

Данная серия методичек посвящается лучшему семинаристу по квантовой теории  
Толоконникову Андрею Владимировичу

(звонит звонок)

А.В.: Это перерыв или конец пары? Перерыв? Жалко, лучше бы конец пары.

Студент: А у нас в связи с майскими выпадают два вторника...

А.В.: УРААААА ВЫХОДНЫЕ НЕ НАДО БУДЕТ ВЕСТИ СЕМИНАРЫ

## 1. Введение

Поговорим о том, когда частица не одна, а  
их несколько

Вот так выглядит спинор частицы с  $s_z = \frac{1}{2}$ :  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

а так - с  $s_z = -\frac{1}{2}$ :  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$

А вот так вот выглядит спинор (ВФ) системы  
из двух частиц с суммарной проекцией спина

на z, равной 1:  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2$ . У первой  $s_z = \frac{1}{2}$ ,

у второй  $s_z = \frac{1}{2}$ , в сумме как раз 1.

А вот спинор системы из 2 частиц с суммарной  
проекцией  $S_z = -1$ :  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2$ .

Осталось построить спинор с  $S_z = 0$ . Он такой

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2$$

или такой

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 \quad ?$$

В этом случае спинор определен неоднозначно.

Он вида  $a \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 + b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2$ , где  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  (условие нормировки).

Например, помимо  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2$  ( $a=1; b=0$ ) и  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2$  ( $a=0; b=1$ ) годится

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right]$$

Упр. читателю. Написать общий вид спинора в состоянии с  $S_z = -1/2$ .

Ответ:  $a \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_3 + b \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_3 + c \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_3$   
 $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1$

## 2. Смешанные состояния

внезапно приобретают новый смысл в многочастичных системах.

Пусть у нас есть чистое состояние многочастичной системы. Волновая функция есть функция ВСЕЙ системы, она описывает все электроны одновременно. Если представлять систему как бочонок с мешками электронами («Русское лото» все смотрели?),



то волновая функция описывает все электроны одновременно.

Вот ведущий вытаскивает бочонок



Будем считать, что он не вытаскивает и даже не трогает бочонки, просто указывает на них рукой в мешке. Т.е. случайно выбирает бочонок. Вот я случайно выбрал один электрон. У меня в волновой функции все электроны пронумерованы:

$$[1]_1, [0]_2$$

А я выбрал какой-то наугад. Я не знаю, он первый или второй.

Причём если волновая функция какая-то такая

$$[1]_1, [0]_2, [1]_3, [0]_4, [1]_5$$

То ежу понятно, что скорее всего, проекция спина будет  $+1/2$ . Но это неточно ☺.

Налицо классическая вероятность, а где классическая вероятность – там смешанные состояния. Итак, наугад выбранный электрон не обладает волновой функцией, но зато мы можем написать для него матрицу смешанного состояния. Давайте, кстати, это сделаем.

Полезно запомнить: если чистое состояние описывается ВФ

$a$

$b$

(Естественно, с условием нормировки:  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ )

То матрица плотности для него будет  $\begin{pmatrix} a^2 & ab^* \\ ab & b^2 \end{pmatrix}$ . Звёздочка – комплексное сопряжение.

$$[1]_1, [0]_2$$

Построим матрицу плотности для

вытащу  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ , и матрица плотности в этом случае будет  $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ . С

вероятностью  $1/2$  я вытащу  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ , и матрица плотности в этом случае будет

$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ . Складываем, получаем  $\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ .

А теперь построим матрицу плотности для наугад взятого электрона в

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_3, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_4, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_5$$

системе вероятности будут не  $1/2$  и  $1/2$ , а  $4/5$  и  $1/5$ , так что будет

$$\frac{4}{5} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & 0 \\ 0 & \frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

(Матрицы будут всегда получаться диагональными, но это только потому, что мы в базисе нормальном работаем).

Вот такими матрицами плотности в многочастичных системах и занимается квантовая статистика. Теперь вы знаете, чем занимаются ваши однокурсники с квантстата.

### 3. Про поляризованность.

Наверняка вы слышали «поляризованность». Давайте я сейчас вот этот термин расшарю с помощью диалога ☺.

Вася: я тут тебе систему с электронами создал. Прикинь, у всех спинор или  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ , или  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ !

Петя: Что, реально? Нет  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ , например? (т.е. состояний с квантовой суперпозицией)

Вася: Не, только  $\frac{1}{0}$ , или  $\frac{0}{1}$  - других вариантов нет!

Петя: Круто! (Вытаскивает электрон). А он  $\frac{1}{0}$  или  $\frac{0}{1}$ ?

Вася: А я откуда знаю?

Петя: А ты каких больше в систему добавил -  $\frac{1}{0}$  или  $\frac{0}{1}$ ?

Вася:  $\frac{1}{0}$  больше, их где-то 95%.

Петя: Получается, что тот электрон, который я вытащил, скорее всего,  $\frac{1}{0}$ ?

Вася: Ну типа.

Петя: Т.е. ты мне создал **поляризованный** пучок(систему) электронов.

Вася: Почему это тебе так важно?

Петя: Потому что до тебя какая-то гнида мне тоже предоставила пучок электронов.

Вася: И чё?

Петя: А там 50% было  $\frac{1}{0}$ , а 50%  $\frac{0}{1}$ ! Это **неполяризованный** пучок!

