کوانتش دوم

در این فصل ابتدا با شروع از معادله شرودینگر بس‌ذره‌ای نشان می‌دهیم که کوانتش دوم به عنوان روش مناسبی برای نمایش دادن عملگر هامیلتونی به طور طبیعی به دست می‌آید. سپس با معرفی عملگرهای میدان، نشان خواهیم داد که علامت + (ـ) ناشی از تعویض دو ذره بوزونی (فرمیونی) در یک تابع موج بس‌ذره‌ای، به صورت جبر جابجایی (پاد جابجایی) بین عملگرهای میدان مربوطه ترجمه می‌شود. در مرحله بعد، با استفاده از عملگرهای میدان، عملگرهای مهم دیگر نظیر چگالی بار و جریان و اسپین را نیز در نمایش کوانتش دوم بیان می‌کنیم.

۱۰ منشاء کوانتش دوم

کوانتش دوم دلالت بر این نمی‌کند که چیزی مجددا کوانتیده می‌شود. بلکه فرمول بندی کوانتش دوم، عینا هم‌ارز رهیافت مبتنی بر معادله شرودینگر است و صرفا نگرشی است به مساله مکانیک کوانتومی که برای مساله بس‌ذره‌ای مناسب‌تر از حل مستقیم معادله شرودینگر است. بدین معنا، اسم کوانتش دوم بی مُسما است. در این فصل ابتدا نشان می‌دهیم چگونه از معادله شرودینگر وابسته به زمان برای N ذره می‌توان به طور کاملا طبیعی به «نمایش» عملگر هامیلتونی بر حسب عملگرهای خلق و فنا دست یافت. سپس عملگرهای دیگر نظیر عملگر اسپین، چگالی بار، چگالی جریان و چگالی اسپین را نیز بر حسب همین عملگرهای خلق و فنا نمایش می‌دهیم و کمیت‌های مشاهده‌پذیر آزمایشگاهی را از محاسبه همبستگی چنین علمگرهایی در نمایش کوانتش دوم محاسبه خواهیم کرد.

معادله شرودینگر وابسته به زمان برای Nذره به صورت زیر است :

$$i\hbar\,\partial_t\Psi(x_1,x_2,\ldots,x_N,t)=H\Psi(x_1,x_2,\ldots,x_N,t). \qquad (1)$$

در این نمادگذاری، x_k به جمیع مختصه‌های ذره‌ی kام، اشاره می‌کند که شامل مختصات فضایی $\mathbf{x}_k$ و هر متغیر گسسته‌ای مانند مولفه‌ی z اسپین یا اعداد کوانتومی لازم دیگر برای مشخص کردن حالت ذره‌های یک سیستم بس‌ـذره‌ای کوانتومی است. هامیلتونی از دو بخش تک ذره‌ای T، و انرژی پتانسیل برهم‌کنش دوـذره‌ای v، تشکیل شده است:

$$H=\sum_{k=1}^{N}T(x_k)+\frac{1}{2}\sum_{k\neq l}v(x_k,x_l). \qquad (2)$$

حال یک مجموعه کامل از توابع موج تک ذره‌ای در نظر بگیرید

$$\phi_{E_1}(x_1),\phi_{E_2}(x_2),\ldots,\phi_{E_N}(x_N),$$

که E_kها مجموعه‌ی کاملی از اعداد کوانتومی تک ذره را نمایش می‌دهد. به طور مثال برای یک سیستم متشکل از بوزون‌های اسکالر (یعنی دارای اسپین صحیح صفر) عدد کوانتومی مناسب عبارت است از تکانه $\mathbf{p}$؛ یا برای سیستمی از فرمیون‌ها مجموعه برچسب‌های کوانتومی مناسب عبارتند از تکانه‌ي $\mathbf{p}$ و مولفه‌ي اسپینی s_z. این مجموعه کاملا دلخواه است و فقط کامل بودن آن برای ما اهمیت دارد. اما معمولا این مجموعه را چنان انتخاب می‌کنند که مجموعه کامل ویژه توابع بخش تکـذره‌ای هامیلتونی بالا باشد. به عنوان مثال برای یک سیستم همگن بزرگ می‌توان مجموعه‌ای از امواج تخت و یا برای ذرات در یک شبکه‌ی کریستالی می‌توان مجموعه‌ی کاملی از توابع بلوخ در یک پتانسیل تناوبی مناسب را

درنظرگرفت. کامل بودن مجموعه توابع تک‌ـذره‌ای این اجازه را می‌دهد که بستگی تابع موج بس‌ـذره‌ای نسبت به متغیر $x_۱$ را به صورت زیر بسط دهیم:

$$\Psi(x_۱, x_۲, \ldots, x_N; t) = \sum_{E_۱} C'_{E_۱}(x_۲, \ldots, x_N, t)\ \phi_{E_۱}(x_۱).$$

و اگر این کار را متواترا برای ضرایب بسط هم تکرار کنیم، نهایتا به دست می‌آوریم:

$$\Psi(x_۱, x_۲, \ldots, x_N; t) = \sum_{E_۱, E_۲, \ldots, E_N} C_{E_۱, E_۲, \ldots, E_N}(t)\ \phi_{E_۱}(x_۱)\phi_{E_۲}(x_۲)\ldots\phi_{E_N}(x_N). \qquad (۳)$$

تا اینجای کار مساله یافتن تابع موج بس‌ـذره‌ای Ψ که تابعی از N متغیر $x_۱, x_۲ \ldots, x_N$ است را تحویل کرده‌ایم به مساله یافتن معادله‌ای برای ضرایب بسط $C_{E_۱\ldots,E_N}$ و وابستگی زمانی هم در دل همین ضریب باقی مانده است.

