8 Идеальные системы бозонов и фермионов

Больцмановское приближение перестает работать при низких температурах и (или) высоких плотностях числа частиц. Здесь начинает играть существенную роль природа объектов, из которых состоит система, а именно – имеют частицы целый или полуцелый спин или, точнее, симметричны или антисимметричны относительно перестановок частиц волновые функции системы.

8.1 Симметричность и антисимметричность волновых функций

Пусть $\varphi = \varphi(x_1, \ldots, x_N)$ – волновая функция трехмерной системы N одинаковых частиц, где x_i – совокупность пространственных координат и дополнительных квантовых чисел i-й частицы. В силу тождественности частиц гамильтониан $\hat{H}$ системы не может зависеть от нумерации частиц, т. е. от того, какую частицу считать 1-й, какую 2-й и т.д. Поэтому $\hat{H}$ должен быть симметричным по отношению ко всем перестановкам частиц и коммутировать с оператором перестановок $\hat{P}$: $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$.

Назовем транспозицией $\hat{T}$ одну перестановку между i-й и j-й частицами $(i \neq j)$. Если $\hat{T}\varphi = \varphi$, то волновая функция симметрична, и так как любая перестановка $\hat{P}$ получается последовательным применением $\hat{T}$, то $\hat{P}\varphi = \varphi$. Другой возможный случай – антисимметричная волновая функция: $\hat{T}\varphi = -\varphi$; в этом случае $\hat{P}\varphi = (-1)^P\varphi$.

Поскольку P – интеграл движения, то свойство симметрии не изменяется с течением времени. Указанные возможности приводят к двум типам статистики: статистика Бозе – Эйнштейна (симметричные состояния) и статистика Ферми – Дирака (антисимметричные состояния).

8.2 Числа заполнения

Перейдем от непрерывного x–представления к дискретному f–представлению $\varphi(x_1, \ldots, x_N) \longrightarrow \Phi(f_1, \cdots, f_N)$:

$$\varphi(x_1, \ldots, x_N) = \sum_{f_1 \cdots f_N} \Phi(f_1, \cdots, f_N)\Psi_{f_1}(x_1) \cdots \Psi_{f_N}(x_N), \tag{1}$$

где

$$\Phi(f_1, \cdots, f_N) = \int \varphi(x_1, \ldots, x_N) \Psi^*_{f_1}(x_1) \cdots \Psi^*_{f_N}(x_N) dx_1 \cdots dx_N). \qquad (2)$$

Здесь $f \equiv (\vec{p}, \sigma)$ – дискретный индекс); $\Phi(f_1, \cdots, f_N)$ – волновая функция в дискретном $f-$ представлении.

Введем вместо аргументов $(f_1, \ldots, f_N)$ систему чисел заполнения $(\ldots, n_f, \ldots)$ – чисел частиц в состоянии f, положив

$$n_f = \begin{cases} 0, & \text{если } f \text{ отсутствует среди } f_1, f_2, \ldots, f_N; \\ m, & \text{если } f \text{ встречается m раз среди } f_1, \ldots, f_N; \end{cases}$$

$$\sum_f n_f = N.$$

Антисимметричная волновая функция $\Phi(f_1, \cdots, f_N)$ обращается в нуль, если среди $f_1, \ldots, f_N$ найдется хотя бы одна пара равных f – принцип Паули. Следовательно, все $f_1, \ldots, f_N$ должны быть различными и какое-либо f_i может встречаться не более одного раза: $n_f = 0, 1$ – ферми–статистика. Такие частицы имеют спин кратный $\hbar/2$ и называются фермионами.

Очевидно, что в случае симметричной волновой функции числа заполнения могут принимать любые значения: $n_f = 0, 1, 2, \ldots, N$ – бозе–статистика. Эти частицы имеют целый спин (кратный $\hbar$) и называются бозонами.

