

Лекція №3

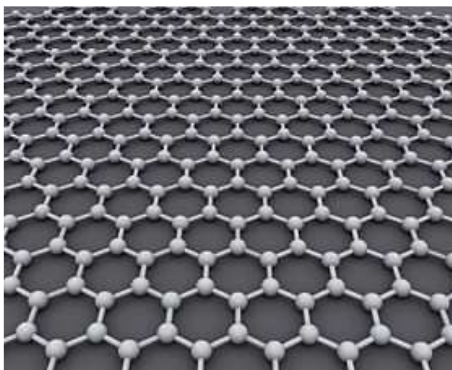
Квазічастинки та їх характеристики.

Контрольні питання до матеріалу лекції.

1. Що таке структурні одиниці речовини?
2. Що таке квазічастинки, як довго вони живуть, і чому можуть слугувати прикладом квантово-механічної дуальності речовини?
3. Два типи елементарних збуджень, приклади.
4. Фізичні характеристики елементарних збуджень
5. Основні принципи квантової механіки.
6. Що таке матриця густини (або статистичний оператор)? Як виражаються середні значення квантово-механічних величин через матрицю густини (статистичний оператор).

Для пошуку відповідей на зазначені контрольні питання користуватися матеріалами попередніх лекцій та літературою з основного списку, наданого лектором.

Як уже було видно із попередніх лекцій, конденсована матерія – надзвичайно складне утворення. Вона є системою сильно взаємодійних структурних одиниць, що здійснюють складні коливальні рухи як цілісне. Крім того, якщо головними структурними одиницями є багатоатомні елементи, то кожна структурна одиниця має внутрішні ступені вільності, що визначають характер коливань її складових атомів. Неможливо передбачити заздалегідь, якими властивостями наділена задана конфігурація частинок. Так що при дослідженні конденсованих систем існує практично невичерпна можливість відкриття нових невідомих явищ і властивостей речовини. Що й підтверджується численними відкриттями в даній області, зробленими відносно недавно. Наприклад, відкриттям високотемпературної надпровідності, графену, фулеренів тощо.



Вікіпедія. Графен — двовимірний матеріал^[en], одна з алотропних форм вуглецю, моноатомний шар атомів вуглецю із гексагональною структурою. Графен був відкритий в 2004 Андрієм Геймом та Костянтином Новосьоловим із Манчестерського університету. За

це відкриття Гейм та Новосьолов були нагороджені Нобелівською премією з фізики за 2010. Основною особливістю чистого графена — двовимірної модифікації вуглецю — є відсутність у ньому забороненої зони, ширина якої дорівнює нулю^[1]



Вікіпедія. Фулерени або бакіболи — одна з кількох алотропних модифікацій Карбону. Найвідоміший фулерен — молекула C_{60} , яка має ідеальну форму футбольного м'яча^[1]. Відкриті в 1985 Робертом Керлом, Гарольдом Крото й Річардом Смолі^[1], ці молекули, що складаються тільки з атомів Карбону, отримали свою назву на честь Річарда Бакмінстера Фулера — архітектора, що прославився побудовою ажурних куполів. Першовідкривачі отримали Нобелівську премію з хімії в 1996 році^[1]. Природні фулерени можна знайти в сажі. Кристалічна форма фулеренів називається **фулеритом**.

Вікіпедія. Алотропія (від гр. *ἄλλος*, *állos* — інший і *τρόπος*, *trópos* — властивість) — явище утворення елементом двох або кількох простих речовин. Так проста речовина кисень O_2 і проста речовина озон O_3 є алотропічними видозмінами елементу оксигену. Вуглець, фосфор, сірка і інші елементи також утворюють алотропічні видозміни. Алотропічні видозміни, або модифікації, обумовлюються або різною кількістю атомів у молекулах, або різною кристалічною будовою твердих тіл, що складаються з атомів того самого хімічного елементу. Явищами алотропії пояснюється і той факт, що простих речовин відомо значно більше, ніж хімічних елементів. Відомо понад 400 простих речовин, а хімічних елементів — лише 118.