حال اجازه بدهید به یک خاصیت بنیادی توابع موج بس‌ذره‌ای هنگامی که به شکل فضایی Ψ بیان شده‌اند نگاه کنیم و ببینم وقتی که تابع موج را به صورت معادل به زبان ضرایب C بیان می‌کنیم این خاصیت به چه شکل در می‌آید. توابع موج بس ذره‌ای نسبت به تعویض مختصات دو ذره، یا متقارن هستند یا پادمتقارن. برای سهولت توابع موج دو ذره‌ای را در نظر بگیرد:

$$\Psi(x_۱, x_۲, t) = \lambda\ \Psi(x_۲, x_۱, t). \qquad (۴)$$

که λ برای بوزون‌ها (فرمیون‌ها) برابر $+۱$ (-۱) است. با جایگذاری بسط Ψ بر حسب توابع C در عبارت بالا خواهیم داشت:

$$\sum_{E_۱, E_۲} C_{E_۱, E_۲}(t)\ \phi_{E_۱}(x_۱)\ \phi_{E_۲}(x_۲) = \lambda \sum_{E'_۱, E'_۲} C_{E'_۱, E'_۲}(t)\ \phi_{E'_۱}(x_۲)\ \phi_{E'_۲}(x_۱)$$

که معادل است با شریط زیر بر روی ضرایب بسط C:

$$C_{E_۱, E_۲}(t) = \lambda\, C_{E_۲, E_۱}(t).$$

که برای تابع موج با N ذره نیز قابل تعمیم است. بنابراین به لحاظ رفتار تحت تعویض مشخصات هر دو ذره دلخواه، ضرایب بسط C رفتاری مشابه با تابع موج Ψ دارند. در حقیقت C همان تابع موج است که به جای آنکه همانند Ψ در مختصات x بیان شده باشد، بر حسب اعداد کوانتومی E_m بیان شده است. حال اجازه بدهید به جای معادله‌ای برای Ψ، به دنبال یک معادله برای ضرایب C باشیم. به این منظور تابع موج (۳) را در معادله‌ی شرودینگر (۱) جایگذاری می‌کنیم. با توجه به این که وابستگی زمانی تابع موج بس ذره‌ای در ضرایب C قرار دارد، می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned} & i\hbar \sum_{E'_۱\ldots E'_N} \partial_t\, C_{E'_۱,\ldots,E'_N}(t)\ \phi_{E'_۱}(x_۱)\ldots\phi_{E'_N}(x_N) \qquad (۵) \\ & = \Big(\sum_{k=۱}^{N} T(x_k) + \tfrac{۱}{۲} \sum_{k\neq l} v(x_k, x_l) \Big) \sum_{E'_۱\ldots E'_N} C_{E'_۱,\ldots,E'_N}(t)\ \phi_{E'_۱}(x_۱)\ldots\phi_{E'_N}(x_N). \end{aligned}$$

اکنون طرفین رابطه بالا را در راستای بردار $|E_۱ \ldots E_N\rangle$ تصویر می‌کنیم که در پایه مختصات x بدان معنا خواهد بود که ضرب و انتگرال به شکل زیر را اعمال کنیم:

$$\int dx_۱ \ldots dx_n\ \ \phi^\star_{E_۱}(x_۱)\ldots\phi^\star_{E_N}(x_N).$$

از آنجایی که توابع موج تک ذره متعامد هستند – به این معنی که،

$$\langle E_۱ | E'_۱ \rangle = \delta_{E_۱, E'_۱},$$

برای سمت چپ معادله‌ی (۵) به دست می‌آوریم:

$$i\hbar \sum_{E'_1 \dots E'_N} \partial_t \, C_{E'_1,\dots,E'_N}(t) \, \langle E_1|E'_1\rangle \dots \langle E_N|E'_N\rangle = i\hbar \, \partial_t \, C_{E_1,\dots,E_N}(t)$$

برای سمت راست معادله (۵) ابتدا روی سهم ناشی از انرژی جنبشیِ هامیلتونی متمرکز می‌شویم:

$$\begin{aligned}
&\sum_{E'_1 \dots E'_N} C_{E'_1,\dots,E'_N}(t) \int dx_1 \dots dx_n \, \phi^\star_{E_1}(x_1) \dots \phi^\star_{E_N}(x_N) \Big(\sum_{k=1}^{N} T(x_k) \Big) \\
&\qquad\qquad \phi_{E'_1}(x_1) \dots \phi_{E'_N}(x_N) \\
&= \sum_{E'_1 \dots E'_N} C_{E'_1,\dots,E'_N}(t) \, \langle E_1|T|E'_1\rangle \langle E_2|E'_2\rangle \dots \langle E_N|E'_N\rangle \\
&+ \sum_{E'_1 \dots E'_N} C_{E'_1,\dots,E'_N}(t) \, \langle E_1|E'_1\rangle \langle E_2|T|E'_2\rangle \langle E_3|E'_3\rangle \dots \langle E_N|E'_N\rangle \\
&+ \dots \\
&+ \sum_{E'_1 \dots E'_N} C_{E'_1,\dots,E'_N}(t) \, \langle E_1|E'_1\rangle \langle E_2|E'_2\rangle \dots \langle E_{N-1}|E'_{N-1}\rangle \langle E_N|T|E'_N\rangle
\end{aligned}$$

که در آن جمع بندی روی «اندیس k ذره» موجب شده است که در هر یک N جمله تولید شوند که در جمله kـام آن، انتگرال‌گیری روی مختصه x_k عنصر ماتریسی $\langle E_k|T|E'_k\rangle$ را به دست داده است. این عنصر ماتریسی به صورت زیر داده می‌شود:

$$\langle E_k|T|E'_k\rangle = \int dx \phi^\star_{E_k}(x) T(x) \phi_{E'_k}(x). \qquad (۶)$$

انتگرال‌گیری روی بقیه مختصات، عوامل $\langle E_i|E'_i\rangle$ را برای $i \neq k$ را به دست می‌دهد که معادل دلتای کرونکر δ_{E_i,E'_i} هستند و محاسبه جمع بندی روی همه E'_iها (به غیر از $i = k$) را تسهیل می‌کنند و لذا برای سهم انرژی جنبشی (عملگر تک‌ذره‌ای) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}
&= \sum_{E'_1} C_{E'_1,E_2,E_3\dots,E_N}(t) \, \langle E_1|T|E'_1\rangle \\
&+ \sum_{E'_2} C_{E_1,E'_2,E_3\dots,E_N}(t) \, \langle E_2|T|E'_2\rangle \\
&+ \dots \\
&+ \sum_{E'_N} C_{E_1,E_2,E_3\dots,E'_N}(t) \, \langle E_N|T|E'_N\rangle
\end{aligned}$$