Задание $\{f_i\}$ однозначно определяет систему чисел заполнения $\{n_{f_i}\}$. Возьмем теперь, наоборот, систему чисел заполнения и рассмотрим все те $\{f_i\}$, для которых $\{n_{f_i}\}$ является соответствующей системой : $\{f_i\} \leftrightarrow \{n_{f_i}\}$. Из самого определения чисел заполнения следует, что n_{m_1} элементов из $f_1, \ldots, f_N$ принимают значения m_1, n_{m_2} – значения m_2 и т.д. Любое распределение N элементов $f_1, \ldots, f_N$ по s группам $m_1, \ldots, m_s$ из $n_{m_1}, \ldots, n_{m_s}$ элементов в каждой группе приводит к той же самой системе чисел заполнения. Таким образом, данная система чисел $\{n_{f_i}\}$ определяет набор $\{f_i\}$ с точностью до разбиений N частиц на s групп $(s \leq N)$ по $n_{m_1}, \ldots, n_{m_s}$ элементов. Поэтому число $\eta\{n_{f_i}\}$ всех возможных наборов $\{f_i\}$, отвечающих системе $\{n_{f_i}\}$, равно

$$\eta\{n_{f_i}\} = \sum_{(f_1, \ldots, f_N) \leftrightarrow (\ldots, n_f, \ldots)} 1 = \frac{N!}{\prod\limits_f n_f!} \ . \qquad (3)$$

Волновая функция в представлении чисел заполнения для бозе–систем имеет вид $C(\ldots,n_f,\ldots) = \sqrt{\eta}\Phi(f_1,\ldots,f_N)$. Для ферми–систем $\eta = N!$ и $C(\ldots,n_f,\ldots) = \sqrt{N!}\Phi(f_1,\ldots,f_N)$. Если занумеровать те f, для которых $n_f = 1$, в порядке возрастания $f = m_1, m_2, \ldots, m_N \quad (m_1 < m_2 < \cdots < m_N)$, то

$$C(\ldots,n_f,\ldots) = \sqrt{N!}\Phi(m_1,\ldots,m_N), \quad \sum_f n_f = N.$$

Нормировочный множитель $\sqrt{\eta}$ обеспечивает сохранение скалярного произведения при переходе от n_f–представления к f–представлению:

$$\begin{aligned}
(\Phi_1,\Phi_2) &= \sum_{\{f_i\}} \Phi_1^*(f_1,\cdots,f_N)\Phi_2(f_1,\cdots,f_N) = \\
&= \sum_{\{f_i\}} \frac{1}{\sqrt{\eta}}C_1^*(\ldots,n_f,\ldots)\frac{1}{\sqrt{\eta}}C_2(\ldots,n_f,\ldots) = \\
&= \sum_{\{n_{f_i}\}} \frac{N!}{\prod\limits_f n_f!}\frac{1}{\eta}C_1^*(\ldots,n_f,\ldots)C_2(\ldots,n_f,\ldots) = (C_1,C_2)\,.
\end{aligned}$$

8.3 Задача о гармоническом осцилляторе и оператор числа частиц

Рассмотрим на примере задачи об одномерном гармоническом осцилляторе возможность введения операторов рождения и уничтожения частицы – основу представления вторичного квантования. Стационарное уравнение Шредингера для осциллятора имеет вид

$$\hat{H}_1\Psi = \varepsilon\Psi, \tag{4}$$

где гамильтониан $\hat{H}_1$ есть

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{m\omega^2}{2}q^2.$$

Введем безразмерную координату $\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2}\,q$. Тогда уравнение Шредингера запишется как

$$\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)\Psi = \varepsilon\Psi$$

или
$$\frac{\hbar\omega}{2}\left[\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)+\left(\frac{d}{d\xi}\xi-\xi\frac{d}{d\xi}\right)\right]\Psi=\varepsilon\Psi. \qquad (5)$$
Вводя обозначения
$$a^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right),\ a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right) \qquad (6)$$
и учитывая, что коммутатор
$$\left[\frac{d}{d\xi},\xi\right]=\frac{d}{d\xi}\xi-\xi\frac{d}{d\xi}=\hat{1},$$
получим уравнение Шредингера в новой записи:
$$\hbar\omega a^{+}a\Psi=\varepsilon'\Psi,$$
где $\varepsilon'=\varepsilon-\varepsilon_0$ – энергия, отсчитываемая от основного состояния с $\varepsilon_0=\hbar\omega/2$.

