\le g<f'} n_g} \cdot b_{f'}^+ + b_{f'}^+ (-1)^{\sum\limits_{f\le g<f'} n_g} b_f . \end{aligned} \tag{3.40}$$

Примем во внимание соотношение (3.31). Так как

$$(-1)^{\sum\limits_{f\le g<f'} n_g} = (-1)^{n_f} \cdot (-1)^{\sum\limits_{f<g<f'} n_g} \tag{3.41}$$

содержит множитель $(-1)^{n_f}$, антикоммутирующий с b_f, и множитель $(-1)^{\sum\limits_{f<g<f'} n_g}$, коммутирующий с b_f, мы видим, что

$$b_f (-1)^{\sum\limits_{f\le g<f'} n_g} = -(-1)^{\sum\limits_{f\le g<f'} n_g} b_f .$$

Далее, множитель (3.41) состоит из произведений

$$(-1)^{n_g}$$

при $f\le g<f'$

и потому коммутирует с $b_{f'}^+$. Следовательно, из (3.40), учитывая (3.32), найдем

$$a_f a_{f'}^+ + a_{f'}^+ a_f = \tag{3.42}$$
$$= (-1)^{\sum\limits_{f\le g<f'} n_g}\left(-b_f b_{f'}^+ + b_{f'}^+ b_f\right) = 0.$$

Как видно, при $f<f'$ (см. (3.39)) операторы a_f и $a_{f'}^+$ антикоммутируют. Переходя в (3.42) к сопряженным операторам, найдем

$$\{a_f a_{f'}^+ + a_{f'}^+ a_f\}^+ = a_{f'} a_f^+ + a_f^+ a_{f'} = 0.$$

Отсюда заключаем, что (3.42) справедливо не только для $f<f'$, но и для $f'<f$, то есть оно выполняется при любых $f\neq f'$. Приняв во внимание (3.38), мы можем написать для всех f, f':

$$a_f a_{f'}^+ + a_{f'}^+ a_f = \delta(f-f'). \tag{3.43}$$

Рассуждая совершенно аналогично, убеждаемся, что a_f, $a_{f'}$ между собой антикоммутируют, а также, что $a_f^+, a_{f'}^+$ антикоммутируют при $f\neq f'$. Но при $f=f'$ квадраты a_f и a_f^+ исчезают в силу (3.38). Поэтому всегда

$$\begin{gathered} a_f a_{f'} + a_{f'} a_f = 0, \\ a_f^+ a_{f'}^+ + a_{f'}^+ a_f^+ = 0. \end{gathered} \tag{3.44}$$

Полученные перестановочные соотношения называются <u>перестановочными соотношениями Ферми</u>.

Благодаря определению (3.36) можем называть операторы a_f квантовыми амплитудами уничтожения, а a_f^+ – квантовыми амплитудами рождения, поскольку a_f, a_f^+ соответственно уменьшают и увеличивают n_f на I.

Заметим далее, что на основании (3.34), (3.36)

$$a_f\cdot C_{vac} = 0$$

и

$$a_f^+ C_{vac} = b_f^+ (-1)^{\sum\limits_{g<f} n_g} C_{vac} = b_f^+ C_{vac} = \delta(n_f-1)\prod_{\substack{g\\ g\neq f}}\delta(n_g). \tag{3.45}$$

Пусть $f'<f$, тогда

$$a_{f'}^+ a_f^+ C_{vac} = b_{f'}^+ (-1)^{\sum\limits_{g<f'} n_g}\delta(n_f-1)\prod_{\substack{g\\(g\neq f)}}\delta(n_g) =$$
$$= \delta(n_f-1)\cdot\delta(n_{f'}-1)\prod_{\substack{g\\(g\neq f,f')}}\delta(n_g).$$

Продолжая увеличивать число a_f^+, действующее на C_{vac}, найдем

$$a_{g_1}^+\cdots a_{g_N}^+ C_{vac} = \delta(n_{g_1}-1)\cdots\delta(n_{g_N}-1)\prod_{\substack{g\\(g\neq g_1,\dots g_N)}}\delta(n_g), \tag{3.46}$$

если $\quad g_1 < g_2 < \dots < g_N$.

С помощью тождества (3.46) нетрудно выразить волновую функцию $C(\cdots n_f\cdots)$ в случае статистики Ферми с помощью такой же суммы (3.22), как и для случая статистики Бозе.

Рассмотрим, в самом деле, сумму

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{(f_1,\dots f_N)} F(f_1,\dots f_N)\, a_{f_1}^+\cdots a_{f_N}^+ C_{vac} \tag{3.47}$$

и заметим, что ее можно представить в форме

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\substack{(\dots n_f'\dots)\\ (\sum_f n_f'=N)}}\ \sum_{\substack{(f_1,\dots f_N)\\ (f_1,\dots f_N)\backsim(\dots n_f'\dots)}} F(f_1,\dots f_N)\, a_{f_1}^+\cdots a_{f_N}^+ C_{vac}. \tag{3.48}$$

Напомним здесь, что система $(f_1,\dots f_N)$, соответствующая данной допустимой системе чисел заполнения $(\dots n_f'\dots)$, определена с точностью до $N!$ перестановок между $f_1, f_2, \dots f_N$.

Сумма

$$\sum_{\substack{f_1,\dots f_N\\ \{(f_1,\dots f_N)\backsim(\dots n_f'\dots)\}}} F(f_1,\dots f_N)\, a_{f_1}^+\cdots a_{f_N}^+ C_{vac}, \tag{3.49}$$

входящая в выражение (3.48), содержит, следовательно, $N!$ членов, причем все они оказываются равными, поскольку произведение

$$F(f_1, \dots f_N)\, a^+_{f_1} \cdots a^+_{f_N}\, C_{vac}$$

двух антисимметричных функций $f_1, \dots f_N$:

$$F(f_1, \dots f_N)\ ; \quad \overset{+}{a}_{f_1} \cdots \overset{+}{a}_{f_N}\, C_{vac}$$

является инвариантным по отношению ко всем перестановкам между $(f_1, \dots f_N)$.

Возьмем среди учитываемых в сумме (3.49) систем "упорядоченную последовательность" :

$$(g_1 < g_2 < \dots < g_n) \longleftrightarrow (\dots n'_g \dots). \qquad (3.50)$$

Тогда выражение (3.49) будет равно

$$N!\, F(g_1, \dots g_N)\, \overset{+}{a}_{g_1} \cdots \overset{+}{a}_{g_N}\, C_{vac}\ ,$$

и потому убеждаемся, что рассматриваемая сумма (3.47) может быть представлена в форме

$$\sqrt{N!} \sum_{\substack{(\dots n'_g \dots) \\ \sum_f n'_f = N}} F(g_1, \dots g_N)\, \overset{+}{a}_{g_1} \cdots \overset{+}{a}_{g_N} \cdot C_{vac}\ .$$

Но ввиду (3.50)

$$n'_g = 0, \text{ если } g \neq g_1, \dots g_N\ ,$$

$$n'_g = 1, \quad \text{если } g = g_j\ ; (j = 1, \dots N).$$

Так что благодаря (3.46) можем написать

$$\overset{+}{a}_{g_1} \dots \overset{+}{a}_{g_N}\, C_{vac} = \prod_{(g)} \delta(n_g - n'_g).$$

С другой стороны, учитывая (3.50), имеем, по определению (2.35А),

$$\sqrt{N!}\, F(g_1, \dots g_N) = C(\dots n'_g \dots)\ .$$

Видим, следовательно, что выражение (3.47) будет равно

$$\sum_{\substack{(\dots n'_f \dots) \\ \sum_f n'_f = N}} C(\dots n'_f \dots) \Big\{ \prod_{(g)} \delta(n_g - n'_g) \Big\}.$$

Ясно отсюда, что это выражение равно нулю, если

$$\sum_{(f)} n_f \neq N,$$

и равно

$$C(\dots n_f \dots)$$

в случае, когда

$$\sum_{(f)} n_f = N.$$

Итак, для рассматриваемой системы фермионов, так же как и для ранее рассматривавшейся системы бозонов, волновая функция в представлении чисел заполнения выражается формально идентичным образом с помощью амплитуд рождения:

$$C = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{(f_1, \dots f_N)} F(f_1, \dots f_N)\, a^+_{f_1} \cdots a^+_{f_N}\, C_{vac}\ . \qquad (3.51)$$

Отличие состоит в том, что в случае бозонов (см. (3.22)) здесь $F(f_1, \dots f_N)$ – симметричная функция $f_1, \dots f_N$, a^+_f – бозе-амплитуды; числа заполнения могут принимать любые значения натурального ряда: $n_f = 0, 1, 2, \dots$. В случае же фермионов $F(f_1, \dots f_N)$ – – антисимметричная функция $f_1, \dots f_N$, a^+_f – ферми-амплитуды, числа заполнения могут принимать лишь значения 0 или 1. В обоих случаях вакуумная волновая функция C_{vac} характеризуется равенствами

$$a_f \cdot C_{vac} = 0\ , \qquad (3.52)$$

справедливыми для всех f.

Будем теперь рассматривать форму (3.22), (3.51) сразу для обоих случаев Бозе и Ферми. Подставим в нее выражение для $F(f_1, \dots f_N)$ через волновую функцию в x-представлении, данное формулой (2.11). Получим

$$C=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{(f_1,\dots f_N)}\int\varphi(x_1,\dots x_N)\overset{*}{\psi}_{f_1}(x_1)\dots\overset{*}{\psi}_{f_N}(x_N)dx_1\dots dx_N\,\overset{+}{a}_{f_1}\cdots\overset{+}{a}_{f_N}\cdot C_{vac}\qquad(3.53)$$

Введем операторные функции:

$$\psi(x)=\sum_{(f)}a_f\psi_f(x)\quad,\quad\overset{+}{\psi}(x)=\sum_{(f)}\overset{+}{a}_f\overset{*}{\psi}_f(x).\qquad(3.54)$$

Тогда выражение (3.53) будет приведено к виду так называемого <u>фоковского представления:</u>

$$C=\frac{1}{\sqrt{N!}}\int\varphi(x_1,\dots x_N)\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)dx_1\dots dx_N\cdot C_{vac}\,,\qquad(3.55)$$

при этом на основании (3.52) имеем для всех x

$$\psi(x)\cdot C_{vac}=0$$

и, кроме того, (3.56)

$$(C_{vac}\,,\ C_{vac})=1\,.$$

Рассмотрим теперь перестановочные соотношения между введенными операторными функциями (3.54). Чтобы не повторять вычислений отдельно для случаев Бозе и Ферми, введем символ

$$[A,B]_{\mp}\ ,$$

в котором A , B – некоторые операторы. Этот символ определяем как коммутатор

$$[A,B]_-=AB-BA$$

для случая статистики Бозе и как антикоммутатор

$$[A,B]_+=AB+BA$$

для случая статистики Ферми. Как видно, для операторных амплитуд выполняются перестановочные соотношения:

$$[a_f,\overset{+}{a}_{f'}]_{\mp}=\delta(f-f'),\quad[a_f,a_{f'}]_{\mp}=0,\quad[\overset{+}{a}_f,\overset{+}{a}_{f'}]_{\mp}=0.\qquad(3.57)$$

Имеем поэтому

$$[\psi(x),\overset{+}{\psi}(x')]_{\mp}=[\sum_f a_f\psi_f(x);\sum_{f'}\overset{+}{a}_{f'}\overset{*}{\psi}_{f'}(x')]_{\mp}=$$

$$=\sum_{(f,f')}\psi_f(x)\overset{*}{\psi}_{f'}(x')[a_f,\overset{+}{a}_{f'}]_{\mp}=$$

$$=\sum_{(f)}\psi_f(x)\overset{*}{\psi}_f(x').$$

Откуда благодаря (2.9)

$$[\psi(x),\overset{+}{\psi}(x')]_{\mp}=\delta(x-x')\,.\qquad(3.58)$$

Далее,

$$[\psi(x),\psi(x')]_{\mp}=[\sum_{(f)}a_f\psi_f(x);\sum_{(f')}a_{f'}\psi_{f'}(x')]_{\mp}=$$

$$=\sum_{(f,f')}\psi_f(x)\psi_{f'}(x')\,[a_f,a_{f'}]_{\mp}=0\qquad(3.59)$$

и, совершенно аналогично,

$$[\overset{+}{\psi}(x),\overset{+}{\psi}(x')]_{\mp}=0.\qquad(3.60)$$

Итак, рассматриваемые операторные функции $\psi(x)$, $\overset{+}{\psi}(x)$ удовлетворяют перестановочным соотношениям (3.58), (3.59), (3.60) соответственно в случае Бозе (–) и в случае Ферми (+).

Заметим, между прочим, что если бы a_f , a_f^+ были не операторами, а обычными C–числами, то $\psi(x)$, $\overset{*}{\psi}(x)$, заданные суммами (3.54), можно было бы рассматривать как обычные сопряженные волновые функции одной частицы.

Но чтобы вообще ввести волновые функции для частицы, следует перейти от классической механики к квантовой механике – совершить, так сказать, одно квантование. Таким образом, когда мы переходим от обычных волновых функций к операторным функциям $\psi(x)$, $\psi^+(x)$ с перестановочными соотношениями (3.58), (3.59), (3.60), мы как бы совершаем еще одно, "вторичное" квантование. Поэтому метод, основанный на введении вместо волновых функций $\varphi(x_1,\dots x_N)$ волновых функций C, и называется методом <u>вторичного квантования</u>. Волновая функция C называется тогда <u>волновой функцией в представлении вторичного квантования</u>.

В теории квантованных полей, когда классические полевые (волновые) функции заменяются операторными функциями с соответствующими перестановочными соотношениями, волновые функции C, чтобы не спутать их с операторными волновыми функциями, называются обычно амплитудами состояния или векторами состояния (state vector).

В заключение скажем несколько слов относительно представления C как функций от чисел заполнения n_f – собственных значений операторов $a_f^+ a_f$:

$$C = C(\dots n_f \dots). \tag{3.61}$$

Рассмотрим оператор

$$\mathcal{N} = \int \psi^+(x)\psi(x)dx = \sum_{(f)} a_f^+ a_f , \tag{3.62}$$

для которого

$$\mathcal{N}C = \sum_{(f)} n_f C .$$

Поэтому на основании (2.27), (2.35) будем иметь

$$(\mathcal{N} - N)C = 0 . \tag{3.63}$$

Таким образом, рассматриваемые N-частичные волновые функции в представлении вторичного квантования будут собственными функциями оператора $\mathcal{N}$, соответствующими его собственному значению,

равному N. Этот оператор $\mathcal{N}$ представляет, следовательно, число частиц в системе.

Конкретное представление (3.61) зависит, очевидно, от выбора полной ортонормированной системы $\psi_f(x)$. Такая зависимость, однако, исчезает в особом случае, когда для всех x

$$\psi(x) C_0 = 0. \tag{3.64}$$

Тогда на основании (3.62)

$$\mathcal{N} C_0 = 0, \tag{3.64a}$$

и мы видим, что C_0 соответствует вакуумному состоянию – состоянию, в котором нет частиц.

Из (3.62) следует, что для любой ортонормированной полной системы $\psi_f(x)$ для всех f будет

$$n_f C_0 = 0 .$$

Поэтому

$$C_0 = \mathcal{K} \cdot C_{vac} , \quad \mathcal{K} = const , \tag{3.65}$$

где

$$C_{vac} = \prod_{(f)} \delta(n_f) ; \qquad (C_{vac}, C_{vac}) = 1 \tag{3.66}$$

и где $\mathcal{K}$ – нормировочный множитель, который можно вынести за знак скалярного произведения:

$$(C, C_0) = \sum_{(\dots n_f \dots)} C^*(\dots n_f \dots) C_0(\dots n_f \dots) = \mathcal{K}(C, C_{vac}).$$

Взяв $C = C_{vac}$, получим

$$\mathcal{K} = (C_{vac}, C_0) . \tag{3.67}$$

Итак, C_0 определено соотношением (3.64) с точностью до нормировочного множителя (3.67). Как видно, понятие вакуумного состояния представляет специфическое понятие метода вторичного квантования, играющее в нем важную роль – через такое "пустое" состояние, как C_{vac}, выражаются с помощью формул (3.51) или (3.55) <u>реальные</u> N-частичные состояния.

§4. Представление вторичного квантования для динамических операторов. Уравнения движения для временной эволюции операторной функции

Рассуждения §2 и §3 показали, что можно ввести волновые функции C в представлении вторичного квантования, положив

$$C=\frac{1}{\sqrt{N!}}\cdot\int\varphi(x_1,\dots x_N)\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)dx_1\dots dx_N\cdot C_{vac}. \tag{4.I}$$

Вакуумное состояние C_{vac} здесь нормировано:

$$(C_{vac},C_{vac})=1 \tag{4.2}$$

и характеризуется соотношением

$$\psi(x)\cdot C_{vac}=0, \tag{4.3}$$

справедливым для всех x. Такое представление (4.I) имеет место и для случая Бозе, и для случая Ферми.

В случае Бозе $\varphi(x_1,\dots x_N)$ есть симметричная функция $x_1,x_2\dots x_N$, а операторные функции $\psi(x)$, $\psi^+(x)$ удовлетворяют перестановочным соотношениям Бозе:

$$\begin{gathered}\psi(x)\cdot\overset{+}{\psi}(x')-\overset{+}{\psi}(x')\psi(x)=\delta(x-x'),\\ \psi(x)\cdot\psi(x')-\psi(x')\psi(x)=0,\\ \overset{+}{\psi}(x)\overset{+}{\psi}(x')-\overset{+}{\psi}(x')\overset{+}{\psi}(x)=0.\end{gathered} \tag{4.4}$$

В случае же ферми-статистики $\varphi(x_1,\dots x_N)$ является антисимметричной функцией $x_1,\dots x_N$, а операторные функции $\psi(x)$, $\psi^+(x)$ удовлетворяют перестановочным соотношениям Ферми:

$$\begin{gathered}\psi(x)\overset{+}{\psi}(x')+\overset{+}{\psi}(x')\psi(x)=\delta(x-x'),\\ \psi(x)\psi(x')+\psi(x')\psi(x)=0,\\ \overset{+}{\psi}(x)\overset{+}{\psi}(x')+\overset{+}{\psi}(x')\overset{+}{\psi}(x)=0.\end{gathered} \tag{4.5}$$

Займемся преобразованием динамических величин, рассматривавшихся в §I, и, в частности, преобразованием гамильтониана нашей динамической системы H к представлению вторичного квантования.

При этом нами будет использовано лишь представление (4.I), свойства (4.2), (4.3) вакуумной функции, свойства симметрии обычной волновой функции $\varphi(x_1,\dots x_N)$ и перестановочные соотношения для операторных функций в форме (4.4) для случая статистики Бозе или в форме (4.5) для случая статистики Ферми.

Подчеркнем здесь, что мы вообще можем забыть все сказанное в §2 и §3 и рассматривать равенство (4.I) при только что перечисленных свойствах просто как определение волновой функции в представлении вторичного квантования.

Чтобы преобразовать динамические величины к представлению вторичного квантования, не прибегая при этом к громоздким преобразованиям, докажем следующую лемму:

ЛЕММА. Рассмотрим два случая:

А. Бозе-случай. Операторные функции $\psi(x)$, $\overset{+}{\psi}(x)$ удовлетворяют перестановочным соотношениям Бозе, обычная функция $\varphi(x_1,\dots x_N)$ является симметричной.

Б. Ферми-случай. Операторные функции $\psi(x)$, $\overset{+}{\psi}(x)$ удовлетворяют перестановочным соотношениям Ферми, обычная функция $\varphi(x_1,\dots x_N)$ является антисимметричной. Тогда в обоих случаях имеет место тождество

$$\begin{gathered}\int\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,\varphi(x_1,\dots x_N)dx_1\dots dx_N=\\ =N\cdot\int\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,\delta(x'-x_1)\cdot\varphi(x_1,\dots x_N)dx_1\dots dx_N.\end{gathered} \tag{4.6}$$

Доказательство

Чтобы единообразно провести доказательство этой леммы для обоих случаев (А) и (Б), введем число $\epsilon=\pm1$, положив

$$\begin{aligned}\epsilon&=1\quad(А),\\ \epsilon&=-1\quad(Б).\end{aligned} \tag{4.7}$$

Тогда

$$\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_j) = \delta(x'-x_j) + \epsilon\,\overset{+}{\psi}(x_j)\psi(x'),$$
$$\overset{+}{\psi}(x_{j_1})\overset{+}{\psi}(x_{j_2}) = \epsilon\,\overset{+}{\psi}(x_{j_2})\overset{+}{\psi}(x_{j_1}). \qquad (4.8)$$

Далее, обозначая через T_{j_1,j_2} транспозицию

$$x_{j_1}\to x_{j_2},\qquad x_{j_2}\to x_{j_1},\qquad j_1\neq j_2,$$

будем иметь также в обоих рассматриваемых случаях

$$T_{j_1,j_2}\varphi = \epsilon\varphi. \qquad (4.9)$$

Рассмотрим теперь выражение

$$\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac}$$

и будем передвигать $\psi(x')$ вправо, пользуясь перестановочными соотношениями (4.8). Найдем последовательно

$$\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} = \delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} +$$
$$+\epsilon\,\overset{+}{\psi}(x_1)\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} = \delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} +$$
$$+\epsilon\,\delta(x'-x_2)\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_3)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} +$$
$$+\epsilon^2\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_3)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac} = \dots$$

Учитывая, что, по свойству (4.3),

$$\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\psi(x')\,C_{vac} = 0,$$

в итоге будем иметь

$$\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} = \delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} +$$
$$+\sum_{2\le j\le N}\epsilon^{j-1}\delta(x'-x_j)\left\{\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\right\}^{(j)}\cdot C_{vac}, \qquad (4.10)$$

где

$$\left\{\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\right\}^{(j)} \qquad (4.11)$$

получается из "полного" произведения:

$$\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)$$

в результате вычеркивания из него $\overset{+}{\psi}(x_j)$. Если мы поместим в (4.11) $\overset{+}{\psi}(x_1)$ на вакантное место, которое занимал $\overset{+}{\psi}(x_j)$, то получим выражение, в которое переходит произведение $\overset{+}{\psi}(x_2)\overset{+}{\psi}(x_3)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)$ после замены x_j на x_1. Но чтобы поставить в (4.11) $\overset{+}{\psi}(x_1)$ на указанное место, необходимо провести этот оператор через произведение $(j-2)$ операторов $\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_{j-1})$, ввиду чего появится множитель $\epsilon^{(j-2)}$.

