

## **Часть 6**

- **Вырожденный бозе-газ. Конденсация Бозе-Эйнштейна.**
- **Термодинамика фотонного газа.**
- **Излучение абсолютно чёрного тела.**
- **Формула Планка, закон Стефана-Больцмана.**
- **Реликтовое микроволновое излучение.**
- **Колебания кристаллической решетки. Фононы**
- **Модели твердого тела. Зонная структура.**
- **Операторы рождения и уничтожения, многочастичные состояния бозонов и фермионов**

# Идеальный газ Бозе-Эйнштейна

**Задача:** рассмотреть свойства идеального газа бозонов с ненулевой массой

Принцип Паули в этом случае неприменим и поведение такого газа при низкой температуре не имеет ничего общего со свойствами идеального газа фермионов. Термодинамика газа бозонов описывается статистикой Бозе-Эйнштейна:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1} \geq 0 \quad \longrightarrow \quad e^{\beta(\epsilon - \mu)} \geq 1 \quad \text{Число частиц не может быть отрицательным}$$

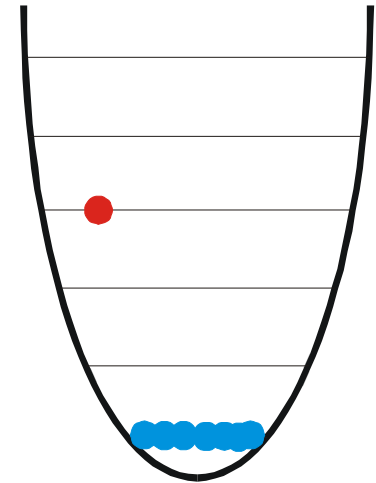
Если энергия основного состояния  $\epsilon_0 = 0$ , то  $e^{-\beta\mu} \geq 1$  и  $\mu \leq 0$ .

При абсолютном нуле температур все частицы находятся в основном состоянии,

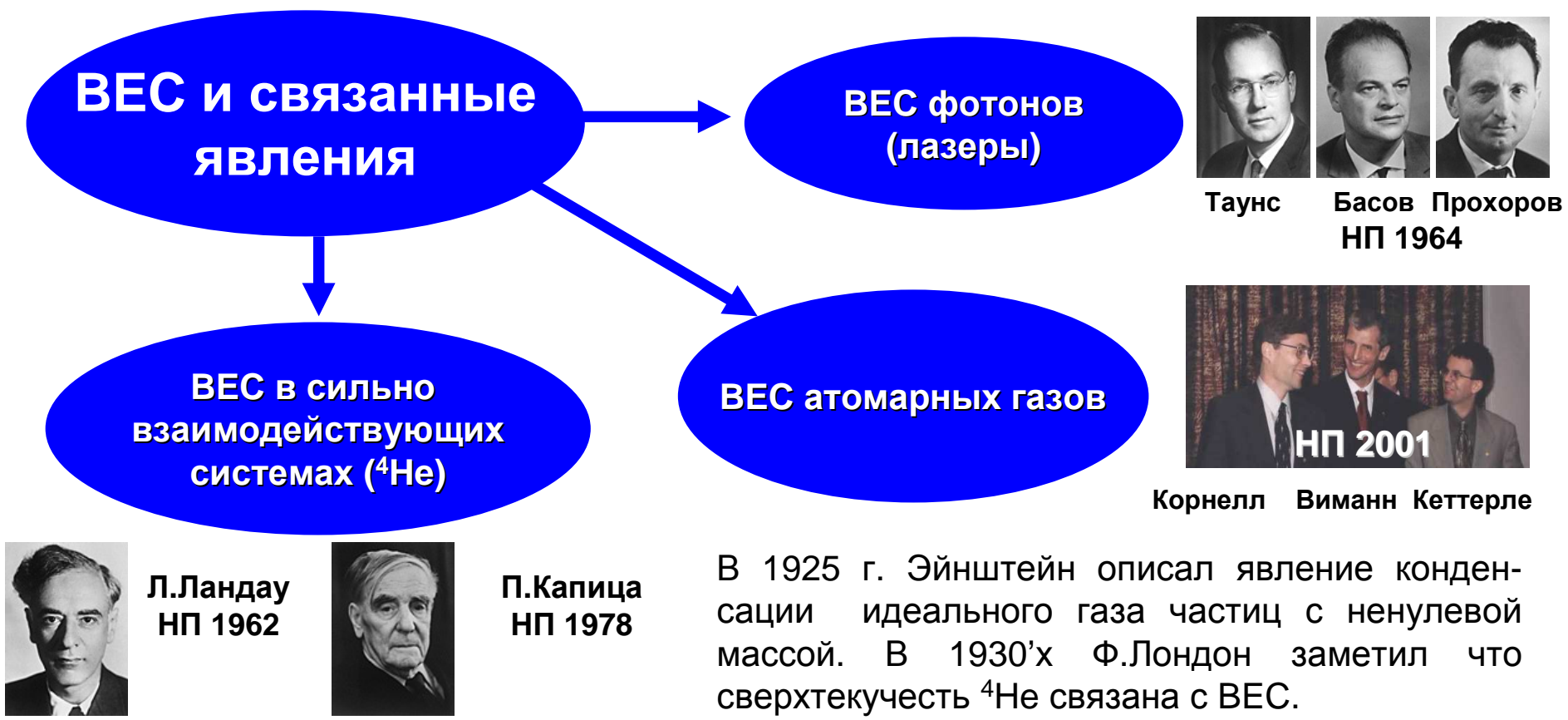
$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} = N; \quad \longrightarrow \quad \mu \rightarrow -k_B T / N$$

В этом пределе свободная энергия Гиббса  $G = N \mu = -k_B T$

**Замечание:** величина  $f = e^{\beta\mu}$  называется **фугитивностью** (летучесть)



# Конденсация Бозе-Эйнштейна (ВЕС)



70 лет спустя после предсказания Эйнштейна ВЕС в слабовзаимодействующих системах была экспериментально обнаружена в экспериментах по лазерному охлаждению системы атомов в магнитной ловушке.

**Конденсация Бозе-Эйнштейна: коллективный квантовый эффект в макроскопических масштабах**

## Два типа бозонов

- Частицы, представляющие собой полевые кванты (фотоны, векторные W,Z бозоны и др.) Число этих частиц не сохраняется если меняется энергия системы. В этом случае химический потенциал в равновесном состоянии равен нулю независимо от плотности частиц.
- Частицы со внутренней структурой, содержащие целое число фермионов Число этих частиц сохраняется, если энергия не превышает порога диссоциации ( $\sim \text{MeV}$  в случае атомных ядер)

**Напомним:** Элемент объема фазового пространства свободной частицы

$$\int dw = \int g d\vec{r} d\vec{p} = g \int dx dy dz \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3} = V \int \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}$$

Для нерелятивистских бозонов  $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ ;  $d\varepsilon = \frac{p dp}{m}$ ;  $p = \sqrt{2m\varepsilon}$

$$dw = 2\pi V \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{(2\pi\hbar)^3} = A \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon; \quad A = 2\pi V \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}$$

# Идеальный газ бозонов: высокотемпературный предел

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1}$$

Рассмотрим предел  $T \gg 0$ ;  $f = e^{\beta\mu} \ll 1$

$$N = \int f(\varepsilon) d\omega = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{f^{-1} e^{\beta\varepsilon} - 1} = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{f e^{-\beta\varepsilon} \sqrt{\varepsilon}}{1 - f e^{-\beta\varepsilon}} d\varepsilon \quad (x = \beta\varepsilon)$$

$$= \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{f}{\beta^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\infty} dx \sqrt{x} e^{-x} (1 + f e^{-x} + \dots)$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{f}{\lambda^3} \left( 1 + \frac{f}{2\sqrt{2}} + \dots \right)$$

Наивная оценка:

если  $T \rightarrow \infty$  то  $\beta \rightarrow 0$  и  $f \rightarrow 1$  ?

Неверно: если число частиц  $N$  фиксировано, то химпотенциал  $\mu$  стремится к  $-\infty$  быстрее чем  $\beta \rightarrow 0$

Внутренняя энергия идеального газа бозонов:

$$E = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{f^{-1} e^{\beta\varepsilon} - 1} = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{f}{\beta^{5/2}} \int_0^{\infty} dx x^{3/2} e^{-x} (1 + f e^{-x} \dots)$$

$$= \frac{3}{2} \frac{V f}{\lambda^3 \beta} \left( 1 + \frac{f}{4\sqrt{2}} + \dots \right)$$

## Уравнение состояния идеального газа бозонов ( $T \gg 0$ )

$$\frac{N}{V} = \frac{f}{\lambda^3} \left( 1 + \frac{f}{2\sqrt{2}} + \dots \right) \quad \rightarrow \quad f = \frac{\lambda^3 N}{V} \left( 1 - \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\lambda^3 N}{V} + \dots \right)$$

$$E = \frac{3}{2} \frac{V f}{\lambda^3 \beta} \left( 1 + \frac{f}{4\sqrt{2}} + \dots \right) = \frac{3}{2} \frac{N}{\beta} \left( 1 - \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\lambda^3 N}{V} + \dots \right) \left( 1 + \frac{1}{4\sqrt{2}} \frac{\lambda^3 N}{V} + \dots \right)$$

Уравнение состояния при высокой температуре:

$$PV = \frac{2}{3} E = Nk_B T \left( 1 - \frac{\lambda^3 N}{4\sqrt{2}V} + \dots \right)$$

**Замечание:** Число частиц фиксировано,  $N = \text{const}$ . Следовательно, мы рассматриваем *канонический ансамбль* и химпотенциал  $\mu$  не является естественной переменной.

Что происходит при низкой температуре когда  $f \rightarrow 1$  ?

# Конденсация Бозе-Эйнштейна ( $T \sim T_c$ )

Среднее число частиц и средняя энергия  $f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}$

$$N = \int f(\varepsilon) d\omega = A \int_0^\infty f(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon; \quad E = \int \varepsilon f(\varepsilon) d\omega = A \int_0^\infty f(\varepsilon) \varepsilon^{3/2} d\varepsilon. \quad A = V \frac{2\pi g(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}$$

Функция плотности бозонных состояний  $g(\varepsilon)$  - по аналогии с фермионным случаем

$$d\omega = 2\pi(2s+1)V \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{h^3} = g(\varepsilon) d\varepsilon; \implies g(\varepsilon) = 2(2s+1)\pi V \sqrt{\varepsilon} \frac{(2m)^{3/2}}{h^3}$$

**Вопрос:** корректно ли это выражение? Мы ничего не забыли?

$$N = \frac{2(2s+1)}{\sqrt{\pi}} V \left( \frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{\exp[x - \beta\mu] - 1} dx$$

$$(x = \beta\varepsilon)$$

$$1/\lambda^3 = \left( \frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2}$$

Выполним интегрирование при  $T = T_c$ , т. е. при  $\mu = 0$

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{\exp(x) - 1} dx \approx 1.3\sqrt{\pi} = 2.315$$

**Критическая температура  
Бозе-Эйнштейновской конденсации**

$$T_c \approx \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left( \frac{n}{2.612} \right)^{2/3} \quad (s = 0)$$

# Техника вычисления интегралов II

Техническая часть задачи: научиться вычислять интегралы вида

$$I_n = \int_0^{\infty} \frac{x^n dx}{f^{-1}e^x - 1} \quad \leftarrow \text{фугитивность } f=e^{\beta\mu}; \quad 0 \leq f \leq 1$$

$$1 + x + x^2 + \dots = \frac{1}{1-x}; \quad \text{если } x < 1 \quad \frac{1}{f^{-1}e^x - 1} = fe^{-x} \frac{1}{1 - fe^{-x}}$$

$$I_n = \int_0^{\infty} x^n dx \sum_{k=1}^{\infty} f^k e^{-kx} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f^k}{k^{n+1}} \int_0^{\infty} (kx)^n e^{-kx} d(kx)$$

Гамма-функция  
 $\Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} t^n e^{-t} dt$

$$I_n = \Gamma(n+1) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f^k}{k^{n+1}}$$

при  $T = T_c$ , т. е. при  $\mu=0$  интеграл сводится к  $\zeta$ -функции Римана:  $\sum_{k=1}^{\infty} k^{-(n+1)} = \zeta(n+1); \quad \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2.613$

$$I_{1/2} = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 2.613$$

$$N = \frac{2V}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}}}{\exp[x - \beta\mu] - 1} dx = \frac{2V}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\pi} \cdot 1.3 \propto T^{3/2}$$



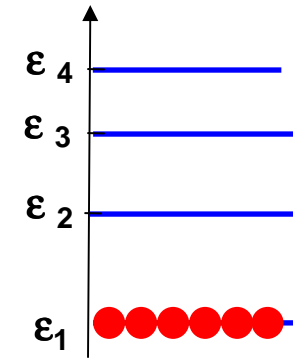
# Конденсация Бозе-Эйнштейна: что происходит при $T=0$ ?

В пределе  $T=0$  °К. все бозоны находятся в основном состоянии и энергия системы минимальна.