Результатом наших манипуляций является запись гамильтониана осциллятора через понижающий a и сопряженный ему повышающий a^{+} операторы:
$$\hat{H}_1=\hbar\omega a^{+}a. \qquad (7)$$
Непосредственным вычислением получим перестановочные соотношения для операторов a, a^{+} :
$$\left[a,a^{+}\right]=aa^{+}-a^{+}a=\left[\frac{d}{d\xi},\xi\right]=\hat{1},\ \ [a,a]=\left[a^{+},a^{+}\right]=0. \qquad (8)$$

Собственные векторы и спектр энергии ε_n' найдем, определив основное состояние (вакуум) $|0\rangle$ как $a\,|0\rangle=0$. Это дифференциальное уравнение
$$\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\Psi_0(\xi)=0,$$
решение которого дает волновую функцию основного состояния
$$\Psi_0(\xi)=\frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\xi^2/2\right).$$

Любой вектор $|n\rangle$ состояния с собственным значением ε'_n найдем путем последовательного применения оператора a^+ :

$$|1\rangle = c_1 a^+ |0\rangle\,, \ \ |2\rangle = c_2 a^+ |1\rangle\,, \ \ \ldots, \ \ |n\rangle = c_n a^+ |n-1\rangle\,, \qquad (9)$$

где c_i – постоянные, которые должны обеспечивать нормировку вектора $|n\rangle$. Умножая (9) на сопряженный вектор $\langle n|\, a c_n^*$, найдем скалярные произведения:

$$\langle 1 \mid 1\rangle = |c_1|^2 \langle 1 \mid 1\rangle = 1, \text{ откуда } c_1 = 1;$$

$$\langle 2 \mid 2\rangle = c_2^* \langle 1 |a| 2\rangle = |c_2|^2 \left\langle 1 \left|aa^+\right| 1\right\rangle =$$

$$= |c_1|^2 |c_2|^2 \left\langle 0 \left|a\left(a^+a+1\right)a^+\right| 0\right\rangle = |c_1|^2 |c_2|^2 \left[\left\langle 0 \left|aa^+aa^+\right| 0\right\rangle + \left\langle 0 \left|aa^+\right| 0\right\rangle\right] =$$

$$= |c_1|^2 |c_2|^2 \left[\left\langle 0 \left|\left(a^+a+1\right)\left(a^+a+1\right)\right| 0\right\rangle + \left\langle 0 \left|a^+a+1\right| 0\right\rangle\right] = 2|c_1|^2 |c_2|^2 = 1,$$

откуда $c_2 = 1/\sqrt{2}$; и т. д. :

$$\langle n \mid n\rangle = n\,|c_n|^2 = 1, \ c_n = 1/\sqrt{n}.$$

(Здесь было принято во внимание, что $a^+a^+\cdots a\,|0\rangle = 0$.) Таким образом, действие оператора a^+ определяется уравнением

$$a^+ |n-1\rangle = \sqrt{n}\,|n\rangle\,, \text{ или } |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^+\right)^n |0\rangle\,. \qquad (10)$$

Найдем теперь результат действия оператора a. Так как

$$a\left(a^+\right)^n = aa^+\left(a^+\right)^{n-1} = \left(a^+a+1\right)\left(a^+\right)^{n-1} =$$

$$= a^+a\left(a^+\right)^{n-1} + \left(a^+\right)^{n-1} = \cdots = \left(a^+\right)^n a + n\left(a^+\right)^{n-1},$$

то

$$a\left(a^+\right)^n |0\rangle = n\left(a^+\right)^{n-1} |0\rangle\,,$$

т.е.

$$\sqrt{n!}a\,|n\rangle = n\sqrt{(n-1)!}\,|n-1\rangle\,,$$

откуда

$$a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\,. \qquad (11)$$

Используя (11) и (10), легко показать, что a^+a есть эрмитов оператор с собственными значениями, равными n:

$$a^+a\,|n\rangle = n\,|n\rangle\,. \tag{12}$$

Таким образом, a^+a является оператором номера n состояния осциллятора и задача (4) свелась к задаче нахождения собственных значений оператора a^+a :

$$\hbar\omega a^+a\,|n\rangle = n\hbar\omega\,|n\rangle\,,$$

т. е. спектр энергий осциллятора есть $\varepsilon_n' = n\hbar\omega$, где $n = 0, 1, 2, \ldots$ – индекс уровня энергии, или $\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