Таким чином, точний теоретичний розрахунок подібного роду багаточастинкових систем наразі неможливий. По-перше тому, що число частинок величезне ($\sim 10^{22}$ частинок в 1 см^3), і, по-друге, ще й тому, що вони сильно взаємодіють між собою. Більш того, насправді і мікроскопічний вигляд власне взаємодії насправді не відомий. Із-за взаємодії частинок повна енергія такої системи, що повинна визначати її властивості, не є сумою енергій окремих частинок, як у випадку ідеального газу. А ідеальний газ, як ми пам'ятаємо, є саме ІДЕАЛОМ як система, що допускає точний опис.

Із математичної точки зору головною причиною такого надзвичайно простого опису є та обставина, що енергія ідеального газу (а значить, і гамільтоніан) має досить простий вигляд

$$E = \sum_l E_l \nu_l, \quad (1)$$

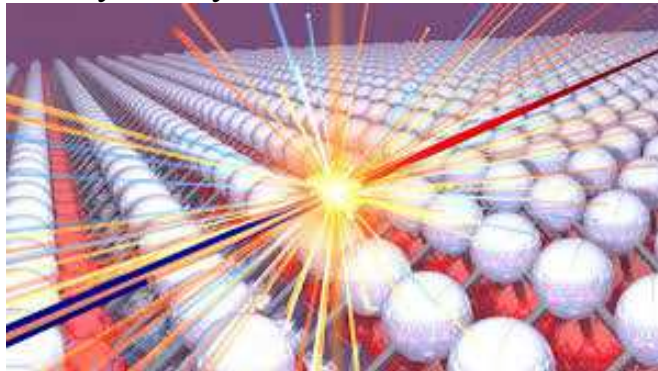
де E_l - енергія структурної одиниці ідеального газу в стані з набором фізичних характеристик l і ν_l - число заповнення відповідного енергетичного рівня, тобто, число частинок багаточастинкової системи, що знаходяться саме в даному стані. Звідси спокуса й «божевільна думка»: «А чи не можна опис процесів і явищ у фізиці конденсованого стану звести до опису їх у рамках моделі ідеального газу»?

Виявляється, можна!!! Причому, як не парадоксально, саме наявність сильної взаємодії між частинками робить таку абсурдну, на перший погляд, ідею, цілком реалізовною. А саме, в силу наявності взаємодії (і сильної!) між структурними одиницями конденсованої речовини будь-який рух у ній є колективним. Навіть якщо певним чином вдалось вивести із стану рівноваги одну структурну одиницю, сильна взаємодія передає збуджуючий вплив багатьом частинкам середовища. Якщо таке збудження не приводить до сильних відхилень системи від її основного стану, то чи не можна енергію збудженого стану середовища представити у вигляді енергії E_0 основного (не збудженого) її стану та енергії збудження? Енергія збудження повинна бути набагато меншою за енергію основного стану і представлена у вигляді суми енергій E_l елементарних (тобто, таких що не можуть бути зведеними до більш простих) рухів (збуджень):

$$E = E_0 + \sum_l E_l \nu_l. \quad (2)$$

Саме такі елементарні збудження, кванти руху, неподільні на більш прості «одиниці» колективного руху, і називаються **КВАЗІЧАСТИНКАМИ** з енергією E_l . Таким чином, опис системи сильновзаємодійних структурних одиниць зводиться до опису системи в термінах характеристик теж, у певному сенсі структурних, одиниць – квазічастинок. **Тобто, по суті відбувається тим самим перехід до нових структурних одиниць!!!** Прикметно, що в енергії основного стану E_0 криється інформація про сильну взаємодію між «первинними» структурними одиницями речовини. Легко бачити, що формула (2) відрізняється від формули (1), що є формулою енергії ідеального газу, тільки наявністю доданку E_0 - енергії основного стану системи. Тобто, якщо вдається привести енергію системи до вигляду (2), то вдається звести задачу про опис конденсованої системи з сильною взаємодією між структурними одиницями до опису в термінах характеристик ідеального газу. Сама задача зведення до опису системи в термінах ідеального газу називається квантуванням системи. Тут слід спеціально зазначити, що, як уже підкреслювалось на попередній лекції, частинки конденсованого середовища підкоряються законам квантової механіки, тому властивості сукупності частинок, що складають тверде тіло (або рідину), можуть стати зрозумілими лише на основі квантових уявлень. Таким чином, саме розвиток квантової теорії конденсованих середовищ привів до створення спеціальних фізичних понять, зокрема, привів до концепції квазічастинок — елементарних збуджень усієї сукупності взаємодійних