Множественность  $\Omega = 1$  и  $S = k_B \ln \Omega = 0$

Химический потенциал

$$\mu = -T \frac{\partial S}{\partial N} = 0$$

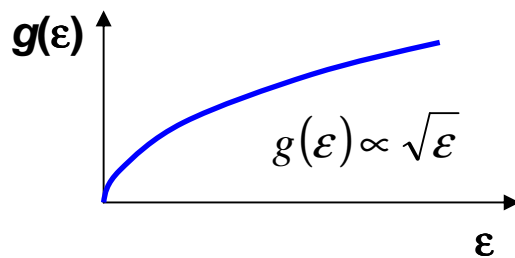
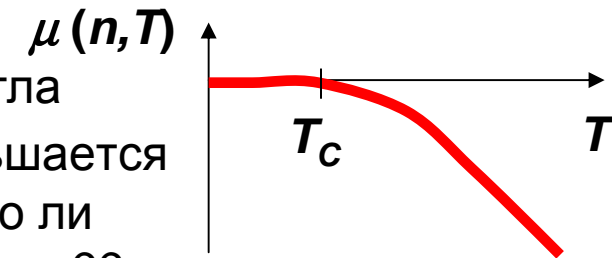


**Проблема:**  $\mu \rightarrow 0$  гораздо раньше при  $T=T^*$

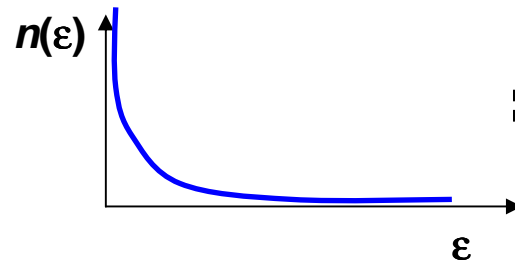
$$n = \frac{N}{V} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} I_{1/2}(f) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{I_{1/2}(f)}{\lambda^3}$$

$$1/\lambda^3 = \left( \frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2}$$

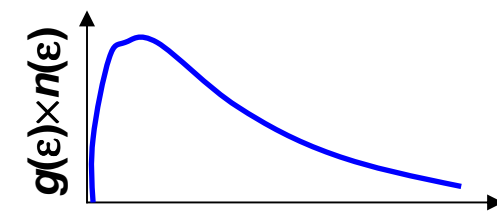
Что происходит при  $T < T_c$ ? Функция  $f$  уже достигла максимального значения  $f=1$ . Число частиц уменьшается с дальнейшим уменьшением температуры? Можно ли путем простого охлаждения аннигилировать частицы??



×



=



**Мы не учитываем основного состояния!**

Причина ошибки - некорректное использование выражения для плотности состояний  $g(\epsilon) \sim \epsilon^{1/2}$  - наши формулы игнорируют все частицы в основном состоянии!

$$g(\epsilon) = \delta(0) + 2\pi V \sqrt{\epsilon} \frac{(2m)^{3/2}}{h^3}$$

Во-вторых, предположение о непрерывности спектра некорректно для квантовых состояний.

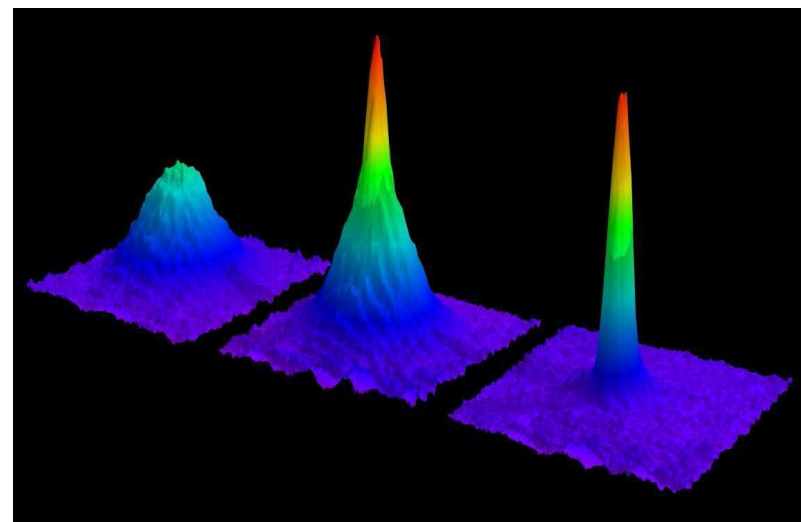
$$N = \int f(\epsilon) dw = N(0) + A \int_0^{\infty} f(\epsilon) \sqrt{\epsilon} d\epsilon = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} + A \int_0^{\infty} \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$$

При  $T < T^*$   $f = e^{\beta\mu} \approx 1 - 1/N$  и макроскопическое число частиц оккупирует основное состояние  $N = \frac{f}{1-f} + 2.1613 \frac{V}{\lambda^3}$

$$T_c \approx \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left( \frac{n}{2.612} \right)^{2/3}$$

$$\frac{N(0)}{N} = 1 - \frac{2.1613V}{N\lambda^3} = 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2}$$

**Замечание:** конденсация происходит не в координатном, а в импульсном пространстве



Импульс экспериментально наблюдаемого конденсата не равен 0. **Почему?**

$N \sim 10^4 - 10^7$  атомов рубидия,  
 $T_c \sim 10^{-7} \text{K}$

## Конденсация Бозе-Эйнштейна: эксперимент с парами $^{87}\text{Rb}$

$$T_c \approx \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left( \frac{n}{2.612} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Чем легче бозоны, тем выше  $T_c$ . Поэтому конденсация **экситонов** (электронно-дырочных пар) в полупроводниках наблюдалась намного раньше конденсации в газах (Пара  $e^+e^-$  имеет целый спин).

Впервые бозе-эйнштейновская конденсация в слабовзаимодействующих газах наблюдалась в эксперименте с атомами  $^{87}\text{Rb}$ . 10,000 атомов были помещены в «ящик» размера  $\sim 10 \mu\text{m}$  (плотность  $\sim 10^{19} \text{m}^{-3}$ ). При этом:

$$\Delta\varepsilon \sim \varepsilon_1 = \frac{3h^2}{8mL^2} = \frac{3}{8} \frac{(6.6 \cdot 10^{-34})^2}{87 \times 1.7 \cdot 10^{-27} \times (10^{-5})^2} \approx 1.1 \cdot 10^{-32} \text{ J} \Rightarrow 8 \cdot 10^{-10} \text{ K}$$

Конденсация наблюдалась при  $T_c \sim 0.1 \mu\text{K}$ . Теоретическая оценка дает:

$$T_c = \frac{0.53}{k_B} \left( \frac{h^2}{2\pi m} \right) \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3} \approx \frac{0.53 \times (6.6 \cdot 10^{-34})^2 \times (1 \cdot 10^{19})^{2/3}}{1.38 \cdot 10^{-23} \times 2\pi \times 87 \times 1.7 \cdot 10^{-27}} \approx 8 \cdot 10^{-8} \text{ K}$$

$k_B T_c \approx 100 \Delta\varepsilon$  ! - **Напомним:** конденсация происходит при условии  $k_B T \gg \Delta\varepsilon$  :

$$\Delta\varepsilon \sim \varepsilon_1 \sim \frac{h^2}{mL^2}$$

$$k_B T_c \sim \frac{h^2}{m} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3} \sim \Delta\varepsilon L^2 \frac{N^{2/3}}{L^2} \sim \Delta\varepsilon N^{2/3} \gg \Delta\varepsilon$$

- Чем больше число частиц в системе, тем лучше выполняется это условие.

# Теплоемкость бозонного газа

Уравнение состояния при низкой температуре:

$$PV = \frac{2}{3}E = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{k_B T V}{\lambda^3} I_{3/2}(f)$$

Вклад основного состояния подавлен как  $1/N$

Поскольку  $f = e^{\beta\mu} \approx 1$

$$I_{3/2} = \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\zeta\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \cdot 1.3415 \quad \longrightarrow \quad P = 2.0122 \cdot \frac{k_B T}{\lambda^3} \quad 1/\lambda^3 = \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$

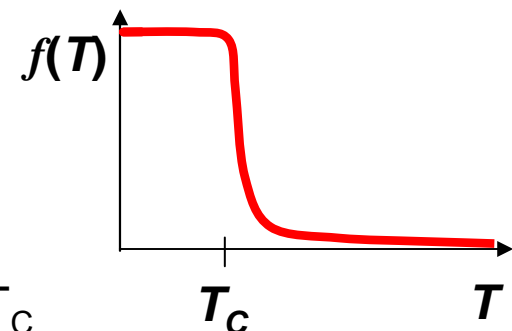
Давление бозонного газа не зависит от плотности частиц и зависит от температуры как  $P \sim T^{5/2}$  - никак не похоже на высокотемпературный режим!

**Вопрос:** что происходит при критической температуре  $T_c$ ?

Внутренняя энергия бозонного газа  $\frac{E}{V} = \frac{3}{\sqrt{\pi}} \frac{k_B T}{\lambda^3} I_{3/2}(f); \quad f = e^{\mu/k_B T}$

Теплоемкость бозонного газа

$$\frac{C}{V} = \frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{15}{2\sqrt{\pi}} \frac{k_B}{\lambda^3} I_{3/2}(f) + \frac{3}{\sqrt{\pi}} \frac{k_B T}{\lambda^3} \frac{\partial I_{3/2}}{\partial f} \left( \frac{\partial f}{\partial T} \right)$$



Второе слагаемое вносит вклад только при  $T > T_c$

# Теплоемкость бозонного газа

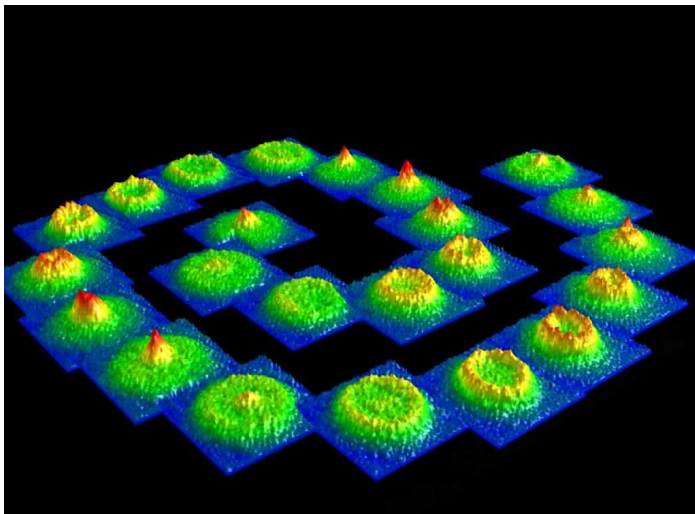
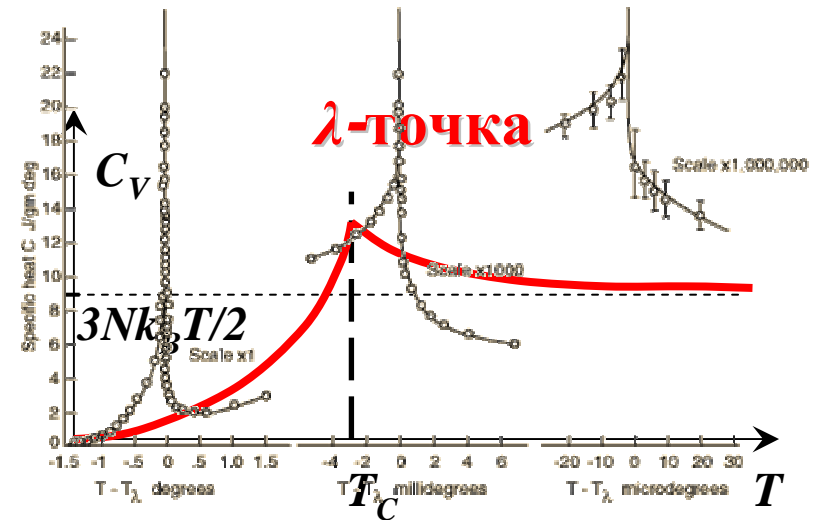
При температуре ниже критической  $C_V = \frac{15V}{2\sqrt{\pi}} \frac{k_B}{\lambda^3} \Gamma(5/2) \zeta(5/2) \sim T^{3/2}$

При температуре выше критической  $f = e^{\beta\mu} < 1$  и  $df/dT < 0 \rightarrow$  теплоемкость уменьшается

При  $T \rightarrow T_C$  сверху

$$f \approx 1 - B \left( \frac{T - T_C}{T_C} \right)^2$$

$$C_V = 1.3415 \cdot \frac{45V}{8\sqrt{\pi}} \frac{k_B}{\lambda^3} - b \left( \frac{T - T_C}{T_C} \right)$$



Внутренняя энергия бозонного газа непрерывна при  $T = T_C$  но его теплоемкость при этом скачкообразно меняет свое поведение - происходит **фазовый переход**

# Конденсация Бозе-Эйнштейна: сверхтекучесть

**Замечание:** фазовый переход в бозе-эйнштейновский конденсат не происходит в обычных газах поскольку они при требуемых условиях переходят в жидкую или твердую фазы. Однако жидкий гелий ( $^4\text{He}$ ) имеет две фазы, называемые **He I** и **He II**, причем **He II** обладает целым рядом аномальных свойств.