که نهایتا به شکل فشرده زیر قابل بیان است:

$$\sum_{k=1}^{N} \sum_{W} \langle E_k|T|W\rangle \, C_{E_1,E_2,\dots,E_{k-1},W,E_{k+1},\dots,E_N}(t). \qquad (۷)$$

در معادله (۷) تراز انرژی E_k از لیست زیروندهای تابع C حذف شده و به جای آن تراز انرژی W نشسته است. به معنایی می‌توان تصور کرد که این جمله صحبت از پروسه‌ای می‌کند که یک ذره از تراز E_k به تراز W رفته است دامنه (جذر احتمال) این پروسه متناسب با عنصر ماتریسی $\langle E_k|T|W\rangle$ است که توسط عملگر تک ذره‌ای T تولید شده است. اگر مشابه همین عملیات را برای بخش انرژی پتانسیل تکرار کنیم، انتگرال گیری روی دو مختصه منجر به عناصر ماتریسی دو

ذره‌ای گردیده و جمع بندی روی اندیس $k \neq l$ ذره‌ها به جمع بندی روی دو تراز E_k و E_l تبدیل می‌شود که در نهایت به دست می‌آوریم:

$$i\hbar\,\partial_t\, C_{E_1,\ldots,E_N}(t) = \sum_{E_k}\sum_{W}\langle E_k|T|W\rangle\; C_{E_1,E_2,\ldots,E_{k-1},W,E_{k+1},\ldots,E_N}(t)$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{E_k,E_l}\sum_{W,W'}\langle E_kE_l|v|WW'\rangle\; C_{E_1,\ldots,E_{k-1},W,E_{k+1},\ldots,E_{l-1},W',E_{l+1},\ldots,E_N}(t) \qquad (۸)$$

که در آن عنصر ماتریسی دوذره‌ای به صورت زیر است:

$$\langle E_kE_l|V|WW'\rangle = \int\int dx_k dx_l\; \phi^{\star}_{E_k}(x_k)\;\phi^{\star}_{E_l}(x_l)\;v(x_k,x_l)\;\phi_W(x_k)\;\phi_{W'}(x_l) \qquad (۹)$$

تا اینجا بحث کاملا کلی و مستقل از بوزون یا فرمیون بودن ذرات مورد بحث بوده است. حال باید مشخص کنیم که با آمار بوزونی مواجه هستیم یا آمار فرمیونی. ابتدا به مورد بوزون‌ها می‌پردازیم و سپس فرمیون‌ها را در نظر می‌گیریم.

۱.۱.۰ بوزون‌ها

برای سیستمی از بوزون‌ها که در معادله (۴) دارای $\lambda = 1$ هستند، خاصیت تقارن تابع موج بس‌ذره‌ای تحت تعویض برچسب‌های انرژی اجازه می‌دهد که بنویسیم:

$$C_{121314\ldots}(t) = C_{\underbrace{1\ldots1}_{n_1}\;\underbrace{2\ldots2}_{n_2}\;\ldots\ldots}(t)$$

که در آن برای اختصار به جای زیرنویس انرژی E_i در ضرایب C صرفا از شمارش‌گر i استفاده کرده‌ایم. ضریب بالا متناظر با حالتی است که n_1 ذره در تراز E_1، قرار دارند، n_2 ذره در تراز E_2 قرار دارند و به همین ترتیب. جمع کل ذرات توزیع شده در ترازهای مختلف، $\sum_i n_i$ برابر با تعداد کل ذرات است. ماهیت تمیزناپذیر ذرات که در این خاصیت تقارنی منعکس است، به ما اجازه می‌دهد که به جای ضریب C نماد جدید $\bar{C}$ را به نحوی تعریف کنیم که اصالت را به ترازها و «عدد اشغال» آن‌ها بدهد:

$$C_{E_1,E_2,\ldots}(t) \equiv \bar{C}_{n_1,n_2,\ldots,n_\infty}(t)$$

پسندیده است یک ظرافت دیگر را هم در تعریف نماد مناسب به‌جای ضرایب بالا مراعات کنیم و آن مربوط به بهنجارش مناسب ضرایب است. شرط بهنجارش برای تابع موج بس ذره‌ای به صورت زیر است:

$$\int dx_1\cdots dx_N\;\Psi^{\dagger}(x_1,\ldots,x_N,t)\;\Psi(x_1,\ldots,x_N,t) = 1,$$

که بعد از ترجمه به زبان ضرایب C خواهد شد:

$$\sum_{E'_1,\ldots,E'_N}\sum_{E_1,\ldots,E_N} C_{E'_1,\ldots,E'_N}(t)\;C_{E_1,\ldots,E_N}(t)\langle E'_1|E_1\rangle\ldots\langle E'_N|E_N\rangle = 1,$$

که به اعتبار راست‌هنجار بودن توابع موج تک‌ذره‌ای به شکل زیر ساده می‌شود:

$$\sum_{E_1,\ldots,E_N}|C_{E_1,\ldots,E_N}(t)|^2 = 1$$

تغییر متغیر جمع‌بندی در رابطه بالا از مجموعه‌ی E_iها به مجموعه‌ی اعداد اشغال n_iها، شرط بهنجارش را برای $\bar{C}$ به صورت زیر درمی‌آورد:

$$\sum_{n_1,\ldots,n_\infty}|\bar{C}_{n_1,\ldots,n_\infty}(t)|^2\frac{N!}{n_1!\ldots n_\infty!} = 1$$

که در آن ضریب شمارش مربوط به تعداد روش‌های توزیع n_i ذره در تراز E_i به نحوی که جمع کل n_iها مقدار ثابت N باشد لحاظ گردیده است. رابطه بالا پیشنهاد می‌کند که بهتر است «تابع موج» در فضای اعداد اشغال را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$f_{n_1,\ldots,n_\infty}(t) = \left(\frac{N!}{n_1!\ldots n_\infty!}\right)^{\frac{1}{2}} \bar{C}_{n_1,\ldots,n_\infty}(t), \qquad (۱۰)$$