частинок – ідеального газу квазічастинок. Чому ж у такому випадку квазічастинки названі вище «слабковзаємодійними»? Перш за все тому, що процедура квантування, як побачимо далі, є наближеною, реалізовною, як правило, в рамках певної теорії збурень. Тобто, у формулі (2) повинні бути доданки, внесок яких до процесів і явищ, що вивчаються, повинен бути незначним у порівнянні зі внеском основних членів. Ці доданки можна трактувати як взаємодію між квазічастинками. Ситуація повністю аналогічна ситуації з визначенням поняття «ідеальний газ». Повністю невзаємодійний газ є фізично нереальним із тієї причини, що в ньому неможливі релаксаційні процеси, тобто, установлення стану рівноваги. Саме для цього повинна існувати слабка взаємодія між структурними одиницями такої речовини, наявністю якої можна ігнорувати при розв'язку певних класів задач (по-суті, крім вивчення релаксаційних процесів у системі). Зазначимо також, що формула (2) також відображує згадувану не раз раніше квантово механічну дуальність речовини. Зараз це, може бути, не так очевидно, але про це ми ще будемо говорити в майбутньому.



Принаймні, видно аналогію з уведенням на попередній лекції поняття поля, його вакууму (основного стану!) й частинки як збудження вакууму. Основний стан системи й квазічастинки як його збудження.

Методи квантування ґрунтуються на уявленні про основний стан багаточастинкових систем. Із точки зору термодинаміки, макроскопічна система знаходиться в основному стані за температури абсолютного нуля. Мінімуму потенціальної енергії повинне відповідати таке розташування частинок, за якого система однорідна, оскільки будь-які варіації її густини збільшують потенціальну енергію. Але ж саме однорідність системи передбачає її періодичність. Таким чином, будь-якій системі, що знаходиться у рівноважному стані за нульової температури $T = 0$ повинна відповідати кристалічна структура.

Із співвідношення невизначеностей Гейзенберга витікає, що стан повного спокою для частинок неможливий, оскільки в стані спокою частинка повинна мати точно визначені координати й імпульс. Тому в основному стані частинки здійснюють деякий рух поблизу своїх положень рівноваги. Ці рухи називаються нульовими коливаннями. На відміну від теплового руху нульові коливання не несуть теплової (кінетичної енергії). Амплітуда нульових коливань визначається енергією зв'язку: глибиною потенціальних ям, що визначають положення частинки в просторі. Якщо енергія взаємодії мала, то

амплітуда нульових коливань може бути порядку міжчастинкових відстаней. Така речовина залишається рідкою за охолодження аж до $T = 0$. Прикладом незамерзаючої речовини є гелій аж до певних значень тиску в такій системі.

Властивості конденсованих середовищ визначаються не тільки їх структурою, але й динамікою поведінки, тобто, особливостями рухів, що приводять до переходу середовища до збудженого стану.

У просторово-однорідній системі рух виникає у вигляді окремих дискретних порцій (квантів) – елементарних збуджень. У газах частинки є одночасно і структурними одиницями речовини і структурними одиницями руху, тобто, кожна частинка має визначену енергію й імпульс. Рух же частинок у конденсованому середовищі має корпоративний характер і визначається узгодженими рухами великого числа структурних одиниць. Таким чином, характерною особливістю елементарних збуджень в конденсованих середовищах є те, що кожне елементарне збудження охоплює багато структурних одиниць.

