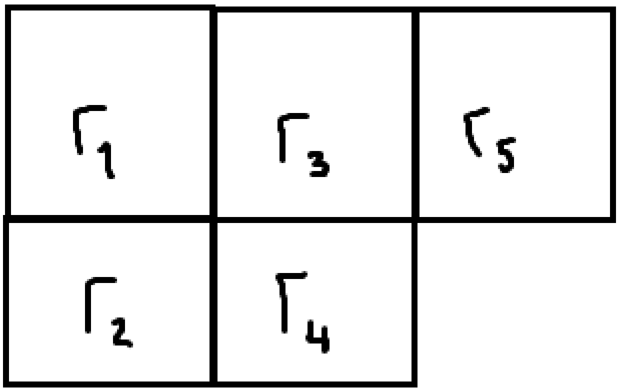
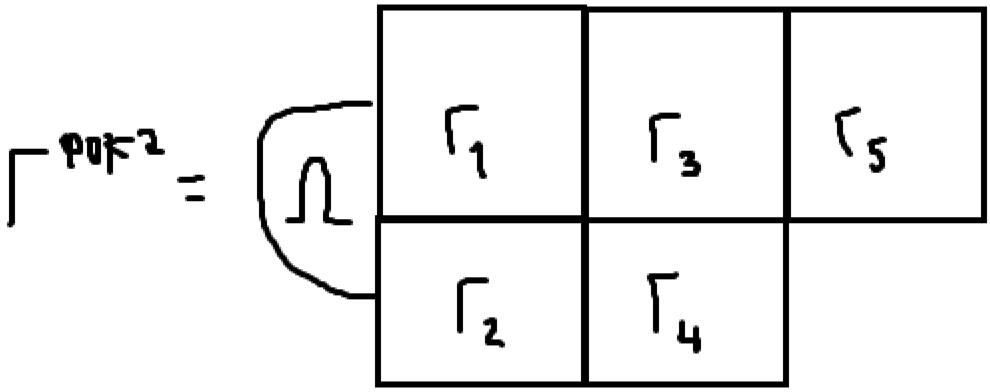
Приступаем к построениям квантовой теории поля, где у нас не будет чёткой привязки к кол-ву частиц.
Обозначим за $Г^1$ гильбертово пространство всех одночастичных ВФ,
$Г^2$ - гильбертово пространство всех двухчастичных ВФ,
$Г^3$ - гильбертово пространство всех одночастичных ВФ
И т.д.
Вот так они выглядят:



К ним добавим ещё одно состояние, которое мы обозначим как |Ω> и будем. называть «вакуум» или $Г^0$.
То, что получилось



Будем называть гильбертовым пространством Фока.
Чуть более строго: гильбертовым пространством Фока называется прямое (декартово) произведение N-частичных подпространств.

Например, рассмотрим фоковскую ВФ:

$$\Psi = \frac{1}{2}\varphi^1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi^2 + \frac{1}{2}\varphi^3$$

Где φ_1 – какая-то одночастичная функция, φ_2 – какая-то двухчастичная ВФ, φ_3 – какая-то трёхчастичная ВФ.
Физический смысл: с вероятностью ¼ у нас одна частица, с вероятностью ½ две, с вероятностью ¼ три.

Введём оператор числа частиц $\widehat{N}$. Его действие легко показать на примере:

$$< \Psi\left|\widehat{N}\right|\Psi > = \frac{1}{4} * 1 + \frac{1}{2} * 2 + \frac{1}{4} * 3 = 2$$

В среднем у нас две частицы.

Теперь перейдём к операторам рождения и уничтожения. Но сначала нам нужно в каждом Γ^n выбрать какой-нибудь базис (или, что то же самое, представление). Давайте для условности выберем энергетический, хотя можно какой угодно.

Тогда $\widehat{a_n^+}$ имеет смысл добавления в систему частицы на n-ный энергетический уровень, $\widehat{a_n^-}$ - удаления частицы с n-ного энергетического подуровня.

Замечание. А что будет, если частицы на n-ном энергетическом уровне нет, а мы её удаляем? В этом случае возвращается нулевая ВФ |0>.
Также |0> возвращается в том случае, если у нас фермионы с принципом запрета Паули, а мы пытаемся добавить ещё частицу на уровень, где мест уже нет.