Представление вторичного квантования основано на следующей интерпретации операторов (6): состояние $|0\rangle$ есть вакуум, действуя на который оператором a_f^+, получим одночастичное состояние $|1_f\rangle$ с энергией ε_f; оператор a_f уничтожает состояние $|1_f\rangle$. Состояние, задаваемое вектором $|\ldots, n_f, \ldots\rangle$ есть состояние с n_f частицами, каждая из которых имеет энергию ε_f, а оператор $a_f^+a_f$ есть оператор числа частиц такого состояния: $\hat{n} \equiv a_f^+a_f$. Операторы $a_f^+,\ a_f$ с коммутационными соотношениями (см.(8))

$$\left[a_f, a_{f'}^+\right] = \delta_{ff'}, \left[a_f, a_{f'}\right] = \left[a_f^+, a_{f'}^+\right] = 0 \tag{13}$$

называют бозе–операторами, соответственно, рождения и уничтожения частицы в состоянии с квантовыми числами f:

Для систем составленных из фермионов также можно ввести операторы рождения b_f^+ и уничтожения b_f со свойствами, обусловленными антисимметричностью волновых функций (или принципом Паули):

$$\begin{aligned} b_f^+\,|\ldots, n_f, \ldots\rangle &= \sqrt{1 - n_f}\,(-1)^{\sum\limits_{i<f} n_i}\,|\ldots, n_f + 1, \ldots\rangle\,, \\ b_f\,|\ldots, n_f, \ldots\rangle &= \sqrt{n_f}\,(-1)^{\sum\limits_{i<f} n_i}\,|\ldots, n_f - 1, \ldots\rangle\,, \end{aligned} \tag{14}$$

$$\left[b_f, b_{f'}^+\right]_+ = \delta_{ff'}, \left[b_f, b_{f'}\right]_+ = \left[b_f^+, b_{f'}^+\right]_+ = 0, \tag{15}$$

где $[a, b]_+ = ab + ba$ – антикоммутатор. Из (14) видно, что если $n_f = 1$, т. е. состояние занято фермионом, то $b_f^+\,|\ldots, 1_f, \ldots\rangle = 0$ – в соответствии с принципом Паули.

Гамильтониан системы N невзаимодействующих частиц в представлении вторичного квантования есть обобщение формулы (7)

$$\hat{H} = \sum_f \varepsilon_f a_f^+ a_f = \sum_f \varepsilon_f \hat{n}_f. \qquad (16)$$

где $\hat{n}_f = a_f^+ a_f$ – оператор числа частиц в состоянии f:

$$\hat{n}_f \left| \ldots, n_f, \ldots \right\rangle = n_f \left| \ldots, n_f, \ldots \right\rangle. \qquad (17)$$

8.4 Большая статистическая сумма квантовой системы

Найдем теперь большую статистическую сумму системы N невзаимодействующих частиц. Одночастичное состояние f задается квантовыми числами импульса $\vec{p}$ и проекции спина на ось z $s_z \equiv \sigma/2$: $\varepsilon_f \equiv \varepsilon_{p\sigma}$. Если вырождение по спину не снято, то все $g_s = 2s+1$ состояний с проекциями спина $s_z = -s, -s+1, \ldots, 0, \ldots, s-1, s$ и одинаковым импульсом p имеют одну и ту же энергию $\varepsilon_{p\sigma} = \varepsilon_p$. Каноническая статистическая сумма системы имеет вид

$$Z_N = Tr \exp\left(-\beta \hat{H}\right) = \sum_{\{n_f\}} \exp\left(-\beta \sum_f \varepsilon_f n_f\right) \delta_{N, \sum\limits_f n_f}. \qquad (18)$$

След в (18) вычисляется так: для каждого значения $f \equiv (\vec{p}, \sigma)$ выполняется суммирование по всем возможным значениям чисел заполнения n_f одночастичного состояния f. Но из-за условия фиксированности числа частиц $\sum_f n_f = N$ вычисление (18) усложняется: статсумма не факторизуется, так как не все n_f являются независимыми индексами.