Якщо квазічастинки існують досить довго в незмінному вигляді, то вони подібні частинкам, тобто, характеризуються певними значеннями енергії та імпульсу. Умовою існування квазічастинок є вимога, щоб час життя квазічастинки τ був набагато більшим за невизначеність у часі Δt , що витікає із співвідношення невизначеності Гейзенберга

$$\tau \gg \Delta t \sim \frac{\hbar}{E}, \quad (3)$$

де E - енергія квазічастинки. Ця умова означає, що збуджені стани, відповідні частинкам, повинні бути стаціонарними.

Два типи елементарних збуджень.

Елементарні збудження можна поділити на два типи:

1. Елементарні збудження, які після вимкнення взаємодії структурних одиниць переходять у частинки ідеального типу. Прикладом збуджень такого типу є елементарні збудження в електронній фермі-рідині: «частинки» й «античастинки». При вимкненні взаємодії фермі-рідина переходить у фермі-газ, а елементарні збудження набувають параметрів реальних ферміонів (електронів з енергіями, близькими до енергії Фермі).
2. Елементарні збудження, що зумовлені виключно силами взаємодії і відсутні в ідеальному газі структурних одиниць. Прикладом таких збуджень є кванти пружних коливань кристалічної ґратки, що називаються фононами. При вимкненні взаємодії енергія фононів обертається на нуль.

Повна енергія системи поблизу основного стану є сумою енергії основного стану (яка може бути обрана за точку відліку) і суми енергій елементарних збуджень.

У динамічному відношенні квазічастинки подібні до звичайних частинок. Однак характерною особливістю квазічастинок є те, що вони не

можуть з'являтися у вакуумі. Для їх існування необхідна наявність середовища, оскільки, будучи носіями руху, вони не представляють собою будівельний матеріал середовища, у якому існують. Тому, щоб підкреслити цю різницю, прийнято говорити не про імпульс квазічастинок, а про квазіімпульс.

Основні характеристики квазічастинок.

«Частички – это Вам не квазичастицы»!

«Квазичастицы – это Вам не частички»!

Можна сказати, полемічна публічна «сутичка» **Олександра Ілліча Ахієзера та Іллі Михайловича Ліфшиця**. Суть відображено в картинці.

Quasi-particle Mattuck's quasi-horse

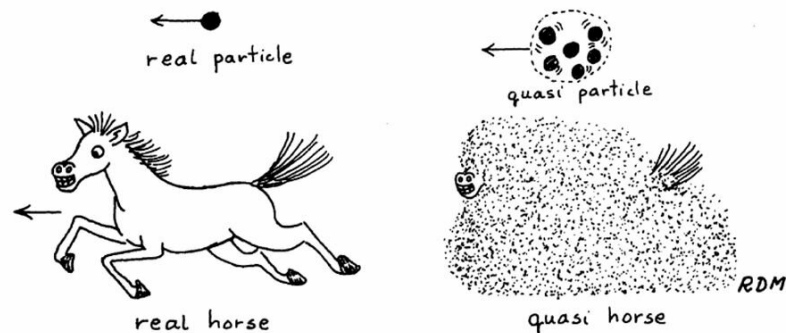


Illustration by Richard D. Mattuck from “A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem”

"Кому потрібні книжки без картинок... – або хоча б віршиків, не розумію!" - думала Аліса. Л.Керрол, «Аліса в країні чудес».

Основними характеристиками квазічастинок є наступні:

1. Енергія E .
2. Квазіімпульс \mathbf{p} .
3. Закон дисперсії $E(\mathbf{p})$ - залежність енергії квазічастинки від квазіімпульса.