Коммутаторы операторов рождения и уничтожения:

$$\left[\widehat{a_n^-}, \widehat{a_m^+}\right] = б_{nm}$$

$$[\widehat{a_n^-}, \widehat{a_m^-}] = \left[\widehat{a_n^+}, \widehat{a_m^+}\right] = 0$$

Думаю, понятно, почему он именно такие: рождение и уничтожение частиц на разных энергетических уровнях происходит независимы, поэтому тогда операторы коммутируют, а не коммутируют лишь, когда мы рождаем и уничтожаем на одном энергетическом уровне.

Достаточно теории, начнём же решать задачи.

Вакуумные средние

Типичная задача в КТП – подсчёт вакуумных средних. Начнём тренироваться:

$$< \Omega\left|\widehat{a_n^-}\widehat{a_k^+}\right|\Omega >$$

Начинаем считать. $\widehat{a_k^+}$ действует на вакуум $|\Omega >$, так что теперь у нас не просто вакуум, а одна частица на k-том энергетическом уровне. Это удобно записать в виде вот такой вот строки:
|00000…001000…>
Где единица стоит на k-том месте. Т.е. мы добавили частицу на k-тый уровень. Теперь действуем оператором уничтожения $\widehat{a_n^-}$. Заметим, что если k!=n, то мы пытаемся «убрать» частицу с n-го уровня, где до этого её и так не было. В этом случае возвращается нулевая ВФ.

А вот если k=n, то мы убираем как раз ту частицу, которую только что добавили. Получаем снова вакуум |00000…000000…>. Что, ответ б$_{nk}|\Omega >$? Почти. Дело в том, что операторы рождения и уничтожения не только добавляют или убирают частицу, но и домножают на $\sqrt{n+1}$ для $\widehat{a_n^+}$ и на $\sqrt{n}$ для $\widehat{a_n^-}$. Так что ответ б$_{nk}|\Omega > * \sqrt{n+1} * \sqrt{n}$.

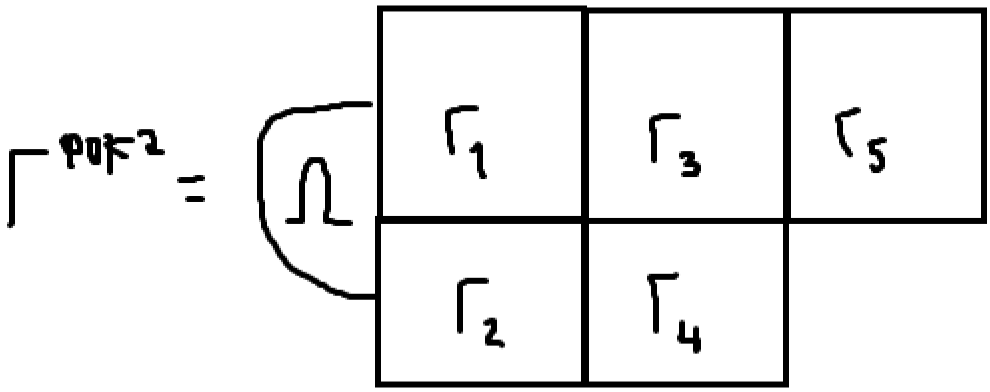
Заметим, что все такие средние

$$< \Omega|\dots \widehat{a_n^-}|\Omega >$$

Будут равны 0, т.к. мы пытаемся отнять у «нищего» - у вакуума, в котором и так частиц нет.
Аналогично будут равны 0 и

$$< \Omega\left|\widehat{a_k^+} \dots\right|\Omega >$$

Т.к. мы под конец частицу добавили, конечная ВФ не будет содержать части в $Г^0$, а будет лежать частично в $Г_1$, частично в $Г_2$, где угодно



Но вот вакуумной части у неё не будет, а нам же надо будет на <Ψ| скалярно домножать, так что скалярное произведение будет ноль.
Пример:

$$< \Omega\left|\exp\left(\widehat{a_k^+}\right)\widehat{O}\right|\Omega >$$

Понятно, что явно посчитать мы не можем из-за неясности явного вида $\widehat{O}$, но мы можем упростить выражение, исключив экспоненту.
Распишем экспоненту в ряд:

$$< \Omega|\sum_{m=0}^{+\infty} \widehat{a_k^+}^{\;n} \widehat{O}|\Omega >$$

Можно вот так вот, явно:

$$< \Omega|\left(1 + \widehat{a_k^+} + \frac{\widehat{a_k^+}^2}{2!} + \cdots\right)\widehat{O}|\Omega >$$

И пользуясь свойством $< \Omega\left|\widehat{a_k^+} \dots\right|\Omega >$, получаем, что все слагаемые занулятся, кроме

$$< \Omega|\hat{O}|\Omega >$$

Вот мы и упростили выражение.

