

12 Systémy nerozlišitelných částic

Pro složené soustavy nerozlišitelných částic je výhodný popis pomocí kreačních a anihilačních operátorů \hat{a}_k^\dagger , \hat{a}_k , které působí na *Fockově prostoru*

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}^{(2)} \oplus \dots$$

($\mathcal{H}^{(n)}$ označuje Hilbertův prostor soustavy n částic, $\mathcal{H}^{(0)}$ obsahuje pouze jeden stav $|0\rangle$, který se běžně nazývá *vakuum*). Normované báze vektorů prostoru $\mathcal{H}^{(n)}$ budeme značit

$$|N_1, N_2, \dots; N\rangle, \quad \text{kde} \quad \sum_{k=1}^{\infty} N_k = N$$

je celkový počet částic (N_1 je počet částic v jednočásticovém stavu (orbitalu) $|\phi_k\rangle$), a dají se vytvořit pomocí kreačních operátorů

$$|N_1, N_2, \dots; N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \dots}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{N_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{N_2} \dots |0\rangle$$

Schematicky můžeme tedy psát

$$\mathcal{F} = |0\rangle \otimes \hat{a}_j^\dagger |0\rangle \otimes \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger |0\rangle \otimes \dots$$

Kreační operátory přidávají částici, anihilační ubírají:

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^\dagger |N_1, \dots, N_k, \dots; N\rangle &= \sqrt{N_k + 1} |N_1, \dots, N_k + 1, \dots; N + 1\rangle \\ \hat{a}_k |N_1, \dots, N_k, \dots; N\rangle &= \sqrt{N_k} |N_1, \dots, N_k - 1, \dots; N - 1\rangle \end{aligned}$$

(odmocninové koeficienty plynou z normalizace vektorů). Působení anihilačního operátoru na vakuum dá 0:

$$\hat{a}_k |0\rangle = 0$$

Vlnové funkce soustavy částic musí být symetrické vůči záměně libovolných dvou nerozlišitelných bosonů (částic s celočíselným spinem) a antisymetrické vůči záměně dvou nerozlišitelných fermionů (částic s poločíselným spinem). Toho lze docílit tím, že kreační operátory splňují komutační (bosony) nebo antikomutační (fermiony) relace.

Bosonové kreační a anihilační operátory označíme \hat{b}_k^\dagger , \hat{b}_k . Komutační relace mezi nimi zní

$$\left[\hat{b}_j, \hat{b}_k^\dagger\right] = \delta_{jk}, \quad \left[\hat{b}_j, \hat{b}_k\right] = \left[\hat{b}_j^\dagger, \hat{b}_k^\dagger\right] = 0. \quad (12.0.1)$$

Operátor počtu částic ve stavu $|\phi_k\rangle$ a operátor celkového počtu částic jsou

$$\begin{aligned} \hat{N}_k &= \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \\ \hat{N} &= \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \end{aligned}$$

12.1 Gaussovská porucha bosonového systému

Dva nerozlišitelné bosony se pohybují v poli jednorozměrného harmonického oscilátoru

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2M} (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \frac{1}{2} M \Omega^2 (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2).$$

Jejich vzájemná interakce je popsána Gausovským Hamiltoniánem

$$\hat{H}_I = v e^{-\alpha(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2},$$

kde $v, \alpha > 0$ jsou reálné parametry.

Uvažujte interakci za malou poruchu a spočítejte do prvního řádu poruchové teorie opravu k energii základního stavu.

Řešení:

Budeme počítat v x -reprezentaci. Jednočásticová vlnová funkce základního stavu je

$$\phi_0(x) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}x^2}$$

V případě dvou bosonů musí být vlnová funkce symetrická vůči záměně dvou částic. To splňuje přímo součin

$$\psi_0^B(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)} \quad (12.1.1)$$

Neporušená energie základního stavu soustavy dvou bosonů je

$$E_0^{B(0)} = 2\hbar\Omega \left(0 + \frac{1}{2}\right) = \hbar\Omega$$

Opravu k energii základního stavu spočítáme jako skalární součin¹⁶

$$\begin{aligned} E_0^{B(1)} &= \iint \psi_0^{B*}(x_1, x_2) \hat{H}_I \psi_0^B(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \\ &= v \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \iint e^{-\frac{M\Omega}{\hbar}(x_1^2 + x_2^2)} e^{-\alpha(x_1 - x_2)^2} dx_1 dx_2 = \\ &= v \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \iint e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}[(x_1 + x_2)^2 + (x_1 - x_2)^2]} e^{-\alpha(x_1 - x_2)^2} dx_1 dx_2 = \\ &= \left| \begin{array}{l} X = \frac{x_1 + x_2}{2} \\ x = x_1 - x_2 \end{array} \right. \begin{array}{l} \text{Jakobián} \\ \text{transformace je 1} \end{array} \left. \right| = \\ &= v \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{2M\Omega}{\hbar}X^2} dX \int e^{-(\frac{M\Omega}{2\hbar} + \alpha)x^2} dx = \\ &= v \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2M\Omega}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{M\Omega}{2\hbar} + \alpha}} = \\ &= \frac{v}{2} \sqrt{\frac{M\Omega}{M\Omega + 2\hbar\alpha}} \end{aligned}$$