که بهنجارش تابع موج بر حسب آن به صورت ساده‌ی زیر درمی‌آید:

$$\sum_{n_1,\ldots,n_\infty} |f_{n_1,\ldots,n_\infty}(t)|^2 = 1.$$

در ادامه خواهیم دید که مزیت تعریف تابع موج در فضای اعداد اشغال به شکل f معادله‌ی (۱۰) فراتر از آن است که فقط شرط بهنجارش را به شکل ساده‌ای درآورد. با این تعریف می‌توانیم معادله‌ی (۸) را بر حسب تابع f بنویسیم که در ادامه به این کار می‌پردازیم. این کار باعث می‌شود که به جای معادله شرودینگری در فضای مختصات ذرات، معادله‌ی شرودینگری در فضای اعداد اشغال به دست آوریم که تعبیر کوانتش دوم نیز در این فضا به طور طبیعی حاصل خواهد شد. در دینامیک (مشتق زمانی) تابع C هم جمله تک‌ذره‌ای و هم جمله برهم‌کنش سهیم دارند که در اینجا برای سهولت روی سهم بخش تک‌ذره‌ای هامیلتونی متمرکز می‌شویم:

$$\begin{aligned}&\sum_{E_k}\sum_{W}\langle E_k|T|W\rangle\; C_{E_1,E_2,\ldots,E_{k-1},W,E_{k+1},\ldots,E_N}(t)\\ &= \sum_{E}\sum_{W}\langle E|T|W\rangle n_E\; \bar{C}_{n_1,\ldots,n_{E_k}-1,\ldots,n_W+1,\ldots,n_\infty}(t). \qquad (۱۱)\end{aligned}$$

حذف شدن زیروند E_k و افزوده شدن زیروند W در خط اول معنایش این است که در خط دوم عدد اشغال مربوطه یک واحد کمتر شده و عدد اشغال مربوط به تراز W یک واحد افزون شده است. در رفتن به خط دوم در حذف اندیس k معنای مهمی مستتر است: اندیس k در خط اول به نوعی ایجاب می‌کند که در جمع بندی $\sum_{E_k}$ تک تک ذرات سیستم هستند که سرشماری می‌شوند. اما در خط دوم این ترازها هستند که سرشماری می‌شوند و جمع روی تراز E بسته می‌شود، مستقل از این که کدامین ذره آن را اشغال کرده باشد. ضریب n_E هم از آنجا ناشی می‌شود که ممکن است یک تراز توسط چند ذره اشغال شده باشد. اینکه ذرات مرجعیت خود را از دست داده و مرجعیت به «ترازها» یا اوربیتال‌ها منتقل شده است، با تمایزناپذیر بودن ذرات هم‌خوانی دارد. به لحاظ فرمول‌بندی نیز به زودی روشن خواهد شد که این امر قدم مهمی در رهیافت موسوم به کوانتش دوم است.

از این‌جا به بعد نمادگذاری را اندکی ساده‌تر می‌کنیم و اربیتال‌ها را به جای آنکه با انرژی E و W برچسب بزنیم با نمادهای ساده‌تر i و j استفاده می‌کنیم. در این صورت دینامیک ضرایب $\bar{C}$ به صورت زیر داده می‌شود:

$$i\hbar\,\partial_t\,\bar{C}_{n_1,n_2,\ldots,n_\infty}(t) = \sum_{i,j} n_i\,\langle i|T|j\rangle\,\bar{C}_{n_1,\ldots,n_i-1,\ldots,n_j+1,\ldots,n_\infty}(t) + \ldots$$

برای این‌که تاکید شود معادله‌ی بالا شامل بخش پتانسیل هم می‌شود، از ... استفاده شده است. حال معادله‌ی بالا را برحسب f می‌نویسیم:

$$\begin{aligned}&i\hbar\sqrt{\frac{n_1!\ldots n_\infty!}{N!}}\;\partial_t\; f_{n_1,\ldots,n_\infty}(t)\\ &= \sum_{ij}\langle i|T|j\rangle\; n_i\sqrt{\frac{n_1!\ldots(n_i-1)!\ldots(n_j+1)!\ldots n_\infty!}{N!}}\; f_{n_1\ldots n_i-1\ldots n_j+1\ldots n_\infty}(t) + \ldots\end{aligned}$$

که از ساده کردن آن به دست می‌آوریم:

$$i\hbar\,\partial_t\; f_{n_1,\ldots,n_\infty}(t) = \sum_{ij}\langle i|T|j\rangle\;\sqrt{(n_j+1)n_i}\; f_{n_1\ldots n_i-1\ldots n_j+1\ldots n_\infty}(t) + \ldots \qquad (۱۲)$$

به خاطر بیاورید که fها ضرایب بسط تابع موج بس‌ذره‌ای در نمایش عدد اشغال است و لذا:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1,\ldots,n_\infty} f_{n_1,\ldots,n_\infty}(t)\,|n_1 \ldots n_\infty\rangle \qquad (۱۳)$$

که در آن نماد اختصاری $|n_1,\ldots,n_\infty\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \ldots |n_\infty\rangle$ را به کار برده‌ایم. اگر از طرفین رابطه بالا نسبت به زمان مشتق گرفته و از رابطه (۱۲) استفاده کنیم خواهیم داشت،

$$\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t|\Psi\rangle &= \sum_{n_1,\ldots,n_\infty} i\hbar\,\partial_t f_{n_1,\ldots,n_\infty}(t)|n_1 \ldots n_\infty\rangle = \\ &\sum_{n_1,\ldots,n_\infty}\sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\sqrt{(n_j+1)n_i}\; f_{n_1\ldots n_i-1\ldots n_j+1\ldots n_\infty}(t)|n_1\ldots n_i\ldots n_j\ldots n_\infty\rangle \\ &+\ldots \end{aligned} \qquad (۱۴)$$

حال از تغییر متغیر $\tilde{n_i} = n_i - 1, \tilde{n_j} = n_j + 1$ معادله‌ی بالا را بازنویسی می‌کنیم:

$$\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t|\Psi\rangle = &\sum_{n_1,\ldots\tilde{n_i}\ldots\tilde{n_j}\ldots,n_\infty}\sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\sqrt{\tilde{n_j}(\tilde{n_i}+1)} \\ &\times f_{n_1\ldots\tilde{n_i}\ldots\tilde{n_j}\ldots n_\infty}(t)|n_1\ldots\tilde{n_i}+1\ldots\tilde{n_j}-1\ldots n_\infty\rangle + \ldots \end{aligned}$$