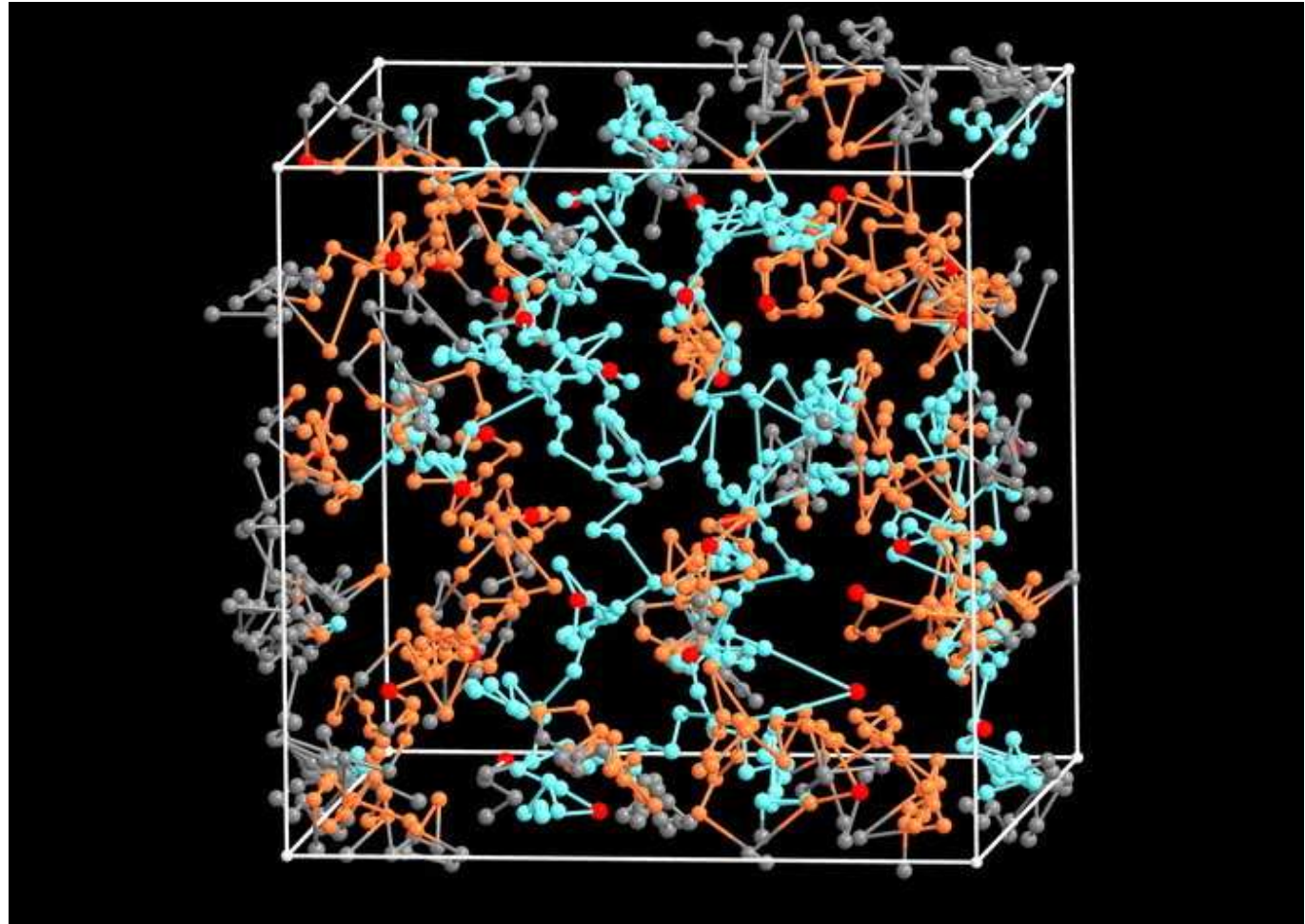
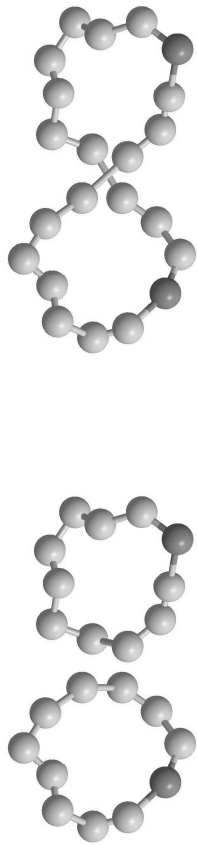
$^4\text{He}$  - 2 протона + 2 нейтрона + 2 электрона - это бозон.

Фазовый переход происходит в жидком гелии при **2.17 °K**, ранее полагалось что он связан с бозе-эйнштейновской конденсацией молекул.

Жидкость в **сверхтекучей фазе** проявляет ряд необычных свойств, например, если она находится в открытом контейнере то она может течь вверх вдоль стенок перетекая через край. Вращение контейнера не затрагивает динамики сверхтекучей жидкости, ее вязкость равна нулю. Освещение стакана с супержидкостью приводит к ее сильному всплеску.

Проблема с описанием конденсации в  $^4\text{He}$  - эта система сильно взаимодействует - это жидкость а не газ!





Компьютерное моделирование  $^4\text{He}$  при 1.2 К. Цвет соответствует степени корреляции атомов  $^4\text{He}$  с соседними кластерами - только около 7% всех молекул  $^4\text{He}$  находится в фазе конденсата.

# Электромагнитное поле = система осцилляторов

Рассмотрим электромагнитное поле в объеме  $V = L \cdot L \cdot L$

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad \longrightarrow \quad \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right) \vec{A} = 0; \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

Разложение в ряд Фурье: 
$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} \left\{ A_{\vec{k}\lambda} \vec{e}_{\vec{k}\lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t} + A_{\vec{k}\lambda}^* \vec{e}_{\vec{k}\lambda}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega t} \right\}$$

Уравнения электромагнитного поля расщепляются на набор осцилляторных уравнений, для каждой моды колебаний выполняются условия

$$\omega = \omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}|; \quad \vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{k} = 0$$

Условие обращения электромагнитного потенциала в ноль на границах объема  $V$  означает что  $\vec{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z)$

**Каноническое квантование электромагнитного поля:**

$$Q_{\vec{k}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{4\pi c}} (A_{\vec{k}\lambda} + A_{\vec{k}\lambda}^*); \quad P_{\vec{k}\lambda} = \frac{i\omega_{\vec{k}}}{\sqrt{4\pi c}} (A_{\vec{k}\lambda} - A_{\vec{k}\lambda}^*); \quad [Q_{\vec{k}\lambda}, P_{\vec{k}'\lambda'}] = i\hbar \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) = \sum_{\vec{k}\lambda} \frac{\omega_{\vec{k}}}{2\pi c} |A_{\vec{k}\lambda}|^2 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\lambda} (P_{\vec{k}\lambda}^2 + \omega_{\vec{k}}^2 Q_{\vec{k}\lambda}^2)$$

$$A_{\vec{k}\lambda} \rightarrow a_{\vec{k}\lambda}; \quad A_{\vec{k}\lambda}^* \rightarrow a_{\vec{k}\lambda}^\dagger \quad \longrightarrow \quad \mathcal{H} = \sum_{\vec{k}\lambda} \hbar \omega_{\vec{k}} \left( a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right)$$




# Энергия электромагнитного излучения

**Проблема ультрафиолетовой катастрофы:** рассмотрим электромагнитное поле в ограниченном объеме (стоячие волны)

$$\lambda_n = \frac{\pi n}{L}, n = 1, 2, \dots$$

Каждая мода колебаний имеет 2 поляризационных степени свободы. Теорема о равномерном распределении энергии:


$$\varepsilon_n = 2 \cdot \frac{k_B T}{2} = k_B T$$

Полная энергия стоячей волны:  $E = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n = \infty \cdot k_B T$  **Катастрофа!**

**Решение:** Электромагнитное излучение - это поток частиц - фотонов - с энергией  $\varepsilon$  и импульсом  $p$ :

$$\varepsilon = \frac{hc}{\lambda} = pc; \quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

Фотоны - это частицы нулевой массы со спином 1 (бозоны), имеющие 2 степени свободы. Поскольку для бозонов температура конденсации

$$T_c \approx \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left( \frac{n}{2.612} \right)^{\frac{2}{3}}$$

можно ожидать что для фотонов она бесконечна - можно рассматривать фотоны как несконденсированную часть газа Бозе-Эйнштейна при температуре ниже  $T_c$

# ФОТОННЫЙ ГАЗ

Спектр фотонов в 3-х мерном ящике

$$\vec{k} = \frac{2\pi\vec{n}}{L}; \quad \vec{n} = (n_x, n_y, n_z); \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad d^3n = dn_x dn_y dn_z = V \frac{dk_x dk_y dk_z}{(2\pi)^3}$$

Число фотонов с импульсом между  $k$  и  $k+dk$   $\rightarrow g(k)dk = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$

Энергия фотонного газа  $E = \sum_i n_i \hbar \omega; \quad \omega = c|\vec{k}| = ck$

Статсумма фотонного газа

$n_i$  - число фотонов с энергией  $\hbar\omega$

$$Z = \sum_{n_0=0}^{\infty} \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots e^{-E/k_B T} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(\sum_{i=0}^{\infty} -\beta n_i \hbar \omega\right) = \prod_i \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar \omega}$$

$$= \prod_i \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \prod_i \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon_i}} = \prod_i Z_i$$

Статсумма идеального газа с  $\mu=0$

Средняя энергия фотона в  $i^{\text{ом}}$  состоянии:

$$E_i = -\frac{\partial \ln Z_i}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln[1 - e^{-\beta \epsilon_i}] = \frac{\epsilon_i e^{-\beta \epsilon_i}}{1 - e^{-\beta \epsilon_i}} = \frac{\epsilon_i}{e^{\beta \epsilon_i} - 1}$$

Поскольку  $E_i = n_i \epsilon_i$ , то среднее значение чисел заполнения определяется как

$$n_i = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_i} - 1}$$

# Планковский спектр излучения

Полная энергия фотонного газа

$$E = \sum_{i=0}^{\infty} n_i \varepsilon_i = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \frac{\varepsilon d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$$

Плотность числа состояний ( $\varepsilon = \hbar ck = \hbar\omega$ ;  $\omega = kc = 2\pi c/\lambda$ )

$$g(\varepsilon) = g(k) \frac{dk}{d\varepsilon} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} = \frac{V}{\pi^2} \frac{\varepsilon^2}{(\hbar c)^3}$$

$$x = \varepsilon/k_B T$$

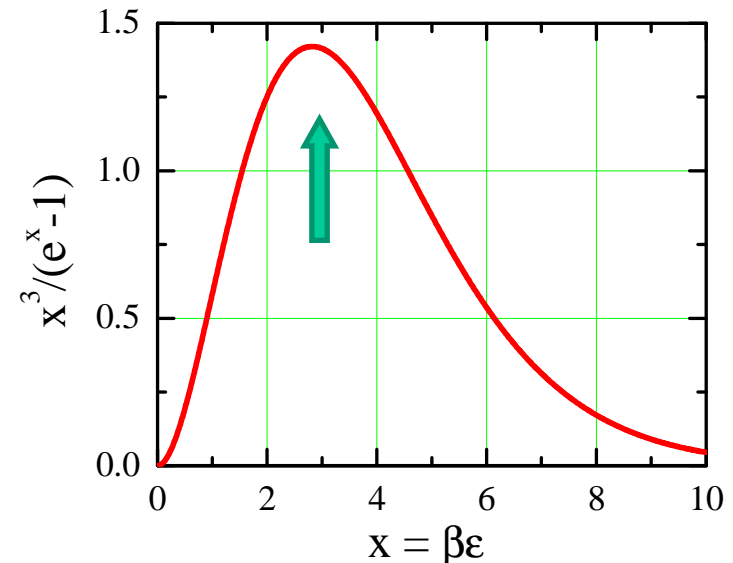
$$E = \int_0^{\infty} \frac{V}{\pi^2} \frac{\varepsilon^2}{(\hbar c)^3} \frac{\varepsilon d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} = \frac{8\pi V}{(hc)^3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon = \frac{8\pi V}{(hc)^3} \frac{1}{\beta^4} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

$$= \frac{8\pi V}{(hc)^3} (k_B T)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \int_0^{\infty} u(\varepsilon) d\varepsilon$$

Энергетический спектр излучения фотонов в тепловом равновесии с веществом при температуре T:

$$u(\varepsilon) = \frac{8\pi V}{(hc)^3} \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$$

Закон Вина:  $\varepsilon_{max} = 2.82k_B T$



Полная энергия в единице объема

$$\frac{E}{V} = \frac{8\pi h}{c^3} \left( \frac{k_B T}{h} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = I_3 = \Gamma(4) \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = \Gamma(4)\zeta(4) = 6\zeta(4) = \frac{\pi^4}{15}$$

$$\frac{E}{V} = \sigma T^4 = \frac{\pi^2 k_B^4}{15(\hbar c)^3} T^4; \quad \sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{15\hbar^3 c^3}$$

Закон Стефана-Больцмана

Постоянная Стефана

Свободная энергия

$$F = -k_B T \ln Z = \frac{V k_B T}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3 e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = -\frac{V \pi^2}{45 \hbar^3 c^3} (k_B T)^4$$

Давление фотонного газа?

$$P = -\left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{E}{3V} \Rightarrow \boxed{E = 3PV}$$

Теплоемкость фотонного газа

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{4\pi^2 V}{15(\hbar c)^3} k_B^4 T^3$$

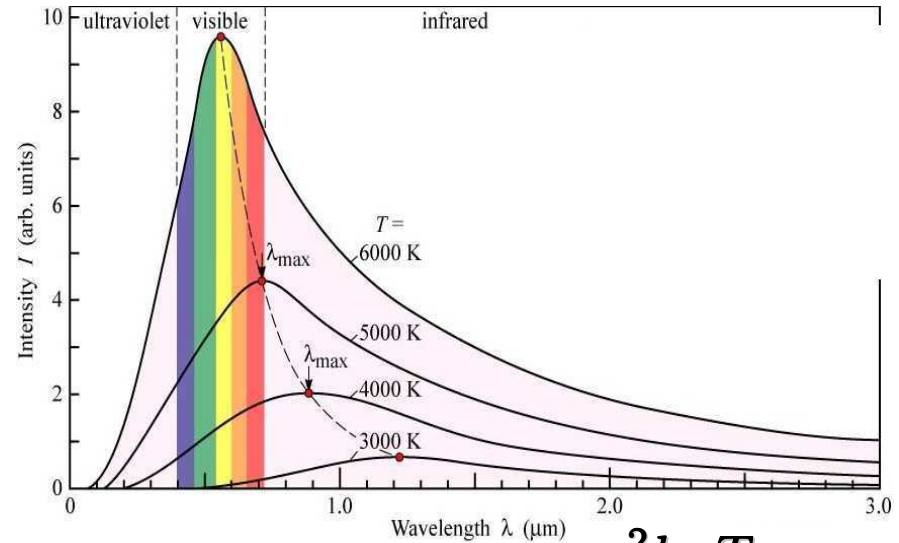
Энтропия фотонного газа

$$S = -\left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = \frac{4\pi^2 V}{45(\hbar c)^3} k_B^4 T^3$$

$$E = \int_0^{\infty} u(\varepsilon) d\varepsilon \quad \rightarrow \quad u(\varepsilon) = \frac{8\pi V}{(hc)^3} \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$$

$$E = \int_0^{\infty} u(\omega) d\omega; \quad u(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega\beta} - 1)}$$