Эта трудность снимается переходом к большому каноническому ансамблю. Большую статистическую сумму системы можно записать как

$$\tilde{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_f\}} \exp\left[-\beta \sum_f (\varepsilon_f - \mu) n_f\right] \delta_{N, \sum\limits_f n_f}. \qquad (19)$$

Поскольку ограничение на число частиц снято, т. е. $\sum\limits_f n_f$ может быть любой, то суммирование по n_f в (19) можно выполнять независимо:

$$\tilde{Z} = \sum_{\{n_f\}} \exp\left[-\beta \sum_f (\varepsilon_f - \mu) n_f\right] = \prod_f \sum_{n_f} \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu) n_f\right] = \prod_f Z_f. \qquad (20)$$

Теперь большая статсумма получена в виде произведения, каждый сомножитель которого относится уже не к отдельной частице, как это было в больцмановском приближении, но к одночастичному состоянию f:

$$Z_f = \sum_{n_f} \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu)n_f\right]. \tag{21}$$

Для систем бозонов $n_f = 0, 1, 2, \dots$, поэтому

$$Z_f^B = \sum_{n_f=0}^{\infty} \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu)n_f\right] = \frac{1}{1 - \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu)\right]}, \tag{22}$$

а для ферми–системы $n_f = 0, 1$ и

$$Z_f^F = \sum_{n_f=0}^{1} \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu)n_f\right] = 1 + \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu)\right]. \tag{23}$$

Если ввести параметр η, принимающий значение $+1$ для системы бозонов и -1 для фермионной системы, то большую статистическую сумму можно написать в виде общей формулы:

$$\tilde{Z} = \prod_f \left(1 - \eta \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu)\right]\right)^{-\eta}. \tag{24}$$

Большой термодинамический потенциал идеальной квантовой системы есть

$$J = -kT \ln \tilde{Z} = \eta kT \sum_f \ln\left(1 - \eta \exp\left[-(\varepsilon_f - \mu)/kT\right]\right), \tag{25}$$

а давление –

$$P = -\eta \frac{kT}{V} \sum_f \ln\left(1 - \eta \exp\left[-(\varepsilon_f - \mu)/kT\right]\right). \tag{26}$$

8.5 Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака

Большое каноническое распределение квантовой системы также представляется в факторизованном виде:

$$P_{\{n_f\}N} = \frac{1}{\tilde{Z}} \exp\left[-\beta \sum_f (\varepsilon_f - \mu)n_f\right] = \prod_f P_{n_f} \tag{27}$$

где
$$P_{n_f} = \frac{1}{Z_f} \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu) n_f\right] \; -$$
вероятность того, что уровень f заселен n_f частицами.

Найдем среднюю заселенность состояния f:
$$\langle n_f \rangle = \sum_{n_f} n_f P_{n_f} \equiv \frac{\partial \ln Z_f}{\partial(\beta\mu)}. \tag{28}$$
Подставляя в (28) выражения (22) и (23), найдем распределение Бозе – Эйнштейна
$$\langle n_f \rangle_{\text{Б–Э}} = \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_f - \mu)\right] - 1} \tag{29}$$
и распределение Ферми – Дирака
$$\langle n_f \rangle_{\text{Ф–Д}} = \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_f - \mu)\right] + 1}. \tag{30}$$

Различие природы частиц, составляющих систему, результировалось в единице, стоящей в знаменателе квантовых распределений с разными знаками: $+1$ – для системы частиц целого спина (бозонов) и -1 – полуцелого спина (фермионов). При тех условиях, когда этой единицей можно пренебречь, а именно, если $\exp(-\beta\mu) \gg 1$, получим предельное, не зависящее от природы частиц, распределение – распределение Максвелла – Больцмана:
$$\langle n_f \rangle^{\text{Ф–Д}}_{\text{Б–Э}} \longrightarrow \langle n_f \rangle \simeq \exp\left[-\beta(\varepsilon_f - \mu)\right]. \tag{31}$$
(В следующей лекции условия такого перехода будут рассмотрены более подробно.)

С помощью распределений Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака могут быть непосредственно вычислены наблюдаемые величины – плотность числа частиц n и внутренняя энергия системы U
$$n \equiv \frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{V} \sum_f \langle n_f \rangle, \; U \equiv \langle E \rangle = \sum_f \langle n_f \rangle \varepsilon_f. \tag{32}$$