¹⁶ Transformace k proměnným X, x je speciálním případem přechodu k *Jacobiho souřadnicím* (těžišťový a relativní pohyb). Pro tři částice tato transformace zní

$$\begin{aligned} y_1 &= x_1 - x_2 \\ y_2 &= \frac{x_1 + x_2}{2} - x_3 \\ y_3 &= \frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} \end{aligned}$$

12.2 Fermionový systém

Zadání je stejné jako v předchozím příkladu 12.1, jen uvažujte fermiony se spinem 1/2. Spočítejte v prvním řádu poruchové teorie opravu k energii základního stavu pro singletní i tripletní spinový stav.

Řešení:

Vlnová funkce dvou stejných fermionů je obecně rovna

$$\psi^F(x_1, x_2) = \phi^F(x_1, x_2) \Sigma_{S\xi}$$

kde $\phi^F(x_1, x_2)$ je prostorová část, $\sigma_{S\xi}$ část spinová. Dva spiny o velikosti 1/2 se složí buď na celkový spin $S = 1$ – tripletní stav –, který je symetrický vůči záměně částic $1 \leftrightarrow 2$, nebo na spin $S = 0$ – singletní stav –, který je vůči záměně antisymetrický. Vlnová funkce systému složeného z fermionů musí být antisymetrická. Z toho vyplývá, že její prostorová část musí být

- symetrická pro singletní stav
- antisymetrická pro tripletní stav.

Prostorová část vlnové funkce pro singletní stav tudíž vypadá stejně jako v případě bosonů (12.1.1)

$$\phi_{0,S=0}^F(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)}$$

a tím pádem také oprava k energii vyjde stejně:

$$E_{0,S=0}^{F(1)} = \frac{v}{2} \sqrt{\frac{M\Omega}{M\Omega + 2\hbar\alpha}}$$

U prostorové části vlnové funkce stavu tripletního si již nevystačíme s jednočásticovou vlnovou funkcí ψ_0 . Antisymetrizovat se dá až součin

$$\phi_{0,S=1}^F(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_0(x_1)\phi_1(x_2) - \phi_1(x_1)\phi_0(x_2)],$$

přičemž $\phi_1(x)$ můžeme určit například aplikováním posunovacího operátoru \hat{a}^\dagger na funkci $\phi_0(x)$

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{M\Omega} \hat{p} \right) \\ \phi_1(x) &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \right) \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}x^2} = \\ &= \phi_0(x) \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{M\Omega}{\hbar} x \right) \\ &= x \phi_0(x) \sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}}, \end{aligned}$$

takže

$$\begin{aligned}\phi_{0,S=1}^F(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_0(x_1)x_2\phi_0(x_2)\sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}} - x_1\phi_0(x_1)\sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}}\phi_0(x_2) \right] \\ &= \sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}} (x_2 - x_1) \phi_0(x_1)\phi_0(x_2).\end{aligned}$$

Neporušená hodnota energie je v tomto stavu

$$E_{0,S=1}^{F(0)} = \hbar\omega \left(0 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2}\right) = 2\hbar\omega$$

a příspěvek 1. řádu poruchové teorie zní

$$\begin{aligned}E_{0,S=1}^{F(1)} &= \iint \psi_{0,S=1}^{F*}(x_1, x_2) \hat{H}_1 \psi_{0,S=1}^F(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \\ &= v \frac{M\Omega}{\hbar} \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \iint (x_1 - x_2)^2 e^{-\frac{M\Omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)} e^{-\alpha(x_1-x_2)^2} dx_1 dx_2 = \\ &= \frac{v}{2\pi} \left(\frac{M\Omega}{\hbar}\right)^2 \iint (x_1 - x_2)^2 e^{-\frac{M\Omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)} e^{-\alpha(x_1-x_2)^2} dx_1 dx_2 = \\ &= \frac{v}{2\pi} \left(\frac{M\Omega}{\hbar}\right)^2 \int e^{-\frac{2M\Omega}{\hbar}X^2} dX \int x^2 e^{-\left(\frac{M\Omega}{2\hbar}+\alpha\right)x^2} dx = \\ &= \frac{v}{2\pi} \left(\frac{M\Omega}{\hbar}\right)^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2M\Omega}} \frac{1}{2} \frac{\pi}{\frac{M\Omega}{2\hbar}+\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{M\Omega}{2\hbar}+\alpha}} = \\ &= \frac{v}{2} \left(\frac{M\Omega}{M\Omega + 2\hbar\alpha}\right)^{3/2}.\end{aligned}$$

