

## Квантовые системы многих частиц

Помните, как считали древние люди? Один, два, много. Мы пойдем еще дальше, поскольку уже две частицы образуют «систему многих частиц», по крайней мере, в том смысле, что в квантовой механике им присущи специфические свойства.

Состояние квантовой системы, состоящей из  $N$  частиц, описывается волновой функцией<sup>1</sup>

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t), \quad (1)$$

а гамильтониан представляет собой сумму гамильтонианов отдельных частиц и оператора взаимодействия  $\hat{U}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  между ними:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \hat{U}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (2)$$

где

$$\hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{U}(\mathbf{r}_i) \quad (3)$$

– так называемый *одночастичный гамильтониан*.

Только ради простоты записи я часто буду говорить о системе из двух частиц, основные выводы останутся справедливыми для *любых двух частиц* произвольной системы  $N$  одинаковых частиц.

Если взаимодействием между частицами можно пренебречь, то задача о стационарных значениях энергии системы сводится к одночастичным задачам,  $\psi$ -функцию можно записать в виде произведения их решений  $\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)$  и  $\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)$

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2), \quad (4)$$

а полная энергия системы равна сумме энергий отдельных частиц  $E = E_1 + E_2$ .

В самом деле, пусть для системы из двух частиц мы нашли решения уравнений

$$\hat{H}_1(\mathbf{r}_1)\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) = E_1\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) \quad (5)$$

и

$$\hat{H}_2(\mathbf{r}_2)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) = E_2\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2). \quad (6)$$

Тогда произведение функций  $\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)$  удовлетворяет уравнению Шредингера для системы:

---

<sup>1</sup> Согласно нашей договоренности,  $\psi$ -функция такой системы есть  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ .

Волновая  
функция  $N$   
частиц

Одночастич-  
ный гамиль-  
тониан

Невзаимо-  
действующие  
частицы

$$\begin{aligned} \hat{H}(\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)) &= \\ \hat{H}_1(\mathbf{r}_1)(\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)) + \hat{H}_2(\mathbf{r}_2)(\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)) &= \\ \psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)\hat{H}_1(\mathbf{r}_1)\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) + \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\hat{H}_2(\mathbf{r}_2)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) &= \psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)E_1\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) + \\ \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)E_2\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) &= \\ (E_1 + E_2)\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) &= E\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2). \end{aligned}$$

Мы использовали тот факт, что оператор  $\hat{H}_1(\mathbf{r}_1)$  игнорирует функцию  $\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)$ , а оператор  $\hat{H}_2(\mathbf{r}_2)$  – функцию  $\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)$ .

Нас особенно будут интересовать квантовые системы, состоящие из одинаковых частиц (например, только из электронов или только из фотонов), потому что именно в них проявляются пресловутые особенности. Легко заметить, что, если все частицы одинаковы, то гамильтониан (2) не изменяется при перестановке частиц. Именно поэтому для таких систем справедливо следующее утверждение.

Если функция  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  есть решение стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

то решением этого уравнения будет и любая функция  $\tilde{\psi}$ , отличающаяся только произвольной перестановкой аргументов (например,  $\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ ).<sup>1</sup>

Однако эта неприятная неоднозначность снимается *принципом неразличимости одинаковых частиц*.

В классической механике (по крайней мере, в принципе) все одинаковые материальные точки можно в начальный момент «пронумеровать», а потом, даже если они сталкиваются между собой, проследить за ними по траекториям.

В квантовой механике, как мы знаем, нельзя ввести траекторию из-за принципа неопределенности Гейзенберга. Допустим, я бросаю одну микрочастицу левой рукой, а другую – правой, даю им образовать «квантовую систему двух частиц» и через некоторое время вновь их ловлю. Нет никакой возможности определить, какая из них была выпущена левой (или правой) рукой. В этом и заключается принцип неразличимости одинаковых частиц в квантовой механике.<sup>2</sup>

Свойство  $\psi$ -  
функций си-  
стем из оди-  
наковых ча-  
стиц

<sup>1</sup> См. учебник Л.К. Мартинсона и Е.В. Смирнова. Для невзаимодействующих частиц это сразу видно из формулы (4): ведь наборы собственных функций всех операторов  $\hat{H}_i$  одни и те же.

<sup>2</sup> Этот принцип часто называют принципом тождественности одинаковых частиц, но поскольку еще говорят «неразличимость тождественных частиц», то получается вообще «масло масляное».