Таким образом,

$$\left\{\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\right\}^{(j)} = \epsilon^{j-2}\left\{\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\right\}_{x_j\to x_1}.$$

Подставим найденный результат в (4.10) и заметим, что

$$\epsilon^{j-1}\cdot\epsilon^{j-2} = \epsilon^{2j-4}\cdot\epsilon = \epsilon.$$

Получим

$$\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} = \delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac} +$$
$$+\sum_{2\le j\le N}\epsilon\,T_{1,j}\,\delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac}.$$

Помножим обе части данного тождества на $\varphi(x_1,\dots x_N)$ и проинтегрируем по $x_1,\dots x_N$. Найдем

$$\int\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,\varphi(x_1,\dots x_N)\,dx_1\dots dx_N =$$
$$=\int\delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,\varphi(x_1,\dots x_N)\,dx_1\dots dx_N + \qquad (4.12)$$
$$+\sum_{2\le j\le N}\epsilon\cdot\int\left\{T_{1,j}\,\delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\right\}\varphi(x_1,\dots x_N)\,dx_1\dots dx_N.$$

Рассмотрим член суммы $\sum\limits_{2\le j\le N}$:

$$\epsilon\int\{T_{1,j}\,\delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N \qquad (4.13)$$

и совершим в этом интеграле замену переменных:

$$x_1\to x_j \quad ; \quad x_j\to x_1 .$$

Видим тогда, что выражение (4.13) будет равно

$$\epsilon\int\{T^2_{1,j}\,\delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\}\,T_{1,j}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N .$$

Но

$$T^2_{1,j}=1 \quad ; \quad T_{1,j}\varphi=\epsilon\varphi \quad ; \qquad \epsilon^2=1 .$$

Таким образом, (4.13) равно

$$\int\delta(x'-x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N ,$$

и мы убеждаемся, что все $(N-1)$ члены суммы $\sum\limits_{2\le j\le N}$, входящей в (4.12), равны первому члену правой части этого тождества.

Итак,

$$\int\psi(x')\overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N =$$

$$= N\cdot\int\overset{+}{\psi}(x_2)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\delta(x'-x_1)\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N ,$$

и наша лемма доказана.

СЛЕДСТВИЯ ЛЕММЫ

I. Рассмотрим выражение

$$\int\psi(x'_2)\psi(x'_1)\overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N \qquad (4.14)$$

при условиях леммы. Применяя эту лемму, видим, что выражение (4.14) равно

$$N\cdot\int\psi(x'_2)\overset{+}{\psi}(x_2)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\delta(x'_1-x_1)\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N . \qquad (4.15)$$

Воспользуемся еще раз нашей леммой для выражения (4.15), содержащего $(N-1)$ операторных функций ψ^{+}. Убедимся тогда, что

$$\int\psi(x'_2)\psi(x'_1)\overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N =$$

$$= N(N-1)\int\overset{+}{\psi}(x_3)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\delta(x'_1-x_1)\,\delta(x'_2-x_2)\cdot\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N . \qquad (4.16)$$

II. Последовательным S-кратным применением леммы придем к следующему тождеству:

$$\int\psi(x'_s)\ldots\psi(x'_1)\overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N =$$

$$= N(N-1)\cdots(N-S+1)\int\overset{+}{\psi}(x_{S+1})\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\longrightarrow \qquad (4.17)$$

$$\longrightarrow\delta(x'_1-x_1)\ldots\delta(x'_s-x_s)\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N$$

для $\qquad S<N$.

III. Применив рассматриваемую лемму N раз, найдем

$$\int\psi(x'_N)\ldots\psi(x'_1)\overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N =$$

$$= N!\int\delta(x'_1-x_1)\ldots\delta(x'_N-x_N)\,C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N .$$

Взяв скалярное произведение от обеих частей этого равенства с вакуумной функцией C_{vac} , получим, учтя нормировку (4.2) для C_{vac},

$$\int\left(C_{vac}, \psi(x_N')\dots\psi(x_1')\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\right)\varphi(x_1,\dots x_N)dx_1\dots dx_N =$$

$$= N!\int\delta(x_1'-x_1)\dots\delta(x_N'-x_N)\varphi(x_1,\dots x_N)dx_1\dots dx_N = \qquad (4.I8)$$

$$= N!\cdot\varphi(x_1',\dots x_N').$$

Поскольку, по определению скалярного произведения ,всегда

$$(C, ABC) = (A^+C, BC),$$

где A , B – некоторые операторы, действующие на волновые функции C , тождество (4.I8) можно также представить в форме

$$\int\left(\overset{+}{\psi}(x_1')\dots\overset{+}{\psi}(x_N')C_{vac}, \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\right)\varphi(x_1,\dots x_N)dx_1\dots dx_N =$$

(4.I9)

$$= N!\int\delta(x_1'-x_1)\dots\delta(x_N'-x_N)\varphi(x_1,\dots x_N)dx_1\dots dx_N.$$

Применим теперь полученные тождества. Начнем с использования тождества (4.I8) для обращения представления (4.I). Рассмотрим выражение

$$(C_{vac}, \psi(x_N')\dots\psi(x_1')C)$$

и подставим в него представление (4.I). Получим

$$(C_{vac}, \psi(x_N')\dots\psi(x_1')C) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\int\left(C_{vac},\psi(x_N')\dots\psi(x_1')\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\right)\varphi(x_1,\dots x_N)dx_1\dots dx_N.$$

Откуда на основании (4.I8) видим, что это выражение равно

$$\sqrt{N!}\cdot\varphi(x_1',\dots x_N').$$

Таким образом, получим формулу обращения представления (4.I):

$$\varphi(x_1,\dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\left(C_{vac},\psi(x_N)\dots\psi(x_1)\cdot C\right). \qquad (4.20)$$

Обозначим для краткости правые части (4.I), (4.20) соответственно через

$$C\{\varphi\}\ ,\qquad \varphi\{C\}.$$

Видим, что имеется взаимно однозначное соответствие между рассматриваемыми обычными функциями φ и соответствующими волновыми функциями C в представлении вторичного квантования :

$$\varphi \longleftrightarrow C.$$

Именно, $C(\varphi)$ соответствует φ , а $\varphi(C)$ соответствует C .

Установим теперь,что скалярное произведение сохраняется при переходе к вторичному квантованию. Возьмем две обычные волновые функции φ , φ_1 и соответствующие им функции C , C_1:

$$\varphi\to C = C(\varphi),$$

$$\varphi_1\to C_1 = C(\varphi_1).$$

Тогда на основании (4.I) найдем

$$(C_1, C) = \frac{1}{N!}\int\varphi_1^*(x_1',\dots x_N')\varphi(x_1,\dots x_N)\left(\overset{+}{\psi}(x_1')\dots\overset{+}{\psi}(x_N')C_{vac}, \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\right.\to$$

$$\to\left.\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\right)dx_1'\dots dx_N'\cdot dx_1\dots dx_N,$$

и потому, воспользовавшись тождеством (4.I9), получим

$$(C_1, C) =$$

$$=\int\varphi_1^*(x_1',\dots x_N')\varphi(x_1,\dots x_N)\delta(x_1'-x_1)\dots\delta(x_N'-x_N)dx_1'\dots dx_N' dx_1\dots dx_N =$$

$$=\int\varphi_1^*(x_1',\dots x_N')\varphi(x_1,\dots x_N)dx_1\dots dx_N,$$

т.е.

$$(C_1, C) = (\varphi_1, \varphi) \qquad \text{для} \qquad \begin{matrix}\varphi\longleftrightarrow C,\\ \varphi_1\longleftrightarrow C_1.\end{matrix} \qquad (4.2I)$$

Перейдем к преобразованию динамических величин к представлению вторичного квантования. Пусть $\mathcal{D}$ будет некоторой динамической величиной, которая в обычном представлении выражается суммой операторов типа $\mathfrak{A}$, $\mathfrak{B}$, ... $\mathfrak{C}^{(s)}$, рассматривавшихся в §1. В представлении вторичного квантования эта величина должна изображаться таким оператором $\tilde{\mathfrak{D}}$, действующим на волновые функции C, у которого все соответствующие матричные элементы $\mathfrak{D}$ и $\tilde{\mathfrak{D}}$ были бы равны:

$$(\varphi_1, \mathfrak{D}\varphi) = (C_1, \tilde{\mathfrak{D}} C) \quad \text{для} \quad \begin{array}{l} \varphi_1 \longleftrightarrow C_1, \\ \varphi \longleftrightarrow C. \end{array} \tag{4.22}$$

Ясно, что нам достаточно найти отдельные выражения для $\tilde{\mathfrak{A}}$, $\tilde{\mathfrak{B}}$, ..., $\tilde{\mathfrak{C}}^{(s)}$..., так как, по определению (4.22), сумма типа

$$\mathfrak{A} + \mathfrak{B} + \cdots \mathfrak{C}^{(s)} + \cdots$$

в представлении вторичного квантования будет следующей:

$$\tilde{\mathfrak{A}} + \tilde{\mathfrak{B}} + \cdots \tilde{\mathfrak{C}}^{(s)} + \cdots.$$

Чтобы фактически построить изучаемое представление для

$$\mathfrak{D} = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \ldots \mathfrak{C}^{(s)},$$

поступим следующим образом: для произвольной рассматриваемой функции φ возьмем соответствующее

$$C = C(\varphi).$$

Возьмем также C -функцию, соответствующую $\mathfrak{D}\varphi$:

$$C' = C(\mathfrak{D}\varphi).$$

и подберем оператор $\tilde{\mathfrak{D}}$ так, чтобы он переводил C в C':

$$C' = \tilde{\mathfrak{D}} C.$$

Мы увидим тогда, что

$$\begin{array}{l} \varphi \longleftrightarrow C, \\ \mathfrak{D}\varphi \longleftrightarrow \tilde{\mathfrak{D}} C. \end{array} \tag{4.23}$$

Возьмем еще некоторую волновую функцию φ_1 и соответствующее ей C_1:

$$\varphi_1 \longleftrightarrow C_1. \tag{4.24}$$

Из (4.23), (4.24) на основании свойства сохранения скалярного произведения (4.21) и будет вытекать требуемое равенство (4.22) матричных элементов операторов $\mathfrak{D}$ и $\tilde{\mathfrak{D}}$.

Итак, перейдем к фактическому построению динамических величин в представлении вторичного квантования.

Начнем с рассмотрения аддитивной динамической величины, характеризуемой оператором типа

$$\mathfrak{A} = \sum_{1 \le j \le N} A_j, \tag{4.25}$$

упоминавшимся в §1. Имеем

$$C' = C(\mathfrak{A}\varphi) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \overset{+}{\psi}(x_1) \ldots \overset{+}{\psi}(x_N) C_{vac} \left(\mathfrak{A}\varphi\right)_{x_1,\ldots x_N} dx_1 \ldots dx_N. \tag{4.26}$$

Заметим, что в случае системы бозонов выражения

$$\overset{+}{\psi}(x_1) \ldots \overset{+}{\psi}(x_N) C_{vac}, \qquad \varphi(x_1, \ldots x_N) \tag{4.27}$$

симметричны по отношению к $x_1, \ldots x_N$. В случае системы фермионов выражения (4.27) являются антисимметричными функциями $x_1, \ldots x_N$. Поэтому в обоих рассматриваемых случаях можем применить к интегралу, стоящему в правой части (4.26), тождество (1.34), установленное в §1.

Тогда получим

$$C' = \frac{N}{\sqrt{N!}} \int \overset{+}{\psi}(x_1) \ldots \overset{+}{\psi}(x_N) C_{vac} A(x_1, x_1') \varphi(x_1', x_2, \ldots x_N) dx_1' dx_1 \ldots dx_N.$$

Заменим переменные в этом интеграле: x_1 на x, а x_1' на x', тогда имеем

$$C' = \frac{N}{\sqrt{N!}} \int \overset{+}{\psi}(x) A(x, x') \overset{+}{\psi}(x_2) \ldots \overset{+}{\psi}(x_N) C_{vac} \varphi(x', x_2, \ldots x_N) \otimes\!\!\rightarrow \tag{4.28}$$

$$\otimes\!\!\rightarrow dx\, dx'\, dx_2 \ldots dx_N.$$

Обратимся к тождеству (4.6) и заметим, что его можно записать в виде

$$N\int \overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\,\varphi(x',x_2,\dots x_N)\,dx_2\dots dx_N =$$

$$= \int \psi(x')\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac}\,\varphi(x_1,x_2,\dots x_N)\,dx_1\dots dx_N.$$

Подставив это тождество в правую часть (4.28), убеждаемся, что

$$C' = \frac{1}{\sqrt{N!}}\int \overset{+}{\psi}(x)A(x,x')\psi(x')\,dx\,dx'\int \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\,C_{vac}\otimes\!\rightarrow$$

$$\otimes\!\rightarrow \varphi(x_1,\dots x_N)\,dx_1\dots dx_N = \int \overset{+}{\psi}(x)\cdot A(x,x')\psi(x')\,dx\,dx'\cdot C.$$

Отсюда видим, что в представлении вторичного квантования рассматриваемая аддитивная динамическая величина изображается оператором

$$\widetilde{\mathfrak{A}} = \int \overset{+}{\psi}(x)A(x,x')\psi(x')\,dx\,dx'. \tag{4.29}$$

Так как $\mathfrak{A}$ из (4.25) и $\widetilde{\mathfrak{A}}$ из (4.29) представляют одну и ту же динамическую величину, а сами формы (4.25), (4.29) ясно указывают, на волновые функции какого рода (обычные или функции вторичного квантования) действуют эти операторы, мы не будем далее ставить знак $\sim$ для обозначения того, что мы имеем дело с представлением вторичного квантования.

Заметим еще, что (4.29) может быть также записано в виде

$$\mathfrak{A} = \int \overset{+}{\psi}(x)\left\{\int A(x,x')\psi(x')\,dx'\right\}dx =$$
$$= \int \overset{+}{\psi}(x)\,(A\psi)_x\,dx. \tag{4.30}$$

Возьмем в качестве примера пространственную плотность числа частиц. В обычном координатном представлении такая плотность в точке q будет

$$\rho(q) = \sum_{1\le j\le N}\delta(q-q_j). \tag{4.31}$$

Этот оператор диагонален в координатном представлении и не действует на индексы ν_j. Возьмем формулу (4.30) и, чтобы не спутать данной фиксированной точки q с пространственной частью переменной интеграции x, обозначим эту последнюю через q_1:

$$x = (q_1,\nu).$$

Тогда в случае (4.31)

$$(A\psi)_{q_1,\nu} = \delta(q-q_1)\psi(q_1,\nu),$$

и потому благодаря (4.30) в представлении вторичного квантования будем иметь

$$\rho(q) = \sum_{(\nu)}\int \overset{+}{\psi}(q_1,\nu)\,\delta(q-q_1)\,\psi(q_1,\nu)\,dq_1 =$$
$$= \sum_{(\nu)}\overset{+}{\psi}(q,\nu)\,\psi(q,\nu). \tag{4.32}$$

Проинтегрировав плотность числа частиц по всему рассматриваемому пространству точек q, получим оператор, представляющий полное число частиц:

$$\mathcal{N} = \sum_{(\nu)}\int \overset{+}{\psi}(q,\nu)\cdot\psi(q,\nu)\,dq,$$

или более кратко:

$$\mathcal{N} = \int \overset{+}{\psi}(x)\cdot\psi(x)\,dx. \tag{4.33}$$

Очевидно, для рассматриваемых N-частичных функций C из (4.I)

$$(\mathcal{N}-N)C = 0, \tag{4.34}$$

то есть для них оператор $\mathcal{N}$ принимает значение, равное N.

Рассмотрим выражение

$$\psi(x_1)\mathcal{N} = \int \psi(x_1)\overset{+}{\psi}(x)\psi(x)\,dx = \int \delta(x_1-x)\psi(x)\,dx +$$
$$+ \epsilon\int \overset{+}{\psi}(x)\psi(x_1)\psi(x)\,dx = \psi(x_1) + \epsilon^2\int \overset{+}{\psi}(x)\psi(x)\,dx\,\psi(x_1),$$

где $\epsilon = +1$ (Бозе),

$\epsilon = -1$ (Ферми).

Имеем

$$\psi(x_1)(\mathcal{N}-1) = \mathcal{N}\psi(x_1);\ \text{т.е.}\ \psi(x_1)\mathcal{N} = (\mathcal{N}+1)\psi(x_1). \qquad (4.35)$$

Взяв здесь сопряжение и учитывая самосопряженность $\mathcal{N}$, найдем также

$$(\mathcal{N}-1)\overset{+}{\psi}(x_1) = \overset{+}{\psi}(x_1)\mathcal{N}. \qquad (4.36)$$

Пусть теперь C будет собственной функцией оператора $\mathcal{N}$ для собственного числа N. Иначе говоря, пусть имеет место равенство (4.34):

$$\mathcal{N}C = NC.$$

Помножим обе части этого равенства соответственно на $\psi(x_1)$ и $\overset{+}{\psi}(x_1)$:

$$\psi(x_1)\mathcal{N}C = N\psi(x_1)C,$$

$$\overset{+}{\psi}(x_1)\mathcal{N}C = N\overset{+}{\psi}(x_1)C$$

и воспользуемся соотношениями (4.35), (4.36). Получим

$$\mathcal{N}\psi(x_1)C = (N-1)\psi(x_1)C,$$

$$\mathcal{N}\overset{+}{\psi}(x_1)C = (N+1)\overset{+}{\psi}(x_1)C. \qquad (4.37)$$

Видим, таким образом, что оператор ψ уменьшает число частиц на I, а $\overset{+}{\psi}$ увеличивает это число на I. Можем поэтому называть операторные функции $\overset{+}{\psi}$, ψ соответственно операторными функциями рождения и уничтожения частиц.

Перейдем к рассмотрению динамических величин бинарного типа:

$$\mathfrak{B} = \sum_{1\le j_1<j_2\le N} B_{j_1 j_2} \qquad (4.38)$$

и воспользуемся схемой рассуждения, изложенной выше для аддитивных величин. Имеем

$$C' = C(\mathfrak{B}\varphi) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,(\mathfrak{B}\varphi)_{x_1,\ldots x_N}\,dx_1\ldots dx_N.$$

Принимая во внимание, что выражения (4.27) или оба симметричны (случай Бозе), или оба антисимметричны (случай Ферми) по отношению к $x_1,\ldots x_N$, мы можем здесь воспользоваться тождеством (I.35) и написать:

$$C' = \frac{N(N-1)}{2}\frac{1}{\sqrt{N!}}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,B(x_1,x_2;x_2',x_1')\otimes\!\rightarrow$$

$$\otimes\!\rightarrow \varphi(x_1',x_2',x_3,\ldots x_N)\,dx_1'\,dx_2'\,dx_1\,dx_2\ldots dx_N. \qquad (4.39)$$

Сделаем замену переменных $x_1\to\bar{x}_1$, $x_2\to\bar{x}_2$. В новых обозначениях имеем

$$C' = \frac{1}{2\sqrt{N!}}N(N-1)\int \overset{+}{\psi}(\bar{x}_1)\overset{+}{\psi}(\bar{x}_2)B(\bar{x}_1,\bar{x}_2;x_2',x_1')\overset{+}{\psi}(x_3)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\otimes\!\rightarrow$$

$$\otimes\!\rightarrow C_{vac}\,\varphi(x_1',x_2',x_3,\ldots x_N)\,d\bar{x}_1\,d\bar{x}_2\,dx_1'\,dx_2'\,dx_3\ldots dx_N. \qquad (4.40)$$

Воспользуемся теперь тождеством (4.16), которое перепишем в виде

$$N(N-1)\cdot\int \overset{+}{\psi}(x_3)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,\varphi(x_1',x_2',x_3,\ldots x_N)\,dx_3\ldots dx_N =$$

$$= \int \psi(x_2')\psi(x_1')\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N.$$

На этом основании из (4.40) получаем

$$C' = \frac{1}{2\sqrt{N!}}\int \overset{+}{\psi}(\bar{x}_1)\overset{+}{\psi}(\bar{x}_2)B(\bar{x}_1,\bar{x}_2;x_2',x_1')\psi(x_2')\psi(x_1')\,d\bar{x}_1\,d\bar{x}_2\,dx_1'\,dx_2'\otimes\!\rightarrow$$

$$\otimes\!\rightarrow \int \overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_N)\,dx_1\ldots dx_N.$$

т.е.

$$C' = \frac{1}{2}\int \overset{+}{\psi}(\bar{x}_1)\overset{+}{\psi}(\bar{x}_2)\, B(\bar{x}_1,\bar{x}_2; x_2', x_1')\, \psi(x_2')\, \psi(x_1')\, d\bar{x}_1\, d\bar{x}_2\, dx_1'\, dx_2' \cdot C. \tag{4.4I}$$

Таким образом, в представлении вторичного квантования динамическая величина бинарного типа будет представлена оператором

$$\mathfrak{B} = \frac{1}{2}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\, B(x_1,x_2; x_2' x_1')\, \psi(x_2')\psi(x_1')\, dx_1\, dx_2\, dx_2'\, dx_1' \tag{4.42}$$

В более краткой форме можно записать:

$$\mathfrak{B} = \frac{1}{2}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\cdot\overset{+}{\psi}(x_2)\left(B_{1,2}\, \psi_2\, \psi_1\right)_{x_1,x_2} dx_1\, dx_2 \ . \tag{4.43}$$

Займемся теперь преобразованием S-кратных операторов, рассмотренных в §I:

$$\sigma^{(S)} = \sum_{1\le j_1<j_2<\dots<j_s\le N} S_{j_1,j_2,\dots,j_s} \ . \tag{4.44а}$$

Для этого воспользуемся принятой схемой. Имеем

$$C' = C\left(\sigma^{(S)}\varphi\right) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac}\left(\sigma^{(S)}\varphi\right)_{x_1,\dots x_N} dx_1\dots dx_N \ . \tag{4.44б}$$

Откуда, воспользовавшись тождеством (I.33), получим

$$C' = \frac{N(N-1)\cdots(N-S+1)}{S!\sqrt{N!}}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\cdot C_{vac}\, S(x_1,\dots x_s; x_s',\dots x_1')\, \varphi(x_1',\dots x_s'; x_{s+1},\dots x_N)\, dx_1'\dots dx_s'\, dx_1\dots dx_N.$$

Переобозначим здесь $x_1\to\bar{x}_1\ ,\dots, x_s\to\bar{x}_s$. Тогда

$$C' = \frac{N(N-1)\dots(N-S+1)}{S!\sqrt{N!}}\int \overset{+}{\psi}(\bar{x}_1)\dots\overset{+}{\psi}(\bar{x}_s)\, S(\bar{x}_1,\dots\bar{x}_s; x_s'\dots x_1')\, \overset{+}{\psi}(x_{s+1})\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\, C_{vac}\cdot\varphi(x_1'\dots x_s', x_{s+1},\dots x_N)\, dx_1'\dots dx_s'\, d\bar{x}_1\dots d\bar{x}_s\, dx_{s+1}\dots dx_N. \tag{4.45}$$

Обратимся к тождеству (4.I7) и запишем его в виде

$$N(N-1)\dots(N-S+1)\int \overset{+}{\psi}(x_{s+1})\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\, C_{vac}\,\varphi(x_1'\dots x_s', x_{s+1},\dots x_N)\, dx_1'\dots dx_s'\, dx_{s+1}\dots dx_N = \int \psi(x_s')\dots\psi(x_1')\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\, C_{vac}\,\varphi(x_1,\dots x_N)\, dx_1\dots dx_N.$$

Подставив это равенство в правую часть (4.45), получим

$$C' = \frac{1}{S!\sqrt{N!}}\int \overset{+}{\psi}(\bar{x}_1)\dots\overset{+}{\psi}(\bar{x}_s)\, S(\bar{x}_1,\dots\bar{x}_s; x_s'\dots x_1')\,\psi(x_s')\dots\psi(x_1')\, d\bar{x}_1\dots d\bar{x}_s \int \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\, C_{vac}\,\varphi(x_1,\dots x_N)\, dx_1,\dots dx_N,$$

т.е.

$$C' = \frac{1}{S!}\int \overset{+}{\psi}(\bar{x}_1)\dots\overset{+}{\psi}(\bar{x}_s)\, S(\bar{x}_1,\dots\bar{x}_s; x_s'\dots x_1')\,\psi(x_s')\dots\psi(x_1')\, d\bar{x}_1\dots d\bar{x}_s\, dx_1'\dots dx_s'\cdot C \ .$$

Итак, в представлении вторичного квантования рассматриваемая динамическая величина S-кратного типа дается оператором

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{S!}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_s)\, S(x_1,\dots x_s; x_s',\dots x_1')\,\psi(x_s')\dots\psi(x_1')\, dx_1\dots dx_s\, dx_1'\dots dx_s' \tag{4.46}$$

или в более краткой записи:

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{S!}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_s)\left\{S_{1,\dots s}\,\psi_s\dots\psi_1\right\}_{x_1,\dots x_s} dx_1\dots dx_s \ . \tag{4.47}$$

Можем теперь перейти к преобразованию гамильтониана нашей динамической системы к представлению вторичного квантования. Возьмем гамильтониан в форме (I.36), введенный в §I:

$$H = \sum_{1\le j\le N} T_j + \sum_{1\le j_1<j_2\le N} U_{j_1,j_2}, \tag{4.48}$$

где для матричных элементов одночастичного оператора T и двухчастичного оператора U будем пользоваться обозначениями (I.37).