Вася: А в идеале для тебя, наверное, чтобы 100% было одинаково?

Петя: Да, это perfect – абсолютно поляризованный пучок.

#### 4. Гамильтонианы многочастичных системах

обычно выглядят как-то так

$$\hat{H} = -\vec{B} \mu_1 \hat{\sigma}_1 - \vec{B} \mu_2 \hat{\sigma}_2$$

Это гамильтониан двух частиц магнитными моментами  $\mu_1$  и  $\mu_2$  в однородном магнитном поле  $\mathbf{B}$ . Если поле неоднородное, то будет ещё вдобавок так

$$\hat{H} = -\vec{B}_1 \mu_1 \hat{\sigma}_1 - \vec{B}_2 \mu_2 \hat{\sigma}_2$$

Соответственно, а если магнитные моменты оказались одинаковы, то вместо  $\mu_1$  и  $\mu_2$  мы можем написать одну букву  $\mu$ .

$\hat{\sigma}_1$  и  $\hat{\sigma}_2$  - матричный вектор Паули. Как они действуют на

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}?$$

$\hat{\sigma}_1$  действует только на первый столбец, оставляя второй неизменным.

$\hat{\sigma}_2$  - наоборот, действует только на второй столбец, оставляя неизменным первым.

При таком раскладе спины первой и второй частицы меняют независимо, т.е. мы сначала можем найти эволюцию каждого столбца, а потом вновь их объединить.

Однако это справедливо для гамильтонианов вида

$$\hat{H} = -\vec{B}_1 \mu_1 \hat{\sigma}_1 - \vec{B}_2 \mu_2 \hat{\sigma}_2$$

Где каждое слагаемое содержит или  $\hat{\sigma}_1$ , или  $\hat{\sigma}_2$ .

А можно придумать вот такой гамильтониан:

$$\hat{H} = -W_0 \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$$

Где, понятно, основную сложность будет иметь вот это стрёмная конструкция:

$$\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2$$

Если её расписать, то получим

$$\hat{\sigma}_x \left( \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right) \hat{\sigma}_x \left( \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right) + \hat{\sigma}_y \left( \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right) \hat{\sigma}_y \left( \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right) + \hat{\sigma}_z \left( \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right) \hat{\sigma}_z \left( \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right)$$

И там уже надо считать эволюции каждого СФ одновременно. Но так, в «лоб», делать не надо. А как надо? Посмотрим на примере.

Решим задачу:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + U(\hat{r}_1, \hat{r}_2) + k\hat{s}_1\hat{s}_2$$

Найти расщепление энергетического спектра из-за спина. Чему равно это расщепление?

$\hat{s}_1 = \frac{\hat{\sigma}_1}{2}$ ,  $\hat{s}_2 = \frac{\hat{\sigma}_2}{2}$ . Да, операторы Паули и спина равны с точностью до двойки. Так что с тем же успехом мы могли бы написать

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{k}{4}\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$$

Но всё же вернёмся к  $\hat{H} = \hat{H}_0 + k\hat{s}_1\hat{s}_2$ . Перепишем:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + k\hat{s}_1\hat{s}_2 = \hat{H}_0 + \frac{k}{2}((\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2)$$

Чему равно  $\hat{s}^2$ ? Мы слышали фразу «спин у электрона  $-\frac{1}{2}$ ». Что,  $\frac{1}{2} * \frac{1}{2}$ ?

Почти:  $\frac{1}{2} * \left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{3}{4}$  (помните же  $l(l+1)$ ?)

Получаем

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + k\hat{s}_1\hat{s}_2 = \hat{H}_0 + \frac{k}{2} \left( (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right)$$

А  $(\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 = \hat{S}^2$  - это оператор квадрата суммарного спина. Как вы понимаете, он может быть или  $0 * (0 + 1) = 0$ , или  $1 * (1 + 1) = 2$ . Т.е. здесь возникнет расщепление уровней!

Верхний:  $\frac{k}{2} \left( 2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right) = +\frac{k}{2}$  по сравнению с  $\hat{H}_0$  (если бы спина не было)

Нижний:  $\frac{k}{2} \left( 0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right) = -\frac{3k}{2}$  по сравнению с  $\hat{H}_0$  (если бы спина не было)

А разница между ними будет как раз  $k$ , которая будет как раз энергия расщепления.

Здесь мы воспользовались важной идеей: записать скалярное произведение  $\hat{s}_1\hat{s}_2$  как  $(\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2$ . Разумеется, точно такой же трюк надо проделать, если взаимодействие не спин-спиновое, а спин-орбитальное:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{r}) + k\hat{l}\hat{s}$$

для простоты одночастичная система. И пусть это центрально-симметричная система, причём, причём 3d.

Делаем так:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + k\hat{l}\hat{s} = \hat{H}_0 + \frac{k}{2}((\hat{l} + \hat{s})^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2)$$

$\hat{s}^2$  по классике  $\frac{3}{4}$ ,  $\hat{l}^2 - 2(2+1)=6$  (у нас же d-состояние!), ну а  $(\hat{l} + \hat{s})^2 = \hat{j}^2$  - знакомый полный момент. Тут явно вырисовывается знакомая формула  $J(J+1)-L(L+1)-S(S+1)$ . Вот так она выводится ☺