12.3 Kondenzátová střední hodnota

Je zadán bosonový N -částicový kondenzát¹⁷

$$|B; N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\hat{B}^\dagger\right)^N |0\rangle$$

kde operátor \hat{B}^\dagger je vyjádřen lineární kombinací

$$\hat{B}^\dagger \equiv \sum_k z_k \hat{b}_k^\dagger$$

a \hat{b}_k^\dagger bosonové operátory, splňující komutační relace (12.0.1). Komplexní čísla z_k jsou normována:

$$|z|^2 \equiv \sum_k z_k^* z_k = 1$$

Spočítejte střední hodnotu $\langle B; N | \hat{H} | B; N \rangle$, kde operátor \hat{H} je složen z jednočásticové a dvoučásticové části

$$\hat{H} = \sum_{ij} \epsilon_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{klmn} v_{klmn} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_n \hat{b}_m,$$

přičemž ϵ_{ij} , v_{klmn} jsou komplexní čísla.

¹⁷ Tento příklad je vyřešen a diskutován v učebnici [1].

Řešení:

Naším cílem je prokomutovat všechny anihilační operátory napravo skrz kreační operátory kondenzátu. Jejich působení na stav vakua pak dá nulový příspěvek.

Vyjdeme z

$$\hat{K}_1 \equiv [\hat{b}_j, \hat{B}^\dagger] = \sum_k z_k [\hat{b}_j, \hat{b}_k^\dagger] = \sum_k z_k \delta_{jk} = z_j$$

a indukcí dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{K}_N &\equiv [\hat{b}_j, (\hat{B}^\dagger)^N] = \\ &= [\hat{b}_j, \hat{B}^\dagger] (\hat{B}^\dagger)^{N-1} + \hat{B}^\dagger [\hat{b}_j, (\hat{B}^\dagger)^{N-1}] = \\ &= z_j (\hat{B}^\dagger)^{N-1} + \hat{B}^\dagger \hat{K}_{N-1},\end{aligned}$$

neboli

$$\begin{aligned}\hat{K}_2 &= z_j \hat{B}^\dagger + \hat{B}^\dagger z_j = 2z_j \hat{B}^\dagger \\ \hat{K}_3 &= z_j (\hat{B}^\dagger)^2 + \hat{B}^\dagger (2z_j \hat{B}^\dagger) = 3z_j (\hat{B}^\dagger)^2 \\ &\vdots \\ \hat{K}_N^\dagger &= N z_j (\hat{B}^\dagger)^{N-1}.\end{aligned}$$

Působení anihilačního operátoru \hat{b}_j na kondenzát dává

$$\begin{aligned}\hat{b}_j |B; N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{b}_j (\hat{B}^\dagger)^N |0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} N z_j (\hat{B}^\dagger)^{N-1} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{B}^\dagger)^N \hat{b}_j |0\rangle = \\ &= \frac{N}{\sqrt{N}} z_j \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} (\hat{B}^\dagger)^{N-1} |0\rangle = \\ &= z_j \sqrt{N} |B; N-1\rangle.\end{aligned}$$

Nyní již můžeme vypočítat střední hodnotu Hamiltoniánu:

$$\langle B; N | \hat{H} | B; N \rangle = N \sum_{ij} \epsilon_{ij} z_i^* z_j + \frac{N(N-1)}{2} \sum_{klmn} v_{klmn} z_k^* z_l^* z_m z_n$$

Podobně bychom mohli pokračovat a určit kondenzátovou střední hodnotu vícečásticových operátorů.

12.4 Evoluce bosonového kondenzátu

Nechť se soustava N bosonů nachází ve stavu kondenzátu

$$|\psi_0; N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{b}_0^\dagger)^N |0\rangle.$$

a systém je popsán jednočásticovým Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \mathcal{E} (\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}),$$

ve kterém \mathcal{E} je reálný parametr udávající škálu energie,

$$\hat{B}^\dagger \equiv \sum_{k>0} z_k \hat{b}_k^\dagger$$

(komplexní parametry z_k nyní nemusí být – narozdíl od předchozího příkladu – normovány) a operátory $\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger$ splňují bosonové komutační relace (12.0.1).

Nalezněte časový vývoj stavu $|\psi_0(t); N\rangle$.

Řešení:

Hledáme stav

$$|\psi_0(t); N\rangle = \hat{U}(t) |\psi_0; N\rangle ,$$

kde

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} .$$

Začneme s jedním bosonem a budeme postupně přidávat další.