Для класичної частинки з масою m залежність енергії від імпульсу має вигляд

$$E(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (2)$$

Цей вираз витікає із релятивістської теорії, в якій

$$E = c\sqrt{m^2c^2 + \mathbf{p}^2}, \quad (3)$$

де c - швидкість світла. У випадку, коли швидкість частинки набагато менша за швидкість світла, маємо

$$E = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\mathbf{p}^2}{m^2c^2}} \approx mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (4)$$

Корисно порівняти цей вираз із формулою (2).

Енергія класичної частинки складається із енергії спокою mc^2 та кінетичної енергії $\mathbf{p}^2/2m$, тобто, закон дисперсії цієї частинки є квадратичним. На відміну від невзаємодійних частинок, закон дисперсії квазічастинок може мати дуже складний характер.

4. Ефективна маса квазічастинки – деяке умовне поняття, залежне від способу її визначення. Описує поведінку квазічастинок за певних зовнішніх умов.
5. Константа взаємодії – заряд.
6. Статистика, якою описується ансамбль квазічастинок.
7. Енергетичний спектр – структура енергетичних станів, у яких може перебувати квазічастинка.
8. Функція спектральної густини станів, яка описує залежність густини станів dN , в яких може перебувати квазічастинка в інтервалі енергій dE , тобто, залежність dN/dE від енергії квазічастинки E .

Принципи квантової механіки.

— Не може бути! — вигукнула Аліса. — Я не можу цьому повірити! — Не можеш? — повторила Королева з жалістю. — Спробуй ще раз: вдихни глибше й закрой очі. Аліса розсміялась. — Це не допоможе! — сказала вона. — Не можна повірити в неможливе! — Просто в тебе мало досвіду, — зазначила Королева. — У твоєму віці я приділяла цьому півгодини щодня! В інші дні я встигала повірити в десяток неможливостей до сніданку! Льюїс Керролл, «Крізь дзеркало і що там побачила Аліса, або Аліса в Задзеркаллі»

Чисті стани й суміші.

Стани квантових систем багатьох частинок описуються за допомогою **статистичного оператора**, або, як його ще називають, **матриці густини**. Ми ще матимемо можливість більш детально познайомитись із цим поняттям, але попередньо нагадаємо основні принципи квантової механіки.

Згідно з квантовою механікою кожній фізичній величині R – спостережній - ставиться у відповідність певний оператор \hat{R} , заданий у гільбертовому просторі, який є сукупністю векторів ψ , що називаються векторами стану.

Гільбертів простір (на честь [Давида Гільберта](#)) — це узагальнення поняття [евклідового простору](#) на [нескінченновимірний](#) випадок. Є лінійним простором над [полем](#) дійсних або

комплексних чисел (прийменник «над» означає, що у такому просторі дозволені операції множення на скаляри із відповідних полів), із визначеним скалярним добутком. Останній дозволяє:

1. вводити поняття, аналогічні звичним поняттям ортогональності і кута;
2. визначити метрику, відносно якої гільбертів простір є повним метричним простором.

Гільбертові простори часто виникають у математиці та фізиці — як правило, як функціональні простори. Вперше вони досліджувалися з цієї точки зору в першому десятилітті 20-го століття Давидом Гільбертом, Ерхардом Шмідтом і Фріджемсом Рісом. Гільбертові простори є незамінними інструментами в теорії диференціальних рівнянь у частинних похідних, квантовій механіці, аналізі Фур'є (який включає застосування до обробки сигналів і теплопередачі) та ергодичній теорії (яка формує математичну основу термодинаміки). (ВІКІПЕДІЯ)

Для цих векторів стану визначений скалярний добуток (ψ_1, ψ_2) , що має наступні властивості

$$\begin{aligned} (\psi_1, \psi_2)^* &= (\psi_2, \psi_1), \quad (\psi, a\psi_1 + b\psi_2) = a(\psi, \psi_1) + b(\psi, \psi_2), \\ (\psi, \psi) &> 0, \end{aligned} \quad (5)$$

