Лекция №3

Квазичастицы и их характеристики.

Структурные единицы вещества – это строительный материал, из которого состоит материя. Распределение структурных единиц в пространстве определяет структуру вещества.

Конденсированная материя – чрезвычайно сложное образование. Оно представляет собой систему сильно взаимодействующих структурных единиц, совершающих сложные колебательные движения как целое. Кроме того, если структурными единицами являются многоатомные элементы, то каждая структурная единица обладает внутренними степенями свободы, определяющих характер колебаний составляющих ее атомов. Точный теоретический расчет многочастичных систем в настоящее время невозможен. Невозможно также заранее предсказать, какими свойствами будет обладать заданная конфигурация частиц. Так что при исследовании конденсированных систем имеется практически неисчерпаемая возможность открытия новых неизвестных явлений и свойств вещества. Что подтверждается многочисленными открытиями в данной области, сделанной в последние годы (например, открытием высокотемпературной сверхпроводимости, существование которой считалось невозможным). Что касается теории конденсированных систем, то здесь большую роль играют различные приближенные методы расчета и теоретические модели.

Наиболее широко используются в настоящее время квазичастичные методы описания возбужденных состояний конденсированных сред. Эти методы основываются на представлении об основном состоянии многочастичных систем. С точки зрения термодинамики, макроскопическая система находится в основном состоянии при температуре абсолютного нуля. Минимуму потенциальной энергии взаимодействия должно соответствовать такое расположение частиц, при котором система однородна, так как ее любые вариации плотности увеличивают потенциальную энергию. Но однородность системы означает ее периодичность. Таким образом, любой системе, находящейся в равновесном состоянии при $T=0$ должна соответствовать кристаллическая структура.

Из соотношения неопределенностей Гейзенберга следует, что состояние полного покоя для частиц невозможно, так как в состоянии покоя частица должна иметь точно определенные координаты и импульс. Поэтому в основном состоянии частицы совершают некие движения вблизи своих положений равновесия. Эти движения называются нулевыми колебаниями. В отличие от теплового движения нулевые колебания не несут тепловой (кинетической) энергии. Амплитуда нулевых колебаний определяется энергией связи : глубиной потенциальных ям, определяющих положение частиц в пространстве. Если энергия взаимодействия мала, то амплитуда нулевых колебаний может быть порядка межчастичных расстояний. Такое вещество остается жидким при охлаждении вплоть до $T=0$. Примером незамерзающей жидкости является гелий.

Свойства конденсированных сред определяются не только их структурой, но и динамикой их поведения, то есть, особенностями движений, определяющих переход среды в возбужденное состояние.

В пространственно-однородной системе движение возникает в виде отдельных дискретных порций (квантов) – элементарных возбуждений. В газах частицы являются одновременно и структурными единицами вещества и структурными единицами движения, то есть, каждая частица имеет определенную энергию и импульс. Движения же частиц в конденсированной среде имеют кооперативный характер, и определяется согласованными движениями большого числа структурных единиц. Таким образом, характерной особенностью элементарных возбуждений в конденсированных средах является то, что каждое элементарное возбуждение охватывает много структурных единиц.

В том случае, когда элементарные возбуждения, на которые можно разложить состояния ансамбля структурных единиц при низких уровнях возбуждения, могут распространяться в среде, их принято называть **квазичастицами**. Если квазичастицы существуют достаточно долго в неизменном виде, они подобны частицам, то есть, характеризуются определенными значениями энергии и импульса. Условием существования квазичастиц является требование, чтобы время жизни квазичастиц τ было много больше неопределенности во времени Δt, вытекающего из соотношения неопределенностей Гейзенберга

$$\tau \gg \Delta t \sim \frac{\hbar}{E}, \tag{1}$$

где E - энергия квазичастицы. Это условие означает, что возбужденные состояния, соответствующие квазичастицам, должны быть квазистационарными.

Два типа элементарных возбуждений.