Спектральное распределение фотонов в тепловом равновесии с веществом



При малых частотах (высоких температурах)

$$\hbar\omega\beta \ll 1;$$

$$e^{\hbar\omega\beta} \approx 1 + \hbar\omega\beta;$$

$$u(\omega) \approx \frac{\omega^2 k_B T}{\pi^2 c^3}$$

При высоких частотах (низких температурах)

$$\hbar\omega\beta \gg 1;$$

$$u(\omega) \approx \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\hbar\omega\beta}$$

**Закон Релея-Джинса**

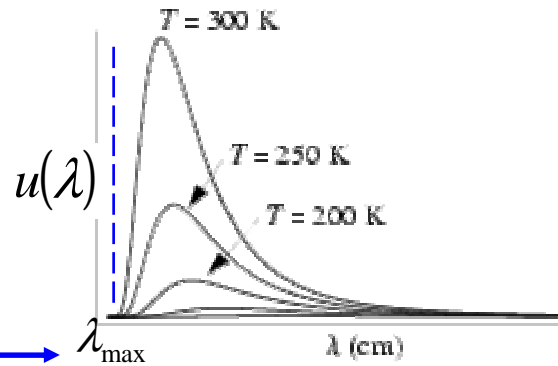
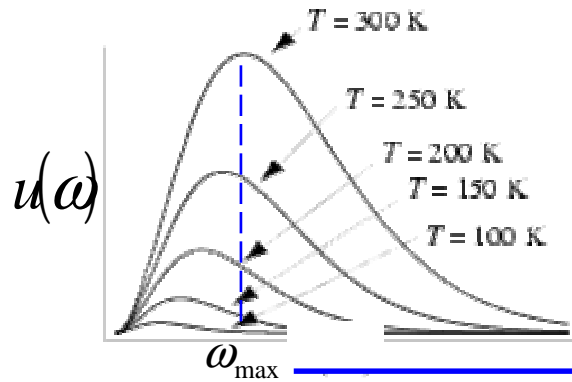
**Закон Вина**

Спектральный максимум по  $\omega$ :

$$(x = \varepsilon/k_B T)$$

$$\omega_{max} \rightarrow \frac{du(\omega)}{d\omega} = 0 = \frac{3\omega^2}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} - \frac{\omega^3 \hbar\beta e^{\hbar\omega\beta}}{(e^{\hbar\omega\beta} - 1)^2} = 3(e^x - 1) - xe^x$$

Трансцендентное уравнение  $1 - \frac{x}{3} = e^{-x}$  имеет решение  $x = 2.822 = \hbar\omega_{max} \beta$



$$\nu_{max} \Leftrightarrow \lambda_{max}$$

$$\frac{\hbar\omega_{max}}{k_B T} \approx 2.82 \quad \omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

$$\frac{hc}{k_B T \lambda_{max}} \approx 2.82 \quad ?$$

**Задача:** определить на какую длину волны приходится максимум излучения

$$\varepsilon = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} \implies \frac{d\varepsilon}{d\lambda} = -\frac{hc}{\lambda^2} = -\frac{\varepsilon}{\lambda}$$

$$u(\varepsilon)d\varepsilon = -u(\lambda)d\lambda$$

$$u(\varepsilon) = \frac{8\pi}{(hc)^3} \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$$



$$u(\lambda) = \frac{8\pi}{(hc)^3} \frac{\left(\frac{hc}{\lambda}\right)^3}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \frac{hc}{\lambda^2} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}$$

Спектральный максимум по  $\lambda$ :

$$\lambda_{max} \implies \frac{du(\lambda)}{d\lambda} = 0 = -\frac{5}{x^6(e^{1/x} - 1)} - \frac{(-x^{-2})e^{1/x}}{x^5(e^{1/x} - 1)^2} = -5x(e^{1/x} - 1) + e^{1/x}$$

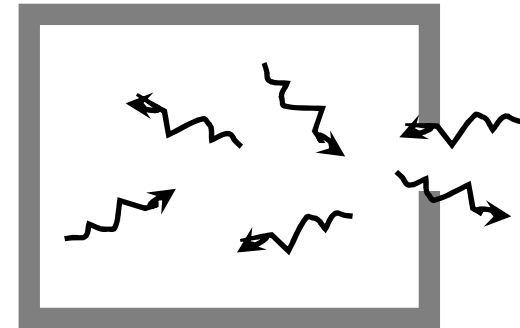
$$\lambda_{max} \approx \frac{hc}{5k_B T}$$

При  $T = 300 \text{ K}$   $\lambda_{max} \approx 10 \mu\text{m}$

# Излучение черного тела

Абсолютно **черное тело** поглощает все падающее на него электромагнитное излучение и испускает планковский спектр фотонов (**Замечание:** Черное тело не обязательно должно быть черным - спектр солнечного излучения очень мало отличается от планковского)

Физическая модель черного тела - небольшая дырка в большом ящике, падающие на дырку фотоны поглощаются внутри ящика, при этом устанавливается тепловое равновесие между излучением и стенками.



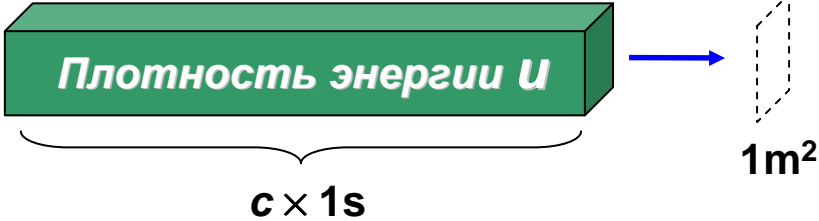
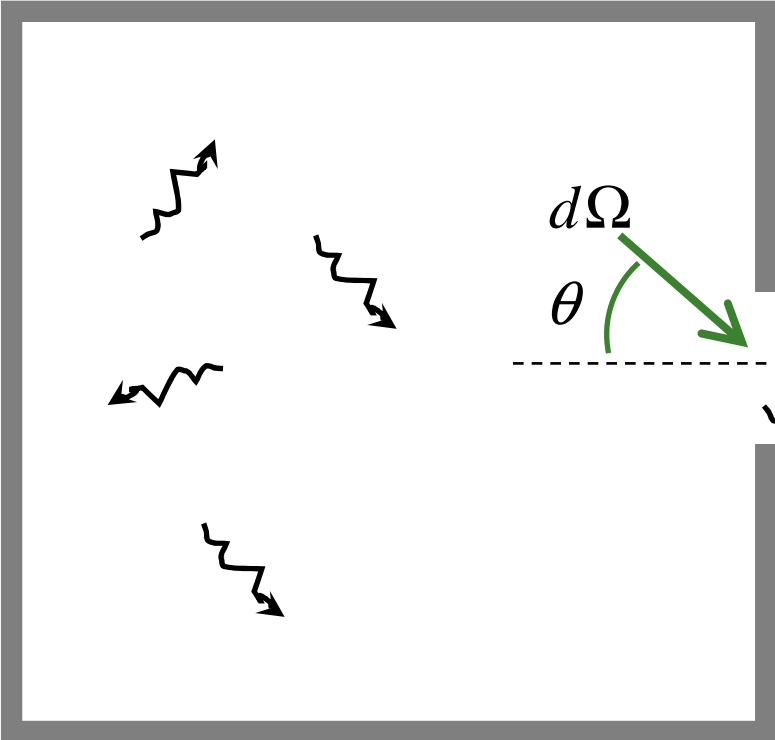
Такую систему можно рассматривать с двух точек зрения:

- Ансамбль гармонических осцилляторов, энергия которых квантуется как

$$\varepsilon_i = \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\omega_i; \quad n_i = 0, 1, 2 \dots$$

- Газ тождественных и неразличимых бозонов (фотонов), энергия которых квантуется как  $\varepsilon_i = \hbar\omega$

# Излучение черного тела



Излученная через отверстие S за время dt энергия

$$dE(d\Omega, dt, S) = \frac{E}{V} \cdot (cdt \cdot R^2 d\Omega) \frac{S \cos \theta}{4\pi R^2}$$

Энергия излучения на единицу площади за единицу времени:

$$I(T) = \frac{1}{S} \frac{dE}{dt} = \int d\phi \int d\theta \frac{E}{V} c \cdot \cos \theta \frac{\sin \theta}{4\pi} = \frac{cE}{4V}$$

## Закон Стефана-Больцмана

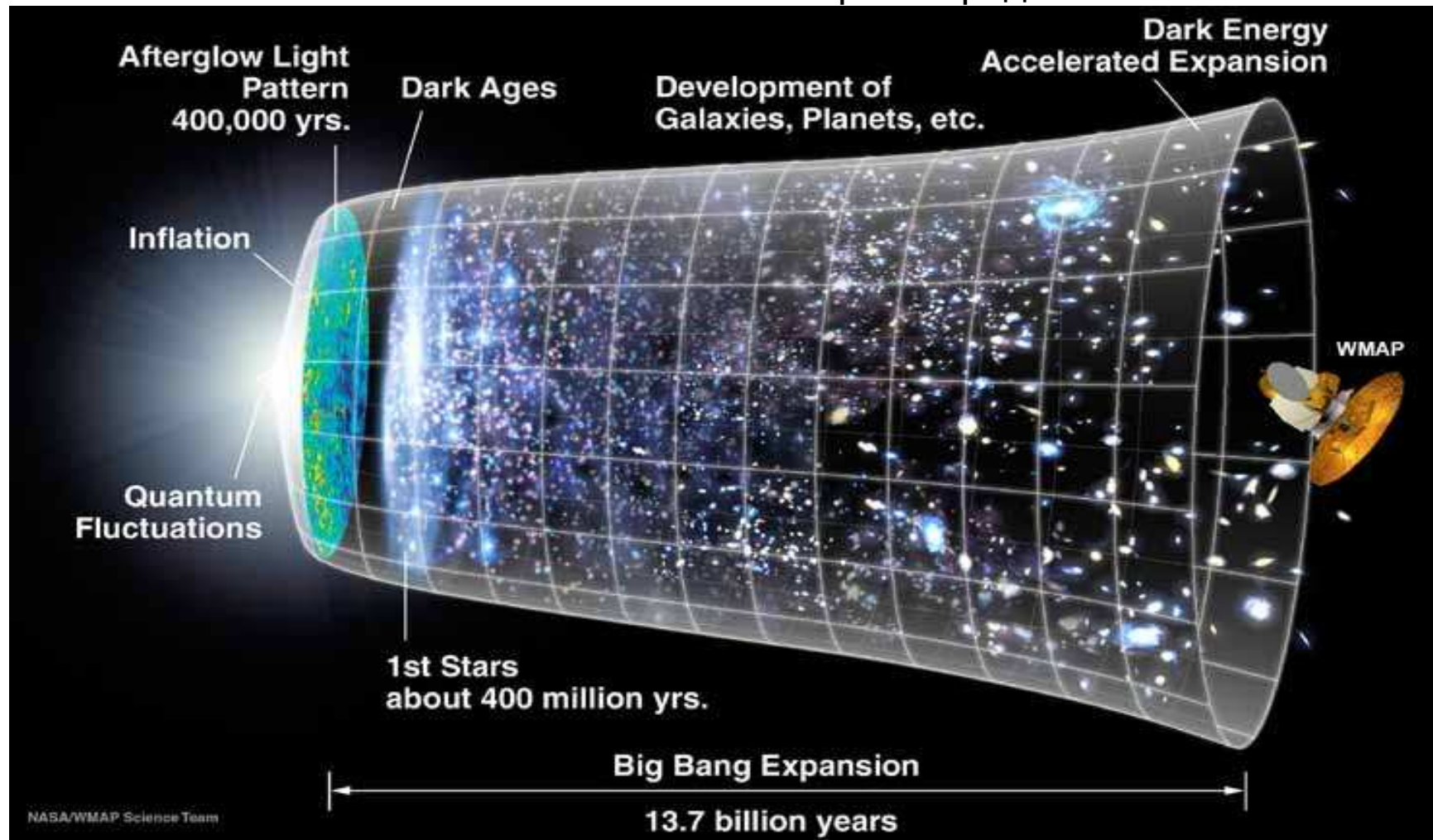
$$\frac{E}{V} = \sigma T^4 = \frac{\pi^2 k_B^4}{15(\hbar c)^3} T^4; \quad \sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{15\hbar^3 c^3} \quad \rightarrow \quad I(T) = \frac{c\sigma}{4} T^4$$

Частота, соответствующая максимуму излучения, возрастает с ростом температуры



# Космическое микроволновое излучение

Вселенная заполнена *почти* однородным фоновым электромагнитным излучением в микроволновом диапазоне, спектральный характер которого *почти* в точности соответствует излучению черного тела при температуре 2.725 °К. Отклонение от планковского спектра - порядка  $10^{-5}$



# Модели твердого тела: колебания решетки

**Задача:** вычислить теплоемкость твердого тела. Мы полагаем что

- Твердое тело представляет собой кристаллическую решетку атомов.
- Каждый из атомов совершает гармонические колебания около положения равновесия и может быть рассмотрен как 3D гармонический осциллятор
- Соответствующие осцилляторы связаны между собой
- Число нормальных мод колебаний равно  $3N$ , каждый осциллятор независим

Рассмотрим упрощенный пример одномерной цепочки связанных осцилляторов

$$\begin{cases} \dot{q}_n = \frac{\partial H}{\partial p_n} = \frac{p_n}{m} \\ \dot{p}_n = -\frac{\partial H}{\partial q_n} = -\alpha(q_{n+1} + q_{n-1} - 2q_n) \\ \ddot{q}_n = -\frac{\alpha}{m}(q_{n+1} + q_{n-1} - 2q_n) \end{cases}$$

$H = \sum_n \left\{ \frac{p_n^2}{2m} + \frac{1}{2} \alpha (q_{n+1} - q_n)^2 \right\}$

$q_n = x - na$



Преобразование Фурье:  $q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \tilde{q}_k e^{ikn}$