Поскольку такой гамильтониан состоит из суммы аддитивной и бинарной компонент, в представлении вторичного квантования будем иметь

$$H = \int \overset{+}{\psi}(x)\, T(x,x')\,\psi(x')\,dx\,dx' + \frac{1}{2}\int \overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\,U(x_1,x_2;x_2',x_1')\,\psi(x_2')\psi(x_1')\,dx_1 dx_2 dx_2' dx_1'. \tag{4.49}$$

В частности, гамильтониан (I.38)

$$H = -\sum_{1\le j\le N}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{q_j} + \sum_{1\le j_1<j_2\le N}\Phi(q_{j_1}-q_{j_2}),$$
$$\Phi(q) = \Phi(-q), \tag{4.50}$$

для которого переход от (4.48) характеризуется формулами (4.40), в представлении вторичного квантования будет

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \overset{+}{\psi}(x)\Delta_q\psi(x)\,dx + \frac{1}{2}\iint \Phi(q_1-q_2)\,\overset{+}{\psi}(x_1)\overset{+}{\psi}(x_2)\psi(x_2)\psi(x_1)\,dx_1 dx_2. \tag{4.51}$$

Если в H из (4.50) необходимо учесть член, происходящий от внешнего поля $U_e(q)$:

$$\sum_{(1\le j\le N)} U_e(q_j), \tag{4.52}$$

то в (4.5I), очевидно, добавится выражение вида

$$\int U(q)\,\overset{+}{\psi}(x)\psi(x)\,dx. \tag{4.53}$$

В рассматриваемом представлении уравнение Шредингера будет

$$i\hbar\frac{\partial C_t}{\partial t} = H C_t, \tag{4.54}$$

но можно также воспользоваться подходом Гейзенберга. Как известно, в этом подходе какая-либо динамическая величина, которая в трактовке Шредингера изображается оператором $\mathcal{D}$, будет представлена оператором, явно зависящим от времени по закону

$$\mathcal{D}(t) = e^{i\frac{H}{\hbar}t}\,\mathcal{D}\,e^{-i\frac{H}{\hbar}t}. \tag{4.55}$$

Введем, в частности, операторные функции:

$$\psi(t,x) = e^{i\frac{H}{\hbar}t}\psi(x)e^{-i\frac{H}{\hbar}t},$$
$$\overset{+}{\psi}(t,x) = e^{i\frac{H}{\hbar}t}\overset{+}{\psi}(x)e^{-i\frac{H}{\hbar}t}. \tag{4.56}$$

Заметим, что

$$e^{i\frac{H}{\hbar}t}\mathcal{D}_1\cdot\mathcal{D}_2\cdots\mathcal{D}_\ell\, e^{-i\frac{H}{\hbar}t} = e^{i\frac{H}{\hbar}t}\mathcal{D}_1 e^{-i\frac{H}{\hbar}t}\cdot e^{i\frac{H}{\hbar}t}\mathcal{D}_2 e^{-i\frac{H}{\hbar}t}\cdots e^{i\frac{H}{\hbar}t}\mathcal{D}_\ell e^{-i\frac{H}{\hbar}t},$$

т.е.

$$e^{i\frac{H}{\hbar}t}\cdot\mathcal{D}_1\cdot\mathcal{D}_2\cdots\mathcal{D}_\ell\, e^{-i\frac{H}{\hbar}t} = \mathcal{D}_1(t)\cdot\mathcal{D}_2(t)\cdots\mathcal{D}_\ell(t). \tag{4.57}$$

Вспомним далее, что на основании (4.29), (4.42), (4.46) рассматривавшиеся нами операторы типа $\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \ldots, \mathfrak{G}^{(s)}, \ldots$ выражаются через произведения операторных функций:

$$\overset{+}{\psi}(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}(x_s)\psi(x_s')\ldots\psi(x_1'); \quad s = 1,2,3\ldots$$

Поэтому благодаря свойству (4.57) видим, что

$$\mathfrak{A}(t),\ \mathfrak{B}(t),\ \dots\ \mathfrak{G}^{(s)}(t)$$

представляются выражениями, получающимися из соответствующих выражений (4.29), (4.42), (4.46) просто заменой $\psi(x)$, $\overset{+}{\psi}(x)$ на $\psi(t,x)$, $\overset{+}{\psi}(t,x)$.

Таким образом, задача нахождения зависящих от времени динамических величин в картине Гейзенберга приводится к нахождению операторных функций $\psi(t,x)$, $\psi^+(t,x)$.

Основываясь на равенствах (4.56), (4.57), видим, что

$$\{\psi(t,x)\overset{+}{\psi}(t,x')\pm\overset{+}{\psi}(t,x')\psi(t,x)\}=e^{i\frac{H}{\hbar}t}\{\psi(x)\overset{+}{\psi}(x')\pm\overset{+}{\psi}(x')\psi(x)\}e^{-i\frac{H}{\hbar}t},$$

$$\{\psi(t,x)\psi(t,x')\pm\psi(t,x')\psi(t,x)\}=e^{i\frac{H}{\hbar}t}\{\psi(x)\psi(x')\pm\psi(x')\psi(x)\}e^{-i\frac{H}{\hbar}t},$$

$$\{\overset{+}{\psi}(t,x)\overset{+}{\psi}(t,x')\pm\overset{+}{\psi}(t,x')\overset{+}{\psi}(t,x)\}=e^{i\frac{H}{\hbar}t}\{\overset{+}{\psi}(x)\overset{+}{\psi}(x')\pm\overset{+}{\psi}(x')\overset{+}{\psi}(x)\}e^{-i\frac{H}{\hbar}t}.$$

Откуда вытекает, что операторные функции $\psi(t,x)$, $\overset{+}{\psi}(t,x)$ удовлетворяют таким же перестановочным соотношениям (4.4) или (4.5), что и $\psi(x)$, $\overset{+}{\psi}(x)$:

А) случай Бозе :

$$\begin{aligned}&\psi(t,x)\overset{+}{\psi}(t,x')-\overset{+}{\psi}(t,x')\psi(t,x)=\delta(x-x'),\\&\psi(t,x)\psi(t,x')-\psi(t,x')\psi(t,x)=0,\\&\overset{+}{\psi}(t,x)\overset{+}{\psi}(t,x')-\overset{+}{\psi}(t,x')\overset{+}{\psi}(t,x)=0.\end{aligned}\tag{4.58}$$

Б) случай Ферми :

$$\begin{aligned}&\psi(t,x)\overset{+}{\psi}(t,x')+\overset{+}{\psi}(t,x')\psi(t,x)=\delta(x-x'),\\&\psi(t,x)\psi(t,x')+\psi(t,x')\psi(t,x)=0,\\&\overset{+}{\psi}(t,x)\overset{+}{\psi}(t,x')+\overset{+}{\psi}(t,x')\overset{+}{\psi}(t,x)=0.\end{aligned}\tag{4.59}$$

Подчеркнем, что такие перестановочные соотношения верны лишь для одновременных операторных функций $\psi(t,x)$, $\psi^+(t,x)$. Коммутаторные соотношения при разных временах, скажем, для $\psi(t_1,x_1)$ с $\overset{+}{\psi}(t_2,x_2)$, отсюда никоим образом не вытекают.

Построим теперь уравнение для временной эволюции операторных функций. Так, из (4.56) имеем

$$\begin{aligned}&i\hbar\frac{\partial\psi(t,x)}{\partial t}=\psi(t,x)H-H\psi(t,x),\\&\psi(0,x)=\psi(x).\end{aligned}\tag{4.60}$$

Заметим далее, что, поскольку H является интегралом движения:

$$H=H(t)=e^{i\frac{H}{\hbar}t}He^{-i\frac{H}{\hbar}t}$$

и это выражение не зависит от t, можем заменить в представлении гамильтониана, например, (4.49), операторные функции $\psi(x)$, $\overset{+}{\psi}(x)$ соответственно на $\psi(t,x)$, $\overset{+}{\psi}(t,x)$ и затем, пользуясь перестановочными соотношениями (4.58) или (4.59), раскрыть коммутатор, стоящий в правой части уравнения (4.60).

Возьмем для примера случай гамильтониана (4.50), для которого в представлении вторичного квантования получено выражение (4.5I). Ввиду только что сказанного это выражение будет равно

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\overset{+}{\psi}(t,x_1)\Delta_{q_1}\psi(t,x_1)dx_1+$$
$$+\frac{1}{2}\iint\Phi(q_1-q_2)\overset{+}{\psi}(t,x_1)\overset{+}{\psi}(t,x_2)\psi(t,x_2)\psi(t,x_1)dx_1dx_2.\tag{4.6I}$$

Используя перестановочные соотношения (4.58) или (4.5I), нетрудно убедиться, что в обоих случаях справедливы следующие выражения для коммутаторов:

$$[\psi(t,x);\overset{+}{\psi}(t,x_1)\Delta_{q_1}\psi(t,x_1)]=\delta(x-x_1)\cdot\Delta_{q_1}\psi(t,x_1),$$

$$[\psi(t,x);\overset{+}{\psi}(t,x_1)\overset{+}{\psi}(t,x_2)\psi(t,x_2)\psi(t,x_1)]=$$
$$=\delta(x-x_1)\overset{+}{\psi}(t,x_2)\psi(t,x_2)\psi(t,x_1)+$$
$$+\delta(x-x_2)\overset{+}{\psi}(t,x_1)\psi(t,x_1)\psi(t,x_2).$$

Поэтому для коммутатора в правой части (4.60) найдем ввиду (4.6I)

$$[\psi(t,x);H]=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q\psi(t,x)+$$

$$+\frac{1}{2}\int \Phi(q-q_2)\overset{+}{\psi}(t,x_2)\psi(t,x_2)dx_2\cdot\psi(t,x) +$$

$$+\frac{1}{2}\int \Phi(q-q_1)\overset{+}{\psi}(t,x_1)\psi(t,x_1)dx_1\cdot\psi(t,x).$$

Обозначим в первом интеграле правой части переменную x_2 через x', а во втором интеграле обозначим через x' переменную интеграции x_1. Получим

$$[\psi(t,x;H] = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q\psi(t,x) + \int\Phi(q-q')\overset{+}{\psi}(t,x')\psi(t,x')dx'\,\psi(t,x) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q\psi(t,x) + \sum_{(\nu')}\int\Phi(q-q')\overset{+}{\psi}(t,q',\nu')\psi(t,q',\nu')dq'\cdot\psi(t,x).$$

Таким образом, в более развернутом виде, положив $x = q, \nu$, представим уравнение (4.60) в следующей форме:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t,q,\nu)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q + U_i(t,q)\right\}\psi(t,q,\nu), \qquad (4.62)$$

где

$$U_i(t,q) = \int\Phi(q-q')\left\{\sum_{(\nu')}\overset{+}{\psi}(t,q',\nu')\psi(t,q',\nu')\right\}dq'. \qquad (4.63)$$

Заметим на основании (4.32), что оператор, стоящий в (4.63) в фигурных скобках, есть оператор, представляющий плотность числа частиц в момент времени t:

$$\sum_{(\nu)}\overset{+}{\psi}(t,q,\nu)\psi(t,q,\nu) = \rho(t,q), \qquad (4.64)$$

и, следовательно, (4.63) эквивалентно выражению

$$U_i(t,q) = \int\Phi(q-q')\rho(t,q')dq'. \qquad (4.65)$$

Как видно, по своей форме уравнение (4.62) аналогично обычному уравнению Шредингера, соответствующему движению частицы в поле потенциала U_i.

Сам этот потенциал как бы вызывает распределение частиц с плотностью $\rho(t,q)$ (см. (4.65)).

Характерное отличие нашего уравнения (4.62) от соответствующего "классического" нелинейного волнового уравнения состоит "лишь" в операторной природе ψ, $\overset{+}{\psi}$, то есть в наличии перестановочных соотношений (4.58) или (4.59). Формально это уравнение (4.62) получается как бы "вторичным" квантованием – квантованием волновых функций из "классического" уравнения Шредингера с самосогласованным полем $U_i(q)$. Слово классический мы ставим в кавычки, поскольку для самого получения такого уравнения уже требуется одно, так сказать "первичное", квантование. В теории поля имеется подобный подход: берут полевые уравнения, получаемые из некоторого лагранжиана, и затем на полевые функции накладывают соответствующие перестановочные соотношения, совместимые с данным временным уравнением для полевых функций.

§5. Общие замечания к методу вторичного квантования

В этом параграфе мы сделаем ряд дополнительных замечаний по поводу метода вторичного квантования.

1°. Прежде всего обратим внимание на то обстоятельство, что в представлении вторичного квантования форма операторов аддитивного, бинарного и т.д. типов, в частности, и гамильтониана нашей динамической системы, не зависит явно от числа частиц N. Это число войдет в выражение матричных элементов таких операторов через посредство N-частичных волновых функций C. Данное обстоятельство оказывается весьма удобным для задач статистической механики, в которых мы имеем дело с так называемым большим ансамблем Гиббса. Большой ансамбль Гиббса характеризуется гамильтонианом

$$\Gamma = H - \mu N, \qquad (5.1)$$

содержащим параметр μ, называемый химическим потенциалом. Средние значения динамических величин берутся по статистическому оператору

$$\frac{1}{\Omega}e^{-\frac{\Gamma}{\theta}}\quad;\quad \Omega = Sp\, e^{-\frac{\Gamma}{\theta}}$$

большого ансамбля:

$$\langle \mathcal{D} \rangle = \frac{Sp\, e^{-\frac{\Gamma}{\theta}} \cdot \mathcal{D}}{Sp\, e^{-\frac{\Gamma}{\theta}}} \tag{5.2}$$

Существенное отличие такого ансамбля от обычного ансамбля Гиббса состоит в том, что шпуры в (5.2) берутся по состояниям с произвольным, а не с фиксированным значением числа частиц N.

Ввиду (5.2) среднее число частиц $\overline{N}$ будет

$$\overline{N} = \langle \mathcal{N} \rangle = \frac{Sp\, e^{-\frac{\Gamma}{\theta}} \cdot \mathcal{N}}{Sp\, e^{-\frac{\Gamma}{\theta}}} = f(\mu, \theta), \tag{5.3}$$

и мы можем рассматривать это соотношение как уравнение для определения химического потенциала μ по заданному значению $\overline{N}$.

Вообще, в статистической механике целесообразно рассматривать динамические системы, находящиеся в конечном объеме, и затем уже совершать предельный переход, расширяя этот объем на все пространство. Дело в том, что если имеем любое конечное число частиц N в бесконечном пространстве, то их средняя плотность оказывается равной нулю. Поэтому, если мы желаем рассматривать динамическую систему сразу во всем бесконечном пространстве и вместе с тем обеспечить отличную от нуля плотность числа частиц, мы тем самым оказываемся вынужденными иметь дело с бесконечным числом частиц. Но тогда оператор $\mathcal{N}$, да и сам гамильтониан H, эффективно пропорциональный числу частиц, теряют смысл, и становится необходимым проводить дополнительные исследования, связанные с переформулировкой самой постановки задачи. Чтобы избежать этой формальной трудности и иметь дело с конечным объемом, удобно воспользоваться методом квазидискретного представления, о котором говорилось в §2.

В соответствии с основной идеей этого представления рассматриваем в качестве допустимого пространства точек конечную область, определенную неравенствами

$$-\frac{L}{2} < q^{(\alpha)} < \frac{L}{2}, \qquad \alpha = 1, 2, 3 \tag{5.4}$$

с объемом $V = L^3$. Буквой V будем обозначать как область (5.4), так и ее объем. На волновые функции

$$\varphi(x_1, \dots x_N) \quad ; \quad x = (q, \nu)$$

наложено условие периодичности с периодом L по каждой из пространственных координат $q_i^{(\alpha)}$. При этом, чтобы обеспечить выполнение такого условия периодичности для всех моментов времени t, берем для потенциальной энергии взаимодействия пары частиц вместо интеграла Фурье (2.17)

$$\Phi(q) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(k \cdot q)} \cdot f(k) \cdot d\vec{k} \tag{5.5}$$

дискретную сумму (2.19)

$$\Phi(q) = \frac{1}{V} \sum_{(k)} e^{i(k \cdot q)} \cdot f(k), \tag{5.6}$$

в которой в качестве k взято дискретное множество (2.15)

$$k = \left(\frac{2\pi n^{(1)}}{L}, \frac{2\pi n^{(2)}}{L}, \frac{2\pi n^{(3)}}{L} \right), \tag{5.7}$$

где $n^{(\alpha)}$ – целые числа, могущие принимать любые отрицательные и положительные (а также нулевые) значения. Как отмечалось в §2, дискретная сумма (5.6) переходит в интеграл Фурье (5.5) при $V \to \infty$. Ввиду периодичности волновых функций по отношению ко всем пространственным координатам система базисных функций взята в форме (2.6), (2.15):

$$\psi_{k,\sigma}(q, \nu) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k \cdot q)} \cdot \delta(\nu - \sigma) \tag{5.8}$$

с дискретным k из множества (5.7). Данная система (5.8), очевидно, будет полной и ортонормированной для области V.

Введем теперь операторные функции, положив

$$\psi(q, \nu) = \sum_{(k)} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(k \cdot q)} \cdot a_{k,\nu} \; ; \; \overset{+}{\psi}(q, \nu) = \sum_{(k)} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i(k \cdot q)} \overset{+}{a}_{k,\nu}, \tag{5.9}$$

где $a_{k,\nu}$, $\overset{+}{a}_{k,\nu}$ являются квантованными амплитудами Бозе или Ферми с соответствующими перестановочными соотношениями. Нетрудно заметить, что, поскольку

$$\frac{1}{V}\sum_{(k)} e^{i(k\cdot q-q')} = \delta(q-q')$$

для q и q', лежащих внутри области V, введенные операторные функции (5.9) удовлетворяют перестановочным соотношениям (4.4) и (4.5) внутри этой области, которую мы только и рассматриваем.

Отсюда видно, что все рассуждения §4 остаются верными и в данном случае, когда в качестве допустимого пространства точек q берется область V. Получим поэтому для гамильтониана Γ следующее представление вторичного квантования:

$$\Gamma = H-\mu N = \sum_{(\nu)}\int \overset{+}{\psi}(q,\nu)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q-\mu\right\}\psi(q,\nu)\,dq +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{(\nu_1,\nu_2)}\int_{(V)}\Phi(q_1-q_2)\overset{+}{\psi}(q_1,\nu_1)\overset{+}{\psi}(q_2,\nu_2)\psi(q_2,\nu_2)\psi(q_1,\nu_1)\,dq_1\,dq_2 . \qquad (5.10)$$

Для преобразования Γ к форме, составленной из квантованных амплитуд, нам остается только подставить соотношения (5.6), (5.9) в выражение (5.10). При вычислениях целесообразно иметь в виду соотношения ортонормировки с кронеккеровской функцией:

$$\int_{(V)} e^{i(k-k')q}\,dq = V\delta(k-k'). \qquad (5.11)$$

Заметим, что связь между дираковской δ-функцией и кронеккеровской δ будет

$$\delta_{Dir}(q) = (2\pi)^3\cdot V\,\delta_{kr}(q).$$

$$\delta_{Dir}(q) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i(k\cdot q)}\,dk \simeq \frac{1}{V}\sum_{(k)} e^{ik\cdot q}.$$

Запишем теперь

$$\overset{+}{\psi}(q_1,\nu_1)\overset{+}{\psi}(q_2,\nu_2)\psi(q_2,\nu_2)\psi(q_1,\nu_1) =$$

$$= \frac{1}{V^2}\sum_{(k_1,k_2,k_1',k_2')} \overset{+}{a}_{k_1\nu_1}\overset{+}{a}_{k_2\nu_2}a_{k_2'\nu_2}a_{k_1'\nu_1}\, e^{-i(k_1-k_1')q_1-i(k_2-k_2')q_2}$$

и далее

$$\Phi(q_1-q_2)\overset{+}{\psi}(q_1,\nu_1)\overset{+}{\psi}(q_2,\nu_2)\psi(q_2,\nu_2)\psi(q_1,\nu_1) =$$

$$= \frac{1}{V^3}\sum_{(k_1,k_2,k_1',k_2',k)} f(k)\,\overset{+}{a}_{k_1\nu_1}\overset{+}{a}_{k_2\nu_2}a_{k_2'\nu_2}a_{k_1'\nu_1}\, e^{i\{k-(k_1-k_1')\}q_1}\cdot e^{-i\{k+(k_2-k_2')\}q_2}.$$

Ввиду (5.11) интеграция этого выражения по q_1 и q_2 дает множитель

$$V^2\delta(k-(k_1-k_1'))\,\delta(k+k_2-k_2') =$$

$$= V^2\delta(k-(k_1-k_1'))\cdot\delta(k_1+k_2-k_1'-k_2').$$

Таким образом, из (5.10) получим

$$\Gamma = \sum_{(k,\nu)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}-\mu\right)\overset{+}{a}_{k,\nu}\cdot a_{k\nu} +$$

$$+\frac{1}{2V}\sum_{(k_1,k_2,k_1',k_2')}\sum_{(\nu_1,\nu_2)} f(k_1-k_1')\,\delta(k_1+k_2-k_1'-k_2')\,\overset{+}{a}_{k_1\nu_1}\overset{+}{a}_{k_2\nu_2}a_{k_2'\nu_2}a_{k_1'\nu_1}. \qquad (5.12)$$

Здесь в случае бесспиновых частиц индекса ν совсем не будет. При рассмотрении частиц с половинным спином ν пробегает два значения $\nu=\pm\frac{1}{2}$.