حال اسم متغیر مترسک $\tilde{n}$ را در همه جای جمع بندی به n تغییر متغیر می‌دهیم و به معادله‌ی زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t|\Psi\rangle = &\sum_{n_1,\ldots,n_i\ldots,n_j\ldots,n_\infty}\sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\sqrt{n_j(n_i+1)} \\ &\times f_{n_1\ldots n_i\ldots n_j\ldots n_\infty}(t)|n_1\ldots n_i+1\ldots n_j-1\ldots n_\infty\rangle + \ldots \end{aligned}$$

از جبر عملگرهای نردبانی نوسانگر هارمونیک ساده می‌دانیم که اگر a و $a^\dagger$ در رابطه‌ی جابجاگری

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \qquad (۱۵)$$

صدق کنند، در آن صورت حالت‌هایی که عدد اشغال آن‌ها یک واحد باهم تفاوت دارد را به صورت زیر به هم مرتبط خواهند کرد:

$$a_i{}^\dagger|n_i\rangle = \sqrt{n_i+1}\;|n_i+1\rangle, \qquad a_j|n_j\rangle = \sqrt{n_j}\;|n_j-1\rangle \qquad (۱۶)$$

که به اعتبار آن می‌توان نوشت،

$$\begin{aligned} &|n_1,\ldots,n_i+1,\ldots,n_j-1,\ldots n_\infty\rangle = |n_1\rangle\otimes\ldots|n_i+1\rangle\otimes\ldots|n_j-1\rangle\otimes\ldots|n_\infty\rangle \\ &= a_i^\dagger a_j|n_1,\ldots,n_i,\ldots,n_j,\ldots n_\infty\rangle \end{aligned} \qquad (۱۷)$$

و لذا معادله‌ی (۱۵) به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t\,|\Psi\rangle\; &= \sum_{ij}\langle i|T|j\rangle a_i^\dagger a_j \sum_{n_1\ldots n_\infty} f_{n_1,\ldots,n_\infty}(t)\;|n_1,\ldots,n_\infty\rangle + \ldots \\ &= \left(\sum_{ij}\langle i|T|j\rangle\; a_i^\dagger a_j\right)|\Psi\rangle + \ldots \end{aligned} \qquad (۱۸)$$

سمت چپ معادله بالا تحول زمانی تابع موج بس‌ذره‌ای $|\Psi\rangle$ است و سمت راست آن اثر یک عملگر روی همان تابع موج. بنابراین عملگر داخل پرانتز نمایش جملات تک‌ذره‌ای عملگر هامیلتونی است که بر حسب عملگرهای خلق و فنا نوشته

شده است. لازم به ذکر است که در استخراج معادله بالا فرض کردیم $i \neq j$. بررسی اینکه فرمول بالا برای حالتی که $i = j$ بشود هم معتبر است را به عنوان تمرین خواننده واگذار می‌کنیم.

تا اینجای کار روی سهم جملات تک‌ذره‌ای در تحول ضرایب C متمرکز بودیم. اگر روند محاسبات بالا را برای بخش پتانسیل تکرار کنیم، هامیلتونی کل در نمایش کوانتش دوم به صورت زیر به دست می‌آید:

$$H = \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle \; a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl\rangle \; a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k. \qquad (۱۹)$$

به ترتیب اندیس‌ها در عملگرهای فنا در جمله برهمکنش و ترتیب آنها در عنصر ماتریسی دوذره‌ای دقت کنید. هرجند برای بوزون‌ها این ترتیب اهمیتی ندارد، اما این ترتیب نوشتن در مورد فرمیون‌ها مهم است و ترتیب صحیح به این شکل است.

تمرین: بخش برهمکنشی را برای حالت‌های مختلف i, j, k, l به دست آورید و نشان دهید در حالت کلی، معادله (۱۹) را به دست آورید. می‌توانید از کتاب Fetter و Walecka نیز کمک بگیرید.

۲.۱۰.۰ فرمیون‌ها

حال نوبت به بررسی فرمیون‌ها می‌رسد. برای فرمیون‌ها λ در رابطه‌ی (۴) برابر با ۱ـ است و «تابع موج» C پادمتقارن می‌باشد: $C(\dots E_i \dots E_j \dots, t) = -C(\dots E_j \dots E_i \dots, t)$ معنای عبارت فوق آن است که بایستی عدد کوانتومی E_i با عدد کوانتومی E_j متفاوت باشد و در غیر این صورت ضریب C صفر می‌شود. این امر براساس تعریف $C(E_1 \dots E_N, t) \equiv \bar{C}(n_1 \dots n_\infty, t)$ ایجاب می‌کند که اعداد اشغال n_i یا صفر است یا یک که بیانی از اصل طرد پاؤلی می‌باشد.

به زودی نشان می‌دهیم که روابط جبری زیر برای فرمیون‌ها تامین کننده‌ي اصل طرد پاولی هستند:

$$\{c_r^\dagger, c_s\} = \delta_{r,s}, \qquad \{c_r^\dagger, c_s^\dagger\} = \{c_r, c_s\} = 0 \qquad (۲۰)$$

که $c^\dagger$ و c بیانگر همان عملگرهای خلق و فنا برای فرمیون‌ها بوده و رابطه پادجابه‌جاگری به صورت $\{A, B\} = AB + BA$ تعریف می‌گردد. از باز کردن دو رابطه دوم بالا نتیجه می‌گیریم $c_r^\dagger c_r^\dagger = 0$ که بدان معناست که دو الکترون را نمی‌توان در یک اربیتال r خلق نمود. همچنین مزدوج هرمیتی این عبارت به صورت $c_r c_r = 0$ درخواهد آمد که می‌توان آن را اینگونه تعبیر کرد که در یک اربیتال r نمی‌توان بیش از یک «حفره» خلق کرد.