Условие периодичности  $q_{N+n} = q_n \Rightarrow k = \frac{2\pi j}{N}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, N-1$

$\ddot{\tilde{q}}_k = \frac{2\alpha}{m} (1 - \cos k) \tilde{q}_k = \omega_k^2 \tilde{q}_k; \quad \omega_k = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} |\sin(k/2)|$

Дисперсионное соотношение

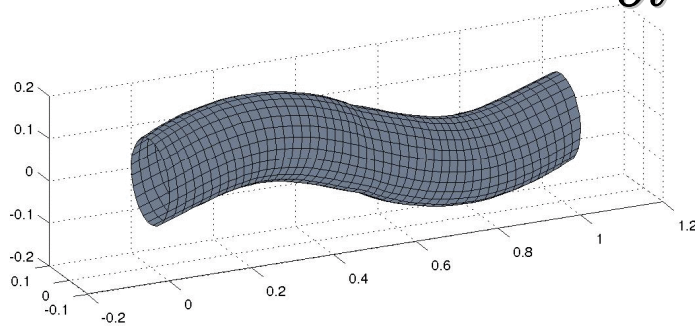
# Дисперсионные соотношения

## ● Дисперсия в одномерной упругой среде

Волновое уравнение  $\frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}$

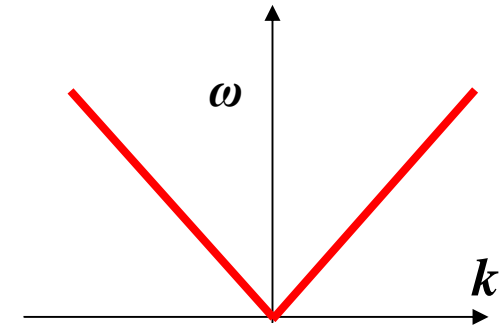
Дисперсионное соотношение

$$\omega = \frac{2\pi v}{\lambda} = |k|v$$



Групповая скорость  $u = \frac{d\omega}{dk}$

В данном случае дисперсия линейна:

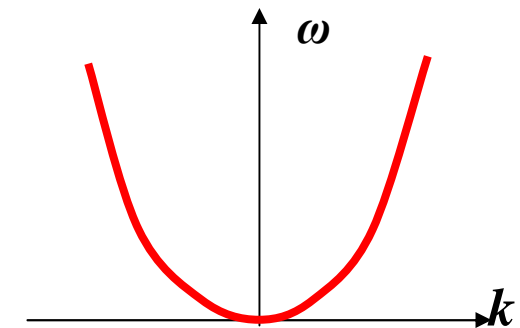


## ● Дисперсионное соотношение де Бройля:

$$E = \hbar\omega; \quad p = \hbar k$$

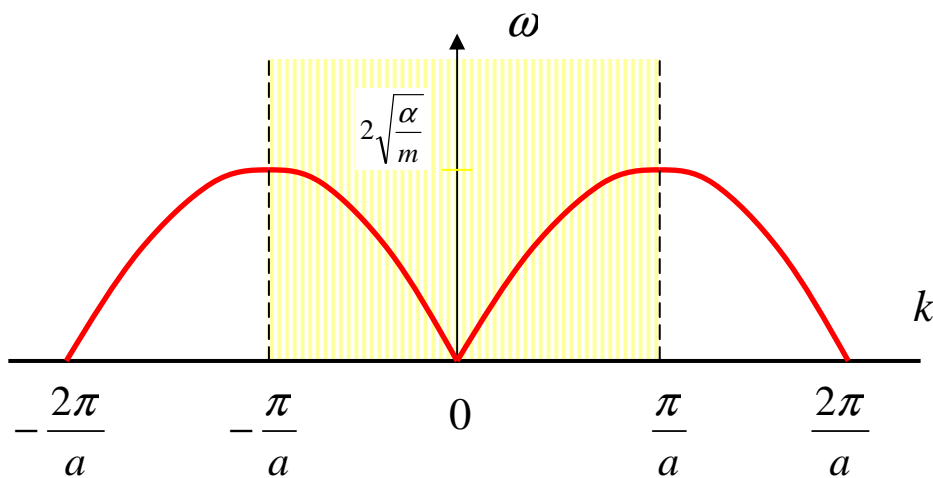
$$E = \frac{p^2}{2m} \implies \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Дисперсия квантовой нерелятивистской свободной частицы нетривиальна:



**Вопрос:** как выглядит дисперсионная кривая фотона?

# Дисперсия в одномерной решетке



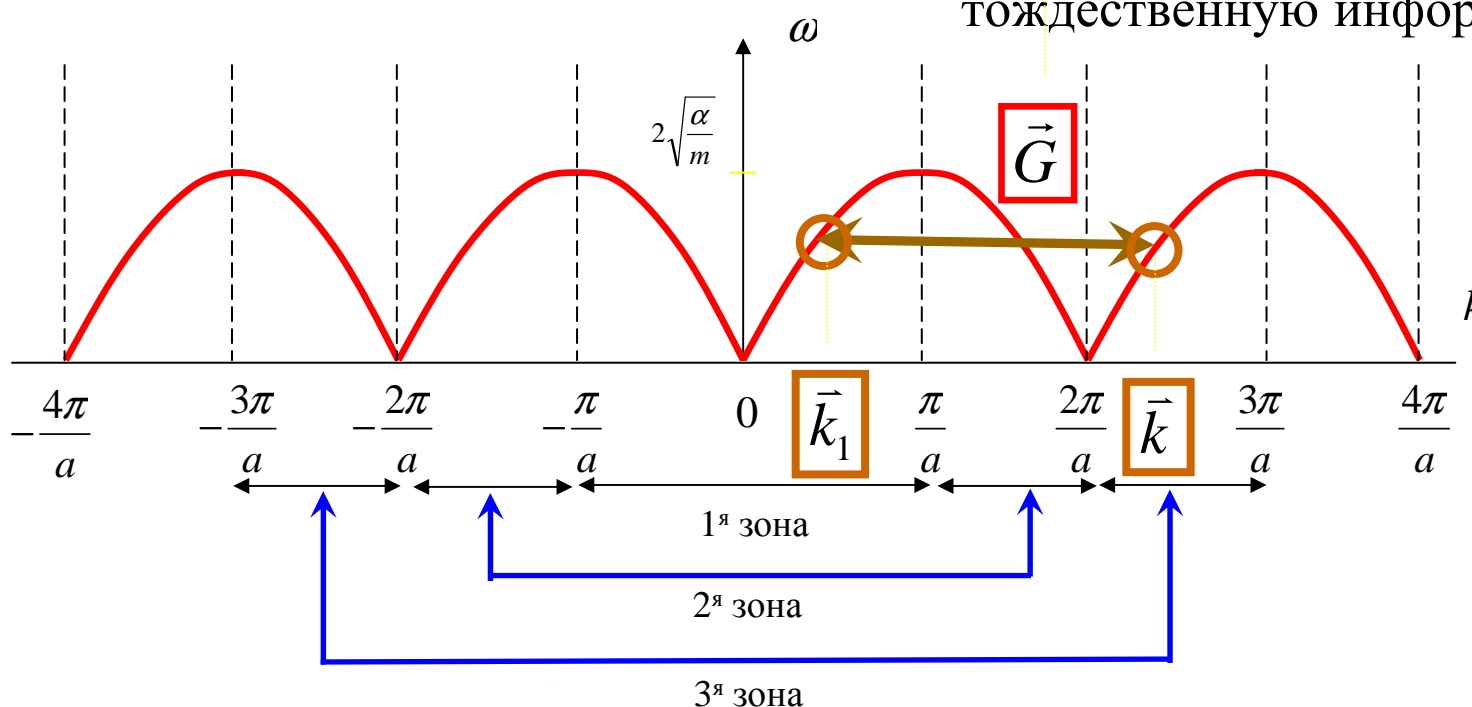
Зонная структура (в  $k$ -пространстве)

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} |\sin(k/2)|$$

Решение периодически по  $k$ , физические моды осцилляций принадлежат интервалу

$$-\frac{\pi}{2} \leq k \leq \frac{\pi}{2}$$

Каждая из зон Бриллюэна содержит тождественную информацию



Вектор обратной решетки

$$\vec{k} = \vec{k}_1 + \vec{G}$$

# Плотность состояний вибрационных мод

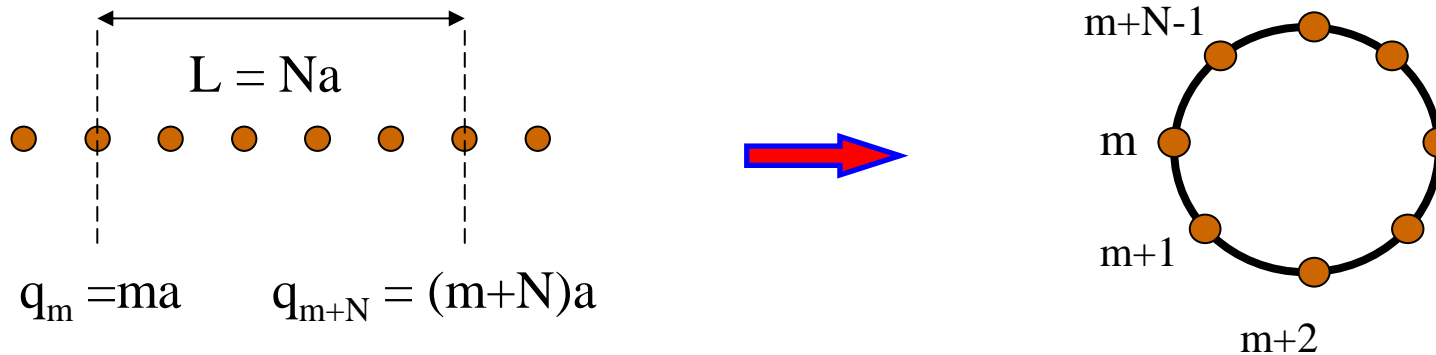
Каждой вибрационной моде соответствует данный волновой вектор  $k$  (или длина волны  $\lambda$ ), частота  $\omega$  и энергия  $E = \hbar\omega$ .

**Вопрос:** Сколько мод находится в интервале между  $(\omega, E, k)$  и  $(\omega+d\omega, E+dE, k+dk)$ ?

$$dN = N(\omega)d\omega = N(E)dE = N(k)d^3\vec{k}$$

**Задача:** найти число мод  $N(k)$  для всех допустимых значений  $k$ .

Первый шаг: упростить задачу, наложив периодические граничные условия



Периодические граничные условия означают что  $q_m = q_{m+N}$ , или

$$\downarrow qe^{i(kma - \omega t)} = qe^{i(k(m+N)a - \omega t)} \implies 1 = e^{ikNa}$$

Величина волнового вектора ограничена:  $kNa = 2\pi n \rightarrow k = \frac{2\pi n}{Na} \quad n = 1, 2, 3, \dots$

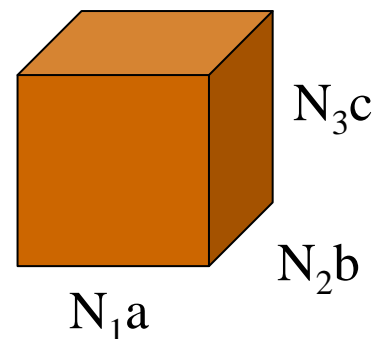
при изменении  $n$  на 1,  $k$  меняется на величину  $\Delta k = \frac{2\pi}{Na}$

Плотность состояний спектра колебаний одномерной монокристаллической цепочки:

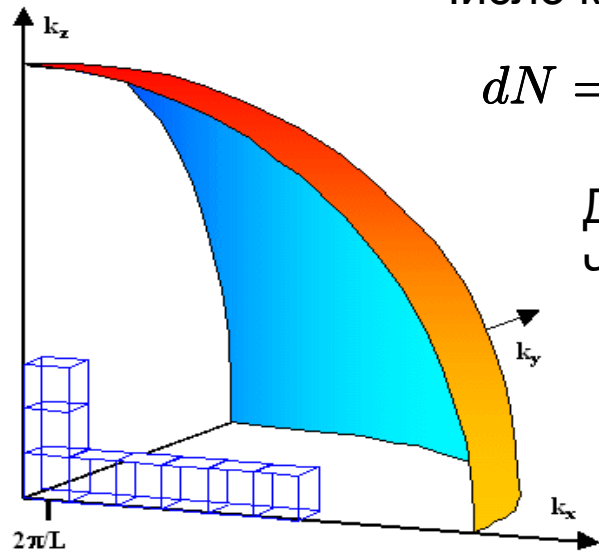
$$\frac{\text{число мод}}{\text{элемент объема}} = \frac{1}{\Delta k} = \frac{Na}{2\pi} = \frac{L}{2\pi}$$

Обобщение периодических граничных условий в 3D: рассмотрим куб состоящий из  $N_1 \times N_2 \times N_3$  атомов

$$\frac{\text{число мод}}{\text{элемент объема}} = \frac{N_1 a}{2\pi} \frac{N_2 b}{2\pi} \frac{N_3 c}{2\pi} = \frac{V}{8\pi^3} = N(k)$$



# Плотность числа состояний колебательных мод



Число колебательных мод в интервале частот  $(\omega, \omega+d\omega)$

$$dN = N(\omega)d\omega = N(k)d^3k = \frac{V}{8\pi^3}d^3k = \frac{V}{8\pi^3} \int dS_\omega dk$$

Дисперсионное соотношение  $\omega(k)$  полностью задает число состояний

$$N(\omega) = \frac{V}{8\pi^3} \int dS_\omega \left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right)^{-1}$$

Для изотропной системы  $\int dS_\omega = 4\pi k^2$

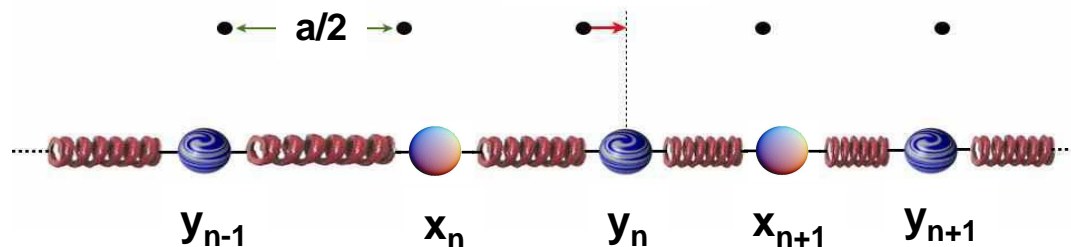
- Коллективному движению атомов твердого тела сопоставляется колебательная мода  $q_m = e^{i(kma - \omega t)}$
- Квантовый гармонический осциллятор: энергия каждой моды равна  $E_n = n\hbar\omega$
- Квант колебаний твердого тела с энергией  $\hbar\omega$  называется **фононом**
- С каждой модой частоты  $\omega$  связан волновой вектор  $k$  и соответствующий **квазиимпульс**  $\hbar k$
- Колебания в кристалле не связаны с переносом массы, обычный импульс атомов твердого тела равен нулю.