Представление ВФ как операторов

Говорят, что о вторичном квантовании ВФ также становится оператором. Это некий жаргон. Разберёмся в нём.

Любую ВФ можно представить как вакуум, на который просто много раз подействовали оператором рождения.

Например, возьмём ВФ, 2 частицы находятся на третьем энергетическом уровне и 3 – на пятом:

Чтобы получить это состояние из вакуума, нам нужно два раза подействовать $\widehat{a_3^+}$ и три раза $\widehat{a_5^+}$. Можно сказать, что $|\Psi> = \widehat{a_3^+}^2 \widehat{a_5^+}^3 |\Omega>$. (Можно было и записать $|\Psi> = \widehat{a_5^+}^3 \widehat{a_3^+}^2 |\Omega>$, благо что операторы коммутируют).

Запишем это вот так вот: $|\Psi> = \hat{\Psi}^+|\Omega>$, где $\hat{\Psi}^+ = \widehat{a_3^+}^2 \widehat{a_5^+}^3$. Т.е. мы поставили в соответствие ВФ оператор, который создаёт эту ВФ из вакуума.

Именно это имеют в виду, когда говорят, что при вторичном квантовании операторами становятся не только физические величины, но и волновые функции.

Формально у нас для ВФ теперь два представления: обычное, какое было в начале

$$\Psi = \frac{1}{2}\varphi^1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi^2 + \frac{1}{2}\varphi^3$$

И как набор операторов рождения (а может, даже местами уничтожения), которыми надо подействовать на вакуум, чтобы получить состояние. Последнее гораздо нагляднеей, поэтому его и используют.

Аналогично вводят $\hat{\Psi}^-$ как обратный оператор к $\hat{\Psi}^+$: $|\Omega> = \hat{\Psi}^-|\Psi>$ - оператор, который даунгрейдит нашу ВФ до вакуума.

Аналогия с Макдаком

Если читателю были понятны мои речи до этого момента, то он может пропустить этот «несерьёзный» раздел. А для остальных давайте заметим, что ВФ вторичного квантования ну очень похожи на заказ еды в Макдаке:

Только вместо еды там частицы:

Частицы нейросеть нарисовала в виде зелёных ёлочный игрушек.

Соответственно, ВФ в духе

$$\widehat{a^+_{\text{картошка фри}}}^2 \widehat{a^+_{\text{чизбургер}}}^3 |\Omega >$$

Означает «закажи две картошки фри и три чизбургера» ☺

Сообразите, то же ли получится, если поменять порядок заказа:

$$\widehat{a^+_{\text{чизбургер}}}^3 \widehat{a^+_{\text{картошка фри}}}^2 |\Omega >$$

Ответ: то же, т.к. любые два оператора рождения разной ~~еды~~ частиц коммутируют между собой.

Теперь давайте про операторы уничтожения, т.е. поедания жратвы. Вот чему равно такая ВФ?

$$\widehat{a^-_{\text{лимонад}}} \widehat{a^+_{\text{чизбургер}}}^3 \widehat{a^+_{\text{картошка фри}}}^2 |\Omega >$$

Мы не заказали лимонад, а пытались его скушать (точнее, попить). Естественно, такое недопустимо – данная ВФ равна нулевой ВФ $|0>$. Не путать нулевую ВФ с вакуумом, вакуумом будет вот такая ВФ):

$$\widehat{a^-_{\text{лимонад}}} \widehat{a^+_{\text{лимонад}}} |\Omega >$$

Где мы сначала покупаем лимонад, а затем его выпиваем, возвращаясь к тому, с чего мы начинали – вакуума. (Соответственно, вакуумное среднее

$$< \Omega | \widehat{a^-_{\text{лимонад}}} \widehat{a^+_{\text{лимонад}}} |\Omega >$$

равно $< \Omega|\Omega >$, т.е. 1.