Заметим, между прочим, что гамильтониан (5.10) коммутирует с вектором импульса нашей динамической системы:

$$\vec{P} = -i\hbar\int_{(V)}\sum_{(\nu)}\overset{+}{\psi}(q,\nu)\,\nabla_q\,\psi(q,\nu)\,dq =$$

$$= \hbar\sum_{(\nu)}\vec{k}\,\overset{+}{a}_{k,\nu}a_{k,\nu}. \qquad (5.13)$$

Действительно, коммутация $\vec{P}$ с первой суммой в правой части (5.12) тривиальна, в отношении же второй части достаточно заметить, что оператор $a_{k_2'\nu_2}a_{k_1'\nu_1}$ вызывает уменьшение $\vec{P}$ на $\vec{k}_1'+\vec{k}_2'$, а оператор $\overset{+}{a}_{k_1\nu_1}\overset{+}{a}_{k_2\nu_2}$ вызывает увеличение $\vec{P}$ на $\vec{k}_1+\vec{k}_2$. Но этот вектор равен вектору (5.14) ввиду наличия кронеккеровской δ-функции $\delta(k_1+k_2-k_1'-k_2')$. Таким образом, в принятой квазидискретной схеме импульс $\vec{P}$ является интегралом движения. В заключение подчеркнем еще раз, что при пользовании квазидискретным представлением необходимо всегда иметь в виду предельный переход:

$$V \longrightarrow \infty. \tag{5.14}$$

2^{0}. В §4 мы основывались на формуле (4.1), рассматривая ее как определение волновых функций в представлении вторичного квантования. При этом мы существенно использовали лишь перестановочные соотношения (4.4) или (4.5) для операторных функций $\psi(x), \psi^{+}(x)$ и совершенно не нуждались в той конкретной специальной конструкции квантовых амплитуд, о которой говорилось в §3.

Более того, само представление (4.1) можно формально получить из следующих общих соображений:

А. Рассматриваем линейное пространство $\mathcal{L}$ векторов C, представляющих состояния изучаемой динамической системы, в котором определено скалярное произведение двух векторов

$$(C_1, C_2) \tag{5.15}$$

с обычными свойствами.

Б. Пусть на векторы этого пространства действуют операторные функции $\psi(x), \psi^{+}(x)$, удовлетворяющие перестановочным соотношениям (4.4) или (4.5), переводя их опять в векторы того же пространства. Таким образом, если C есть вектор из $\mathcal{L}$, то

$$\psi(x)C, \quad \psi^{+}(x)C \tag{5.16}$$

также будут векторами из $\mathcal{L}$.

В. В $\mathcal{L}$ существует нормированный вектор C_{vac}, для которого

$$(C_{vac}, C_{vac}) = 1$$

и для которого для всех x

$$\psi(x)\cdot C_{vac} = 0.$$

Г. Если C_0 будет таким вектором в $\mathcal{L}$, что для всех x

$$\psi(x)C_0 = 0, \tag{5.17}$$

то

$$C_0 = \mathcal{K}\cdot C_{vac}, \tag{5.18}$$

где $\mathcal{K}$ – нормированный множитель, который можно выносить за знак скалярного произведения:

$$(C, C_0) = \mathcal{K}\cdot(C, C_{vac}). \tag{5.19}$$

<u>Замечание I к условию Г</u>

Скажем сейчас несколько слов по поводу смысла этого условия, которое, на первый взгляд, может показаться тривиальным.

Возьмем динамическую систему, состоящую их двух подсистем – у I-й подсистемы состояния нумеруются числами заполнения $(\dots n_f \dots)$, а состояния 2-й подсистемы нумеруются некоторыми независимыми величинами X. Представим волновые функции всей такой системы в виде

$$C = C(\dots n_f \dots ; X) \tag{5.20}$$

и введем скалярное произведение, положив

$$(C_1, C_2) = \sum_{(X)} \sum_{(\dots n_f \dots)} C_1^{*}(\dots n_f \dots, X)\, C_2(\dots n_f \dots, X). \tag{5.21}$$

В случае, если X – непрерывны, естественным образом заменяем суммирование по X соответствующей интеграцией. Введем операторные функции $\psi(x)$, $\psi^{+}(x)$, оказывающие воздействие лишь на числа заполнения $\dots n_f \dots$ и не действующие на X. В таком случае из соотношения (5.17) будет вытекать, что

$$C_0(\dots n_f \dots ; X) = \varphi(X) \prod_{(f)} \delta(n_f). \tag{5.22}$$

Но ввиду принятого определения (5.21) скалярного произведения входящий в (5.22) множитель $\varphi(X)$ уже нельзя выносить за знак скалярного произведения. Таким образом, условие (Г) является, в сущности, условием того, что рассматриваемая динамическая система состоит из частиц одного сорта – бозонов или фермионов.

Если же полагаем, как и везде ранее, что имеются лишь частицы одного сорта, и соответственно определим скалярное произведение как

$$(C_1, C_2) = \sum_{\dots n_f \dots} C_1^{*}(\dots n_f \dots)\, C_2(\dots n_f \dots),$$

то если C и зависят от некоторых параметров X, не связанных с $(\ldots n_f \ldots)$, то в соотношении (5.22) $\varphi(X)$ будет множителем, который можно выносить за знак скалярного произведения. Примером C, зависящих от X, могут служить, например, выражения (5.I6), в которых $X = x$.

Замечание II к условию Г

Взяв в (5.I9) $C = C_{vac}$, найдем $K = (C_{vac}, C_o)$ и, подставив в (5.I8), будем иметь

$$C_o = C_{vac} \cdot (C_{vac}, C_o). \tag{5.23}$$

Таким образом, из условия (Г) следует, что если (5.I7) имеет место для всех x, то такое C_o может быть представлено в виде (5.23).

Основываясь на этих общих положениях, перейдем к получению представления (4.I).

Введем оператор

$$\mathcal{N} = \int \psi^{+}(x)\psi(x)\,dx. \tag{5.24}$$

Поскольку $\mathcal{N}$ представляется интегралом от произведения оператора $\psi(x)$ на сопряженный оператор $\psi^{+}(x)$, ясно, что $\mathcal{N}$ является самосопряженным оператором и что его собственные значения не могут быть отрицательными. Повторяя вычисления §4, основанные только на перестановочных соотношениях, убеждаемся, что

$$\mathcal{N}\psi(x) = \psi(x)(\mathcal{N}-1), \tag{5.25}$$

$$\mathcal{N}\psi^{+}(x) = \psi^{+}(x)(\mathcal{N}+1). \tag{5.26}$$

Но из (5.25) вытекает

$$\mathcal{N}\psi(x_s)\ldots\psi(x_1) = \psi(x_s)\ldots\psi(x_1)(\mathcal{N}-s). \tag{5.27}$$

Основываясь на этом равенстве, нетрудно заметить, что все собственные значения N – целые. Действительно, возьмем некоторый собственный вектор C_n для $\mathcal{N}$, соответствующий собственному значению n:

$$(\mathcal{N}-n)C_n = 0.$$

Ввиду (5.27) будем иметь

$$\mathcal{N}\psi(x_s)\ldots\psi(x_1)C_n = \psi(x_s)\ldots\psi(x_1)(\mathcal{N}-s)C_n,$$

то есть

$$\mathcal{N}\psi(x_s)\ldots\psi(x_1)C_n = (n-s)\psi(x_s)\ldots\psi(x_1)C_n. \tag{5.27б}$$

Таким образом, если вектор

$$\psi(x_s)\ldots\psi(x_1)C_n \tag{5.28}$$

не является тождественным нулем (равным нулю при всех $x_1,\ldots x_s$), то он будет собственным вектором для $\mathcal{N}$, соответствующим собственному значению, равному $(n-s)$. Поскольку, однако, собственные значения $\mathcal{N}$ не могут быть отрицательными, отсюда следует, что, начиная с некоторого S, выражения (5.28) должны тождественно обращаться в нуль. Если (5.28) тождественно обращается в нуль уже при $S=1$, то это значит, на основании условия (Г), что C_n пропорционально C_{vac} и, следовательно, $n=0$. Пусть далее (5.28) не обращаются тождественно в нуль при $S=1,2,\ldots\ell$, а для $S=\ell+1$ данное выражение уже является тождественным нулем. Стало быть, имеем

$$\psi(x_{\ell+1})\{\psi(x_\ell)\ldots\psi(x_1)C_n\} = 0$$

для всех $x_{\ell+1}$, и потому

$$\mathcal{N}\{\psi(x_\ell)\ldots\psi(x_1)C_n\} = 0.$$

Приняв во внимание (5.27б), убеждаемся, что $n=\ell$.

Итак, все собственные значения N оператора $\mathcal{N}$ являются целыми:

$$N = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots.$$

Возьмем состояние, для которого $N \geq 1$

$$\mathcal{N}C_N = NC_N,$$

и попробуем представить его в виде (4.I). Чтобы построить такое представление, введем, воспользовавшись (4.20), функцию

$$\varphi(x_1,\dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\left(C_{vac}, \psi(x_N)\dots\psi(x_1)C_N\right) \qquad (5.29)$$

Если $N\geq 2$, то в случае статистики Бозе $\psi(x_j)$ коммутируют между собой и $\varphi(x_1,\dots x_N)$ оказывается симметричной функцией $x_1,\dots x_N$, в случае статистики Ферми $\psi(x_1)\dots\psi(x_N)$ антикоммутируют и $\varphi(x_1,\dots x_N)$ оказывается тем самым антисимметричной функцией $x_1,\dots x_N$.

Нам остается теперь показать, что в обоих случаях

$$C_N = \frac{1}{\sqrt{N!}}\int \varphi(x_1,\dots x_N)\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,dx_1\dots dx_N \qquad (5.30)$$

$$N\geq 1.$$

Чтобы доказать это равенство, заметим, что

$$\mathcal{N}\psi(x)\psi(x_N)\dots\psi(x_1)C_N = \psi(x)\psi(x_N)\dots\psi(x_1)(\mathcal{N}-(N+1))C_N =$$

$$= -\psi(x)\psi(x_N)\dots\psi(x_1)C_N.$$

Так как $\mathcal{N}$ не имеет отрицательных собственных значений, отсюда вытекает, что при всех x

$$\psi(x)\{\psi(x_N)\dots\psi(x_1)C_N\}=0.$$

Применив условие (Г), видим, что

$$\psi(x_N)\dots\psi(x_1)C_N = C_{vac}\left(C_{vac},\psi(x_N)\dots\psi(x_1)C_N\right) =$$

$$= \sqrt{N!}\cdot C_{vac}\,\varphi(x_1,\dots x_N), \qquad (5.31)$$

и потому благодаря (5.30)

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\int\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,\varphi(x_1,\dots x_N)\,dx_1\dots dx_N =$$

$$= \frac{1}{N!}\int\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\psi(x_N)\dots\psi(x_1)C_N\,dx_1\dots dx_N. \qquad (5.32)$$

Для вычисления интеграла по $x_1,\dots x_N$ заметим, что

$$\int\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_s)\psi(x_s)\dots\psi(x_1)C_N\,dx_s =$$

$$= \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_{s-1})\mathcal{N}\psi(x_{s-1})\dots\psi(x_1)C_N =$$

$$= \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_{s-1})\psi(x_{s-1})\dots\psi(x_1)(\mathcal{N}-s+1)C_N.$$

т.е.

$$\int\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_s)\psi(x_s)\dots\psi(x_1)C_N\,dx_s =$$

$$= (N-s+1)\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_{s-1})\cdot\psi(x_{s-1})\dots\psi(x_1),$$

Отсюда получаем последовательно

$$\int\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)\psi(x_N)\dots\psi(x_1)\,dx_1\dots dx_N\,C_N =$$

$$= \int\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_{N-1})\psi(x_{N-1})\dots\psi(x_1)\,dx_1\dots dx_N\,C_N =$$

$$= 2\cdot\int\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_{N-2})\cdot\psi(x_{N-2})\dots\psi(x_1)\,dx_1\dots dx_{N-2}\,C_N = \dots = N!\,C_N.$$

Подставив это тождество в (5.32), мы и получим искомое представление (5.30). Поскольку

$$\mathcal{N}\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac} =$$

$$= \overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)(\mathcal{N}+N)C_{vac} = N\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac},$$

видим, что для выражения (5.30) оператор $\mathcal{N}$ действительно принимает собственное значение, равное N. Ясно теперь, что оператор $\mathcal{N}$ в нашей общей схеме также представляет число частиц.

Мы до сих пор имели дело с N-частичными C-собственными функциями оператора числа частиц $\mathcal{N}$. В общем случае, если мы имеем дело с состояниями, в которых число частиц не фиксировано, то можем написать

$$C = \sum_{(N)} C_N \qquad (5.33)$$

или

$$C = \sum_{(N)}\frac{1}{\sqrt{N!}}\int\varphi(x_1,\dots x_N)\overset{+}{\psi}(x_1)\dots\overset{+}{\psi}(x_N)C_{vac}\,dx_1\dots dx_N, \qquad (5.34)$$

причем φ определяется через C_N с помощью формул (5.29). Нетрудно заметить, что два C, соответствующие различным значениям N, будут ортогональными. Имеем, действительно,

$$N_1 (C_{N_1}, C_{N_2}) = (\mathcal{N} C_{N_1}, C_{N_2}) = (C_{N_1}, \mathcal{N} C_{N_2}) = N_2 (C_{N_1}, C_{N_2}),$$

т.е.

$$(N_1 - N_2)(C_{N_1}, C_{N_2}) = 0,$$

и потому

$$(C_{N_1}, C_{N_2}) = 0 \qquad \text{для} \quad N_1 \neq N_2.$$

Отсюда видим, что выражение

$$(C_{vac}, \psi(x_N) \dots \psi(x_1) C_{N_1}) = $$
$$= (\overset{+}{\psi}(x_1) \dots \overset{+}{\psi}(x_N) C_{vac}, C_{N_1})$$

равно нулю, если $N_1 \neq N$, поскольку $\overset{+}{\psi}(x_1) \dots \overset{+}{\psi}(x_N) C_{vac}$ есть N-частичный вектор в $\mathcal{L}$. Поэтому, подставив (5.33) в (5.29) вместо C_N, мы не изменим результата. Итак,

$$\begin{aligned} \varphi &= (C_{vac}, C), \\ \varphi(x_1) &= (C_{vac}, \psi(x_1) C), \\ &\dots\dots \\ \varphi(x_1, \dots x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} (C_{vac}, \psi(x_N) \dots \psi(x_1) C). \end{aligned} \tag{5.35}$$

Как видно, состоянию C с нефиксированным значением числа частиц соответствует цепочка обычных волновых функций; C будет играть роль как бы "производящего функционала". Особо важное значение такие C с нефиксированным числом частиц имеют для динамических систем, таких, что для них оператор числа частиц не является интегралом движения.

Динамические системы, в которых частицы могут появляться и уничтожаться, весьма типичны для квантовой теории поля. Однако и в обычных нерелятивистских задачах статистической механики иногда оказывается целесообразным рассматривать динамические системы с несохраняющимся оператором числа частиц $\mathcal{N}$.

3°. Мы до сих пор рассматривали динамические системы, состоящие из одинаковых частиц. Не представляет, однако, затруднений перенести все наши рассуждения и на более общий случай, когда мы имеем динамическую систему, состоящую из нескольких сортов бозонов и фермионов.

Возьмем для простоты изложения случай, когда имеем дело с двумя сортами частиц. Обычные волновые функции такой динамической системы представим в форме

$$\varphi = \varphi(x_1, \dots x_{N_1}; y_1, \dots y_{N_2}). \tag{5.36}$$

Здесь N_j – число частиц j-го сорта $(j = 1, 2)$, x – переменные, параметризующие состояния одной частицы I-го сорта, а y – 2-го сорта.

Поскольку все частицы данного сорта одинаковы, они являются бозонами или фермионами. Таким образом, если частицы I-го сорта являются фермионами, φ – антисимметрическая, а если бозонами, то симметрическая функция $x_1, \dots x_N$. Аналогичное утверждение относится и к свойствам симметрии φ по отношению к $y_1, \dots y_{N_2}$.

Для перехода от обычного представления (5.36) к представлению вторичного квантования введем операторные функции[x/]

$$\psi_1(x), \ \overset{+}{\psi}_1(x); \ \psi_2(y), \overset{+}{\psi}_2(y) \tag{5.37}$$

со свойствами:

А. $\psi_1, \overset{+}{\psi}_1$ всегда коммутируют с $\psi_2, \overset{+}{\psi}_2$.

Б. $\psi_j, \overset{+}{\psi}_j$ при данном $j = 1, 2$ удовлетворяют перестановочным соотношениям Бозе (если частицы этого сорта – бозоны) или Ферми (если частицы этого сорта – фермионы).

В. Имеется C_{vac} – функция "вакуумного состояния", для которой

$$(C_{vac}, C_{vac}) = 1,$$

и для всех x и y

$$\psi_1(x) C_{vac} = 0, \quad \psi_2(y) C_{vac} = 0.$$

[x/] Для конкретного построения таких операторных функций можно воспользоваться процедурой, подробно изложенной в параграфах 2 и 3. Именно, возьмем полные ортонормированные системы $\psi_f(x)$, $\theta_f(y)$ и перейдем от x, y-представления (5.36) волновых функций к их

(Продолжение сноски см. на стр. 76.)

Тогда путем естественного обобщения применявшейся процедуры определим C-волновую функцию в представлении вторичного квантования – в виде

$$C = \frac{1}{\sqrt{N_1!\,N_2!}} \int \overset{+}{\Psi}_1(x_1)\ldots\overset{+}{\Psi}_1(x_{N_1})\overset{+}{\Psi}_2(y_1)\ldots\overset{+}{\Psi}_2(y_{N_2})C_{vac} \otimes\!\!\rightarrow$$
$$\otimes\!\!\rightarrow \varphi(x_1,\ldots x_{N_1}; y_1,\ldots y_{N_2})\,dx_1\ldots dx_{N_1}\,dy_1\ldots dy_{N_2}\,. \tag{5.38}$$

---

f, f'-представлению:

$$\varphi(x_1,\ldots x_{N_1}; y_1,\ldots y_{N_2}) =$$
$$= \sum_{(f_1,\ldots f_{N_1};\, f'_1,\ldots f'_{N_2})} F(f_1,\ldots f_{N_1}; f'_1,\ldots f'_{N_2})\,\Psi_{f_1}(x_1)\ldots\Psi_{f_{N_1}}(x_{N_1})\,\theta_{f'_1}(y_1)\ldots\theta_{f'_{N_2}}(y_{N_2})\,.$$

Далее вводим две системы чисел заполнения:

$$\ldots n_f \ldots;\ \ldots m_{f'}\ldots,$$

соответствующие двум системам аргументов

$$f_1,\ldots\ \ldots f_{N_1};\ f'_1\ldots\ \ldots f'_{N_2}$$ функции F.