# Колебания в двухатомной одномерной цепочке

Рассмотрим одномерную цепочку связанных атомов двух типов (модель кристалла типа NaCl)

$$\ddot{x}_n = -\frac{\alpha}{m_1}(y_n + y_{n-1} - 2x_n)$$

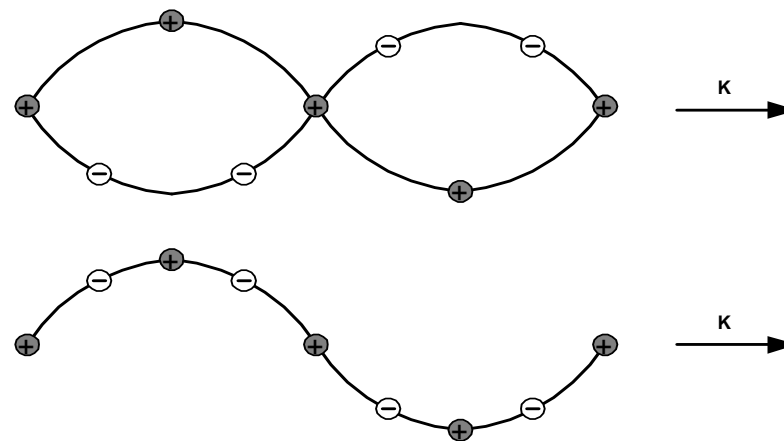
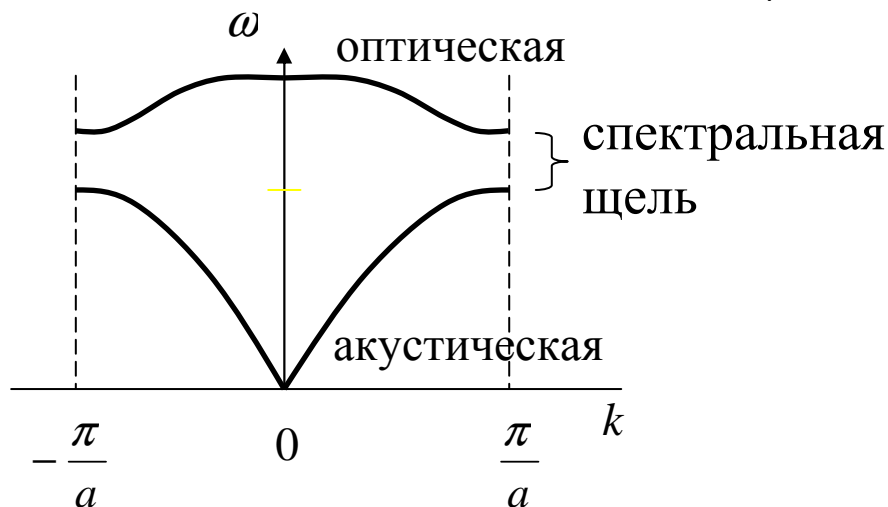
$$\ddot{y}_n = -\frac{\alpha}{m_2}(x_{n+1} + x_n - 2y_n)$$



Две ветви в дисперсионном соотношении:  $\rightarrow \omega_k^2 = \alpha \left( \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \right) \pm \sqrt{\alpha^2 \left( \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \right)^2 - \frac{4\alpha^2}{m_1 m_2} \sin^2(k/2)}$

$\omega_k^+$  :  $\omega \rightarrow 0$  при  $k \rightarrow 0$  - **акустическая ветвь**  
(атомы  $m_1$  и  $m_2$  колеблются в одной фазе)

$\omega_k^-$  :  $\omega \rightarrow \omega_{max}$  при  $k \rightarrow 0$  - **оптическая ветвь**  
(атомы  $m_1$  и  $m_2$  колеблются в противофазе)





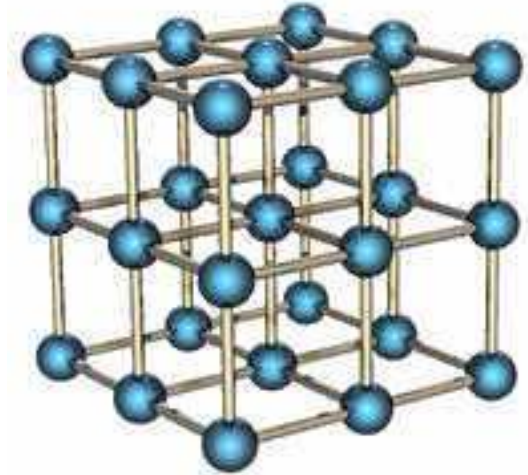
# Нормальные моды

Рассмотрим классический гамильтониан описывающий кубическую решетку

$$T = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{3N} \left( \frac{\partial x_i}{\partial t} \right)^2 = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{3N} \left( \frac{\partial q_i}{\partial t} \right)^2$$

- Разложение в ряд по степеням отклонения от  $x_i^{(0)}$

$$V = V(x_i) = V(x_i^{(0)}) + \sum_i \left( \frac{\partial V}{\partial x_i} \right)_{x_i=x_i^{(0)}} (x_i - x_i^{(0)}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{x_i=x_i^{(0)}} (x_i - x_i^{(0)}) (x_j - x_j^{(0)}) + \dots$$



$$x_i - x_i^{(0)} = \xi_i$$

- Гармоническое приближение:

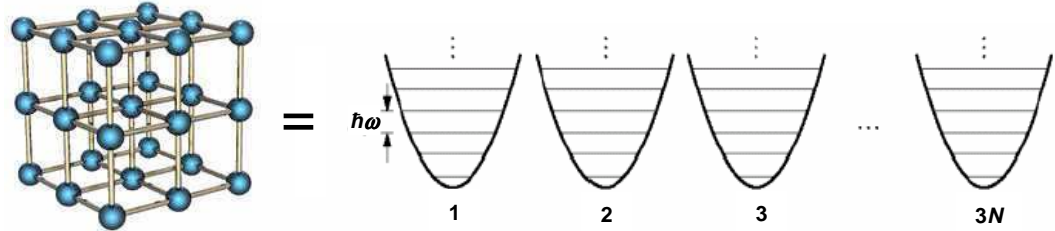
$$H = V_0 + \sum_{i=1}^{3N} \frac{m}{2} \left( \frac{\partial \xi_i}{\partial t} \right)^2 + \sum_{i,j=1}^{3N} \alpha_{ij} \xi_i \xi_j; \quad \alpha_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{\xi_i=0}$$

- Переход к нормальным координатам:  $q_i = a_i + \sum b_{ij} \xi_j$  (диагонализация)

$$H = V_0 + \sum_{i=1}^{3N} \frac{m}{2} \left[ \left( \frac{\partial q_i}{\partial t} \right)^2 + \omega_i^2 q_i^2 \right] \leftarrow \text{набор } 3N \text{ невзаимодействующих осцилляторов}$$

# Модель Эйнштейна

Классический осциллятор:  
высокотемпературный предел  
 $k_B T \gg \hbar \omega$  или все  $n_i \gg 1$



$$E = \sum_{i=1}^{3N} \epsilon n_i = 3N \cdot 2 \cdot \frac{k_B T}{2} = 3N k_B T;$$

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3N k_B$$

**Закон Дюлонга-Пти (1819)**

Каждая из  $3N$  нормальных вибрационных мод в классическом случае соответствует волне деформации распространяющейся в кристалле - это **звуковая волна**.

**Напомним:** При квантовомеханическом описании каждый из осцилляторов имеет энергию

$$\epsilon_i = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_i, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

**Предположение Эйнштейна: все частоты одинаковы:  $\omega_i = \omega$**

Энергия системы  $3N$  тождественных квантовых осцилляторов:

$$E = V_0 + 3N \left[ \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right] = E_0 + \frac{3N \hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

Каждая из  $3N$  нормальных мод в квантовом случае соответствует квазичастицам - **фононам** по аналогии с тем, как нормальные моды (кванты) электромагнитного поля соответствуют фотонам.

**В чем разница?**

Число фотонов бесконечно а  
число фононов ограничено  
размером решетки

# Теплоемкость твердого тела

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3Nk_B \frac{(\beta\hbar\omega)^2 e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} \rightarrow$$

**Высокотемпературный предел:**

$$k_B T \gg \hbar\omega; \quad C_V = 3Nk_B$$

**Низкотемпературный предел:**

$$k_B T \ll \hbar\omega; \quad C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}$$

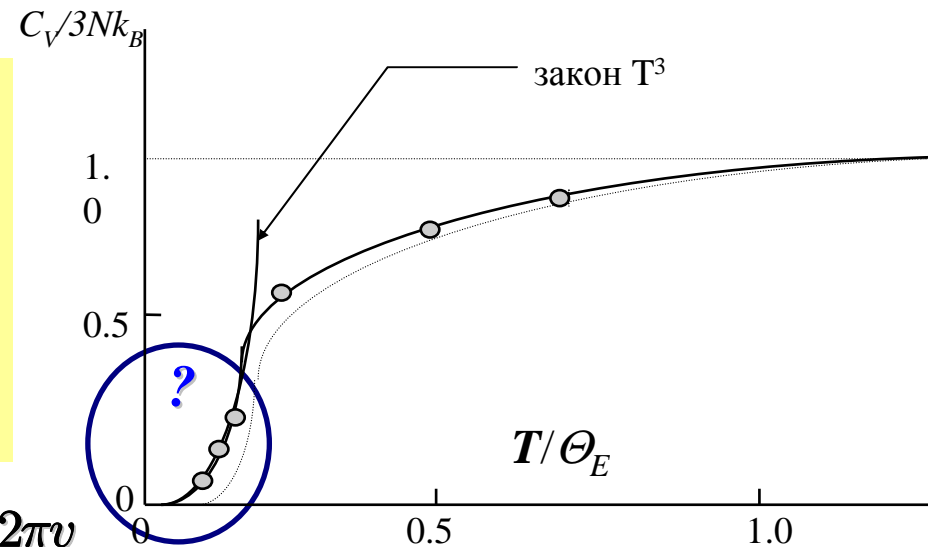
**Температура Эйнштейна:**  $k_B \Theta = \hbar\omega$  **Напомним:** для фотонов  $k_B T = \hbar\omega$

Проблема в области малых температур: эксперимент для большинства тел дает  $C_V \sim T^3$

**Модель Дебая (1912)**

Каждое нормальное колебание твердого тела ассоциировано с упругой звуковой волной, характеризуемой ее длиной  $\lambda$ , частотой  $\omega$  и скоростью распространения  $v$ ; минимальная длина волны определяется межатомным расстоянием  $a$ . Частоты колебаний образуют непрерывный спектр

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N \quad \omega = \frac{2\pi v}{\lambda}; \quad \frac{2\pi v}{L} < \omega < \frac{2\pi v}{a}$$



## Модель Дебая

**Напомним:** плотность состояний фотонного газа в интервале частот  $(\omega, \omega+d\omega)$

$$g(\omega)d\omega = \frac{V\omega^2}{\pi^2c^3}d\omega$$

$$k_B\Theta = \hbar\omega \longleftrightarrow k_B T = \hbar\omega$$

В чем разница?

- Спектр фононов обрезан на максимальной частоте  $\omega_D = \frac{2\pi v}{a}$
- Фотоны имеют 2 состояния поперечной поляризации, фононы в дополнение к ним имеют одно продольное состояние.
- Скорость распространения фононов не равна скорости света.

Плотность состояний фононного газа в интервале частот  $(\omega, \omega+d\omega)$

$$g(\omega)d\omega = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2v^3}d\omega;$$

Полное число фононов  $\int_0^{\omega_D} g(\omega)d\omega = \frac{V\omega_D^3}{2\pi^2v^3} = 3N \implies \omega_D = v \left( \frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$

**Температура Дебая:**  $k_B\Theta_D = \hbar\omega_D$

**Вопрос:** Мы ничего не забыли?

## Модель Дебая

Фононы имеют 2 состояния поперечной поляризации и одно состояние продольной поляризации → существует 2 независимых поперечных звуковых волны распространяющихся со скоростью  $v_t$  и одна продольная волна, распространяющаяся со скоростью  $v_l$ .