Ещё пример:

$$< \Omega | \widehat{a^-_{\text{картошка по−деревенски}}}^3 \sin\left(\widehat{a^+_{\text{картошка по−деревенски}}}\right) |\Omega >$$

Давайте запишем синус через ряд:

$$< \Omega | \widehat{a^-_{\text{картошка по−деревенски}}}^3 \left(\widehat{a^+_{\text{картошка по−деревенски}}} - \frac{\widehat{a^+_{\text{картошка по−деревенски}}}^3}{6} + \cdots\right) |\Omega >$$

Можем записать ряд вакуумных слагаемых:

$$< \Omega \left| \widehat{a^-_{\text{картошка по−деревенски}}}^3 \widehat{a^+_{\text{картошка по−деревенски}}} \right| \Omega > + < \Omega \left| \widehat{a^-_{\text{картошка по−деревенски}}}^3 \frac{\widehat{a^+_{\text{картошка по−деревенски}}}^3}{6} \right| \Omega > + \cdots$$

Во вторичном квантовании у нас в конце не может в конце остаться еда (т.к. вакуум ортогонален любому состоянию, его не содержащему):

$$< \Omega \left| \widehat{a^-_{\text{картошка по−деревенски}}}^2 \right| \Omega > 0 = 0$$

Так что занулятся все слагаемые, кроме одного, которое и даст ответ: -1/6.

Читателю предлагается подумать самому, почему из принципа «в конце не должно остаться еды» вот такое вакуумное среднее

$$< \Omega|a^{-}_{\widehat{\text{картошка по-деревенски}}}{}^{3}\cos\left(a^{+}_{\widehat{\text{лимонад}}}\right)\sin\left(a^{+}_{\widehat{\text{картошка по-деревенски}}}\right)|\Omega >$$

будет нулём.

Возвращаемся в физику. Что с операторами координаты-импульса?

А как выглядят в пространстве Фока привычные нам операторы координаты, импульса и т.д.?

Ответ: зависит от базиса (представления), которое мы выбрали для операторов рождения и уничтожения. Если оно соответствует оператору $\widehat{\mathrm{O}}$, который мы хотим «расширить» на пространство Фока, то формула простая:

$$\widehat{\mathrm{O}} = \sum_{n} \text{СЗ}_n\, \widehat{a_n^{+}}\widehat{a_n^{-}}$$

Пример: вот так легко запишется гамильтониан

$$\widehat{H} = \sum_{n} E_n\, \widehat{a_n^{+}}\widehat{a_n^{-}}$$

Если мы выберем для операторов рождения и уничтожения энергетический базис.

Но что, если не так? Например, нам нужно в одном представлении построить и гамильтониан, и оператор координаты. Мы не можем построить каждый в своём базисе, кому-то придётся «подстроиться». В этом случае потребуется более общая, но и более громоздкая формула:

$$\widehat{\mathrm{O}} = \sum_{n,N} \mathrm{O}_{nN}\, \widehat{a_n^{+}}\widehat{a_N^{-}}$$

Где O_{nN} - матричные элементы: $\mathrm{O}_{nN} =< n|\mathrm{O}|N >$.

Отметим, что приведённые выше формулы были верны, если операторы одночастичные. Что это значит?

Давайте вспомним атомную физику. Вот оператор кин.энергии:

$$\widehat{T_k} = \frac{\widehat{p_k}^2}{2m}$$

Он одночастичный. Оператор потенциальной энергии тоже одночастичный:

$$\widehat{U_k} = U_{\text{ядра}} * (\text{волновая функция})$$

А вот оператор кулоновского отталкивания двух электронов двухчастичный:

$$\widehat{\mathrm{O}_{kn}} = \frac{e^2}{|\widehat{\boldsymbol{r}_k} - \widehat{\boldsymbol{r}_n}|}$$

Так вот, все наши формулы пригодны именно одночастичных операторов. А для двухчастичных операторов всё сложнее. Так, формула для фоковского оператора в произвольном базисе

$$\widehat{O} = \sum_{n,N} O_{nN}\, \widehat{a_n^+}\widehat{a_N^-}$$

Сменится для двухчастичного оператора на

$$\widehat{O} = \sum_{n,N,m,M} O_{nNmM}\, \widehat{a_m^+}\widehat{a_M^-}\widehat{a_n^+}\widehat{a_N^-}$$

Где O_{nNmM} - уже такой матричный элемент $O_{nNmM} =< nm|O|NM >$.