Указанным в параграфе 3 способом строим амплитуды

$$a_{1,f}\,,\ \overset{+}{a}_{1,f}\ ;\ a_{2,f'}\,,\ \overset{+}{a}_{2,f'}\ ,$$

действующие соответственно на аргументы $\ldots n_f\ldots$ и на аргументы $\ldots m_{f'}\ldots$ функции

$$C = C(\ldots n_f\ldots;\ldots m_{f'}\ldots)\,.$$

Таким путем получаем в качестве a_j, a_j^+ амплитуды Бозе или Ферми – в зависимости от характера частиц j-го сорта. Во всяком случае $(a_{1,f},\ \overset{+}{a}_{1,f})$ всегда коммутируют с $(a_{2,f'},\ \overset{+}{a}_{2,f'})$ как операторы, действующие на разные группы аргументов. С помощью квантованных амплитуд строим, наконец, и операторные функции:

$$\Psi_1(x) = \sum_{(f)} \Psi_f(x)\,a_{1,f} \quad ; \quad \Psi_2(y) = \sum_{(f)} \theta_f(y)\,a_{2,f}\,.$$

Как было показано в §4, преобразование динамических величин к представлению вторичного квантования целиком основывалось на лемме и ее следствиях I, II. Фактически такое представление непосредственно вытекало из равенств (4.6), (4.I6) (следствие I) и (4.I7) (следствие II), причем в равенстве (4.I7) содержится и (4.6) при $S=1$, и равенство (4.I6) при $S=2$. Но если обратить внимание на доказательство леммы и ее следствий, то легко заметить, что при этом использовалось только одно свойство C_{vac}, а именно:

$$\Psi(x)C_{vac} = 0$$

при всех x. Так как

$$\Psi_1(x)\overset{+}{\Psi}_2(y_1)\ldots\overset{+}{\Psi}(y_{N_2})C_{vac} = 0$$

при всех x, то в нашем случае можем переписать (4.I7) в виде

$$\int \Psi_1(x'_S)\ldots\Psi(x'_1)\overset{+}{\Psi}_1(x_1)\ldots\overset{+}{\Psi}_1(x_{N_1})\overset{+}{\Psi}_2(y_1)\ldots\overset{+}{\Psi}_2(y_{N_2})C_{vac}\otimes\!\!\rightarrow$$
$$\otimes\!\!\rightarrow \varphi(x_1,\ldots x_{N_1}; y_1,\ldots y_{N_2})\,dx_1\ldots dx_{N_1}\,dy_1\ldots dy_{N_2} =$$
$$= N_1(N_1-1)\ldots(N_1-S+1)\int \overset{+}{\Psi}_1(x_{S+1})\ldots\overset{+}{\Psi}_1(x_{N_1})\overset{+}{\Psi}_2(y_1)\ldots\overset{+}{\Psi}_2(y_{N_2})C_{vac}\,\varphi(x_1,\ldots x_{N_1}; y_1,\ldots y_{N_2})\otimes\!\!\rightarrow \tag{5.39}$$
$$\otimes\!\!\rightarrow \delta(x'_1-x_1)\ldots\delta(x'_S-x_S)\,dx_1\ldots dx_{N_1}\,dy_1\ldots dy_{N_2}\,.$$

Совершенно аналогично, изменив роли Ψ_1, $\overset{+}{\Psi}_1$; Ψ_2, $\overset{+}{\Psi}_2$ и учитывая их коммутацию, получим

$$\int \Psi_2(y'_S)\ldots\Psi_2(y'_1)\overset{+}{\Psi}_1(x_1)\ldots\overset{+}{\Psi}_1(x_{N_1})\overset{+}{\Psi}_2(y_1)\ldots\overset{+}{\Psi}_2(y_{N_2})C_{vac}\otimes\!\!\rightarrow$$
$$\otimes\!\!\rightarrow \varphi(x_0\ldots x_{N_1}; y_1,\ldots y_{N_2})\,dx_1\ldots dx_{N_1}\,dy_1\ldots dy_{N_2} =$$
$$= N_2(N_2-1)\ldots(N_2-S+1)\int \overset{+}{\Psi}_1(x_1)\ldots\overset{+}{\Psi}_1(x_{N_1})\overset{+}{\Psi}_2(y_{S+1})\ldots\overset{+}{\Psi}_2(y_{N_2})C_{vac}\otimes\!\!\rightarrow \tag{5.40}$$
$$\otimes\!\!\rightarrow \varphi(x_1,\ldots x_{N_1}; y_1,\ldots y_{N_2})\,\delta(y'_2-y_1)\ldots\delta(y'_S-y_S)\,dx_1\ldots dx_{N_1}\,dy_1\ldots dy_{N_2}\,.$$

Если теперь приложим оператор

$$\Psi_2(y'_S)\ldots\Psi_2(y'_1)$$

слева к обеим частям тождества (5.39) и учтем затем тождество (5.40), то будем иметь

$$\int \psi_2(y'_{s_2})\ldots\psi_2(y'_1)\psi_1(x'_{s_1})\ldots\psi_1(x'_1)\overset{+}{\psi}_1(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}_1(x_{N_1})\overset{+}{\psi}_2(y_1)\ldots\overset{+}{\psi}_2(y_{N_2})\,C_{vac}\otimes\!\to$$

$$\otimes\!\to \varphi(x_1,\ldots x_{N_1};y_1,\ldots y_{N_2})\,dx_1\ldots dx_{N_1}dy_1\ldots dy_{N_2} = \qquad (5.4\mathrm{I})$$

$$=\{N_1\cdots(N_1-S_1+1)\}\{N_2\cdots(N_2-S_2+1)\}\int\overset{+}{\psi}_1(x_{s_1+1})\ldots\overset{+}{\psi}_1(x_{N_1})\overset{+}{\psi}_2(y_{s_2+1})\ldots\overset{+}{\psi}_2(y_{N_2})\,C_{vac}\otimes\!\to$$

$$\otimes\!\to\varphi(x_1,\ldots x_{N_1};y_1,\ldots y_{N_2})\,\delta(x'_1-x_1)\ldots\delta(x'_s-x_s)\,\delta(y'_1-y_1)\ldots\delta(y'_{s_2}-y_{s_2})\,dx_1\ldots dx_{N_1}dy_1\ldots dy_{N_2}\,.$$

Основываясь на (5.39) и дословно повторяя рассуждения §4, видим, что динамические величины аддитивного, бинарного,...,S -кратного типов, относящиеся лишь к частицам I сорта, в представлении вторичного квантования имеют ту же форму, что и в §4, если взять там $\psi=\psi_1$. Благодаря (5.40) то же относится и к динамическим величинам этих типов, относящихся лишь к частицам 2-го сорта. Здесь в соответствующих формулах §4 мы, естественно, должны положить $\psi=\psi_2$.

Пусть теперь мы имеем дело с динамическими переменными "смешанного типа", являющимися S_1 -кратными по отношению к частицам I-го сотра и S_2 -кратными по отношению к частицам 2-го сорта:

$$\mathcal{D}^{(1,2)}=\sum_{\substack{1\le i_1<\cdots<i_{s_1}\le N_1\\ 1\le j_1<\cdots j_{s_2}\le N_2}}\mathcal{D}^{(1,2)}_{i_1,\ldots i_{s_1};j_1,\ldots j_{s_2}}\,, \qquad (5.42)$$

где

$$\mathcal{D}^{(1,2)}_{1,\ldots s_1;1,\ldots s_2} \qquad (5.42\text{a})$$

– оператор, действующий на переменные $x_1,\ldots x_{s_1}$; $y_1,\ldots y_{s_2}$ рассматриваемых волновых функций φ , симметричный по отношению к перестановкам между индексами $1,\ldots S_1$ и по отношению к перестановкам между индексами $1,\ldots S_2$,соответствующими частицам I-го и 2-го сортов, и где $\mathcal{D}^{(1,2)}_{i_1,\ldots i_{s_1};j_1,\ldots j_{s_2}}$

тот же оператор (5.42а), только действующий соответственно на переменные $x_{i_1},\ldots x_{i_{s_1}}$; $y_{j_1},\ldots y_{j_{s_2}}$ функций φ .

Для приведения рассматриваемого (S_1,S_2) -кратного оператора (5.42) к представлению вторичного квантования воспользуемся рецептурой параграфа 4. Возьмем C,соответствующее φ , и построим

$$C'\longleftrightarrow\mathcal{D}^{(1,2)}\varphi$$

в виде, задаваемом формулой (5.38).

Ввиду того, что $\mathcal{D}^{(1,2)}$ симметричен по отношению к частицам каждого из сортов, можем написать с помощью простого обобщения формулы (4.44б) соотношение

$$C'=\left\{\frac{N_1\cdots(N_1-S_1+1)}{S_1!\sqrt{N_1!}}\right\}\left\{\frac{N_2\cdots(N_2-S_2+1)}{S_2!\sqrt{N_2!}}\right\}\int\overset{+}{\psi}_1(x_1)\cdots\overset{+}{\psi}_1(x_{N_1})\overset{+}{\psi}_2(y_1)\cdots$$

$$\cdots\overset{+}{\psi}_2(y_{N_2})C_{vac}\cdot\left\{\mathcal{D}^{(1,2)}_{1,\ldots s_1;1,\ldots s_2}\varphi\right\}_{x_1,\ldots x_{N_1};y_1,\ldots y_{N_2}}dx_1\ldots dx_{N_1}dy_1\ldots dy_{N_2}\,. \qquad (5.43)$$

Обозначим через

$$\mathcal{D}^{(1,2)}(\xi,\eta,\eta',\xi'),$$

где для краткости положено

$$\xi=(x_1,\ldots x_{S_1})\,;\ \eta=(y_1,\ldots y_{S_2})\,;\ \eta'=(y'_1,\ldots y'_{S_2})\,;$$
$$\xi'=(x'_1,\ldots x'_{S_1})\,, \qquad (5.44)$$

матричное представление для оператора (5.42). Тогда, основываясь на тождестве (5.4I). и почти дословном повторении рассуждений параграфа 4, получим окончательно следующее выражение для рассматриваемого (S_1,S_2) -кратного оператора (5.42) в представлении вторичного квантования:

$$\mathcal{D}^{(1,2)}=\frac{1}{S_1!S_2!}\int\overset{+}{\psi}_1(x_1)\ldots\overset{+}{\psi}_1(x_{S_1})\overset{+}{\psi}_2(y_1)\ldots\overset{+}{\psi}_2(y_{S_2})\,\mathcal{D}^{(1,2)}(\xi,\eta,\eta',\xi')\otimes\!\to$$

$$\otimes\!\to\psi_2(y'_{S_2})\ldots\psi_2(y'_1)\psi_1(x'_{S_1})\ldots\psi_1(x'_1)\,dx_1\ldots dx_{S_1}dy_1\ldots dy_{S_2}\otimes\!\to \qquad (5.45)$$

$$\otimes\!\to dy'_1\ldots dy'_{S_2}\,dx'_1\ldots dx'_{S_1}\,.$$

Возьмем в качестве примера динамическую величину, аддитивную по отношению к частицам и одного, и другого сорта $(S_1 = S_2 = 1)$:

$$U^{(1,2)} = \sum_{\substack{1 \le i \le N_1 \\ 1 \le j \le N_2}} U^{(1,2)}_{i,j} \,,$$

и обозначим через $U^{(1,2)}(x_1, y_1 ; y_1', x_1')$ матрицу, соответствующую $U^{(1,2)}_{1,1}$. Тогда благодаря (5.45) видим, что в представлении вторичного квантования

$$U^{(1,2)} = \int U^{(1,2)}(x, y ; y', x') \overset{+}{\psi}_1(x) \overset{+}{\psi}_2(y) \psi_2(y') \psi_1(x') \, dx\, dx'\, dy\, dy' =$$

$$= \int U^{(1,2)}(x, y ; y', x') \overset{+}{\psi}_2(y) \overset{+}{\psi}_1(x) \psi_1(x') \psi_2(y') \, dx\, dx'\, dy\, dy' .$$

Рассмотрим теперь случай приведения к форме вторичного квантования гамильтониана, содержащего член взаимодействия частиц разных сортов:

$$\mathcal{H} = \sum_{1 \le i \le N_1} T_i^{(1)} + \sum_{1 \le j \le N_2} T_j^{(2)} + \sum_{1 \le i_1 < i_2 \le N_1} U^{(1,1)}_{i_1, i_2} +$$

$$+ \sum_{1 \le j_1 < j_2 \le N_2} U^{(2,2)}_{j_1, j_2} + \sum_{\substack{1 \le i \le N_1 \\ 1 \le j \le N_2}} U^{(1,2)}_{i,j} \,. \tag{5.46}$$

Вводя принятые выше обозначения для соответствующих матричных элементов, получим

$$\mathcal{H} = \int \overset{+}{\psi}_1(x) T^{(1)}(x, x') \psi_1(x') \, dx\, dx' + \int \overset{+}{\psi}_2(y) T^{(2)}(y, y') \psi_2(y') \, dy\, dy' +$$

$$+ \frac{1}{2} \int \overset{+}{\psi}_1(x_1) \overset{+}{\psi}_1(x_2) U^{(1,1)}(x_1, x_2 ; x_2', x_1') \psi_1(x_2') \psi_1(x_1') \, dx_1\, dx_2\, dx_1'\, dx_2' + \tag{5.47}$$

$$+ \frac{1}{2} \int \overset{+}{\psi}_2(y_1) \overset{+}{\psi}_2(y_2) U^{(2,2)}(y_1, y_2 ; y_2', y_1') \psi_2(y_2') \psi_2(y_1') \, dy_1\, dy_2\, dy_1'\, dy_2' +$$

$$+ \int \overset{+}{\psi}_1(x) \overset{+}{\psi}_2(y) U^{(1,2)}(x, y ; y', x') \psi_2(y') \psi_1(x') \, dx\, dy\, dx'\, dy' .$$

Как видно, в рассматриваемом представлении получающиеся выражения не зависят от чисел частиц N_1, N_2. Эти числа войдут лишь в матричные элементы выражений через посредство C, соответствующих конкретным значениям этих чисел:

$$(\mathcal{N}_1 - N_1) C = 0 \quad , \quad (\mathcal{N}_2 - N_2) C = 0,$$

где

$$\mathcal{N}_1 = \int \overset{+}{\psi}_1(x) \psi_1(x) \, dx \,, \qquad \mathcal{N}_2 = \int \overset{+}{\psi}_2(y) \psi_2(y) \, dy \,.$$

Если нам приходится иметь дело с состояниями, для которых операторы чисел частиц $\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2$ не имеют определенного значения, то следует просуммировать выражения вида (5.38) по всем N_1, N_2.

Заметим, что все только что отмеченное тривиально распространяется и на случай, когда имеется любое число различных сортов частиц.

В изложенном методе операторные функции, относящиеся к различным сортам частиц, коммутировали. Нетрудно, однако, сделать их антикоммутирующими. Пусть, например, имеем две пары вышерассмотренных операторных функций:

$$\psi_1 \,, \quad \overset{+}{\psi}_1 \;; \quad \psi_2 \,, \quad \overset{+}{\psi}_2 \,. \tag{5.48}$$

Построим новые операторные функции, положив

$$\psi_1' = \psi_1 \;; \quad \overset{+}{\psi}_1{}' = \overset{+}{\psi}_1 \,,$$

$$\psi_2 = (-1)^{\mathcal{N}_1} \psi_2 = \psi_2 (-1)^{\mathcal{N}_1} \;; \quad \overset{+}{\psi}_2{}' = \overset{+}{\psi}_2 (-1)^{\mathcal{N}_1} = (-1)^{\mathcal{N}_1} \overset{+}{\psi}_2 \,. \tag{5.49}$$

Поскольку оператор

$$\mathcal{N}_1 = \int \overset{+}{\psi}_1(x) \psi_1(x) \, dx$$

коммутирует с ψ_2 и $\overset{+}{\psi}_2$, ясно, что свойства коммутации $\psi', \overset{+}{\psi}{}'$ из одной пары не изменятся. Возьмем, однако, две операторные функции (5.49), принадлежащие к различным парам:

$$\nu_1' \,, \quad \nu_2' \,, \qquad \text{где } \nu_1' = \psi_1' \,, \quad \text{или } \overset{+}{\psi}_1{}' \,, \quad \nu_2' = \psi_2' \text{ или } \overset{+}{\psi}_2{}' \,,$$

и заметим, что оператор $\nu_1' = \nu_1$ при перестановке с $\mathcal{N}$ изменяет $\mathcal{N}_1$ на ± 1. Поэтому

$$\nu_1'\nu_2' = \nu_1 (-1)^{\mathcal{N}_1} \nu_2 = -(-1)^{\mathcal{N}_1}\nu_1\nu_2 = -(-1)^{\mathcal{N}_1}\nu_2\nu_1 = -\nu_2'\nu_1'.$$

Таким образом, ν_1' будет антикоммутировать с ν_2'. Вместе с тем очевидно, что в формулах (5.45), (5.47) мы можем, не изменяя результата, заменить операторные функции (5.48) на операторные функции (5.49), поскольку возникающие знакопеременные множители $(-1)^{\mathcal{N}_1}$ взаимно компенсируются.

Сказанное непосредственно обобщается и на случай любого числа сортов. Пусть, действительно, имеем систему пар операторов:

$$\psi_1, \overset{+}{\psi}_1 \; ; \; \psi_2 \overset{+}{\psi}_2 \; ; \; \psi_3 \overset{+}{\psi}_3 \; ; \; \ldots \; \psi_S \overset{+}{\psi}_S ,$$

таких, что любые два из них, относящиеся к различным сортам частиц, коммутируют. Соответствующую систему, у которой операторные функции, относящиеся к различным сортам частиц, антикоммутируют, получим, положив

$$\psi_1' = \psi_1 \; ; \quad \psi_2' = (-1)^{N_1}\psi_2 = \psi_2(-1)^{N_1},$$

$$\psi_a' = (-1)^{N_1 + \cdots N_{a-1}}\psi_a = \psi_a(-1)^{N_1 + \cdots N_{a-1}},$$

$$a = 2, \ldots S$$

и приняв аналогичные выражения для $\overset{+}{\psi}{}'$.

Таким образом, видим, что коммутация или антикоммутация операторных функций, относящихся к различным сортам, может быть выбрана произвольно – так сказать, по соглашению. Общепринятое соглашение – предписывать коммутацию для бозонных операторных функций как с операторными функциями бозонов других сортов, так и с фермионными операторными функциями. Между фермионными операторными функциями, относящимися к различным фермионам, обычно принимают соотношения антикоммутации. Такой выбор удобен, в частности, тем, что позволяет объединить формально в один сорт фермионы различных сортов или бозоны различных сортов за счет дополнения спинового индекса ν индексом сорта a.

Пусть, действительно, имеем в рамках принятого соглашения систему операторных функций:

$$\psi_a(x) \; , \; \overset{+}{\psi}_a(x) \; ; \quad x = (q, \nu) \; ; \quad a = 1, \ldots S$$

для S сортов фермионов или для S сортов бозонов. Чтобы формально привести ее к случаю одного сорта, введем комбинированный индекс

$$\omega = (\nu, a)$$

и новый символ

$$x = (q, \omega) = (q, \nu, a).$$

Тогда, если положить

$$\psi(x) = \psi_a(q, \nu),$$

то легко убедиться, что $\psi(x)$, $\overset{+}{\psi}(x)$ будут удовлетворять обычным перестановочным соотношениям Ферми или Бозе. Имеем, например,

$$[\psi(x); \overset{+}{\psi}(x')]_{\pm} = [\psi_a(q,\nu); \overset{+}{\psi}_{a'}(q',\nu')]_{\pm} = \delta(a-a')[\psi_a(q,\nu); \overset{+}{\psi}_a(q',\nu')]_{\pm} =$$

$$= \delta(a-a')\delta(\nu-\nu')\delta(q-q') = \delta(x-x').$$

Аналогично устанавливаем и остальные соотношения.

<u>Замечания к §2</u>. Сделаем еще ряд дополнительных замечаний по поводу введенных в §2 волновых функций в представлении чисел заполнения. Прежде всего заметим, что благодаря (2.10) и ортонормированности полной системы:

$$\psi_{f_1}(x_1) \cdot \ldots \cdot \psi_{f_N}(x_N)$$

имеем

$$(\varphi_1, \varphi_2) = (F_1, F_2) ,$$

где F_1, F_2 – f-представления, соответствующие φ_1, φ_2. Таким образом, на основании ранее сказанного

$$(C_1, C_2) = (\varphi_1, \varphi_2) \quad \text{для} \quad \begin{matrix} C_1 \longleftrightarrow \varphi_1 , \\ C_2 \longleftrightarrow \varphi_2 . \end{matrix} \qquad (5.50)$$

Рассмотрим теперь равенство (2.10) и воспользуемся неоднократно применявшимся приемом перестройки суммы по индексам $f_1, \dots f_N$ к сумме по всем допустимым системам чисел заполнения. Получим

$$\varphi(x_1,\dots x_N) = \sum_{\binom{\dots n_f \dots}{\sum_f n_f = N}} \sum_{\binom{f_1,\dots f_N}{(f_1,\dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots)}} F(f_1,\dots f_N)\, \psi_{f_1}(x_1)\dots\psi_{f_N}(x_N). \tag{5.51}$$

Возьмем сначала случай системы бозонов. Тогда благодаря (2.27) видим, что $F(f_1,\dots f_N)$, стоящую в (5.51) под знаком второй суммы, можем заменить на

$$\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(\dots n_f \dots)}} \cdot C(\dots n_f \dots).$$

Следовательно,

$$\varphi(x_1,\dots x_N) = \sum_{(\dots n_f \dots)} C(\dots n_f \dots)\, \varphi_{\dots n_f \dots}(x_1,\dots x_N), \tag{5.52}$$

где

$$\varphi_{\dots n_f \dots}(x_1,\dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(\dots n_f \dots)}} \sum_{\left\{\substack{f_1,\dots f_N \\ (f_1,\dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots)}\right\}} \psi_{f_1}(x_1)\dots\psi_{f_N}(x_N). \tag{5.53}$$

Фиксируем какую-либо систему:

$$(f_1',\dots f_N') \backsim (\dots n_f \dots)$$

и рассмотрим произвольную систему $f_1,\dots f_N$, также соответствующую $(\dots n_f \dots)$. Как видно, всегда можно указать такую перестановку P, что

$$P(f_1,\dots f_N) = (f_1',\dots f_N').$$

Суммирование в (5.53) можем поэтому рассматривать как суммирование по всем

$$\mathcal{N}(\dots n_f \dots) = \frac{N!}{\prod_f (n_f!)}$$

различным перестановкам P (включая тождественную). Заметим далее, что если одновременно провести перестановку P над $(x_1,\dots x_N)$ и над $(f_1, f_2,\dots f_N)$, то произведение обычных C-функций

$$\psi_{f_1}(x_1)\ \dots\ \psi_{f_N}(x_N)$$

от этого не изменится. Следовательно, данное произведение равно

$$P\,\psi_{f_1'}(x_1)\dots\psi_{f_N'}(x_N),$$

причем здесь перестановка P действует на $(x_1,\dots x_N)$. Итак, выражение (5.53) можно представить в виде

$$\varphi_{\dots n_f^{(0)} \dots}(x_1,\dots x_N) = \sqrt{\frac{\prod_{(f)}(n_f!)}{N!}} \sum_{(P)} P\,\psi_{f_1'}(x_1)\dots\psi_{f_N'}(x_N). \tag{5.54}$$

Нетрудно установить свойства ортонормированности таких симметризованных произведений. Действительно, из (5.52) видно, что

$$\varphi_{\dots n_f^{(1)} \dots}(x_1,\dots x_N) \longleftrightarrow C_1 = \prod_{(f)} \delta(n_f - n_f^{(1)}).$$

Отсюда благодаря (5.36) находим

$$(\varphi_{\dots n_f^{(1)} \dots},\ \varphi_{\dots n_f^{(2)} \dots}) = \sum_{\dots n_f \dots} \left\{\prod_{(f)} \delta(n_f - n_f^{(1)})\right\}\left\{\prod_{(f)} \delta(n_f - n_f^{(2)})\right\},$$

то есть

$$(\varphi_{\dots n_f^{(1)} \dots},\ \varphi_{\dots n_f^{(2)} \dots}) = \prod_{(f)} \delta(n_f^{(1)} - n_f^{(2)}). \tag{5.55}$$

Итак, в случае Бозе волновая функция в представлении чисел заполнения $C(\dots n_f \dots)$ является коэффициентом разложения симметричной функции

$$\varphi(x_1,\dots x_N)$$

в ряд по функциям (5.53), получающимся из произведения

$$\psi_{f_1}(x_1)\dots\psi_{f_N}(x_N) \tag{5.56}$$

путем симметризации и введения нормирующего множителя $\frac{1}{\sqrt{\mathcal{K}}}$.