*Замкнутая квантовая система, состоящая из одинаковых частиц,<sup>1</sup> может находиться только в состояниях, которые не изменяются при перестановке местами или обмене состояниями любых двух частиц.*

Обратимся к  $\psi$ -функциям систем из одинаковых частиц. Сначала чуть задумаемся над смыслом знакомой нам фразы постулата о квантовых состояниях: «Состояние полностью задается функцией  $\psi(\mathbf{r})$ ». Перефразируем ее так: состояние частицы определяется (видом) *зависимостью*  $\psi$ -функции от ее аргумента. Поскольку функция  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , вообще говоря, по-разному зависит от своих аргументов, то частицы с радиус-векторами  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  находятся в *разных состояниях*.

Теперь посмотрим, чем отличаются функции  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  и  $\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ . С формальной точки зрения, мы просто поменяли местами аргументы. По существу же, частицы обменялись своими состояниями. Но в силу принципа неразличимости одинаковых частиц состояние всей системы не может при этом измениться, т.е. *функции  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  и  $\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$  описывают одно и то же состояние*. Но тогда они согласно постулату о квантовых состояниях могут отличаться только некоторым комплексным множителем  $\alpha$ :

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \alpha\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (7)$$

Мы сделали перестановку в функции  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , но могли бы начать и с функции  $\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ . Тогда получили бы<sup>2</sup>

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \alpha\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (8)$$

Сравнивая формулы (7) и (8), мы видим, что должно быть

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \alpha^2\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

или

$$\alpha^2 = 1. \quad (9)$$

Можно рассуждать несколько иначе и вновь прийти к формуле (9). Пусть  $dV_1$  и  $dV_2$  – объемы, на которые указывают радиус-векторы  $\mathbf{r}_1$ , и  $\mathbf{r}_2$  соответственно. Выражение  $|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2$  определяет вероятность обнаружить частицу 1 в объеме  $dV_1$ , а частицу 2 – в объеме  $dV_2$ . Эту же вероят-

<sup>1</sup> Т.е. с одинаковой массой, зарядом, спином и т.д. –**все** должно быть одинаково. Хочу еще напомнить, что «замкнутая квантовая система» - понятие довольно условное. В некоторых случаях важно, что вся Вселенная – единая квантовая система.

<sup>2</sup> Множитель не может измениться, поскольку переставляемые аргументы отличаются только обозначениями.

ность дает величина  $|\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2 dV_2 dV_1$ , но при этом частицы меняются состояниями. Чтобы сделать их неразличимыми, необходимо равенство

$$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = |\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2 dV_2 dV_1$$

или

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = e^{i\varphi} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\varphi} \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).$$

Отсюда  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{2i\varphi} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ,

т.е.  $e^{i\varphi} = \pm 1$ .

Таким образом, возможны два случая.

1. Антисимметричные по отношению к перестановкам аргументов функции

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (10)$$

Если функция описывает состояние системы из  $N$  частиц, то знак меняется при перестановке любых двух аргументов.

Частицы, описываемые такими функциями, называются *фермионами* (или ферми-частицами).

Фермионы всегда имеют полуцелый спин. Любая частица с полуцелым спином (в частности, электрон) – фермион.

Если известно какое-нибудь нормированное решение  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  стационарного уравнения Шредингера, то корректную фермионную нормированную функцию можно получить процессом антисимметризации, основанном на [свойстве  \$\psi\$ -функций](#) систем из одинаковых частиц и принципе суперпозиции. Например, для двух частиц

$$\psi^{\text{фермион}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \tilde{\psi}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)). \quad (11)$$

Прежде чем сформулировать очень важный для фермионов *принцип запрета Паули*, сделаю два замечания. Во-первых, для простоты я писал только пространственные переменные  $\psi$ -функций, но одновременно с перестановкой пространственных координат надо переставлять и спиновые переменные. Во вторых, состояние считается полностью определенным, если заданы все его квантовые числа (включая спиновое).

*В замкнутой квантовой системе из одинаковых фермионов в одном полностью определенном состоянии не может находиться более одной частицы.*

В самом деле, если две частицы находятся в строго одинаковых состояниях, то зависимость  $\psi$ -функции от связанных с ними аргументов (в частности, координат) также одинакова, по-

**Фермионы**

Фермионы – частицы с полуцелым спином

Фермионная  $\psi$ -функция

Принцип (запрета) Паули

этому соответствующая перестановка не может изменить  $\psi$ -функцию, т.е. должно быть

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

Последнее равенство совместимо с равенством (10), только если

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \equiv 0,$$

но это и означает, что такая ситуация невозможна.

Как вы знаете из курса химии, принцип запрета Паули объясняет, как заполняются электронные оболочки в атомах, а формула для полного вырождения предыдущей лекции ( $2n^2$ ) становится формулой для максимального числа электронов в оболочке.