Аналогично строится фоковское расширение операторов и для трёхчастичных, и для более-частичных операторов.

В заключение давайте обсудим, как считается среднее значение оператора. Давайте вернёмся к $\widehat{\Psi}^+$ и $\widehat{\Psi}^-$. Если мы их выражаем в тот же базисе, что и операторы рождения-уничтожения, то они записываются очень просто в духе $\widehat{a_3^+}^2\widehat{a_5^+}^3$. Однако часто операторы-рождения уничтожения в энергетическом пространстве (или, как в КЭД, в импульсном пространстве), а ВФ нам нужны в координатном. В этом случае операторы ВФ запишутся как:

$$\widehat{\Psi}^+(\boldsymbol{r}) = \sum_n \varphi_n(\boldsymbol{r})\, \widehat{a_n^+}$$

$$\widehat{\Psi}^-(\boldsymbol{r}) = \sum_n \varphi_n(\boldsymbol{r})\, \widehat{a_n^-}$$

Вот теперь давайте подсчитаем среднее значение оператора $\widehat{F}$:

$$< F >= \iiint dV(\boldsymbol{r})\, \widehat{\Psi}^+(\boldsymbol{r})\widehat{F}(\boldsymbol{r})\widehat{\Psi}^-(\boldsymbol{r})$$

Всё точно так же, как в квантмехе:

$$< F >= \iiint dV(\boldsymbol{r})\, \Psi^*(\boldsymbol{r})\widehat{F}(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r})$$

Только ВФ – это оператор.

Если оператор двухчастичный, то формула усложняется:

$$< U >= \iiint \iiint dV(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})\, \widehat{\Psi}^+(\boldsymbol{r_1})\widehat{\Psi}^+(\boldsymbol{r_2})\widehat{U}(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})\widehat{\Psi}^-(\boldsymbol{r_1})\, \widehat{\Psi}^-(\boldsymbol{r_2})$$

Примеры – по возрастанию сложности (часть давал Парфёнов на КР)

Задача 1. Построить фоковские операторы импульса и энергии для одномерной частицы в ящике длиной L с непроницаемыми стенками.

Решение.
Соображаем: от нас просят одночастичный оператор, так что воспользуемся формулой для одночастичного оператора:

$$\widehat{\mathrm{O}} = \sum_n \text{СЗ}_n\, \widehat{a_n^+}\widehat{a_n^-}$$

$\Psi(0) = \Psi(l) = 0 => \Psi(x) = const * \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)$, где n натуральное число. $p = hk = \frac{h\pi n}{L}$. Т.е. импульс квантуется – принимает дискретные значения $\frac{h\pi}{L} * n$ в форме арифметической прогрессии.
Подставляем в формулу для импульса:

$$\hat{p} = \sum_n p\widehat{a_n^+}\widehat{a_n^-} = \sum_{n=1} \frac{h\pi n}{L} \widehat{a_n^+}\widehat{a_n^-}$$

где $\widehat{a_n^+}$ - оператор рождения частицы с проекцией импульса $p = \frac{h\pi n}{L}$, $\widehat{a_n^-}$- - оператор уничтожения частицы с проекцией импульса $p = \frac{h\pi n}{L}$.
У нас проблема – ряд вида $\sum_n const * n\, \widehat{a_n^+}\widehat{a_n^-}$ и он расходится!!!
Любой физик-теоретик скажет вам, что во вторичном квантовании такое встречается сплошь и рядом.
Физики-теоретики разработали два варианта действий:
1) Ультрафиолетовое обрезание – искусственно обрывается суммирование на каком-то импульсе, частоте, энергии. Это имеет и физический смысл – при больших импульсах, энергиях, частотах начинаются всякие квантовые электродинамики, петли и Фейнманы, где наша модель всё равно не работает.
2) Перенормировка: нас не интересует сама энергия, нас интересует изменение энергии. Мы эту бесконечность называем нулевым уровнем, а вот возбуждённое состояние получится вычитанием $\infty - \infty$ и получением НЕ ∞ ☺
В данном случае будет уместней ультрафиолетовое обрезание:

$$\hat{p} = \sum_{n=1}^{n_{\text{обрез}}} \frac{h\pi n}{L} \widehat{a_n^+}\widehat{a_n^-}$$