- $N = 1$:

$$|\psi_0(t); 1\rangle = e^{\underbrace{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{E} t}_{\alpha}} (\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}) \hat{b}_0^\dagger |0\rangle .$$

Využijeme BCH formuli

$$\begin{aligned} e^{\alpha \hat{X}} \hat{Y} e^{-\alpha \hat{X}} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^k}{k!} \hat{K}_k , \\ \hat{K}_0 &= \hat{Y} , \\ \hat{K}_{k+1} &= [\hat{X}, \hat{K}_k] , \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} \hat{X} &= \hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B} , \\ \hat{Y} &= \hat{b}_0^\dagger . \end{aligned}$$

Dostaneme

$$|\psi_0(t); 1\rangle = \underbrace{\left(\hat{Y} + \alpha [\hat{X}, \hat{Y}] + \frac{\alpha^2}{2!} [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] + \frac{\alpha^3}{3!} \dots \right)}_{\hat{Z}} \underbrace{e^{\alpha \hat{A}}}_{|0\rangle} |0\rangle .$$

Jednotlivé členy přispějí takto:

$$\begin{aligned} \hat{Y} &= \hat{b}_0^\dagger , \\ [\hat{X}, \hat{Y}] &= [\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}, \hat{b}_0^\dagger] = [\hat{B}^\dagger \hat{b}_0, \hat{b}_0^\dagger] = \hat{B}^\dagger [\hat{b}_0, \hat{b}_0^\dagger] = \hat{B}^\dagger , \\ [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] &= [\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}, \hat{B}^\dagger] = \hat{b}_0^\dagger [\hat{B}, \hat{B}^\dagger] = |z|^2 \hat{b}_0^\dagger , \\ [\hat{X}, [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]]] &= [\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}, |z|^2 \hat{b}_0^\dagger] = |z|^2 \hat{B}^\dagger , \\ &\dots \end{aligned}$$

Shrnuto, dostaneme

$$\begin{aligned}
|\psi_0(t); 1\rangle &= \left(\hat{\mathbf{b}}_0^\dagger + \alpha \hat{\mathbf{B}}^\dagger + \alpha^2 \frac{|z|^2}{2!} \hat{\mathbf{b}}_0^\dagger + \alpha^3 \frac{|z|^2}{3!} \hat{\mathbf{B}}^\dagger + \alpha^4 \frac{|z|^4}{4!} \hat{\mathbf{b}}_0^\dagger + \dots \right) |0\rangle \\
&= \left[\underbrace{\left(1 + \alpha^2 \frac{|z|^2}{2!} + \alpha^4 \frac{|z|^4}{4!} + \dots \right)}_{\cosh \alpha |z|} \hat{\mathbf{b}}_0^\dagger + \underbrace{\left(\alpha + \alpha^3 \frac{|z|^2}{3!} + \alpha^5 \frac{|z|^4}{4!} + \dots \right)}_{\frac{1}{|z|} \sinh \alpha |z|} \hat{\mathbf{B}}^\dagger \right] |0\rangle \\
&= \left[\hat{\mathbf{b}}_0^\dagger \cosh \alpha |z| + \hat{\mathbf{B}}^\dagger \frac{\sinh \alpha |z|}{|z|} \right] |0\rangle .
\end{aligned}$$

- $N = 2$:

$$\begin{aligned}
|\psi_0(t); 2\rangle &= e^{\alpha \hat{\mathbf{X}}} \frac{\hat{\mathbf{Y}}^2}{2!} |0\rangle = \frac{\hat{\mathbf{Z}}}{2} e^{\alpha \hat{\mathbf{X}}} \hat{\mathbf{Y}} |0\rangle = \frac{\hat{\mathbf{Z}}^2}{2} e^{\alpha \hat{\mathbf{X}}} |0\rangle = \frac{\hat{\mathbf{Z}}^2}{2} |0\rangle \\
&= \frac{1}{2} \left[\hat{\mathbf{b}}_0^\dagger \cosh \alpha |z| + \hat{\mathbf{B}}^\dagger \frac{\sinh \alpha |z|}{|z|} \right]^2 |0\rangle .
\end{aligned}$$

- Pro obecné N budeme komutovat za využití BCH formule N krát a indukcí dostaneme

$$\begin{aligned}
|\psi_0(t); N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[\hat{\mathbf{b}}_0^\dagger \cosh \alpha |z| + \hat{\mathbf{B}}^\dagger \frac{\sinh \alpha |z|}{|z|} \right]^N |0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[\hat{\mathbf{b}}_0^\dagger \cos \frac{\mathcal{E}t |z|}{\hbar} + i \frac{\hat{\mathbf{B}}^\dagger}{|z|} \sin \frac{\mathcal{E}t |z|}{\hbar} \right]^N |0\rangle .
\end{aligned}$$

Vektor tedy rotuje v komplexní rovině s frekvencí

$$\omega \equiv \frac{\mathcal{E}}{\hbar} |z| .$$