Плотность состояний фононного газа в интервале частот  $(\omega, \omega+d\omega)$

↓

$$g(\omega)d\omega = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2v^3}d\omega = \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \left( \frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) d\omega = g_t(\omega)d\omega + g_l(\omega)d\omega$$

Полное число фононов

$$2N = \int_0^{\omega_{D_t}} g_t(\omega)d\omega = \frac{V\omega_{D_t}^3}{3\pi^2v_t^3}; \quad N = \int_0^{\omega_{D_l}} g_l(\omega)d\omega = \frac{V\omega_{D_l}^3}{6\pi^2v_l^3}$$

Энергия фононного газа

$$E = \int_0^{\omega_D} \varepsilon(\omega)g(\omega)d\omega = \frac{3V}{2\pi^2v^3} \int_0^{\omega_D} \left( \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \right) \omega^2 d\omega$$

Энергия нулевых колебаний

$$= E_0 + \frac{3V\hbar}{2\pi^2v^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = E_0 + \frac{3Vk_B^4 T^4}{2\pi^2v^3\hbar^3} \int_0^{x_0} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$$\begin{aligned} x &= \hbar\omega/k_B T \\ x_0 &= \Theta_D/T \\ \Theta_D &= \hbar\omega_D/k_B \end{aligned}$$

## Теплоемкость твердого тела

Удобно выразить плотность состояний фононов через  $\Theta_D = \hbar\omega_D/k_B$ . Поскольку

$$\frac{V\omega_D^3}{2\pi^2v^3} = 3N, \text{ можно записать: } g(\omega)d\omega = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2v^3}d\omega = \frac{9N\omega^2}{\omega_D^3}d\omega. \text{ Тогда}$$

$$E = \int_0^{\omega_D} \hbar\omega f(\omega)g(\omega)d\omega = \frac{9N\hbar^4}{k_B^3\Theta_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}$$

$$\begin{aligned} x &= \hbar\omega/k_B T \\ x_0 &= \hbar\omega_D/k_B T \end{aligned}$$

Теплоемкость фононного газа

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{9N\hbar^4}{k_B^3\Theta_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1\right]^2} \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} d\omega = \frac{9Nk_B}{x_0^3} \int_0^{x_0} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}$$

$$= 3Nk_B D(x_0); \quad D(x_0) = \frac{3}{x_0^3} \int_0^{x_0} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} \quad \leftarrow \text{Функция Дебая}$$

Альтернативная форма функции Дебая - интегрирование по частям приводит к

$$D(x_0) = -\frac{3x_0}{e^{x_0} - 1} + \frac{12}{x_0^3} \int_0^{x_0} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$$D(x_0) = -\frac{3x_0}{e^{x_0} - 1} + \frac{12}{x_0^3} \int_0^{x_0} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}; \quad C_V = 3Nk_B D(x_0)$$

Низкотемпературный предел:  $T \ll T_D$ ,

$$x_0 \rightarrow \infty; \quad D(\infty) \rightarrow 12 \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^3 e^{-x} dx}{e^x - 1} = \frac{12\pi^4}{15} \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \quad C_V = \frac{12Nk_B}{5} \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

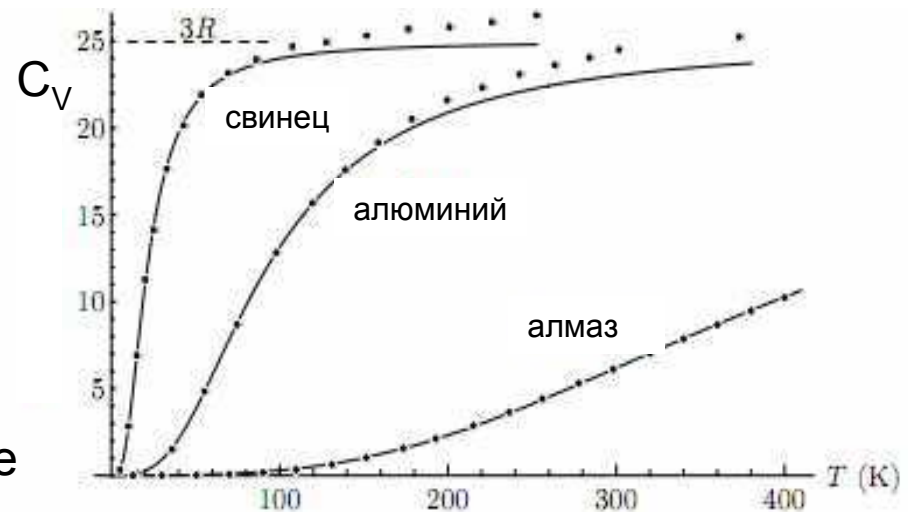
Высокотемпературный предел:  $T \gg T_D$ ,

$$x_0 \rightarrow 0; \quad D(x_0) = 1 - \frac{x_0^2}{20} - \dots; \quad C_V \rightarrow 3Nk_B$$

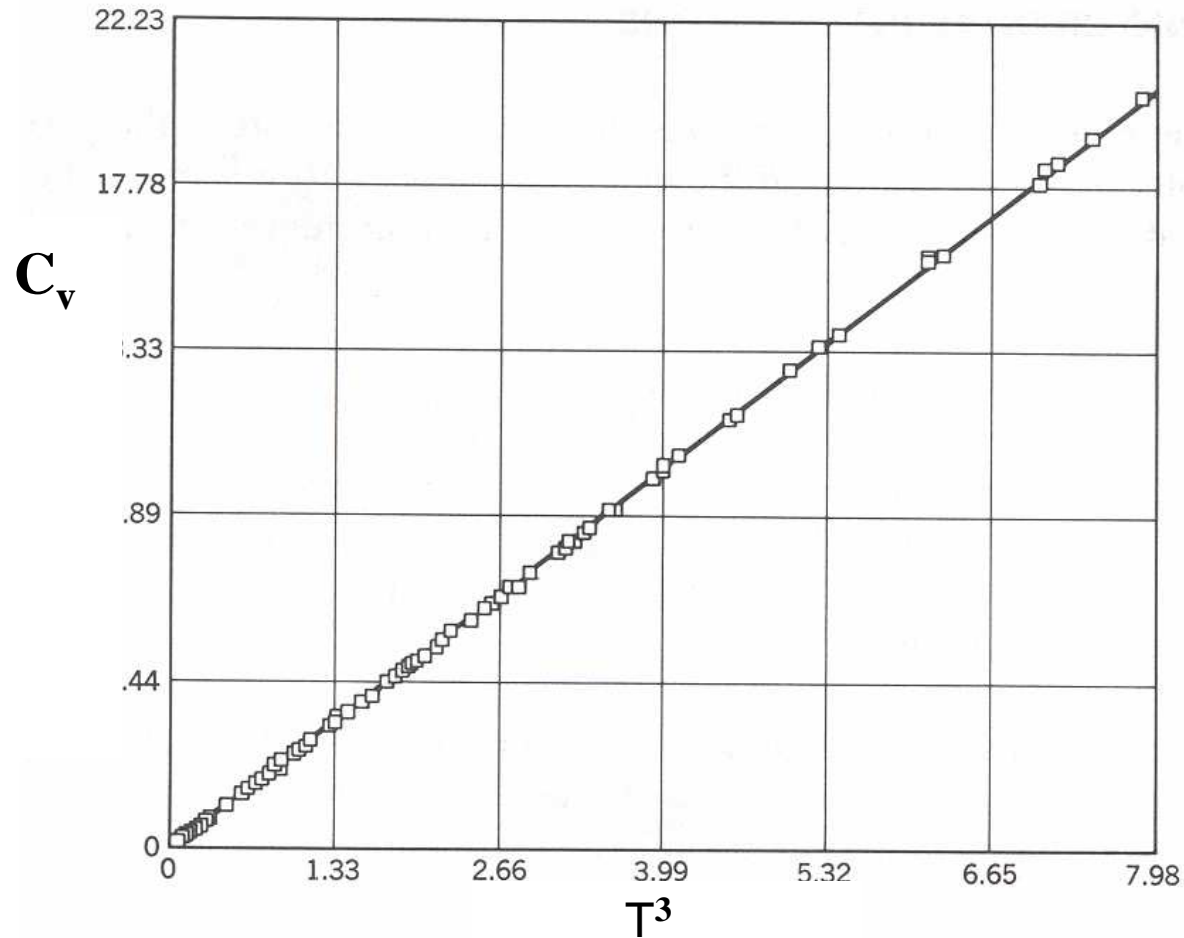
В этом случае воспроизводится классический результат, более того, до тех пор пока выполняется условие  $T > 3\Theta_D$ , теплоемкость Дебая совпадает с ним с точностью более 0.5 процента

Напомним:  $C = C_{эл} + C_{реш}$

В большинстве материалов наблюдаемое значение теплоемкости  $C \approx C_{реш}$



## Модель Дебая: теория vs эксперимент



Экспериментальные данные измерения теплоемкости  
аргона при низких температурах

(L.Finegold and N.E.Phillips)



# Снова об одномерной цепочке: Модель Кронига-Пенни

- Модификация квантовомеханической задачи об одномерной цепочке: вместо осциллятора включен периодический  $\delta$ -образный потенциал

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - g \sum_{n=1}^N \delta(x - na); \quad H\psi(x) = E\psi(x) \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

На интервале  $na < x < na + a$  решения имеют вид  $\psi(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}$

Граничные условия:  $\psi(na - \varepsilon) = \psi(na + \varepsilon); \quad \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} (H - E)\psi dx = 0$

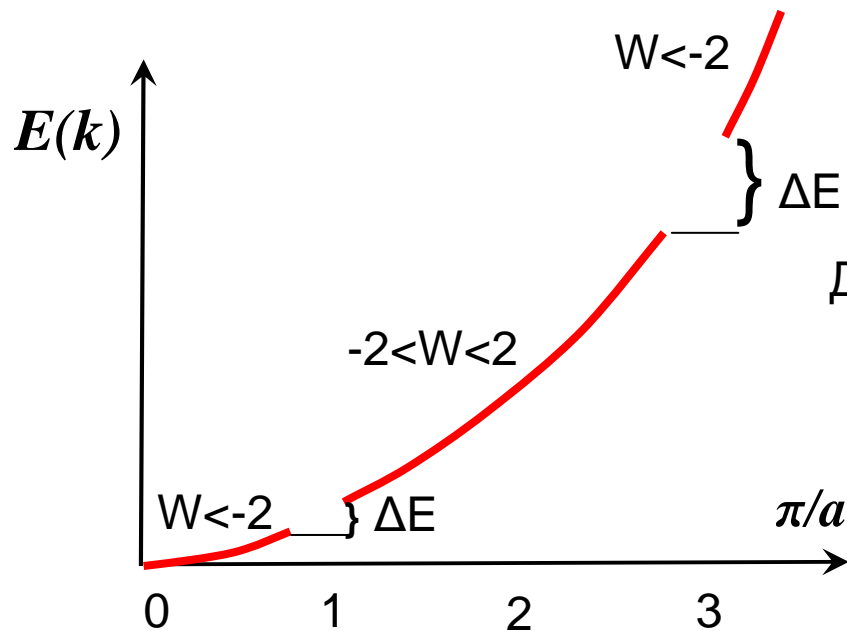
$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(na + \varepsilon) - \psi'(na - \varepsilon)) = g\psi(na)$$

$$\begin{cases} e^{-ika} \psi_{n+1} - \psi_n = B_n e^{-ikan} e^{-ika} (e^{-ika} - e^{ika}) \\ e^{ika} \psi_{n+1} - \psi_n = A_n e^{ikan} e^{ika} (e^{ika} - e^{-ika}) \end{cases}$$

$$\frac{1}{2} (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = \left( -\frac{mg}{\hbar^2 k} \sin(ka) + \cos(ka) \right) \psi_n \equiv 2 \cos(pa) \psi_n \rightarrow \psi_n = 2e^{ipan}$$

**Решение существует только при условии**  $-2 \leq -\frac{mg}{\hbar^2 k} \sin(ka) + \cos(ka) \leq 2$

# Зонная структура



$$-2 \leq -\frac{mg}{\hbar^2 k} \sin(ka) + \cos(ka) \leq 2$$

$$-2 \leq W(ka) \leq 2$$

Дисперсионная кривая модели Кронига-Пенни

Периодический потенциал порождает щели в дисперсионном спектре - возникает **зонная структура**

Рассмотрим квантовомеханический гамильтониан с произвольным периодическим потенциалом  $V(\mathbf{r}) = \sum_n V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$

## Теорема Блоха:

собственные функции такого гамильтониана имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r}) &= e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} u_k(\mathbf{r}); & u_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) &= u_k(\mathbf{r}) \\ \psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) &= e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n)} \psi_k(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

# Фононы и законы сохранения

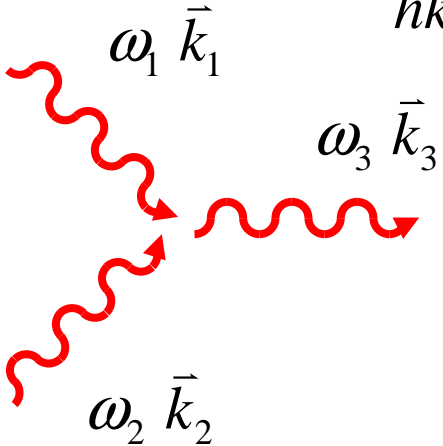
Колебаниям решетки различной частоты мы сопоставили квазичастицы - фононы.

Взаимодействие фононов связано с сохранением энергии.