Элементарные возбуждения можно разделить на два типа:

1. Элементарные возбуждения, которые после выключения взаимодействия структурных единиц переходят в частицы идеального типа. Примером возбуждений такого типа являются элементарные возбуждения в электронной ферми-жидкости: «частицы» и «античастицы». При выключении взаимодействия ферми-жидкость переходит в ферми-газ, а элементарные возбуждения приобретают параметры реальных фермиевских электронов (электронов с энергией, близкой к энергии Ферми).
2. Элементарные возбуждения, которые обусловлены исключительно силами взаимодействия между структурными единицами и отсутствуют в идеальном газе структурных единиц. Примером таких возбуждений являются кванты

упругих колебаний кристаллической решетки, называемые фононами. При выключении взаимодействия энергия фононов обращается в нуль.

Полная энергия системы вблизи основного состояния является суммой энергии основного состояния (которая может быть принята за точку отсчета и суммы энергий элементарных возбуждений).

В динамическом отношении квазичастицы подобны обычным частицам. Однако характерной особенностью квазичастиц является то, что они не могут появляться в вакууме. Для существования квазичастиц необходимо наличие среды, так как, являясь носителями движения, они не представляют собой строительный материал среды, в которой существуют. Чтобы подчеркнуть это отличие, принято говорить не об импульсе квазичастиц, а о квазиимпульсе.

Основные характеристики квазичастиц.

Основными являются следующие характеристики квазичастиц:

1. Энергия E.
2. Квазиимпульс $\mathbf{p}$.
3. Закон дисперсии $E(\mathbf{p})$ - зависимость енергии квазичастицы от квазиимпульса.

Для классической частицы с массой m зависимость энергии от импульса имеет вид

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

Это выражение следует из релятивистской теории, в которой

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

где c - скорость света. В случае, когда скорость частицы много меньше скорости света, имеем

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

Энергия классической частицы складывается из энергии покоя mc^2 и кинетической энергии $\mathbf{p}^2/2m$, то есть, закон дисперсии этой частицы является квадратичным. В отличие от невзаимодействующих частиц, закон дисперсии квазичастиц может иметь очень сложный характер.

4. Эффективная масса квазичастицы –некоторое условное понятие, зависящее от способа ее определения и описывающее поведение квазичастиц при определенных внешних условиях.
5. Константа взаимодействия – заряд.
6. Статистика, которой описывается ансамбль квазичастиц.

7. Энергетический спектр – структура энергетических состояний, в которых может находиться квазичастица.
8. Функция спектральной плотности состояний, описывающая зависимость числа состояний dN, в которых может находиться частица в интервале энергий dE, то есть, dN/dE от энергии квазичастицы E.

Принципы квантовой механики.

Чистые состояния и смеси.

Состояния квантовых систем описываются с помощью **статистического оператора** или **матрицы плотности**. Мы разъясним здесь это понятие, но предварительно напомним основные принципы квантовой механики.

Согласно квантовой механике каждой физической величине R – наблюдаемой - ставится в соответствие некоторый оператор $\hat{R}$, заданный в гильбертовом пространстве, представляющем собой совокупность векторов ψ, называемых векторами состояния. Для этих векторов состояния определено скалярное произведение (ψ_1,ψ_2), обладающее свойствами

$$(\psi_1,\psi_2)^* = (\psi_2,\psi_1),\ (\psi, a\psi_1 + b\psi_2) = a(\psi,\psi_1) + b(\psi,\psi_2), \qquad (5)$$
$$(\psi,\psi) > 0,$$

где a и b - произвольные комплексные числа.

В этом пространстве может быть введен (вообще говоря, бесчисленным количеством способов) полный ортонормированный базис ψ_n, $\quad n = 1,2,...$

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

такой, что любой вектор ψ гильбертова пространства может быть представлен в виде суперпозиции векторов ψ_n

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

Любой оператор R в гильбертовом пространстве переводит каждый вектор ψ этого пространства в некоторый другой вектор ψ' этого же пространства

$$\psi \underset{R}{\rightarrow} \psi' = \hat{R}\psi. \qquad (8)$$

Если при этом

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

где r -некоторое число, то ψ называется собственным вектором оператора $\hat{R}$, принадлежащим собственному значению r. Оператор $\hat{R}^+$ называется эрмитовски сопряженным по отношению к оператору $\hat{R}$, если для любых двух векторов ψ_1 и ψ_2 имеет место равенство

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

Оператор $\hat{R}$ называется эрмитовым или самосопряженным, если

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

Собственные значения любого самосопряженного оператора вещественны, а его собственные векторы образуют полную ортонормированную систему векторов, и могут быть использованы в качестве базиса гильбертова пространства. По этой причине физическим величинам всегда сопоставляются эрмитовы операторы.