Здесь имеем существенное отличие представления чисел заполнения от обычного f –представления (2.10), в котором мы разлагаем симметричную функцию φ по полной системе, вообще говоря, несимметричных функций (5.56). В f –представлении имеем поэтому дополнительное условие симметрии, наложенное на волновые функции $F(f_1,\dots f_N)$, а в представлении чисел заполнения ввиду (5.52) условие симметрии волновых функций $\varphi(x_1,\dots x_N)$ автоматически выполнено при "произвольных" функциях $C(\dots n_f \dots)$.

Совершенно аналогичная ситуация возникает и в случае системы фермионов. Действительно, возвратимся опять к равенству (5.51) и среди

$$(f_1,\dots f_N) \backsim (\dots n_f \dots) \tag{5.57}$$

выберем "упорядоченную" систему:

$$(g_1 < \dots < g_N) \longleftrightarrow (\dots n_f \dots). \tag{5.58}$$

Но для каждой системы $(f_1,\dots f_N)$, удовлетворяющей (5.57), мы, очевидно, можем найти такую перестановку P, что

$$P(f_1,\dots f_N) = (g_1,\dots g_N).$$

Тогда в (5.51)

$$F(f_1,\dots f_N) = (-1)^P F(g_1,\dots g_N) = (-1)^P \frac{1}{\sqrt{N!}} C(\dots n_f \dots),$$

и мы получим

$$\varphi(x_1,\dots x_N) = \sum_{\dots n_f \dots} C(\dots n_f \dots)\, \varphi_{\dots n_f \dots}(x_1,\dots x_N), \tag{5.59}$$

где

$$\varphi_{\dots n_f \dots}(x_1,\dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{(P)} (-1)^P P\, \psi_{g_1}(x_1)\dots\psi_{g_N}(x_N). \tag{5.60}$$

Повторяя рассуждения, только что использованные для случая системы бозонов, убеждаемся, что и эти антисимметризованные функции (5.60) обладают свойством ортонормируемости (5.55). Итак, в случае Ферми волновая функция в представлении чисел заполнения является коэффициентом разложения антисимметричной функции φ в ряд по функциям (5.60), получающимся из произведения (5.56) при помощи антисимметризации и введения нормирующего множителя $1/\sqrt{N!}$.

Отметим в заключение, что правая часть (5.60) есть не что иное, как умноженный на этот множитель детерминант N –го порядка:

$$\mathrm{Det}\,\| \psi_{g_i}(x_j) \|. \tag{5.61}$$

§6. Некоторые аналоги метода вторичного квантования в классической механике. (Уравнение А.А.Власова. Построение микроскопического решения для уравнения Больцмана–Энскога в случае модели упругих шаров)

Займемся сейчас рассмотрением некоторых аналогов метода вторичного квантования в классической механике.

Возьмем для этого систему N одинаковых бесспиновых частиц с гамильтонианом, состоящим из суммы кинетических энергий частиц и потенциальной энергии бинарного взаимодействия, характеризуемого радиально симметричной функцией $\Phi(r)$ (см. (1.38) в §1).

Как видно из изложения §4, метод вторичного квантования в представлении Гейзенберга можно рассматривать как прием формального сведения уравнений динамики данной системы N частиц к уравнению одной точки, движущейся в "самосогласованном" потенциальном поле. Это достигается за счет того, что волновая функция одной частицы $\Psi(t, q)$ (и тем самым, самосогласованный потенциал) становится операторной функцией, удовлетворяющей перестановочным соотношениям Бозе или Ферми (см. (4.58), (4.59), параграф 4).

Рассмотрим какую-либо, например, аддитивную, динамическую переменную:

$$\mathcal{U} = \sum_{1\le j\le N} A_j . \tag{6.1}$$

Тогда в представлении Гейзенберга метода вторичного квантования будем иметь

$$\mathcal{U}(t) = \int A(q_1, q_2)\overset{+}{\Psi}(t, q_1)\Psi(t, q_2)\,dq_1\,dq_2 , \tag{6.2}$$

причем операторные волновые функции удовлетворяют "одночастичному уравнению Шредингера":

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t,q)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_q + U(t,q)\right\}\Psi(t,q) , \tag{6.3}$$

в котором

$$U(t,q) = \int \Phi(q-q')\rho(t,q')\,dq' ,$$

$$\rho(t,q) = \overset{+}{\Psi}(t,q)\Psi(t,q) . \tag{6.4}$$

Для выявления аналогии или, говоря более осторожно, некоторого соответствия между квантовой и классической механикой одной частицы, находящейся во внешнем поле, Вигнером было разработано специальное преобразование, которым мы здесь воспользуемся в рассматриваемом случае квантованных волновых функций.

Возвратимся для этого к выражению (6.2) и совершим в нем замену переменных интегрирования:

$$q_1 = q + \frac{\xi}{2} , \quad q_2 = q - \frac{\xi}{2} . \tag{6.5}$$

Получим

$$\mathcal{U}(t) = \int A\left(q+\frac{\xi}{2}, q-\frac{\xi}{2}\right)\overset{+}{\Psi}\left(t, q+\frac{\xi}{2}\right)\Psi\left(t, q-\frac{\xi}{2}\right)dq\,d\xi .$$

Введем смешанное, координатно-импульсное представление матрицы A, положив

$$A(q,p) = \int A\left(q+\frac{\xi}{2}, q-\frac{\xi}{2}\right)e^{-i\frac{p\xi}{\hbar}}\,d\xi , \tag{6.6}$$

а также квантованный оператор Вигнера:

$$f(t,q,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \overset{+}{\Psi}\left(t, q+\frac{\xi}{2}\right)\overset{+}{\Psi}\left(t, q-\frac{\xi}{2}\right)e^{i\frac{p\xi}{\hbar}}\,d\xi . \tag{6.7}$$

Тогда, учитывая, что

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\cdot\int e^{i\frac{p(\xi-\xi')}{\hbar}}\,dp = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{ik(\xi-\xi')}\,dk = \delta(\xi-\xi') , \tag{6.8}$$

видим, что выражение (6.2) можно представить в форме

$$\mathcal{U}(t) = \int A(q,p)f(t,q,p)\,dq\,dp . \tag{6.9}$$

Из (6.7), (6.8) ясно также, что входящая в (6.4) операторная плотность числа частиц будет представляться интегралом

$$\rho(t,q) = \int f(t,q,p)\,dp . \tag{6.10}$$

Заметим теперь, что, основываясь на уравнении (6.3), нетрудно получить уравнение для операторной функции (6.7). Имеем, действительно, благодаря (6.3), (6.4)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t,q_2)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{q_2}\right\}\Psi(t,q_2) + \int \Phi(q_2-q)\overset{+}{\Psi}(t,q)\Psi(t,q)\Psi(t,q_2)\,dq .$$

Откуда, проводя сопряжение, получим

$$-i\hbar\frac{\partial \overset{+}{\psi}(t,q_1)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{q_1}\right\}\overset{+}{\psi}(t,q_1) + \int \overset{+}{\psi}(t,q_1)\overset{+}{\psi}(t,q)\psi(t,q)\cdot\Phi(q_1-q)\,dq.$$

Таким образом, найдем

$$i\hbar\frac{\partial \overset{+}{\psi}(t,q_1)\psi(t,q_2)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{q_1}-\Delta_{q_2})\overset{+}{\psi}(t,q_1)\psi(t,q_2) + \int\Phi(q_2-q)\overset{+}{\psi}(t,q_1)\overset{+}{\psi}(t,q)\psi(t,q)\psi(t,q_2)\,dq - \int\Phi(q_1-q)\overset{+}{\psi}(t,q_1)\overset{+}{\psi}(t,q)\psi(t,q)\psi(t,q_2)\,dq. \tag{6.11}$$

Но, воспользовавшись перестановочными соотношениями ((4.58) или (4.59), §4), видим, что в обоих случаях

$$\overset{+}{\psi}(t,q_1)\overset{+}{\psi}(t,q)\psi(t,q)\psi(t,q_2) = \overset{+}{\psi}(t,q)\psi(t,q)\overset{+}{\psi}(t,q_1)\psi(t,q_2) - \delta(q-q_1)\overset{+}{\psi}(t,q_1)\psi(t,q_2),$$

и потому

$$\int\Phi(q_2-q)\overset{+}{\psi}(t,q_1)\overset{+}{\psi}(t,q)\psi(t,q)\psi(t,q_2)\,dq - \int\Phi(q_1-q)\overset{+}{\psi}(t,q_1)\overset{+}{\psi}(t,q)\psi(t,q)\psi(t,q_2)\,dq = \{U(t,q_2)-U(t,q_1)-\Phi(q_2-q_1)+\Phi(0)\}\overset{+}{\psi}(t,q_1)\psi(t,q_2).$$

Кроме того, благодаря (6.5) имеем

$$\Delta_{q_1}-\Delta_{q_2} = \left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\vec q}+\frac{\partial}{\partial\vec\xi}\right)^2 - \left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\vec q}-\frac{\partial}{\partial\vec\xi}\right)^2 = 2\frac{\partial}{\partial\vec q}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec\xi}.$$

Следовательно, (6.11) можно представить в форме

$$i\hbar\frac{\partial\overset{+}{\psi}(t,q+\frac{\xi}{2})\cdot\psi(t,q-\frac{\xi}{2})}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec q}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec\xi}\overset{+}{\psi}(t,q+\frac{\xi}{2})\psi(t,q-\frac{\xi}{2}) + \{U(t,q-\frac{\xi}{2})-U(t,q+\frac{\xi}{2})-\Phi(-\xi)+\Phi(0)\}\overset{+}{\psi}(t,q+\frac{\xi}{2})\psi(t,q-\frac{\xi}{2}). \tag{6.12}$$

Помножим обе части этого уравнения на

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3 i\hbar}\cdot e^{i\frac{p\xi}{\hbar}}$$

и проинтегрируем по ξ, а также воспользуемся фурье-разложением:

$$U(t,q\pm\frac{\xi}{2})=\int\tilde U(k)e^{ik(q\pm\xi/2)}dk, \tag{6.13}$$

$$\Phi(\xi)=\int\tilde\Phi(k)e^{ik\cdot\xi}dk.$$

Интегрируя по частям, найдем

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3\cdot i\hbar}\int e^{i\frac{p\xi}{\hbar}}\frac{\partial}{\partial\vec\xi}\overset{+}{\psi}(t,q+\frac{\xi}{2})\cdot\psi(t,q-\frac{\xi}{2})\,d\xi = -\frac{1}{(2\pi\hbar)^3\cdot i\hbar}\int\overset{+}{\psi}(t,q+\frac{\xi}{2})\psi(t,q-\frac{\xi}{2})\frac{\partial}{\partial\vec\xi}e^{i\frac{p\xi}{\hbar}}\,d\xi = -\vec p\, f(t,q,p). \tag{6.14}$$

Имеем далее

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3\cdot i\hbar}\int e^{i\frac{p\xi}{\hbar}}\cdot e^{\pm ik\frac{\xi}{2}}\overset{+}{\psi}(t,q+\frac{\xi}{2})\cdot\psi(t,q-\frac{\xi}{2})\,d\xi = \frac{1}{i\hbar}f(t,q,p\pm\frac{k\hbar}{2}). \tag{6.15}$$

Таким образом, с учетом (6.13), (6.14), (6.15) приходим к следующему уравнению для операторной функции f:

$$\frac{\partial f(t,q,p)}{\partial t} = -\frac{\vec{p}}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{q}} f(t,q,p) -$$

$$-\frac{i}{\hbar}\int\Big\{e^{ik\cdot q}\tilde{U}(k)\Big[f\big(t,q,p-\tfrac{k\hbar}{2}\big)-f\big(t,q,p+\tfrac{k\hbar}{2}\big)\Big]- \qquad (6.16)$$

$$-\tilde{\Phi}(k)\big[f(t,q,p-k\hbar)-f(t,q,p)\big]\Big\}\,dk.$$

Посмотрим, не задумываясь пока над физическим смыслом такой процедуры, во что перейдет это уравнение, если совершить в нем формальный переход к пределу $\hbar\to 0$.

Получим

$$\frac{\partial f(t,q,p)}{\partial t} = -\frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{q}} f(t,q,p) + i\int\Big\{e^{ik\cdot q}\tilde{U}(k)\cdot k - \tilde{\Phi}(k)\cdot\vec{k}\Big\}\,dk \cdot$$

$$\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}} f(t,q,p).$$

Но из (6.13) имеем

$$i\int e^{ik\cdot q}\,\tilde{U}(k)\vec{k}\,dk = \frac{\partial U(t,q)}{\partial\vec{q}} = \int\frac{\partial\Phi(q-q')}{\partial\vec{q}}\rho(t,q')\,dq',$$

$$i\int\vec{k}\cdot\tilde{\Phi}(k)\,dk = \left(\frac{\partial\Phi(\xi)}{\partial\xi}\right)_{\xi=0} = \int\frac{\partial\Phi(q-q')}{\partial\vec{q}}\delta(q-q')\,dq'.$$

Таким образом, формальный переход к пределу $\hbar\to 0$ приводит к уравнению вида

$$\frac{\partial f(t,q,p)}{\partial t} = -\frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{q}} f(t,q,p) + \qquad (6.17)$$

$$+\int\frac{\partial\Phi(q-q')}{\partial\vec{q}}\cdot\big\{\rho(t,q')-\delta(q'-q)\big\}\,dq'\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}} f(t,q,p).$$

Сделав это замечание, возвратимся теперь к выражению (6.9). Если бы ψ, ψ^+ были обычными волновыми C-функциями одной частицы, то выражение (6.2), (6.9) представляло бы среднее значение динамической переменной $\mathfrak{U}$ в момент времени t, а $f(t,q,p)$ была бы зависящей от t обычной C-функцией в шестимерном фазовом пространстве точек (q,p) и являлась бы квантовомеханическим обобщением Вигнера классической функции плотности распределения частицы в данном фазовом пространстве.

Однако, поскольку мы имеем дело с операторными волновыми функциями в представлении Гейзенберга, выражение (6.9) задает саму динамическую величину – оператор $\mathfrak{U}(t)$, и функция $f(t,q,p)$ также является оператором, действующим на состояния рассматриваемой динамической системы из N частиц.

Возникает вопрос – как в такой ситуации перейти к классической механике?

Ответ на него в какой-то степени тривиален. Квантовомеханическим операторам, действующим на состояния динамической системы, соответствуют в классической механике функции состояния, характеризуемого совокупностью пространственных координат и импульсов:

$$q_1(t)\cdots q_N(t);\quad p_1(t),\cdots p_N(t).$$

Рассмотрим динамическую величину аддитивного типа, теперь уже в схеме классической механики:

$$\mathfrak{U} = \sum_{1\le i\le N} A(q_i,p_i).$$

Тогда

$$\mathfrak{U}(t) = \sum_{(1\le i\le N)} A(q_i(t),p_i(t)), \qquad (6.18)$$

где

$$q_i = q_i(t), \quad p_i = p_i(t)$$

как функции времени определяются известными уравнениями классической механики:

$$\frac{d\vec{q}_j}{dt} = \frac{1}{m}\vec{p}_j \ ; \quad \frac{d\vec{p}_j}{dt} = -\sum_{\substack{(1 \le j_1 \le N \\ j_1 \ne j)}} \frac{\partial \Phi(q_j - q_{j_1})}{\partial \vec{q}_j} . \tag{6.19}$$

из (6.18) легко видеть, что

$$\mathfrak{A}(t) = \int A(q,p) f(t,q,p)\, dq\, dp \, , \tag{6.20}$$

где

$$f(t,q,p) = \sum_{(1 \le j \le N)} \delta(q - q_j(t))\,\delta(p - p_j(t)) . \tag{6.21}$$

Здесь, как всегда, $\delta(q-q_j)$, $\delta(p-p_j)$ – трехмерные δ -функции Дирака.

Итак, в классическом аналоге (6.20) квантовомеханической формулы (6.9) выражение (6.21) для f, естественно, оказывается функцией состояния нашей динамической системы – то есть функцией от совокупности $q_j(t)$, $p_j(t)$. Как видно из (6.21), f представляет плотность числа частиц в фазовом пространстве точек (q,p). Заметим еще, что, как и в квантовом случае, мы можем выразить через эту функцию (6.21) бинарные, ... S -кратные динамические величины.

Возьмем, например, бинарную динамическую величину :

$$\mathfrak{B}(t) = \sum_{(1 \le j_1 < j_2 \le N)} B\{q_{j_1}(t), p_{j_1}(t) ; q_{j_2}(t), p_{j_2}(t)\}, \tag{6.22}$$

в которой $\mathfrak{B}$, разумеется, симметрична по отношению к перестановке обеих фазовых точек:

$$\mathfrak{B}\{q,p,q',p'\} = \mathfrak{B}(q',p';q,p).$$

Имеем, очевидно,

$$\mathfrak{B}(t) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{(1 \le j_1 \le N; \\ 1 \le j_2 \le N; \ j_1 \ne j_2)}} B_{j_1 j_2} = \frac{1}{2}\Big\{ \sum_{\substack{1 \le j_1 \le N \\ 1 \le j_2 \le N}} B_{j_1, j_2} - \sum_{1 \le j_1 \le N} B_{j_1, j_1} \Big\}. \tag{6.23}$$

Но

$$\sum_{1 \le j_1 \le N} B_{j_1, j_2} = \int \mathfrak{B}(q,p;q',p') \sum_{1 \le j_1 \le N} \delta(q - q_{j_1}(t))\,\delta(p - p_{j_1}(t)) \sum_{1 \le j_2 \le N} \delta(q' - q_{j_2}(t)) \rightarrow$$

$$\rightarrow \delta(p' - p_{j_2}(t))\, dq\, dp\, dq'\, dp' =$$

$$= \int \mathfrak{B}(q,p;q',p') f(t,q,p) f(t,q',p')\, dq\, dp\, dq'\, dp'$$

и

$$\sum_{1 \le j \le N} B_{j_1, j_1} = \int \mathfrak{B}(q,p;q,p) f(t,q,p)\, dq\, dp =$$

$$= \int \mathfrak{B}(q,p;q',p') f(t,q,p)\, \delta(q-q')\, \delta(p-p')\, dq\, dp\, dq'\, dp'.$$

Итак, учитывая (6.23), получим для бинарной динамической величины следующее выражение:

$$\mathfrak{B}(t) = \frac{1}{2} \int \mathfrak{B}(q,p;q',p') \{ f(t,q',p') - f(t,q,p)\, \delta(q-q')\, \delta(p-p') \} dq\, dp\, dq'\, dp' . \tag{6.24}$$

Совершенно такая же процедура непосредственно обобщается и на случай S -кратных динамических переменных, все они могут быть подобным же образом выражены через функцию f .

Составим теперь уравнение, характеризующее временную эволюцию этой функции. Положим

$$f_j(t,q,p) = \delta(q - q_j(t))\,\delta(p - p_j(t)), \tag{6.25}$$

так что

$$f(t,q,p) = \sum_{1 \le i \le N} f_j(t,q,p). \tag{6.26}$$

Основываясь на уравнениях (6.19), видим, что

$$\frac{\partial f_j(t,q,p)}{\partial t} = \frac{\vec{p}_j}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{q}_j} \delta(q-q_j)\,\delta(p-p_j) - \sum_{\substack{1 \le j_1 \le N \\ (j_1 \ne j)}} \frac{\partial \Phi(q_j - q_{j_1})}{\partial \vec{q}_j} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_j} \delta(q-q_j)\,\delta(p-p_j)$$

или

$$\frac{\partial f_j(t,q,p)}{\partial t} = -\frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial}{\partial \vec{q}}\delta(q-q_j)\delta(p-p_j) +$$

$$+\sum_{\substack{(1\le j_1\le N \\ j_1\ne j)}} \frac{\partial \phi(q-q_{j_1})}{\partial q}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{p}}\delta(q-q_j)\delta(p-p_j). \tag{6.27}$$

Здесь

$$\sum_{\substack{(1\le j_1\le N \\ j_1\ne j)}} \frac{\partial \phi(q-q_{j_1})}{\partial \vec{q}}\cdot\delta(q-q_j) =$$

$$= \int \frac{\partial \phi(q-q')}{\partial \vec{q}}\Big\{\sum_{1\le j_1\le N}\delta(q'-q_{j_1}) - \delta(q'-q_j)\Big\}dq'\cdot\delta(q-q_j) =$$

$$= \int \frac{\partial \phi(q-q')}{\partial \vec{q}}\Big\{\sum_{1\le j_1\le N}\delta(q'-q_{j_1}) - \delta(q'-q)\Big\}dq'\cdot\delta(q-q_j).$$

Но, как видно из (6.2I),

$$\sum_{1\le j_1\le N}\delta(q-q_{j_1}) = \int f(t,q,p)dp = \rho(t,q), \tag{6.28}$$

причем это выражение, очевидно, представляет плотность числа частиц в трехмерном пространстве точек q. Следовательно,

$$\sum_{\substack{(1\le j_1\le N \\ j_1\ne j)}} \frac{\partial \phi(q-q_{j_1})}{\partial \vec{q}}\cdot\delta(q-q_j) =$$

$$= \int \frac{\partial \phi(q-q')}{\partial \vec{q}}\{\rho(t,q') - \delta(q'-q)\}dq'\cdot\delta(q-q_j),$$

и потому из (6.27), (6.25) найдем

$$\frac{\partial f_j(t,q,p)}{\partial t} = -\frac{\vec{p}}{m}\frac{\partial}{\partial \vec{q}}f_j(t,q,p) +$$

$$+\int \frac{\partial \phi(q-q')}{\partial \vec{q}}\cdot\{\rho(t,q') - \delta(q'-q)\}dq'\,\frac{\partial}{\partial \vec{p}}f_j(t,q,p). \tag{6.29}$$

Отсюда, складывая по всем (j), получим искомое уравнение для $f(t,q,p)$:

$$\frac{\partial f(t,q,p)}{\partial t} = -\frac{\vec{p}}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{q}}f(t,q,p) +$$

$$+\int \frac{\partial \phi(q-q')}{\partial \vec{q}}\{\rho(t,q') - \delta(q'-q)\}dq'\frac{\partial}{\partial \vec{p}}f(t,q,p), \tag{6.30}$$

$$\rho(t,q') = \int f(t,q',p')dp'.$$

Как видно, оно полностью совпадает с уравнением (6.I7), которое мы получили из квантового уравнения (6.I6) с помощью формального предельного перехода при $\hbar\to 0$. Из только что приведенного вывода уравнения (6.30) ясно, что в выражении

$$\rho(t,q') - \delta(q'-q)$$

второй член с δ -функцией обусловлен исключением "самодействия" – в уравнении для $\frac{dp_j}{dt}$ в сумме по индексу j_1, стоящей в правой части, исключается член с индексом $j_1=j$.