برای اینکه نشان دهیم جبر بالا اصل طرد پاولی را تامین می‌کند، ابتدا عملگر «تعداد» الکترون‌ها در حالت ϕ_r را به صورت $n_r = c_r^\dagger c_r$ تعریف می‌کنیم و با استفاده از جبر (۲۰) به دست می‌آوریم

$$n_r^2 = (c_r^\dagger c_r)(c_r^\dagger c_r) = c_r^\dagger \; (c_r \; c_r^\dagger) \; c_r = c_r^\dagger \; (1 - c_r^\dagger c_r) \; c_r = c_r^\dagger \; c_r - 0 = n_r$$

عملگری که مجذور آن با خودش برابر باشد، فقط می‌تواند ویژه‌مقدار صفر یا یک داشته باشد که به معنای اصل طرد پاولی می‌باشد. دو حالت مربوط به عدد اشغال صفر و یک را به ترتیب با $|0\rangle$ و $|1\rangle$ نشان می‌دهیم. با داشتن حالت $|0\rangle$ می‌توان حالتی با عدد اشغال یک را به صورت $|1\rangle = c^\dagger |0\rangle$ تعریف کرد. از روابط جبری تعریف کننده عملگرهای فرمیونی می‌توان نتیجه گرفت،

$$c^\dagger |1\rangle = c^\dagger c^\dagger |0\rangle = 0$$
$$c |1\rangle = c c^\dagger |0\rangle = (1 - c^\dagger c) |0\rangle = |0\rangle$$

تابع موج بس‌ذره‌ای Ψ به شکل $|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1,\dots,n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t)|n_1 \dots n_\infty\rangle$ در می‌آید که پایه‌ی اعداد اشغال $|n_1 \dots n_\infty\rangle$ حاصل‌ضرب مستقیم $|n_i\rangle = (c_i^\dagger)^{n_i} \; |0\rangle$ بر روی تمام اربیتال‌های ممکن i است. موقع عمل کردن با عملگر فنای مربوط به اربیتال s توجه می‌کنیم که اگر حالت s اشغال نشده باشد، صفر به دست می‌آوریم. اما اگر این حالت اشغال شده باشد، الکترون اشغال شده در حالت s از بین می‌رود و عدد اشغال مربوطه صفر می‌گردد، اما یک «علامت» به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} c_s \; |n_1 \dots n_s \dots n_\infty\rangle &= c_s \; (c_1^\dagger)^{n_1} \dots (c_s^\dagger)^{n_s=1} \dots (c_\infty^\dagger)^{n_\infty} \; |0\rangle \\ &= (-1)^{n_1+\dots+n_{s-1}} \; |n_1 \dots n_{s-1}, 0, n_{s+1} \dots n_\infty\rangle \end{aligned} \qquad (۲۱)$$

این علامت اساسا مثبت یا منفی یک است، بسته به اینکه اربیتال‌های «قبل» از s به تعداد زوج یا فرد تا الکترون داشته باشند. این علامت «منفی» مشهور فرمیون‌هاست. اگر به این علامت توجه نشود، فیزیک فرمیون‌ها را از دست خواهیم داد! برای اینکه این علامت به صورت سازگاری در مساله لحاظ شود، ضرورت دارد که یک «ترتیب» برای اربیتال‌ها قرارداد کرده و تا آخر محاسبه کمیت‌های فیزیکی به این قرارداد پایبند باشیم.

با ملاحضات فوق برای پایه‌ي اعداد اشغال فرمیونی، بقیه مراحل مربوط به نمایش هامیلتونی در نمایش کوانتش دوم عینا مانند مورد بوزون‌هاست. در شکل معادله (۱۹) ترتیب عملگرها طوری تنظیم شده است که مراعات علامت منفی فرمیونی نیز شده باشد.

۲.۰ عملگر میدان

اگر یک ذره در اربیتال معینی که با i برچسب خورده است خلق کنیم،

$$c_i^\dagger \left|\circ\right\rangle = \left|\underbrace{\circ\dots\circ}_{i-1}\text{۱}\circ\dots\circ\right\rangle \equiv \left|i\right\rangle,$$

تابع موج مربوط به این اربیتال از تصویر حالت فوق در پایه $\left|x\right\rangle$ به دست خواهد آمد: $\phi_i(x) = \langle x|c_i^\dagger\left|\circ\right\rangle = \langle x|i\rangle$. وقتی که عملگر $c_i^\dagger$ ذره‌ای را در اربیتال i خلق می‌کند، این ذره در هر نقطه x فضابا دامنه احتمال $\phi_i(x)$ وجود خواهد داشت. حال می‌خواهیم عملگری تعریف کنیم که ذره را دقیقا در یک مکان معین x خلق کند، به طوری که: $\psi^\dagger(x)\left|\circ\right\rangle = \left|x\right\rangle$. به عملگر خلق $\psi^\dagger(x)$ عملگر میدان [۱] گفته می‌شود. برای تامین این منظور توجه می‌کنیم که

$$\psi^\dagger(x)\left|\circ\right\rangle = \sum_i \left|i\right\rangle\langle i|x\rangle = \sum_i \langle i|x\rangle\, c_i^\dagger\left|\circ\right\rangle = \left|x\right\rangle$$

که تعریف زیر را پیشنهاد می‌کند:

$$\psi^\dagger(x) = \sum_i \phi_i^*(x)c_i^\dagger \leftrightarrow \psi(x) = \sum_i \phi_i(x)c_i. \qquad (۲۲)$$

رابطه بالا بیان می‌کند که وجود یک ذره در مکان x می‌تواند ناشی از وجود آن در هر اربیتال i (با دامنه احتمال $\phi_i^*(x) = \langle i|x\rangle$) باشد. حال می‌توان عملگر هامیلتونی را بر حسب عملگرهای میدان بازنویسی کرد. به عنوان مثال بیایید نشان دهیم نمایش عملگر هامیلتونی به صورت زیر در می‌آید:

$$H = \int dx\psi^\dagger(x)T(x)\psi(x) + \frac{\text{۱}}{\text{۲}}\int\int dxdx'\psi^\dagger(x)\psi^\dagger(x')V(x-x')\psi(x')\psi(x). \qquad (۲۳)$$

قبل از پرداختن به اثبات رابطه بالا، توجه می‌کنیم که اگر $\psi(x)$ به جای عملگر میدان، یک تابع موج می‌بود، عبارت بالا به لحاظ شکل ظاهری شبیه مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی مربوط به این تابع موج می‌شد. این تشابه صرفا روشی برای به خاطر سپردن شکل صحیح فرمول است و ارزش آن چیزی در حد عبارت «باغ وقف حکیم خجعه» است[۲]. این تشابه ظاهری منشاء اسم بی‌مسمای «کوانتش دوم» است که بر طبق آن تابع موج بودن $\psi(x)$ جدی گرفته شده و سپس عبارت کوانتش دوم اصرار می‌کند که آن را به عملگر ارتقاء دهد.