Для векторов состояний, скалярных произведений и матричных элементов операторов часто используются также следующие дираковские обозначения:

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

Вектор $\left|\psi\right\rangle$ является сопряженным по отношению к вектору $\left\langle\psi\right|$. Проще в этом разобраться на привычном примере умножения матриц (строка на столбец):

$$\left\langle\psi\right| \to \left(a^*, b^*, c^*\right), \; \left|\varphi\right\rangle \to \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix},$$

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

Если система характеризуется вектором ψ, или, как еще говорят, находится в состоянии ψ, то среднее значение $\overline{R}$ некоторой физической величины $\hat{R}$, получаемое в результате ее измерения, будет равно

$$\overline{R} = \left(\psi, \hat{R}\psi\right) \equiv \left\langle\psi\middle|\hat{R}\middle|\psi\right\rangle \qquad (11)$$

(предполагается выполненным условие нормировки $(\psi,\psi)=1$). Если ψ_r представляет собой собственный вектор оператора $\hat{R}$, $\hat{R}\psi_r = r\psi_r$, то при измерении величины $\overline{R}$ в состоянии ψ_r мы будем получать всегда одно и то же значение $\overline{R} = r$. Условимся при этом, что в дираковских обозначениях операторы действуют всегда на векторы типа $\left|\psi\right\rangle$

$$\hat{R}|\psi\rangle,\text{ или, например, } \hat{R}|n\rangle = r_n|n\rangle$$

если $|n\rangle$ является собственным вектором оператора $\hat{R}$ с собственным значением r_n. Разложение вектора $|\psi\rangle$ в ряд по полному набору собственных векторов $|n\rangle$ в данной записи выглядит следующим образом

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

Подставляя далее второе выражение в первое, получим:

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

Отсюда видно, что сумма $\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n|$ должна равняться единице,

$$\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1. \tag{12}$$

Последнее равенство носит название условие полноты при условии ортогональности

$$\langle n|m\rangle = \delta_{mn}. \tag{13}$$

То есть, система векторов является полной, и по ней может быть разложен любой вектор состояния рассматриваемого пространства, если эта система векторов удовлетворяет условию (12).

Посмотрим теперь на равенство

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

определяющее среднее значение какого-либо оператора $\hat{R}$. Убедимся, что его можно представить в виде суммы диагональных матричных элементов Sp от произведения двух операторов:

$$\overline{R} = Sp\hat{P}_{[\psi]}\hat{R}, \tag{14}$$

где

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

$\hat{P}_{[\psi]}$ - оператор – проектор, определяемый с помощью соотношения (аналог проекции на вектор в аналитической геометрии)

$$\hat{P}_{[\psi]}\left|n\right\rangle = \left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\middle|n\right\rangle$$

или

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

В самом деле,

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

но сумма $\sum_{n=1}^{\infty}\left|n\right\rangle\left\langle n\right| = 1$ равна единице, следовательно

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

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

что и требовалось показать. Операция Sp инвариантна относительно базиса, в котором она вычисляется, поэтому запись (14) является очень удобной и широко используется.

Наряду с простейшим случаем, когда система может характеризоваться определенным вектором состояния, возможна общая ситуация, когда точно неизвестно, какой из векторов состояния характеризует состояние системы, а можно лишь указать вероятности того, что система характеризуется тем или иным вектором состояния. Если w_n - вероятность того, что система находится в состоянии $\left|n\right\rangle$ (или ψ_n, как мы условились выше), причем

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

то среднее значение какого-либо оператора $\hat{R}$ будет определяться формулой

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

которую можно записать в виде

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

где

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

Оператор ρ носит название статистического оператора или матрицы плотности. Он является положительно определенным эрмитовым оператором, шпур которого равен единице

$$Sp\rho = 1.$$

Если система находится в чистом состоянии $|\psi\rangle$, то ее матрица плотности, очевидно, равна оператору-проектору на состояние $|\psi\rangle$

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