Однако квазиимпульс фонона сохраняется с точностью до вектора обратной решетки  $\vec{G}$

$$\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_3$$

$$\hbar\vec{k}_1 + \hbar\vec{k}_2 = \hbar\vec{k}_3 + \hbar\vec{G}$$



**Возможны процессы**

- Упругое безфононное рассеяние:  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$
- Однофононное рассеяние (поглощение или испускание фонона):
- Многофононное рассеяние

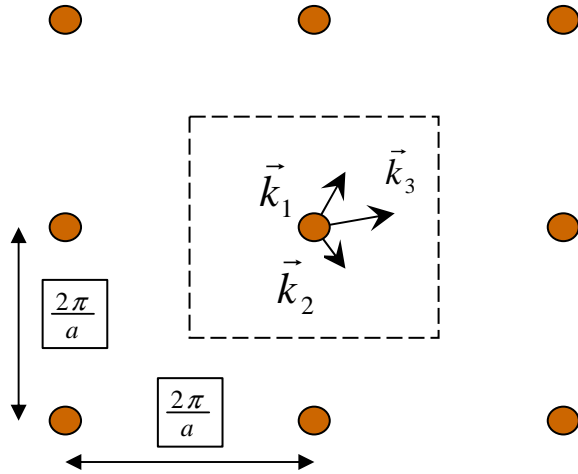
Рассеяние рентгеновских лучей на кристаллической решетке

$$E_3 = E_1 \pm \omega(k_2)$$

$$\vec{k}_3 = \vec{k}_1 \pm \vec{k}_2 + \vec{G}$$

# Столкновения фононов

**Вопрос:** как столкновения фононов связаны с процессом теплопередачи?



Рассмотрим 2-D решетку  
 → 1<sup>я</sup> зона в k-пространстве:

## ● N-процесс (сохранение квазиимпульса)

$N = \text{«Normal»}$

$$\hbar\vec{k}_1 + \hbar\vec{k}_2 = \hbar\vec{k}_3$$

Теплопередача без помех

**Условие:**  $\omega$  и  $q$  малы → процесс при  $T \ll \theta_D$

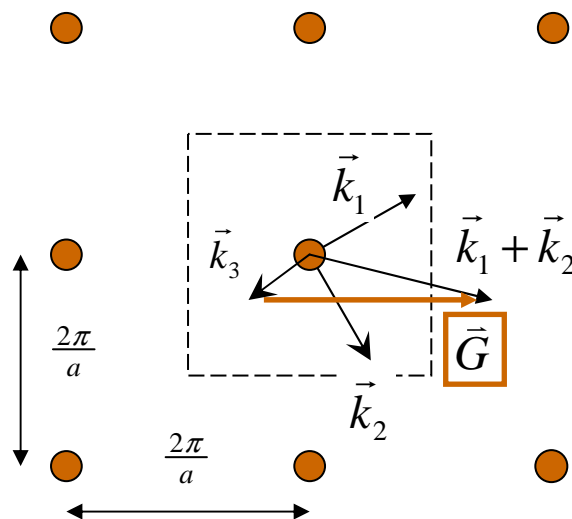
## ● Процесс переброса (U-процесс)

$U = \text{«Umklapp»}$

$$\hbar\vec{k}_1 + \hbar\vec{k}_2 = \hbar\vec{k}_3 + \hbar\vec{G}$$

Помехи теплопередаче!

**Условие:** процесс при  $T \gg \theta_D$



# Снова о гармоническом осцилляторе: операторы $a, a^\dagger$

**Напомним:** Гамильтониан одномерного гармонического осциллятора в координатном представлении:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2}; \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}; \quad \hat{q} = x; \quad [\hat{p}, \hat{q}] = \hat{p}x - x\hat{p} = -i\hbar$$

Уравнение Шрёдингера:  $\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = E\psi(x)$

Определим сопряженные друг другу операторы

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{q} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right); \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{q} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right)$$

Коммутационное соотношение:  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{i}{\hbar}(\hat{p}x - x\hat{p}) = 1$

Представление гамильтониана осциллятора через  
**оператор числа заполнения уровня**

$$H = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \hat{n} + \frac{1}{2} \right); \quad \hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

**Вопрос:** как флуктуации координаты одномерного гармонического осциллятора зависят от температуры?

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger); \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left( n(T) + \frac{1}{2} \right)$$

$$n(T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}$$

Распределение Бозе-Эйнштейна

В модели твердого тела флуктуации координат связаны с суммой по всем фононным модам:

$$\langle X^2 \rangle \approx \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{9\omega^2}{\omega_D^3} \left( \frac{k_B T}{M\omega^2} + \frac{\hbar}{2M\omega} \right) = \frac{9}{M\omega^2} \left( k_B T + \frac{\hbar\omega_D}{4} \right)$$

$$\omega_D = v \left( \frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

Флуктуации связаны со вкладами чисто квантовых и температурных осцилляций

**Плавление:** межатомное расстояние  $a \sim \langle \sqrt{X^2} \rangle$   $\rightarrow$   $T_{cr} \sim \frac{M k_B \Theta_D^2 a^2}{9\hbar^2}$   
(пренебрегая квантовыми осцилляциями)

Температура плавления

# Алгебра операторов $a, a^\dagger$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{n}] &= \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a} = \hat{a}; \\ [\hat{a}^\dagger, \hat{n}] &= \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger = -\hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = -\hat{a}^\dagger \end{aligned}$$

Упростим математику:

$$\hbar = \omega = 1$$

Какие собственные значения соответствуют функциям  $\psi$ ,  $\hat{a}\psi$ ,  $\hat{a}^\dagger\psi$  ?

$$H\psi = \varepsilon\psi; \quad \hat{n}\psi = (\hat{a}^\dagger\hat{a})\psi = n\psi$$

$$H(\hat{a}\psi) = (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}) \hat{a}\psi = (\hat{a}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}) - \hat{a}) \psi = (\varepsilon - 1)(\hat{a}\psi)$$

$$H(\hat{a}^\dagger\psi) = (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}) \hat{a}^\dagger\psi = (\hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}) + \hat{a}^\dagger) \psi = (\varepsilon + 1)(\hat{a}^\dagger\psi)$$

Оператор  $a$  понижает энергию состояния на величину одного кванта энергии а оператор  $a^\dagger$  повышает ее на один квант.

**Замечание:** Энергия основного состояния  $\psi_0$  не может быть понижена!



$$\psi_0 = 0$$

$$\text{Для } n^{\text{го}} \text{ уровня } \psi_n = (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 \implies \varepsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Действие операторов  $a, a^\dagger$  в обозначениях Дирака

$$|\psi_n\rangle = \hat{a}^\dagger |\psi_{n-1}\rangle; \quad \langle \psi_n | = \langle \psi_{n-1} | \hat{a}; \quad |\psi_n\rangle = \hat{a} |\psi_{n+1}\rangle; \quad \langle \psi_n | = \langle \psi_{n+1} | \hat{a}^\dagger$$

# Лестничные операторы

## Нормировка собственных функций оператора числа заполнения?

Заметим что  $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \langle \psi_{n-1} | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \psi_{n-1} \rangle = \langle \psi_{n-1} | \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 | \psi_{n-1} \rangle = n \langle \psi_{n-1} | \psi_{n-1} \rangle$

Так как волновая функция основного состояния нормализована, то

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1 \quad \longrightarrow \quad \langle \psi_n | \psi_n \rangle = n!$$

Нормированные собственные функции оператора числа заполнения:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} |\psi_n\rangle; \quad \langle n | n \rangle = 1; \quad \langle n | m \rangle = \delta_{nm}$$

Условие полноты набора состояний:  $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$

Действие операторов  $a, a^\dagger$  на нормированные состояния:

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle; \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle; \quad \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$$

**Интерпретация:** действие оператора  $a^\dagger$  рождает бозонное состояние, увеличивая число квантов на единицу, действие оператора  $a$  аннигилирует бозонное состояние, собственные значения оператора  $n = a a^\dagger$  задают число бозонов.



# Многочастичные бозонные состояния

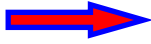
Двухчастичное состояние: Гамильтониан  $H = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + V(|q_1 - q_2|)$

$$|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle$$

Возможные состояния:  $|0\rangle|0\rangle, |0\rangle|1\rangle, |1\rangle|0\rangle, |1\rangle|1\rangle$

Нормировка и условие полноты:

$$\langle n_1, n_2 | m_1, m_2 \rangle = \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2}; \quad \sum_{n, m} |n, m\rangle \langle n, m| = 1$$

Частицы неразличимы  корректно нормализованное и симметризованное бозонное двухчастичное состояние определено как

$$|n_1, n_2\rangle = \left( \frac{1}{2n_1!n_2!} \right)^{\frac{1}{2}} (|n_1\rangle|n_2\rangle + |n_2\rangle|n_1\rangle) \quad \sum_{\alpha=1,2} n_{\alpha} = 2$$

$N$  - частичное состояние:

$$|n_1, n_2 \dots n_N\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle \dots |n_N\rangle$$

Нормализованное и симметризованное бозонное  $N$  - частичное состояние ( $N!$  - число перестановок):

$$|n_1, n_2 \dots n_N\rangle = \left( \frac{1}{N!} \frac{1}{n_1!n_2! \dots n_N!} \right)^{\frac{1}{2}} \left( |n_1\rangle|n_2\rangle \dots |n_{N-1}\rangle|n_N\rangle + |n_2\rangle|n_1\rangle \dots |n_{N-1}\rangle|n_N\rangle + \dots + |n_1\rangle|n_2\rangle \dots |n_N\rangle|n_{N-1}\rangle \right)$$

# Фермионные состояния

**Напомним:** для фермионных состояний числа заполнения могут принимать только два значения, 0 и 1. Следовательно, для одночастичного фермионного состояния:

$$a^\dagger|0\rangle = |1\rangle; \quad a^\dagger|1\rangle = 0; \quad a|0\rangle = 0; \quad a|1\rangle = |0\rangle$$

В случае фермионов операторы  $a, a^\dagger$  удовлетворяют **антикоммутационным соотношениям**

$$\{a, a^\dagger\} \equiv aa^\dagger + a^\dagger a = 1; \quad \{a^\dagger, a^\dagger\} = \{a, a\} = 0$$

Двухчастичное состояние:

$$|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle$$



Нормализованное и антисимметризованное фермионное 2-частичное состояние:

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1\rangle|n_2\rangle - |n_2\rangle|n_1\rangle)$$

# Многочастичные фермионные состояния

Фермионная  $N$  - частичная волновая функция антисимметрична относительно перестановки любой пары частиц

Определим нормализованное и антисимметризованное фермионное  $N$  - частичное состояние

- Нормировка и условие полноты (состояния не упорядочены):

$$\langle n_1, n_2 \dots n_N | m_1, m_2 \dots m_N \rangle = \begin{vmatrix} \langle n_1 | m_1 \rangle & \langle n_1 | m_2 \rangle & \dots & \langle n_1 | m_N \rangle \\ \langle n_2 | m_1 \rangle & \langle n_2 | m_2 \rangle & \dots & \langle n_2 | m_N \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle n_N | m_1 \rangle & \langle n_N | m_2 \rangle & \dots & \langle n_N | m_N \rangle \end{vmatrix};$$

$$\frac{1}{N!} \sum_{n_1, n_2 \dots n_N} |n_1, n_2 \dots n_N\rangle \langle n_1, n_2 \dots n_N| = 1$$

Пример: 3-х частичное состояние

**Фермионы**

$$|n_1, n_2, n_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|n_1, n_2, n_3\rangle - |n_2, n_1, n_3\rangle + |n_2, n_3, n_1\rangle - |n_3, n_2, n_1\rangle + |n_3, n_1, n_2\rangle - |n_1, n_3, n_2\rangle)$$

**Бозоны**

$$\begin{aligned} |n_1, n_1, n_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3!2!}} (|n_1, n_1, n_2\rangle + |n_1, n_1, n_2\rangle + |n_1, n_2, n_1\rangle + |n_2, n_1, n_1\rangle + |n_2, n_1, n_1\rangle + |n_1, n_2, n_1\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|n_1, n_1, n_2\rangle + |n_1, n_2, n_1\rangle + |n_2, n_1, n_1\rangle) \end{aligned}$$

## Какие состояния ближе всего к классическим?

Для одномерного гармонического осциллятора **неэрмитовы** операторы

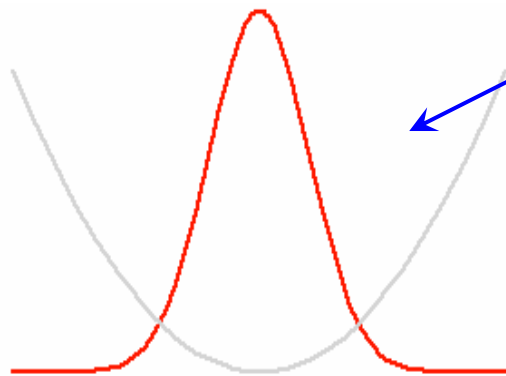
$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{q} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right); \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{q} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right)$$

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger); \quad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

Очевидно, в  
основном состоянии

$$\hat{a}|0\rangle = 0; \quad \langle x|\hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left( \partial_x + \frac{m\omega}{\hbar}x \right) \psi_0(x) = 0$$

$$\psi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$



Волновая функция основного  
состояния гауссова

$$\begin{cases} \langle 0|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|0\rangle = \langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle = 1; \\ \langle 0|(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)|0\rangle = -\langle 0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|0\rangle = -1 \end{cases}$$

$$\langle 0|\hat{q}|0\rangle = \langle 0|\hat{p}|0\rangle = 0; \quad \langle 0|\hat{q}^2|0\rangle\langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

В основном состоянии соотношение  
неопределенности минимизируется

# Когерентные состояния

В состоянии  $|n\rangle$

$$\langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle = \langle n | \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle = \langle n | 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] | n \rangle = 2n + 1$$

$$\langle n | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | n \rangle = -\langle n | \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} | n \rangle = -\langle n | 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] | n \rangle = -(2n + 1)$$

Следовательно

$$\downarrow \langle n | \hat{q} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n \rangle = \langle n | \hat{p} | n \rangle = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \langle n | \hat{a} - \hat{a}^\dagger | n \rangle = 0$$

$$\langle n | \hat{q}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1) \quad \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = \frac{m\omega\hbar}{2} (2n + 1)$$

Волновые функции возбужденных уровней не соответствуют минимуму неопределенности

Его минимизируют волновые пакеты

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle; \quad \langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = |\alpha|^2$$

При этом  $|\alpha\rangle = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}}|0\rangle$

Комплексное собственное значение!

$$\langle\alpha|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle = (\alpha + \alpha^*); \quad \langle\alpha|(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle = (\alpha - \alpha^*)$$

$$\langle\alpha|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle = (\alpha + \alpha^*)^2 + 1; \quad \langle\alpha|(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle = (\alpha - \alpha^*)^2 - 1$$

$$\langle\alpha|\hat{q}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega};$$

$$\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}$$



$$\langle\alpha|(\Delta q)^2|\alpha\rangle\langle\alpha|(\Delta p)^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$