Если формально регуляризовать функцию $\phi(r)$ хотя бы в сколь угодно малой окрестности $r\sim 0$, то ввиду ее радиальной симметрии

$$\int \frac{\partial \phi(q-q')}{\partial \vec{q}}\cdot\delta(q-q')dq' = \left(\frac{\partial \phi(r)}{\partial \vec{r}}\right)_{r=0} = 0, \tag{6.3I}$$

и мы можем опустить упомянутый член с δ -функцией и написать уравнение (6.30) в форме

$$\frac{\partial f(t,q,p)}{\partial t} = -\frac{\vec{p}}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{q}} f(t,q,p) + \int \frac{\partial \Phi(q-q')}{\partial \vec{q}} \cdot \rho(t,q')\,dq' \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f(t,q,p). \tag{6.32}$$

Это уравнение было впервые открыто А.А.Власовым /7/ и потому называется теперь уравнением Власова. Оно рассматривается обычно как приближенное уравнение для макроскопической (усредненной) плотности числа частиц в шестимерном фазовом пространстве. Следует, однако, подчеркнуть, что именно А.А.Власов также впервые опубликовал в своей монографии /8/, изданной в 1950 году, важное замечание о том, что его уравнение имеет и "микроскопические решения" (6.21), которые мы рассматривали выше, причем указал и на условие (6.31) для исключения "самодействия".

Аналогия между исследованием таких микроскопических решений и методом вторичного квантования обсуждалась в работе Ю.Л.Климонтовича /9/.

Уравнение Власова, выведенное для микроскопических решений, разумеется, может служить источником для получения приближенных уравнений для усредненных функций распределения.

Возьмем, например, какую-либо плотность распределения начальных значений q_j, p_j в момент времени $t=0$:

$$\mathcal{D}(q_1^\circ, p_1^\circ; \cdots q_N^\circ, p_N^\circ)$$

в $6N$ -мерном фазовом пространстве, нормированную на единицу:

$$\int \mathcal{D}(q_1^\circ, p_1^\circ, \dots q_N^\circ, p_N^\circ)\,dq_1^\circ dp_1^\circ \cdots dq_N^\circ dp_N^\circ = 1,$$

и условимся обозначать среднее значение какой-либо динамической величины: $F(t) = F(t, q_1^\circ, p_1^\circ; \dots q_N^\circ, p_N^\circ)$,

$$\int F(t)\,\mathcal{D}(q_1^\circ, p_1^\circ, \dots q_N^\circ, p_N^\circ)\,dq_1^\circ dp_1^\circ \cdots dq_N^\circ dp_N^\circ$$

символом

$$\langle F(t) \rangle .$$

Тогда если в качестве первого приближения принять

$$\langle \rho(t,q')\cdot f(t,q,p)\rangle = \langle \rho(t,q')\rangle \langle f(t,q,p)\rangle, \tag{6.33}$$

то, проводя усреднение в обеих частях уравнения (6.32), получим приближенное уравнение Власова для усредненной функции распределения $\langle f(t,q,p)\rangle$ числа частиц в 6 -мерном фазовом пространстве:

$$\frac{\partial \langle f(t,q,p)\rangle}{\partial t} = -\frac{\vec{p}}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{q}} \langle f(t,q,p)\rangle +$$

$$+ \int \frac{\partial \Phi(q-q')}{\partial \vec{q}} \langle \rho(t,q')\rangle\,dq' \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \langle f(t,q,p)\rangle , \tag{6.34}$$

$$\langle \rho(t,q')\rangle = \int \langle f(t,q',p')\rangle\,dp'.$$

Как видно, это уравнение (6.34) сохранило исходную форму (6.32). Можно также использовать вместо (6.33) и более точные приближения – см., например, монографию Ю.Л.Климонтовича /10/.

Заметим далее, что в классической механике системы из N одинаковых упругих шаров имеется еще одно уравнение – уравнение Больцмана-Энскога, считавшееся всегда лишь приближенным, но которое, тем не менее, имеет и микроскопические решения типа (6.21) /11/.

Формально случай упругих шаров мы можем свести к ранее исследовавшемуся случаю, в котором, однако, бинарная функция взаимодействия сингулярна:

$$\Phi(r) = +\infty, \qquad r < a ,$$
$$\Phi(r) = 0, \qquad r \geq a ,$$

где a – диаметр шара. Такую потенциальную функцию, конечно, можно рассматривать как предел регулярной функции, например,

$$\Phi(r) = b\left\{1 - \left(\frac{r}{a}\right)^2\right\}^2 , \quad r < a ,$$
$$\Phi(r) = 0 , \quad r \geq a$$

при $b \to \infty$. Однако этот предельный переход нам не представляется удобным проводить непосредственно в уравнении (6.32) для функции (6.21), и мы будем здесь исходить прямо из известных классических законов соударения двух упругих шаров.

Возьмем вначале ситуацию, когда наша динамическая система состоит из двух таких шаров, центры которых обозначим через q_1, q_2, а импульсы соответственно через p_1, p_2. Допустимыми будут, очевидно, лишь такие положения точек q_1, q_2, для которых

$$|q_1 - q_2| \geq a. \tag{6.35}$$

Рассмотрим функцию состояний нашей динамической системы:

$$F(q_1, p_1; q_2, p_2)$$

и будем строить выражение для

$$\frac{\partial}{\partial t} F(q_1(t), p_1(t); q_2(t), p_2(t)).$$

Возьмем бесконечно малое положительное приращение времени и составим разность

$$F(q_1^{\Delta t}, p_1^{\Delta t}; q_2^{\Delta t}, p_2^{\Delta t}) - F(q_1, p_1; q_2, p_2), \tag{6.36}$$

где для краткости положено

$$q_j = q_j(t), \quad p_j = p_j(t),$$

$$q_j^{\Delta t} = q_j(t+\Delta t), \quad p_j^{\Delta t} = p_j(t+\Delta t).$$

Если бы в течение данного промежутка времени Δt соударения не произошло, то наши точки – центры шаров – двигались бы равномерно и прямолинейно, т.е. мы имели бы

$$q_j^{\Delta t} = q_j + \frac{p_j}{m}\Delta t,$$

$$p_j^{\Delta t} = p_j, \qquad j = 1, 2.$$

В общем же случае представим исследуемую разность (6.36) в форме

$$F(q_1^{\Delta t}, p_1^{\Delta t}; q_2^{\Delta t}, p_2^{\Delta t}) - F(q_1, p_1; q_2, p_2) = \Delta_1 + \Delta_2, \tag{6.37}$$

где

$$\Delta_1 = F(q_1^{\Delta t}, p_1^{\Delta t}; q_2^{\Delta t}, p_2^{\Delta t}) - F(q_1 + \frac{p_1}{m}\Delta t, p_1; q_2 + \frac{p_2}{m}\Delta t, p_2),$$

$$\Delta_2 = F(q_1 + \frac{p_1}{m}\Delta t, p_1; q_2 + \frac{p_2}{m}\Delta t, p_2) - F(q_1, p_1; q_2, p_2). \tag{6.38}$$

Как видно, разность Δ_1 отлична от нуля, лишь если в промежутке времени Δt произойдет соударение обоих упругих шаров. Ясно, однако, что такое соударение фактически произойдет, если

$$|q_2 - q_1| \geq a, \quad |q_2 - q_1 + \frac{p_2 - p_1}{m}\Delta t| < a. \tag{6.39}$$

Положим для сокращения записи

$$q_2 - q_1 = \vec{r}, \quad |q_2 - q_1| = r, \quad \frac{q_2 - q_1}{|q_2 - q_1|} = \vec{e},$$

$$\frac{p_2 - p_1}{m} = \vec{V}. \tag{6.40}$$

Тогда

$$|q_2 - q_1 + \frac{p_2 - p_1}{m}\Delta t| = |\vec{r} + \vec{V}\Delta t| = |r\vec{e} + \vec{V}\Delta t| =$$

$$= \sqrt{(r\vec{e} + \vec{V}\Delta t)^2} = \sqrt{r^2 + 2r(\vec{e}\vec{V})\Delta t + \Delta t^2}$$

или, так как Δt бесконечно мало,

$$|q_2 - q_1 + \frac{p_2-p_1}{m}\Delta t| = r\sqrt{1+2\,\frac{(\vec{e}\cdot\vec{V})}{r}\Delta t + \frac{\Delta t^2}{r^2}} = \tag{6.41}$$

$$= r + (\vec{e}\cdot\vec{V})\Delta t.$$

Отсюда сразу видно, что в области (6.39) ввиду положительности Δt будет

$$(\vec{e}\cdot\vec{V}) < 0. \tag{6.42}$$

Далее можно заметить, что в области (6.39)

$$\theta(|q_2-q_1|-a) - \theta\left(|q_2-q_1| + \frac{p_2-p_1}{m}\Delta t\right) = 1,$$

$$\theta(-\vec{e}\,\vec{V}) = 1. \tag{6.43}$$

Так как Δ_1, как уже отмечалось выше, может отличаться от нуля лишь в области (6.39), в которой справедливы соотношения (6.43), мы можем представить выражение Δ_1, с учетом (6.40), (6.41), в следующей форме:

$$\Delta_1 = \theta(-\vec{e}\vec{V})\{\theta(r-a) - \theta(r-a+\vec{e}\vec{V}\Delta t)\} \otimes\!\to$$

$$\otimes\!\to \{F(q_1^{\Delta t}, p_1^{\Delta t}; q_2^{\Delta t}, p_2^{\Delta t}) - F(q_1 + \tfrac{p_1}{m}\Delta t, p_1; q_2 + \tfrac{p_2}{m}\Delta t, p_2)\}.$$

Введем одномерную δ-функцию $\delta(x)$, локализованную в интервале $(0,+\infty)$ */:

$$\delta(x) = \lim_{\eta\to 0}\frac{\theta(x)-\theta(x-\eta)}{\eta}. \tag{6.44}$$

Тогда

$$\theta(r-a) - \theta(r-a+\vec{e}\vec{V}\Delta t) = -\vec{e}\,\vec{V}\Delta t\,\delta(r-a),$$

поскольку $\vec{e}\cdot\vec{V}\cdot\Delta t<0$. Далее, так как для фаз из области (6.39) соударение шаров произошло,

$$p_j^{\Delta t} = p_j^*\quad, \quad (j=1,2),$$

где p_j^* обозначает импульсы после соударения. Далее, $q_j^{\Delta t}$, $q_j + \frac{p_j}{m}\Delta t$ будут лишь бесконечно мало отличаться от q_j. Таким образом, найдем, учитывая, естественно, лишь члены первого порядка малости по отношению к Δt,

$$\Delta_1 = \Delta t\,|\vec{e}\cdot\vec{V}|\,\theta(\vec{e}\cdot\vec{V})\,\delta(r-a)\cdot\{F(q_1,p_1^*;q_2,p_2^*) - F(q_1,p_1;q_2,p_2)\}. \tag{6.45}$$

---

*/Как видно из определения (6.44),

$$\delta(x) = 0, \qquad x \neq 0 \tag{6.46}$$

и

$$\int_0^\infty \delta(x)\,dx = 1. \tag{6.47}$$

Заметим, что при обычном определении функции $\delta(x)$ она также локализуется в бесконечно малой окрестности точки $x=0$ (6.46), но не обязательно лишь в бесконечно малой окрестности не положительных x. Поэтому ее условие нормировки будет

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\,dx = 1.$$

(Продолжение сноски см. на стр. 106.)

Найдем сейчас выражения для p_j^*, входящие в (6.45). Рассмотрим относительную скорость $\vec{V}$ (см. (6.40)) и выделим в ней компоненту, параллельную $\vec{r}$ (т.е. параллельную $\vec{e}$), и компоненту, перпендикулярную к $\vec{r}$:

$$\vec{V} = \vec{e}(\vec{e}\cdot\vec{V}) + V_\perp, \qquad V_\perp = \vec{V} - \vec{e}(\vec{e}\cdot\vec{V}). \tag{6.48}$$

Но после соударения $V_\perp$ сохраняется, а $\vec{e}\vec{V}$ меняет знак на обратный:

$$V_\perp^* = V_\perp, \quad \vec{e}\vec{V}^* = -\vec{e}\vec{V}.$$

Поэтому, учитывая (6.48),

$$V^* = -\vec{e}(\vec{e}\cdot\vec{V}) + V_\perp, \qquad \vec{V} - 2\vec{e}(\vec{e}\cdot\vec{V}),$$

то есть

$$p_1^* - p_2^* = p_1 - p_2 - 2\{(p_1 - p_2)\vec{e}\}\vec{e}. \tag{6.49}$$

Но, по закону сохранения суммарного импульса,

$$p_1^* + p_2^* = p_1 + p_2. \tag{6.50}$$

Таким образом, из (6.49), (6.50) получим

$$p_1^* = p_1 - \vec{e}\{(p_1 - p_2)\cdot\vec{e}\},$$
$$p_2^* = p_2 + \vec{e}\{(p_1 - p_2)\cdot\vec{e}\}. \tag{6.51}$$

Как видно, наша δ-функция (6.44) формально может быть определена из обычной δ-функции с помощью соотношения

$$\lim \delta(x-\varepsilon), \quad (\varepsilon > 0, \ \varepsilon \to 0).$$

Таким образом, в (6.45), если считать входящую в правую часть δ-функцию обычной, надо заменить в ней a на $a+0$, то есть сделать замену $a \to a+\varepsilon$ и совершить предельный переход $\varepsilon \to 0$, $\varepsilon > 0$.

Как видно теперь, коэффициент при Δt в (6.45) является функцией вида

$$\delta(r-a)\cdot f\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) = \delta(r-a) f(\vec{e}),$$

зависящей также от $q_1 + q_2$, p_1, p_2, t.

Установим сейчас одно полезное для нас тождество. Имеем

$$\delta(r-a) f\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) = \int \delta(\vec{r} - \vec{R})\delta(R-a) f\left(\frac{\vec{R}}{R}\right) d\vec{R}.$$

Введем орт σ — единичный вектор по направлению $\vec{R}$. Тогда

$$\vec{R} = R\cdot\sigma, \qquad d\vec{R} = R^2\cdot dR\, d\sigma,$$

где, как обычно, $d\sigma$ обозначает бесконечно малый элемент телесного угла. Таким образом, найдем

$$\delta(r-a) f(\vec{e}) = \int \delta(\vec{r} - R\sigma)\delta(R-a) f(\sigma) R^2 dR\, d\sigma =$$
$$= a^2 \cdot \int \delta(\vec{r} - a\sigma) f(\sigma) d\sigma. \tag{6.52}$$

Это тождество мы используем для преобразования выражения Δ_1, задаваемого формулой (6.45).

Будет удобно ввести оператор $B_{1,2}(\sigma)$, действующий лишь на импульсы p_1, p_2, переводя их в "импульсы после соударения" (6.51):

$$B_{1,2}(\sigma) f(p_1, p_2) = f\left(p_1 - \sigma(p_{1,2}\cdot\sigma);\ p_2 + \sigma(p_{1,2}\cdot\sigma)\right),$$
$$p_{1,2} = p_1 - p_2. \tag{6.53}$$

Заметим, что из этого определения вытекает

$$\mathcal{B}_{2,1}(-\sigma) = \mathcal{B}_{1,2}(\sigma). \tag{6.54}$$

Используя (6.40), (6.52), (6.53), напишем для выражения (6.45) следующее представление:

$$\Delta_1 = \frac{\Delta t}{m} a^2 \int \theta(p_{1,2}\cdot\sigma)|(p_{1,2}\cdot\sigma)|\cdot\delta(q_2 - q_1 - a\sigma)\{\mathcal{B}_{1,2}(\sigma) - 1\}\cdot F(q_1, p_1; q_2, p_2)\, d\sigma.$$

Для Δ_2 из (6.38) находим непосредственно

$$\Delta_2=\sum_{j=1,2}\frac{\vec{P}_j}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{q}_j}F(q_1,P_1;q_2,P_2).$$

Итак, на основании (6.37) получим окончательно

$$\frac{\partial F(q_1,P_1;q_2,P_2)}{\partial t}=\sum_{j=1,2}\frac{\vec{P}_j}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{q}_j}F(q_1,P_1;q_2,P_2)+T(1,2)\cdot F(q_1,P_1;q_2,P_2), \quad (6.55)$$

где $T(1,2)$ - оператор, действующий на функции двух фазовых точек:

$$T(1,2)F=\int d^2\theta(P_{12}\cdot\sigma)\frac{|(P_{12}\cdot\sigma)|}{m}\cdot\delta(q_2-q_1-a\sigma)\{B_{1,2}(\sigma)-1\}\longrightarrow$$

$$\longrightarrow F(q_1,P_1;q_2,P_2)\}\,d\sigma. \quad (6.56)$$

В уравнении (6.55)

$$q_j=q_j(t)\ ,\quad P_j=P_j(t)$$

представляет фазовую точку в момент времени t для центра j-той сферы.

Заметим, между прочим, что из самого определения (6.56) вытекает, что

$$T(1,2)=T(2,1), \quad (6.57)$$

поскольку, переставив две фазовые точки, достаточно заменить переменную интегрирования орт σ на $-\sigma$, чтобы получить исходное выражение.

Заметим далее, что если в начальный момент времени $t=0$:

$$|q_1^0-q_2^0|\geq a, \quad (6.58)$$

то и во все последующие моменты времени $t>0$ будем иметь

$$|q_1-q_2|\geq a, \quad (6.59)$$

поскольку, как только $|q_1-q_2|$ станет равным a, произойдет соударение, и это расстояние начнет увеличиваться. Подчеркнем, что условие (6.58) есть просто условие ограничения лишь физически допустимыми траекториями центров упругих шаров, выражающее свойство непроницаемости шаров. Однако само уравнение (6.55) никак не связано с областью (6.59) и формально может быть расширено. В частности, из определения (6.56) сразу же следует, что $T(1,2)=0$ при $|q_1-q_2|<a$. Таким образом, хотя уравнение (6.55) и может быть тривиально расширено и на другие области определения, физически правильные результаты мы получим лишь для области (6.59). Оператор бинарного соударения $T(1,2)$ называется поэтому иногда псевдооператором.

Псевдооператоры бинарных соударений такого типа были введены рядом авторов (см., например, /12,13/). Разумеется, они вводились этими авторами ввиду использования подобного рода операторов для изучения динамических систем из N одинаковых упругих шаров, находящихся в макроскопическом объеме V, которые могут быть приняты в качестве классической модели газа. Перейдем сейчас к рассмотрению такой системы.

Так как соударения шаров в принятой схеме классической механики происходят мгновенно, вероятность того, что данный шар одновременно сталкивается с двумя и более шарами, бесконечно мала, и мы можем учитывать поэтому лишь бинарные столкновения.

Возьмем какую-либо функцию динамического состояния:

$$F=F(q_1,P_1;\dots q_N,P_N),$$

где

$$q_j=q_j(t),\qquad P_j=P_j(t), \quad (6.60)$$

причем предполагается, что для начальных значений выполнены физические условия непроницаемости шаров:

$$|q_{j_1}^0-q_{j_2}^0|\geq a\qquad \text{при}\quad j_1\neq j_2. \quad (6.61)$$

Тогда, поскольку движение частиц равномерно и прямолинейно в промежутках между бинарными соударениями, можем написать

$$\frac{\partial F}{\partial t}=\sum_{1\leq j\leq N}\frac{\vec{P}_j}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{q}_j}F+\sum_{(\alpha)}T_\alpha\cdot F. \quad (6.62)$$

Здесь $\sum\limits_{(\alpha)}$ идет по всем парам частиц, причем каждая пара учитывается, конечно, один раз, выражение для $T_{(\alpha)}$ дается формулой (6.56), в которой вместо индексов $(1,2)$ поставлены индексы частиц, входящих в пару. Так как ввиду (6.57)

$$T_{i,j} = T_{j,i},$$

то в уравнении (6.62)

$$\sum_{(\alpha)} T_\alpha F = \frac{1}{2} \sum_{\substack{1 \le j_1 \le N \\ 1 \le j_2 \le N \\ j_1 \ne j_2}} T_{j_1, j_2} F . \tag{6.63}$$

Применим теперь уравнение (6.62) к частному виду функции типа (6.25):

$$f_j(t, q, p) = \delta(q - q_j(t)) \cdot \delta(p - p_j(t)) . \tag{6.64}$$

Найдем

$$\frac{\partial f_j(t,q,p)}{\partial t} = \frac{\vec{p}_j}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{q}_j} \delta(q - q_j) \delta(p - p_j) +$$

$$+ \sum_{\substack{1 \le j_1 \le N \\ j_1 \ne j}} T(j, j_1) f_j , \tag{6.65}$$

поскольку

$$\frac{1}{2} \{ T(j, j_1) + T(j_1, j) \} = T(j, j_1).$$

При этом

$$\frac{\vec{p}_j}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{q}_j} \delta(q - q_j) \delta(p - p_j) = - \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{q}} f_j(t, q, p). \tag{6.66}$$

Перейдем теперь к раскрытию второго члена в правой части уравнения (6.65). Имеем

$$T(j, j_1) f_j =$$

$$= \frac{a^2}{m} \int \theta(p_{j,j_1} \sigma) |(p_{j,j_1} \sigma)| \delta(q_{j_1} - q_j - a\sigma) \delta(q - q_j) \{ \delta(p - p_j + \sigma(p_{j,j_1} \sigma)) -$$
$$- \delta(p - p_j) \} d\sigma .$$

Откуда, замечая, что

$$\int \delta(q' - q_{j_1}) \delta(p' - p_{j_1} - \sigma(p_{j,j_1} \sigma)) dq' dp' = 1,$$

$$\int \delta(q' - q_{j_1}) \delta(p' - p_{j_1}) dq' dp' = 1,$$

можем написать

$$T(j, j_1) f_j =$$

$$= \frac{a^2}{m} \int \theta(p_{j,j_1} \sigma) |(p_{j,j_1} \sigma)| \delta(q_{j_1} - q_j - a\sigma) \delta(q - q_j) \delta(q' - q_{j_1}) \cdot$$
$$\cdot \delta(p - p_j + \sigma(p_{j,j_1} \sigma)) \delta(p' - p_{j_1} - \sigma \cdot (p_{j,j_1} \sigma)) dq' dp' d\sigma -$$
$$- \frac{a^2}{m} \int \theta(p_{j,j_1} \sigma) |(p_{j,j_1} \sigma)| \delta(q_{j_1} - q_j - a\sigma) \delta(q - q_j) \delta(q' - q_{j_1}) \delta(p - p_j) \delta(p' - p_{j_1}) dq' dp' d\sigma \tag{6.67}$$