---

[۱] Field operator

[۲] این عبارت را در مدرسه برای به خاطر سپردن حروف قمری در برابر حروف شمسی عربی به کار می‌بردیم.

حال با شروع از (۲۳) و جاگذاری از (۲۲) به (۱۹) می‌رسیم:

$$\begin{aligned} H &= \int dx \Big(\sum_i \phi_i^*(x) c_i^\dagger\Big) T(x) \Big(\sum_j \phi_j(x) c_j\Big) + \tfrac{1}{2} \iint dx dx' \times \\ &\quad \Big(\sum_i \phi_i^*(x) c_i^\dagger\Big)\Big(\sum_j \phi_j^*(x') c_j^\dagger\Big) V(x-x') \Big(\sum_l \phi_l(x') c_l\Big)\Big(\sum_k \phi_k(x) c_k\Big) \\ &= \sum_{ij} \Big(\int d\mathbf{x} \phi_i^*(x) T(x) \phi_j(x)\Big) c_i^\dagger c_j + \\ &\quad \tfrac{1}{2} \sum_{ijkl} \Big(\iint dx dx' \phi_i^*(x) \phi_j^*(x') V(x-x') \phi_k(x) \phi_l(x')\Big) c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \\ &= \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle \; c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl\rangle \; c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k. \end{aligned}$$

۳.۰ عملگرهای دیگر

هامیلتونی تنها عملگری نیست که بر حسب عملگرهای خلق و فنا یا عملگرهای میدان قابل بیان است. می‌توان سایر عملگرهای مهم که افت و خیزهای مربوط به آنها مورد علاقه تجربی یا نظر می‌باشد را نیز بر حسب این عملگرها نشان داد. به عنوان چند مثال، برخی از عملگرهایی را که در مطالعه سیستم‌های ماده چگال دارای اهمیت هستند را در این بخش معرفی می‌کنیم.

۱.۳.۰ عملگر چگالی و چگالی جریان

این عملگر ساده‌ترین و در عین حال یکی از مهمترین عملگرهایی است افت و خیزهای آن به شکل تابع پاسخی اندازه گیری می‌شود که مرتبط به تابع دی‌الکتریک سیستم است. برای همین ضرورت دارد شکل‌های مختلف آن را به دقت مطالعه کنیم. اجالتا از اسپین ذرات صرف نظر می‌کنیم و لذا مختصه x فقط بیان کننده نقطه $\mathbf{x}$ فضاست. عملگر چگالی در نقطه $\mathbf{x}$ فضا بر حسب عملگرهای میدان به شکل خواهد بود:

$$\rho(\mathbf{x}) = \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}),$$

اغلب سیستم‌های مورد علاقه ما دارای ناوردایی انتقالی هستند و لذا اربیتاهای طبیعی مناسب برای توصیف آن‌ها حالت‌های بلاخ هستند و توسط تکانه $\mathbf{k}$ برچسب زده می‌شوند. در تقریب الکترون آزاد، این اربیتال‌ها شکل ساده موج تخت را دارند:

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{x}},$$

که در آن $\mathcal{V}$ عبارت است از حجمی جعبه‌ای الکترون‌های آزاد در آن زندگی می‌کنند. بنابراین رابطه بین عملگر میدان و عملگرهای مربوط به اربیتال‌های موج تخت به شکل زیر در می‌آید:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{x}} c_{\mathbf{k}} \qquad (۲۴)$$

در این صورت عملگر چگالی ذرات به شکل زیر خواهد بود:

$$\rho(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{p}} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{k}).\mathbf{x}} c_{\mathbf{p}}^\dagger c_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{kq}} e^{i\mathbf{q}.\mathbf{x}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}.\mathbf{x}} \rho_{\mathbf{q}}$$

که تساوی آخر مولفه $\mathbf{q}$ افت و خیز چگالی را به صورت زیر به دست می‌دهد

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}} \qquad (۲۵)$$

این رابطه بیان می‌کند که مولفه فوریه $\mathbf{q}$ افت و خیز چگالی مرتبط است با جمع روی همه پروسه‌هایی که یک ذره با تکانه $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ و یک حفره با تکانه $-\mathbf{k}$ به وجود می‌آورند. تکانه مرکز جرم زوج الکترون‌ـحفره مرتبط با افت و خیز چگالی $(\mathbf{k}+\mathbf{q})+(-\mathbf{k})=\mathbf{q}$ می‌باشد.

حال باید عبارتی برای عملگر چگالی جریان به دست آوریم. برای این کار راه‌های مختلفی وجود دارد که برخی از آن‌ها را در تمرین‌ها می‌آوریم. عملگرهای چگالی و چگالی جریان در معادله پیوستگی صدق می‌کنند:

$$\dot{\rho}(\mathbf{x}) + \nabla.\mathbf{j}(\mathbf{x}) = ۰ \Rightarrow -i\dot{\rho}_{\mathbf{q}} = \mathbf{q}.\mathbf{j}_{\mathbf{q}} \qquad (۲۶)$$

برای هامیلتونی تک ذره‌ای $H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}$ تحول زمانی عملگر چگالی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$-i\dot{\rho}_{\mathbf{q}} = [H, \rho_{\mathbf{q}}] = i\sum_{\mathbf{p},\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{p}} [c^{\dagger}_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}}, c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}}] = \sum_{\mathbf{k}} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}\right) c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{q}.\mathbf{j}_{\mathbf{q}}.$$

تساوی آخر عبارت بالا مولفه طولی بردار چگالی جریان را تعریف می‌کند. اکنون می‌توان با شیفت مبداء تکانه کلی $\mathbf{k}$ که در عبارت بالا روی آن جمع زده می‌شود، عبارت متقارن‌تری به دست آورد:

$$\mathbf{q}.\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/۲} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/۲}\right) c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/۲} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/۲} \qquad (۲۷)$$