Аналогично поступим с энергией:

$$\widehat{H} = \sum_n E_n\, \widehat{a_n^+}\widehat{a_n^-}$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{h\pi n}{L}\right)^2 = \frac{\left(\frac{h\pi}{L}\right)^2}{2m} * n^2$$

$$\widehat{H} = \sum_{n=1} \frac{\left(\frac{h\pi}{L}\right)^2}{2m} * n^2 \widehat{a_n^+}\widehat{a_n^-}$$

Ряд опять расходится, снова порежем по ультрафиолету:

$$\widehat{H} = \sum_{n=1}^{n_{\text{обрез}}} \frac{\left(\frac{h\pi}{L}\right)^2}{2m} * n^2 \widehat{a_n^+}\widehat{a_n^-}$$

Напомним, $n_{\text{обрез}}$ нам приходится выбирать самим и вообще это костыль костылём – лишь бы сошёлся ряд. Да, шаманство, но мой научник о таком шаманстве рассказывал, что и он в научке резал по ультрафиолету… ☺

Задача 2. Всё то же самое, но теперь построить фоковский оператор координаты. Нам по прежнему удобно определить как $\widehat{a_n^+}$ - оператор рождения частицы с проекцией импульса $p = \frac{h\pi n}{L}$, $\widehat{a_n^-}$- - оператор уничтожения частицы с проекцией импульса $p = \frac{h\pi n}{L}$. Но вот из импульса координату здесь однозначно мы получить уже не можем. Надо пользоваться более общей формулой, через матричные элементы:

$$\widehat{\mathrm{O}} = \sum_{n,N} \mathrm{O}_{nN}\, \widehat{a_n^+}\widehat{a_N^-}$$

В данном случае

$$\hat{x} = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{N=1}^{\infty} < \text{состояние с импульсом } p_n\, |\hat{x}| \text{состояние с импульсом } p_N > \widehat{a_n^+}\widehat{a_N^-}$$

Матричный элемент равен вот такому вот интегралу:

$$x_{nN} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) x \varphi_N(x) dx = \int_0^L sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) x sin\left(\frac{\pi N x}{L}\right) dx$$

$$= \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 \int_0^{\pi} sin(nu) u sin(Nu) du$$

$$= \frac{\left(\frac{L}{\pi}\right)^2}{2} \int_0^{\pi} (cos\big((n-N)u\big) - cos\big((n+N)u\big)) u du$$

Вспомогательный интеграл

$$\int_0^{\pi} \cos(mu)\, u du = \frac{1}{m}\int_0^{\pi} u * d\sin(mu) = u * \frac{sinmu|_0^{\pi}}{m} - \frac{1}{m}\int_0^{\pi} \sin(mu)\, du$$

$$= u * \frac{sinmu|_0^{\pi}}{m} + \frac{cosmu|_0^{\pi}}{m^2} = \pi * \frac{sinm\pi}{m} + \frac{cosm\pi - 1}{m^2}$$

т.к. m чётно, то упростим до $\frac{cosm\pi - 1}{m^2}$, что равно 0 при чётных m и $\frac{-2}{m^2}$ при нечётных m.

Откуда получаем для матричного элемента

$$x_{nN} = \frac{\left(\frac{L}{\pi}\right)^2}{2} * \left(-\frac{2}{(n-N)^2} + \frac{2}{(n+N)^2}\right), \text{если } n \text{ и } N \text{ разной чётности}$$

$$x_{nN} = 0, \text{если } n \text{ и } N \text{ одной чётности}$$

$$\hat{x} = \text{сумма по } n, N \text{ разной чётности } \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{L}{\pi}\right)^2}{2} * \left(-\frac{2}{(n-N)^2} + \frac{2}{(n+N)^2}\right) \widehat{a_n^+} \widehat{a_N^-}$$

И ура, этот ряд сходится сам по себе, без ультрафиолетового обрезания. Задача решена.