Рассмотрим первый член в правой части (6.67), содержащий произведение трехмерных δ -функций :

$$\delta(p - p_j + \sigma(p_{j,j_1} \sigma)) \cdot \delta(p' - p_{j_1} - \sigma(p_{j,j_1} \sigma)). \tag{6.68}$$

Заметим вообще, что если a есть какой-то трехмерный вектор, то, выделяя в нем компоненту $\sigma(a\sigma)$, параллельную σ, и компоненту $a_\perp$, перпендикулярную этому орту, можем представить трехмерную δ -функцию $\delta(a)$ в виде

$$\delta(a) = \delta_1(a \cdot \sigma) \cdot \delta_2(a_\perp),$$

где δ_1 – одномерная, а δ_2 – двумерная δ -функция. Применяя это замечание к произведению (6.68), найдем, что оно будет равно следующему выражению:

$$\delta_1((p - p_j)\sigma + (p_{j,j_1} \cdot \sigma)) \delta_1((p' - p_{j_1})\sigma - (p_{j,j_1} \cdot \sigma)) \delta_2(p^\perp - p_j^\perp) \delta(p'^\perp - p_{j_1}^\perp). \tag{6.69}$$

Но тождественно

$$(p-p_j)\sigma+(p_j-p_{j_1})\sigma=p\sigma-p_{j_1}\sigma=p'\sigma+(p-p')\sigma-p_{j_1}\sigma,$$

$$(p'-p_{j_1})\sigma-(p_j-p_{j_1})\sigma=p'\sigma-p_j\sigma=p\sigma-(p-p')\sigma-p_j\sigma.$$

Поэтому (6.69) может быть записано в форме

$$\delta_1(p\sigma-(p-p')\sigma-p_j\sigma)\delta(p'\sigma+(p-p')\sigma-p_{j_1}\sigma)\delta_2(p^{\perp}-p_j^{\perp})\delta(p^{\perp}-p_{j_1}^{\perp})=$$

$$=\delta(p-(p-p')\sigma-p_j)\cdot\delta(p'+(p-p')\sigma-p_{j_1}). \tag{6.70}$$

Таким образом, в первом члене правой части (6.67) выражение (6.68) может быть заменено на (6.70) и, как видно, $(p_{j_1 j}\cdot\sigma)=-(p-p')\sigma$. Поэтому этот член будет равен

$$\frac{a^2}{m}\int\theta\{(p'-p)\sigma\}|(p'-p)\sigma|\delta(q_{j_1}-q_j-a\sigma)\delta(q-q_j)\delta(q'-q_{j_1})\to$$
$$\to\delta(p-(p-p')\sigma-p_j)\delta(p'+(p-p')\sigma-p_{j_1})\,dq'dp'd\sigma=$$
$$=\frac{a^2}{m}\int\theta\{(p'-p)\sigma\}|(p'-p)\sigma|\cdot\delta(q_{j_1}-q_j-a\sigma)\,\delta(q-q_j)\delta(q'-q_{j_1})\to \tag{6.71}$$
$$\to\delta(p-(p-p')\sigma-p_j)\delta(p'+(p-p')\sigma-p_{j_1})\,dq'dp'd\sigma.$$

Введем оператор $b(\sigma)$, действующий на функции импульсов p, p', определив его соотношением

$$b(\sigma)\psi(p,p')=\psi(p-\sigma\{(p-p')\sigma\},\ p'+\sigma\{(p-p')\sigma\}). \tag{6.72}$$

Тогда из (6.71) имеем

$$\frac{a^2}{m}\int\theta\{(p'-p)\sigma\}|(p'-p)\cdot\sigma|\cdot\delta(q'-q-a\sigma)\,b(\sigma)\,\delta(q-q_{j})\delta(p-p_j)\delta(q'-q_{j_1})\delta(p'-p_{j_1})\to$$
$$\to dq'dp'd\sigma. \tag{6.73}$$

Обратимся теперь ко второму члену правой части (6.67). Здесь, очевидно, $(p_{jj}\cdot\sigma)$ может быть заменено на $(p-p')\sigma$. Совершив над переменной интеграции – ортом σ – замену $\sigma\longrightarrow-\sigma$, представим данный член в виде

$$-\frac{a^2}{m}\int\theta\{(p'-p)\sigma\}\cdot|(p-p')\sigma|\cdot\delta(q'_j-q_j+a\sigma)\delta(q-q_j)\delta(p-p_j)\delta(q'-q_j)\delta(p'-p_j)\to$$
$$\to dq'dp'd\sigma=$$
$$=-\frac{a^2}{m}\int\theta\{(p'-p)\sigma\}|(p'-p)\sigma|\cdot\delta(q'-q+a\sigma)\delta(q-q_j)\delta(p-p_j)\delta(q'-q_j')\delta(p'-p_{j_1})\to \tag{6.74}$$
$$\to dq'dp'd\sigma.$$

Заметим теперь, что, хотя в уравнении (6.65) сумма по j_1 идет с исключением индекса $j_1=j$, мы можем распространить ее по всем j_1, поскольку, как это видно уже из (6.67), имеем тождество

$$T(j,j)f_j=0,$$

ибо так как $\sigma^2=1$, то

$$\delta(q_j-q_j-a\sigma)=\delta(-a\sigma)=0.$$

Поэтому, полагая

$$\sum_{1\le j_1\le n}\delta(q'-q_{j_1})\delta(p'-p_{j_1})=f(t,q,p) \tag{6.75}$$

и вспоминая, что на основании (6.64)

$$\delta(q-q_j)\delta(p-p_j)=f_j(t,q,p), \tag{6.76}$$

а также учитывая представления (6.73), (6.74) для членов правой части равенства (6.67), найдем

$$\sum_{1\le j\le N}T(j,j_1)f_j=$$
$$=\frac{a^2}{m}\cdot\int\theta\{(p'-p)\cdot\sigma\}\cdot|(p'-p)\cdot\sigma|\{\delta(q'-q-a\sigma)b(\sigma)-\delta(q'-q+a\sigma)\}f_j(t,q,p)\to$$
$$\to f(t,q',p')\,dq'\cdot dp'd\sigma.$$

Подставив это выражение в уравнение (6.65), будем иметь

$$\frac{\partial f_j(t,q,p)}{\partial t}=-\frac{\vec{p}}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{q}}f_j(t,q,p)+$$
$$+\frac{a^2}{m}\int\theta\{(p'-p)\sigma\}\cdot|(p'-p)\sigma|\{\delta(q'-q-a\sigma)b(\sigma)-\delta(q'-q+a\sigma)\}f_j(t,q,p)f(t,q',p')\to$$
$$\to dq'dp'd\sigma$$

или, выполняя интеграцию по q', запишем

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f_j(t,q,p)}{\partial t} &= -\frac{\vec{p}}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{q}} f_j(t,q,p) + \\
&+ \frac{a^2}{m}\int \theta\{(p'-p)\cdot\sigma\}|(p'-p)\cdot\sigma|\cdot\{f_j(t,q,p^*)f(t,q+a\sigma,p^{*\prime}) - \\
&- f_j(t,q,p)f(t,q-a\sigma,p')\}\,dp'\,d\sigma,
\end{aligned}
\tag{6.77}
$$

где

$$
\begin{aligned}
p^* &= p - \sigma\{(p-p')\cdot\sigma\}, \\
p^{*\prime} &= p' + \sigma\{(p-p')\cdot\sigma\}.
\end{aligned}
\tag{6.78}
$$

Просуммируем теперь обе части уравнения (6.77) по всем $j=1,\dots N$. Тогда, учитывая (6.75), получим

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f(t,q,p)}{\partial t} &= -\frac{\vec{p}}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{q}} f(t,q,p) + \\
&+ \frac{a^2}{m}\int \theta\{(p'-p)\cdot\sigma\}|(p'-p)\sigma|\{f(t,q,p^*)f(t,q+a\sigma,p^{*\prime}) - \\
&- f(t,q,p)f(t,q-a\sigma,p')\}\,dp'\,d\sigma.
\end{aligned}
\tag{6.79}
$$

Нетрудно заметить, что это есть уравнение Больцмана-Энскога. Преобразуем его сейчас, для удобства сравнения, с введением общепринятой нормировки. Так, в кинетической теории газов в уравнение Больцмана-Энскога вместо импульсов обычно используются скорости. Имеем

$$
p = mV, \quad p' = mV', \quad p_j(t) = mV_j(t),
$$

так что

$$
\begin{aligned}
f(t,q,p) &= \sum_{1\le j\le N} \delta(q-q_j(t))\cdot\delta(mV - mV_j(t)) = \\
&= \frac{1}{m^3}\sum_{1\le j\le N} \delta(q-q_j(t))\cdot\delta(V-V_j(t)).
\end{aligned}
$$

Далее, сейчас

$$
\int \sum_{1\le j\le N} \delta(q-q_j(t))\,\delta(V-V_j(t))\,dq\,dV = N.
$$

Поэтому, чтобы перейти к обычной нормировке

$$
\frac{1}{V}\int_{(V)} dq \int dV\, F(t,q,V) = 1,
\tag{6.80}
$$

где V – макроскопический объем, в котором движутся наши частицы, положим

$$
\begin{aligned}
F(t,q,V) &= \frac{1}{n}\sum_{1\le j\le N} \delta(q-q_j(t))\cdot\delta(V-V_j(t)), \\
n &= \frac{N}{V}.
\end{aligned}
\tag{6.81}
$$

Тогда в уравнении (6.79) будем иметь

$$
f(t,q,p) = \frac{n}{m^3}F(t,q,V), \quad dp' = m^3 dV'
$$

и, таким образом, приходим к стандартной форме уравнения Больцмана-Энскога:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F(t,q,V)}{\partial t} &= -\vec{V}\frac{\partial}{\partial \vec{V}}F(t,q,V) + \\
&+ a^2 n \int_{(V'-V)\sigma\ge 0} |(V'-V)\sigma|\cdot\{F(t,q,V^*)\cdot F(t,q+a\sigma,V^{*\prime}) - \\
&\qquad - F(t,q,V)F(t,q-a\sigma,V')\}\,dV'\,d\sigma,
\end{aligned}
\tag{6.82}
$$

в котором

$$
\begin{aligned}
V^* &= V - \sigma((V-V')\cdot\sigma), \\
V^{*\prime} &= V' + \sigma((V-V')\cdot\sigma).
\end{aligned}
\tag{6.83}
$$

Рассмотрим также функцию

$$
\begin{aligned}
W(t,q,V) &= m^3 f_1(t,q,p) = \\
&= \delta(q-q_1(t))\cdot\delta(V-V_1(t))
\end{aligned}
\tag{6.84}
$$

с нормировкой

$$
\int_{(V)} dq\cdot\int dV\cdot W(t,q,V) = 1,
\tag{6.85}
$$

(V)–объем, dV – скорость.

Для нее из (6.77) при $j=1$ найдем

$$\frac{\partial W(t,q,V)}{\partial t} = -\vec{V}\frac{\partial}{\partial q} W(t,q,V) +$$
$$+a^2 n \int\limits_{(V'-V)6>0} |(V'-V)6| \{W(t,q,V^*)F(t,q+a6,V'^*) - W(t,q,V)F(t,q-a6,V')\} dV' d6. \quad (6.86)$$

Как видно из определений (6.81), (6.84),

$$n \cdot F(t,q,V)\, dq \cdot dv$$

представляет число частиц в фазовом объеме $dq \cdot dv$, а $W(t,q,p)$ представляет плотность распределения фазы одной фиксированной – "первой частицы". Подчеркнем, что в литературе уравнение Больцмана-Энскога всегда рассматривалось лишь как приближенное. Мы же показали выше, что оно имеет и микроскопические решения вида (6.81). Это было впервые получено в работе /II/.

Из микроскопических уравнений (6.82), (6.86) можно получить и приближенные уравнения для усредненных макроскопических функций[x/]:

$$< F(t,q,V) >, \qquad < W(t,q,V) > .$$

Если опять воспользоваться в качестве первого приближения приближением типа (6.33) для уравнения Власова, положив

$$< F(t,q',V') \cdot F(t,q,V) > = < F(t,q',V') >< F(t,q,V) >$$

и

$$< W(t,q,V) \cdot F(t,q',V') > = < W(t,q,V) >< F(t,q',V') >, \quad (6.87)$$

[x/] Подчеркнем, что выражения (6.81), (6.84) для $F(t,q,V)$, $W(t,q,V)$ зависят от $q_j(t)$, $V_j(t)$ и, тем самым, являются функциями также начальных значений этих переменных:

$$F(t,q,V) = F(t,q,V;\, q_1^\circ, V_1^\circ, \ldots q_N^\circ V_N^\circ),$$
$$W(t,q,V) = W(t,q,V;\, q_1^\circ, V_1^\circ, \ldots q_N^\circ, V_N^\circ). \quad (6.88)$$

Для усреднения используем какую-либо функцию распределения

$$\mathcal{D}(q_1^\circ, V_1^\circ, \ldots q_N^\circ, V_N^\circ)$$

с условием нормировки

(Продолжение сноски см. на стр. II7.)

то для макроскопических усредненных функций распределения

$$< F(t,q,V) >, \qquad < W(t,q,V) > \quad (6.91)$$

получим также уравнения (6.82), (6.86), но, разумеется, для функций (6.9I) они будут уже приближенными ввиду использования приближенного "расцепления" (6.87).

Кстати, заметим, что если для $< F(t,q,V) >$ возьмем равновесное максвелловское распределение

$$F(q,V) = \varphi(V) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{mV^2}{2\theta}}, \quad (6.92)$$

то, положив в приближенном уравнении (6.86) для $< W(t,q,V) >$

$$< W(t,q,V) > = \varphi(V) \cdot \Psi(t,q,V) \quad (6.93)$$

и отметив, что тождественно

$$\varphi(V) \cdot \varphi(V') = \varphi(V^*) \cdot \varphi(V'^*),$$

получим приближенное уравнение:

$$\frac{\partial \Psi(t,q,V)}{\partial t} = -\vec{V} \cdot \frac{\partial}{\partial q} \Psi(t,q,6) +$$
$$+ a^2 n \int\limits_{(V'-V)6>0} |(V'-V)6| \{\Psi(t,q,V^*) - \Psi(t,q,V)\} \varphi(V') dV' d6. \quad (6.94)$$

$$\int \mathcal{D}(q_1^\circ, V_1^\circ, \ldots q_N^\circ, V_N^\circ)\, dq_1^\circ dV_1^\circ \ldots dq_N^\circ dV_N^\circ = 1$$

и притом, разумеется, такую, которая обращается в нуль для нефизических состояний, когда шары "проникают" друг в друга, то есть

$$\mathcal{D}(q_1^\circ, V_1^\circ, \ldots q_N^\circ, V_N^\circ) = 0, \quad (6.89)$$

если хотя бы для одной пары двух различных частиц $|q_{j_1}^\circ - q_{j_2}^\circ| < a$. Тогда используем следующие определения:

$$< F(t,q,V) > = \int F(t,q,V)\, \mathcal{D}(q_1^\circ, V_1^\circ, \ldots q_N^\circ V_N^\circ)\, dq_1^\circ dV_1^\circ \ldots dq_N^\circ dV_N^\circ,$$
$$< W(t,q,V) > = \int W(t,q,V)\, \mathcal{D}(q_1^\circ, V_1^\circ, \ldots q_N^\circ V_N^\circ)\, dq_1^\circ dV_1^\circ \ldots dq_N^\circ dV_N^\circ. \quad (6.90)$$

Уравнение это обычно используется в кинетической теории газов для изучения диффузии одной выделенной частицы в газе, находящемся в состоянии статистического равновесия.

Возвратимся теперь к уравнению (6.82). Мы уже видели, что, кроме приближенных решений, основанных на аппроксимационной формуле (6.87), оно имеет и микроскопические решения (6.81). Естественно поэтому, что этим нелинейным уравнением можно воспользоваться и для получения более точных приближений – в принципе, сколь угодно точных. Разумеется, существенные трудности весьма быстро возрастают при переходе к более точным формулам. В этой связи отметим работу /I4/, в которой авторы, исходя из нелинейного уравнения Больцмана (получающегося из (6.82) заменой в аргументах F : $q+a\sigma\to q$, $q-a\sigma\to q$), сумели получить приближения, которые выходят за рамки общепринятых представлений о пределах применимости уравнений этого типа.

Заметим еще, что все вышеизложенные рассуждения непосредственно обобщаются и на тот случай, когда кроме непроницаемого ядра имеется и обычное бинарное взаимодействие:

$$\phi(r) = +\infty \;, \qquad r < \frac{a}{2}\,,$$
$$\phi(r) = \Phi_0(r)\,, \quad r \geq \frac{a}{2}\,, \qquad \Phi_0'(r) = 0\,, \quad r < a\,, \tag{6.95}$$

где $\Phi_0(r)$ – регулярная функция r в интервале $(a, +\infty)$, то есть на тот случай, когда между центрами упругих шаров имеются и регулярные бинарные взаимодействия. Тогда можно дословно повторить все наши рассуждения, и все различие сведется к тому, что к выражению $T(1,2)$, заданному формулой (6.56), надо лишь добавить член

$$\frac{\partial \Phi(q_1-q_2)}{\partial \vec{q}_1}\cdot\left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1}\right). \tag{6.96}$$

Чтобы убедиться в этом, достаточно лишь соответственно изменить выражения Δ_1, Δ_2 (6.38) для разности (6.37), положив

$$\Delta_1 = F(q_1^{\Delta t}, p_1^{\Delta t}; q_2^{\Delta t}, p_2^{\Delta t}) - F\left(q_1+\frac{p_1}{m}\Delta t, p_1 - E\Delta t; q_2+\frac{p_2}{m}\Delta t, p_2+E\Delta t\right),$$

$$\Delta_2 = F\left(q_1+\frac{p_1}{m}\Delta t, p_1 - E\cdot\Delta t; q_2+\frac{p_2}{m}\Delta t, p_2+E\cdot\Delta t\right) - F(q_1, p_1; q_2, p_2)\,,$$

где

$$E = \frac{\partial \phi(q_1-q_2)}{\partial \vec{q}_1}.$$

Преобразование Δ_1 совершается точно так же, как и раньше, и приводит к тому же псевдооператору $T(1,2)$, от раскрытия же члена Δ_2 как раз и произойдет добавка (6.96).

Ввиду наличия дополнительного к $T(1,2)$ оператора (6.96) к уравнениям (6.82), (6.86) добавятся "власовские члены", и мы получим, соответственно, уравнения для функций (6.81), (6.84):

$$\frac{\partial F(t,q,v)}{\partial t} = -\vec{v}\cdot\frac{\partial}{\partial \vec{q}} F(t,q,v) + $$
$$+ a^2 n \int\limits_{(v'-v)\cdot\sigma>0} |(v'-v)\cdot\sigma|\cdot\{F(t,q,v^*)F(t,q+a\sigma,v'^*) - F(t,q,v)\cdot F(t,q-a\sigma,v')\}\,dv'd\sigma + \tag{6.97}$$
$$+ \int \frac{\partial \Phi_0(q-q')}{\partial \vec{q}}\,\rho(t,q')\,dq'\,\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial \vec{v}} F(t,q,v)\,,$$

$$\frac{\partial w(t,q,v)}{\partial t} = -\vec{v}\frac{\partial}{\partial \vec{q}} w(t,q,v) + \int \frac{\partial \Phi_0(q-q')}{\partial \vec{q}}\cdot\rho(t,q')\,dq'\,\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial \vec{v}} w(t,p,q) + \tag{6.98}$$
$$+ a^2 n \int\limits_{(v'-v)\cdot\sigma>0} |(v'-v)\cdot\sigma|\cdot\{w(t,q,v^*)F(t,q+a\sigma,v'^*) - w(t,q,v)F(t,q-a\sigma,v')\}\,dv'd\sigma,$$

в которых

$$\rho(t,q) = n\cdot\int F(t,q,v)\,dv. \tag{6.99}$$

Подчеркнем в заключение, что все изложенные рассуждения, относившиеся к динамической системе из N упругих шаров, существенно основаны на мгновенности процесса бинарного соударения и потому не могут быть точно перенесены на случай квантовой механики, где процессы соударения упругих шаров совершаются за конечный промежуток времени (пропорциональный константе $\hbar$ Планка). Что же касается обобщения изложенных результатов в рамках классической механики на случай системы упругих шаров, принадлежащих к различным сортам, например, на случай, когда имеется n различных систем одинаковых шаров, причем шары, принадлежащие к разным сортам, имеют разные диаметры и разные законы регулярных бинарных взаимодействий, то такое обобщение может быть проведено изложенным выше методом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Dirac P.A.M. Theory of the Emission and Absorption of Radiation. Proc.Roy.Soc., 1927, A 144, p. 243-262.
2. Jordan P., Wigner E. Über das Paulische Äquivalenzverbot. Z. für Phys.,1928, 47, p.631-658.
3. Vok W. Konfigurationsraum und zweite Quantelung. Z. für Phys., 1932, 75, p.622-647; Zur Quantenelectrodynamik. Soviet Phys., 1934, 6, p.425.
4. Боголюбов Н.Н. Лекции по квантовой статистике. "Радяньска школа", Киев, 1949, гл.2, с.38-65; Избранные труды, т.II, "Наукова думка", Киев, 1970, с.319-350.
5. Березин Ф.А. Метод вторичного квантования. "Наука", М.,1965.
6. Боголюбов Н.Н. (мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов."Наука",М.,1974; Bogolubov N.N. Jr. A Method for Studying Model Hamiltonians. Pergamon Press,Oxford - New York, 1972.
7. Власов А.А. ЖЭТФ, 1937, 7, с.203; Известия АН СССР, серия физ., 1944, VIII, №5.
8. Власов А.А. Теория многих частиц. Гостехиздат, М., 1950, с.92.
9. Климонтович Ю.Л. ЖЭТФ, 1957, 33, с.982.
10. Климонтович Ю.Л. Статистическая теория неравновесных процессов в плазме. Изд-во МГУ, М., 1964.
11. Боголюбов Н.Н. Микроскопические решения уравнения Больцмана-Энскога в кинетической теории для упругих шаров. ТМФ, 1975, т.24, №2.
12. Hopfild J.J., Bastin J.F. Phys.Rev.,1968, 168, p.193.
13. Sengers J.V., Cohen E.G.D. Physica, 1961, 27, 230; Ernst M.H., Dorfman J.R., Hogy W.R., van Leeuven J.M.J. Physica, 1969, 45, p.1927.
14. Ubbink J.T., Hauge E.H. Physica, 1973, 70, p.297.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 марта 1980 года.