Итак, запомним, что фермионы – крайние индивидуалисты, заняв какое либо состояние, они своих собратьев туда не пускают.

2. Симметричные по отношению к перестановкам аргументов функции

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (12)$$

Частицы, описываемые такими функциями, называются *бозонами* (или бозе-частицами).

Бозоны всегда имеют целый спин (в том числе нулевой). Любая частица с целым спином (в частности, фотон) – бозон.

Если известно какое-нибудь нормированное решение  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  стационарного уравнения Шредингера, то корректную бозонную функцию можно получить процессом симметризации. Например, для двух частиц

$$\psi^{\text{бозон}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \tilde{\psi}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)), & \text{если } \tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \neq \tilde{\psi}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \\ \tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), & \text{если } \tilde{\psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \tilde{\psi}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \end{cases} \quad (13)$$

В отличие от фермионов, бозоны – коллективисты. Я поясню это маленькой (но очень важной для дальнейшего) сказочкой о рождающемся фотоне.

Атом, уставший находиться в возбужденном состоянии и пожелавший отдохнуть, решает испустить фотон. Фотон, рождаясь, думает о том, каким ему быть: куда лететь, какую поляризацию иметь и т.п. Так вот, в нем просыпается «стадное»<sup>1</sup> чувство, и его решение зависит от того, какие фотоны окружают атом. С

Фермионы - индивидуалисты

**Бозоны**

Бозоны - частицы с целым спином

Бозонная  $\psi$ -функция

Бозоны - коллективисты

<sup>1</sup> Это я о стаде бизонов.

максимальной вероятностью он родится в точности таком состоянии, как у большинства фотонов в округе. Более того, вообще его желание родиться связано с наличием подходящих фотонов (например, по частоте, т.е. по энергии).

*Вероятность рождения  $w$  фотона с частотой  $\omega$  пропорциональна числу уже имеющихся фотонов  $N_{\hbar\omega}$  на этой частоте*

$$w \propto N_{\hbar\omega} + 1. \quad (14)$$

Единица здесь появляется потому, что и в отсутствие друзей-фотонов иногда рождаться приходится: как иначе дать папе-атому отдохнуть.

Рассмотрим теперь большое количество одинаковых квантовых систем, каждая из которых представляет собой изолированную потенциальную яму с какой-нибудь *одной*<sup>1</sup> частицей в ней, так что полное число частиц равно числу ям. Выберем какую-либо пару уровней (одинаковых для всех ям) с энергиями  $E_1 < E_2$ . Для краткости будем говорить «система находится на первом (втором) уровне» если частица в соответствующей яме имеет энергию  $E_1$  ( $E_2$ ). Нас будут интересовать переходы между выбранными уровнями с поглощением (*вверх*,  $1 \rightarrow 2$ ) и испусканием (*вниз*,  $2 \rightarrow 1$ ) фотона с энергией

$$\hbar\omega = E_2 - E_1. \quad (15)$$

Для вероятности испускания фотона справедливо *бозонное* соотношение (14), а вероятность поглощения, очевидно, пропорциональна числу фотонов. Кроме того, число переходов *вверх* пропорционально среднему числу систем в состоянии 1 (обозначим  $n_1$ ), а число переходов *вниз* – среднему числу систем в состоянии 2 (обозначим  $n_2$ ). Поэтому для среднего числа переходов в единицу времени *вверх* можно написать

$$W_{1 \rightarrow 2} \propto N_{\hbar\omega} n_1, \quad (16)$$

а *вниз* –

$$W_{2 \rightarrow 1} \propto (N_{\hbar\omega} + 1) n_2. \quad (17)$$

Пусть теперь фотонное излучение и все квантовые системы находятся в равновесии при температуре  $T$ . Тогда в силу принципа детального равновесия среднее число переходов в единицу времени *вверх* и *вниз* должны быть равны:

Основное  
свойство  
бозонов

<sup>1</sup> Это важно, чтобы частицы не влияли друг на друга: чтобы фермионы не мешали, а бозоны – не завлекали.

$$W_{1 \rightarrow 2} = W_{2 \rightarrow 1}.$$

Коэффициенты пропорциональности в соотношениях (16) и (17) определяются чисто квантово-механически, поэтому не могут зависеть от температуры; кроме того, оказывается, что они всегда равны друг другу. Следовательно, в состоянии равновесия должно быть

$$N_{\hbar\omega} n_1 = (N_{\hbar\omega} + 1) n_2. \quad (18)$$

Поскольку мы все сделали так, чтобы частицы никак не вмешивались в жизнь друг друга, то среднее число систем, находящихся в состоянии с энергией  $E$ , пропорционально фактору Больцмана  $e^{-\frac{E}{kT}}$ , так что с учетом (15),

$$\frac{n_1}{n_2} = e^{-\frac{E_1 - E_2}{kT}} = e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} = e^{\frac{\varepsilon}{kT}},$$

где энергия фотона обозначена буквой  $\varepsilon = \hbar\omega$ .