برای الکترون‌های آزاد که $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^{۲}/۲m$ است، عبارت بالا به شکل زیر درمی‌آید:

$$\mathbf{q}.\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}.\mathbf{q}}{m} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/۲} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/۲} \Rightarrow \mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{m}\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/۲} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/۲} \qquad (۲۸)$$

که در قدم آخر ثابت $\hbar$ نیز اعاده شده است. توجه به این نکته مهم است که عنصر ماتریسی $\mathbf{k}$ در رابطه بالا عبارت است از تکانه نسبی زوج الکترون‌ـحفره: $[\mathbf{k}+\mathbf{q}/۲] - [-(\mathbf{k}-\mathbf{q}/۲)] = \mathbf{k}.$ و به طریق مشابه تکانه $\mathbf{q}$ عبارت است از تکانه مرکز جرم زوج الکترون‌ـحفره. بدین معنا کاملا طبیعی است که جریان بار الکتریکی با تکانه نسبی الکترون‌ها نسبت به حفره‌ها که بار مخالف دارند داده شود.

عبارت (۲۷) مختص رابطه پاشندگی مربعی الکترون‌های آزاد نیست و برای ساختار نواری کاملا کلی $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ نیز معتبر است. در چنین وضعیتی، حد پیوستار $\mathbf{q} \to ۰$ امکان می‌دهد کمیت‌های $\varepsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}/۲}$ را بسط تیلور داده و به دست آوریم:

$$\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/۲} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar \partial \mathbf{k}}\right) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/۲} = \sum_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/۲} \mathbf{v}_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/۲} \qquad (۲۹)$$

در قدم آخر رابطه بالا توجه می‌کنیم که در یک ساختار نواری که با رابطه پاشندگی دلخواه $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ تعریف می‌شود، سرعت الکترونی که در حالت بلاخ $\mathbf{k}$ است از مشتق انرژی نواری نسبت به تکانه بلاخ به دست می‌آید. مشابه کلاسیکی رابطه بالا در فضای حقیقی عبارت است از $\mathbf{j} = n\mathbf{v}$ که چگالی جریان برای یک بار واحد را به دست می‌دهد و n نقشی مشابه $c^{\dagger}c$ عبارت بالا را دارد.

به منظور کسب یک نگرش وحدت‌بخش به عبارت بالا و عبارت چگالی بار توجه می‌کنیم که، به همان طریقی که از زمان و فضا می‌توان چهار‌ـبردار $(t, \mathbf{x})$ را ساخت، از انرژی و تکانه نیز می‌توان چهار‌ـتکانه $(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \hbar\mathbf{k})$ درست کرد. حال عنصر ماتریسی مربوط به چهار‌ـجریان $(\rho_{\mathbf{q}}, \mathbf{j}_{\mathbf{q}})$ از مشتق گیری رابطه پاشندگی $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ نسبت به چهار‌ـتکانه به دست می‌آید:

$$(\rho_{\mathbf{q}}, \mathbf{j}_{\mathbf{q}}) = \sum_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/۲} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar \partial \mathbf{k}}\right) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/۲} \qquad (۳۰)$$

شکل ۱: نمایش رابطه جابه‌جایی (۳۱) به زبان نقاشی

به عناصر ماتریسی فوق که به شکل چهارـمشتق نمایش داده شده‌اند، گاهی «راس» نیز گفته می‌شود که وجه تسمیه آن بعدها در مواجهه با دیاگرام‌های فاینمن روشن خواهد شد. از رابطه فوق روشن است که راس ظاهر شده در عملگر جریان یک تابع فرد از تکانه است، اما راس مربوط به عملگر چگالی تابع زوج تکانه می‌باشد. این خاصیت کلی است.

(تمرین) برای به دست آوردن رابطه (۲۷) اتحاد زیر را ثابت کنید:

$$[c^\dagger_\beta c_\alpha, c^\dagger_a c_b] = \delta_{\alpha a} c^\dagger_\beta c_b - \delta_{\beta b} c^\dagger_a c_\alpha, \tag{۳۱}$$

این رابطه را می‌توان به طریقی که در شکل ۱ نشان داده شده است، نقاشی نیز نمود. در این دیاگرام، خطی که به راس مشترک وارد می‌شود برچسب حالت کوانتومی مربوط به عملگر فنا را دارد و خطی که از راس مشترک خارج می‌شود، برچسب حالت کوانتومی خلق شده را بر روی خود دارد. بعدها خواهیم دید این نقاشی‌های ساده، کار محاسبه و تقریب جابه‌جاگرهای پیچیده را بسیار شهودی و روان خواهند نمود.

(تمرین): مناسب است که برای یک شبکه گسسته ابرمکعبی d بعدی نیز عبارت‌هایی برای چگالی بار و چگالی جریان داشته باشیم. هامیلتونی تنگ بست زیر را در نظر بگیرید $H = -\gamma \sum_{\mathbf{m},\mathbf{n}} c^\dagger_{\mathbf{m}} c_{\mathbf{n}} + c^\dagger_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{m}}$. با الهام از رابطه کلاسیکی $\mathbf{j} = \mathbf{v} n = \frac{d\mathbf{x}}{dt} n$ می‌توان نسخه کوانتومی چگالی جریان را مشتق زمانی عملگر زیر پنداشت:

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{R}\, c^\dagger_{\mathbf{R}} c_{\mathbf{R}}$$

با محاسبه جابه‌جاگر این عملگر و هامیلتونی نشان دهید:

$$\mathbf{j} = i\gamma \sum_{\mathbf{n},\mathbf{u}} \mathbf{u} \left(c^\dagger_{\mathbf{n}+\mathbf{u}} c_{\mathbf{n}} - c^\dagger_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}+\mathbf{u}} \right)$$

که در آن $\mathbf{u}$ برداری است که سایت معینی را به یکی از همسایگان خود در جهت مثبت یکی از محورها وصل می‌کند. تبدیل فوریه عبارت فوق را محاسبه کنید و نشان دهید که راس جریان تابع فردی از تکانه است. در حد پیوستار، عبارت‌های پیشین نوشته شده در فضای وارون را برای مولفه فوریه $\mathbf{q}$ عملگر جریان به دست آورید.