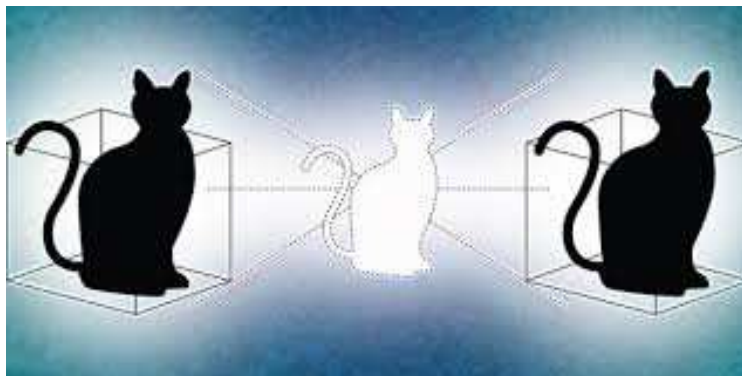
де a і b - довільні комплексні числа.

У цьому просторі може бути уведено (узагалі кажучи, незліченною кількістю способів) повний ортонормований базис ψ_n , $n = 1, 2, \dots$

$$(\psi_n, \psi_m) = \delta_{mn} \quad (6)$$

такий, що будь-який вектор ψ гільбертового простору може бути представлений у вигляді суперпозиції векторів ψ_n

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n, \quad C_n = (\psi_n, \psi), \quad \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 < \infty. \quad (7)$$





Будь-який оператор R у гільбертовому просторі переводить кожний вектор ψ цього простору у деякий інший вектор ψ' цього ж простору

$$\psi \xrightarrow{R} \psi' = \hat{R}\psi. \quad (8)$$

Якщо при цьому

$$\psi' = r\psi,$$

де r -деяке число, то ψ називається власним вектором оператора \hat{R} , належним власному значенню r . Оператор \hat{R}^+ називається ермітово спряженим по відношенню до оператора \hat{R} , якщо для будь-яких двох векторів ψ_1 і ψ_2 має місце рівність

$$(\psi_1, \hat{R}\psi_2) = (\hat{R}^+\psi_1, \psi_2). \quad (9)$$

Оператор \hat{R} називається ермітовим або самоспряженим, якщо

$$\hat{R}^+ = \hat{R}.$$

Власні значення будь-якого самоспряженого оператора дійсні, а його власні вектори утворюють повну ортонормовану систему векторів, і можуть бути використані як базис гільбертового простору. Із цієї причини фізичним величинам у квантовій механіці завжди зіставляються ермітові оператори. Для векторів станів, скалярних добутків і матричних елементів операторів часто використовуються також наступні, так звані, діраківські позначення:

$$\psi \equiv |\psi\rangle, \quad \psi_n \equiv |n\rangle, \quad (\psi, \varphi) = \langle\psi|\varphi\rangle, \quad (\psi, \hat{R}\varphi) = \langle\psi|\hat{R}|\varphi\rangle. \quad (10)$$

Вектор $|\psi\rangle$ є спряженим по відношенню до вектора $\langle\psi|$

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^*$$

Простіше в цьому розібратися на звичному прикладі перемноження матриць (строчка на стовбець):

$$\langle \psi | \rightarrow (a^*, b^*, c^*), \quad |\varphi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix},$$

$$\langle \psi | \varphi \rangle = a^* d + b^* e + c^* f$$

Якщо система характеризується вектором ψ , або, як говорять, знаходиться у стані ψ , то середнє значення \bar{R} деякої фізичної величини \hat{R} , здобуте в результаті її вимірювання, буде дорівнювати

$$\bar{R} = (\psi, \hat{R}\psi) \equiv \langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle \quad (11)$$

(передбачається виконаною умова нормування $(\psi, \psi) = 1$). Якщо ψ_r є власним вектором оператора \hat{R} , $\hat{R}\psi_r = r\psi_r$, то при вимірюванні величини \bar{R} у стані ψ_r ми будемо отримувати завжди одне й те ж значення $\bar{R} = r$. Домовимося при цьому, що в діраківських позначеннях оператори діють завжди на вектори типу $|\psi\rangle$

$$\hat{R}|\psi\rangle, \text{ або, наприклад, } \hat{R}|n\rangle = r_n |n\rangle$$