Равенство (18) принимает вид

$$e^{\frac{\varepsilon}{kT}} N_\varepsilon = N_\varepsilon + 1.$$

Считая, что это уравнение для неизвестной величины  $N_\varepsilon$ , решаем его.

$$\langle N_\varepsilon \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1}. \quad (19)$$

В окончательной формуле я вставил знак среднего значения, поскольку, конечно, речь идет именно о нем.

Получилось очень знакомая формула для среднего числа фотонов с энергией  $\varepsilon = \hbar\omega$  (см. формулу Планка). Эта формула представляет собой распределение фотонов по энергиям и оказывается *верной для любых бозонов, если их число в системе не сохраняется*, т.е. если они могут рождаться (испускаться) и уничтожаться (поглощаться).

Если же число бозонов в системе сохраняется, то распределение (19) несколько изменяется:

$$\langle N_\varepsilon \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - 1}, \quad (20)$$

где параметр  $\mu$  называется химическим потенциалом и находится из очевидного<sup>1</sup> уравнения ( $N$  – полное число бозонов в системе).

$$\sum_\varepsilon \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - 1} = N. \quad (21)$$

Распределение Бóзе – Эйнштейна (число частиц *не* сохраняется)

Распределение Бóзе – Эйнштейна (число частиц сохраняется)

Уравнение для хим. потенциала

<sup>1</sup> Сумма средних значений по всем состояниям должна быть равна полному числу частиц.

Формулы (19) и (20) называются *распределением Бóзе – Эйнштейна*.

Мы еще вернемся к бозонам (см. лекцию «Бозоны. Лазеры»), а сейчас настала пора поговорить о фермионах.

Мы рассмотрим совсем другую ситуацию. Теперь будет только одна квантовая система – потенциальная яма с большим количеством фермионов (например, электронов) в ней. Все находится в равновесии при температуре  $T$ . Выберем произвольные два уровня<sup>1</sup> с условными индексами  $i$  и  $j$ , соответственно с энергиями  $\varepsilon_i < \varepsilon_j$ .<sup>2</sup> Обозначим  $n_i$  и  $n_j$  средние значения числа фермионов на этих уровнях.<sup>3</sup> Без учета спина принцип запрета Паули ограничивает возможные значения  $n_i$  и  $n_j$ :

$$0 \leq n_i \leq 1, \quad 0 \leq n_j \leq 1. \quad (22)$$

Вновь будем следить за фотонными ( $\varepsilon = \hbar\omega = \varepsilon_j - \varepsilon_i$ ) переходами между этими уровнями, Напишем соотношения для числа переходов в единицу времени, аналогичные (16) и (17), но с учетом принципа запрета Паули:

$$W_{i \rightarrow j} \propto n_i(1 - n_j)N_\varepsilon, \quad (23)$$

$$W_{j \rightarrow i} \propto n_j(1 - n_i)(1 + N_\varepsilon), \quad (24)$$

где среднее значение фотонов  $N_\varepsilon$  дается формулой (19). Соображения, приведшие нас к равенству (18), теперь позволяют написать так:

$$n_i(1 - n_j)N_\varepsilon = n_j(1 - n_i)(1 + N_\varepsilon), \quad (25)$$

причем это равенство должно выполняться для любой пары уровней  $i, j$ .

Общее решение этой системы уравнений<sup>4</sup>

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}} + 1}. \quad (26)$$

называется *распределением Фёрми - Дира́ка*. Химический потенциал  $\mu$  находится из уравнения, аналогичного (21):

$$\sum_\varepsilon \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1} = N,$$

Фермионов много не бывает

Распределение Фёрми – Дира́ка

<sup>1</sup> Мы пока забудем про спин, отложим его учет до следующих лекций.

<sup>2</sup> Будем привыкать к обозначению (обычно кинетической) энергии электронов буквой  $\varepsilon$ .

<sup>3</sup> Применительно к электронам эти средние значения еще называют *заселенностью уровней*.

<sup>4</sup> Я вновь добавил знак среднего. Вы можете проверить непосредственно, что приводимое решение обеспечивает равенство (25). При этом надо учесть, что  $\varepsilon = \varepsilon_j - \varepsilon_i$ .

**Обратите внимание на различные знаки перед единицей в формулах (20) и (26).**



где  $N$  – полное число фермионов в системе. На лекциях по физике твердого тела мы довольно подробно изучим это распределение.