якщо $|n\rangle$ є власним вектором оператора \hat{R} із власним значенням r_n . Розклад вектора $|\psi\rangle$ в ряд за повним набором векторів $|n\rangle$ у даному записі виглядає наступним чином

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n |n\rangle, \quad C_n = \langle n | \psi \rangle.$$

Підставляючи далі другий вираз у перший, здобудемо:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle n | \psi \rangle |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n | \psi \rangle = |\psi\rangle \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|.$$

Звідси видно, що сума $\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n|$ повинна дорівнювати одиниці,

$$\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n| = 1. \quad (12)$$

Остання рівність носить назву умови повноти за умови ортогональності

$$\langle n | m \rangle = \delta_{mn}. \quad (13)$$

Тобто, система векторів є повною, і по ній може бути розкладений будь-який вектор стану розглянутого простору, якщо ця система векторів задовольняє умові (12).

Подивимось тепер на рівність

$$\bar{R} = \langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle,$$

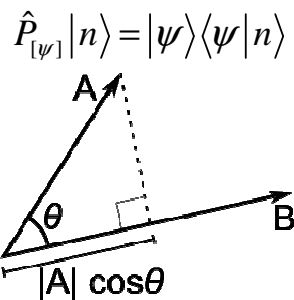
що визначає середнє значення якого- оператора \hat{R} . Упевнимось, що його можна представити у вигляді суми діагональних матричних елементів Sp від добутку двох операторів:

$$\bar{R} = Sp \hat{P}_{[\psi]} \hat{R}, \quad (14)$$

де

$$Sp \hat{A} = \sum_{n=1}^{\infty} A_{nn},$$

$\hat{P}_{[\psi]}$ - оператор – проектор, який визначається за допомогою співвідношення (аналог проєкції на вектор в аналітичній геометрії)



або

$$\hat{P}_{[\psi]} = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Справді,

$$\bar{R} = Sp \hat{P}_{[\psi]} \hat{R} = \sum_{n=1}^{\infty} \langle n | \hat{P}_{[\psi]} \hat{R} | n \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle n | \hat{R} | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi | n \rangle \langle n | \hat{R} | \psi \rangle,$$

Але ж сума $\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1$ дорівнює одиниці, отже

$$\bar{R} = Sp \hat{P}_{[\psi]} \hat{R} =$$

$$\bar{R} = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi | \hat{R} | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{R} | \psi \rangle,$$

Що й слід було довести. Операція Sp інваріантна щодо базису, в якому вона обчислюється, тому запис (14) є дуже зручним і широко використовується.

Поряд з найпростішим випадком, коли система може характеризуватися певним вектором стану, можлива загальна ситуація, коли точно невідомо, який із векторів стану характеризує стан системи, а можна лише вказати ймовірності того, що система характеризується тим чи іншим вектором стану. Якщо w_n - ймовірність того, що система знаходиться в стані $|n\rangle$ (або ψ_n , як ми писали вище), причому

$$w_n \geq 0, \quad \sum_n w_n = 1,$$

то середнє значення якого-небудь оператора оператора \hat{R} буде визначатися формулою

$$\bar{R} = \sum_n w_n \langle n | \hat{R} | n \rangle,$$

яку можна записати у вигляді

$$\bar{R} = \text{Sp} \rho \hat{R},$$

де

$$\rho = \sum_n |n\rangle w_n \langle n| = \sum_n w_n P_{[n]}.$$

Оператор ρ носить назву статистичного оператора або матриці густини. Він є позитивно визначеним ермітовим оператором, шпур якого дорівнює одиниці

$$\text{Sp} \rho = 1.$$

Якщо ж система знаходиться в чистому стані, то її матриця густини, очевидно, співпадає з оператором-проектором на стан $|\psi\rangle$

$$\rho = \hat{P}_{[\psi]} = |\psi\rangle \langle \psi|.$$