

1. 电子在金属中运动速度

自由电子热运动的平均速率是很大的。根据金属经典电子理论，电子的热运动和气体

分子运动一样，电子热运动的平均速率 $\bar{u} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$ ，式中 k 是玻尔兹曼常量， $k=1.38 \times 10^{-23}$ J/K； m 是电子的质量， $m=0.91 \times 10^{-30}$ kg， T 是热力学温度。由公式可算出，当 $t=27^\circ\text{C}$ ，即 $T=300\text{ K}$ 时，

$$\bar{u} = \sqrt{\frac{8 \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300}{3.14 \times 0.91 \times 10^{-30}}} \text{ m/s} = 1.08 \times 10^5 \text{ m/s}$$

自由电子定向运动的平均速率是很小的。假定金属导体单位体积内的电子数为 n ，电子电荷量为 e ，电子定向运动的速率为 \bar{v} ，在 Δt 时间内通过导体横截面 S 的电子数就是 $nS\bar{v}\Delta t$ ，通过此横截面 S 的电荷量 $\Delta q = enS\bar{v}\Delta t$ ，导体中的电流 $I = \frac{\Delta q}{\Delta t} = enS\bar{v}$ ，由此可推出电子定向运动的平均速率 $\bar{v} = \frac{I}{enS}$ 。

下一篇

以铜为例，铜单位体积内的电子数 $n=8.4 \times 10^{22}/\text{cm}^3$ ， $e=1.6 \times 10^{-19}\text{ C}$ 。直径 1 mm 的铜导线，通过的电流是 1A 时，由上面的公式可算出这时自由电子定向运动的平均速率 $\bar{v}=7.4 \times 10^{-5}\text{ m/s}$ ，可见自由电子定向运动的平均速率是很小的。

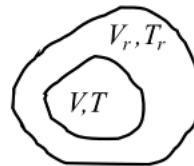
2.YIG 能隙 3eV

3. $\rho = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}$ 公式的证明

正则系综是由具有确定的粒子数 N 、体积 V 和温度 T 的封闭系统所构成的，正则分布函数是封闭系统的系综分布函数。

设想系统与大热源合起来构成一个复合系统，这个复合系统是孤立系统，服从微正则分布。

$$E_0 = E_r + E \quad E \ll E_0$$



系统处于微观态 n 的概率 ρ_n 应正比于此时复合系统的微观态数

$$\rho_n \propto \Omega_r(E_0 - E_n)$$

$$\begin{aligned} \ln \Omega_r(E_0 - E_n) &= \ln \Omega_r(E_0) + \left(\frac{\partial \ln \Omega_r}{\partial E_r} \right)_{E_r=E_0} (-E_n) \\ &= \ln \Omega_r(E_0) - \beta E_n \end{aligned}$$

下载高清
无水印

$$\beta = \left(\frac{\partial \ln \Omega_r}{\partial E_r} \right)_{E_r=E_0} =$$

$$\Omega_r(E_0 - E_n) = \Omega_r(E_0)$$

式中常数 C 可以由归一化条件

$$\sum_n \rho_n = C \sum_n e^{-\beta E_n}$$

系统的配分函数 $Z =$

所以系综中任一体系具有能

$$\rho_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$$

决定。

相应的密度算符就是 $\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$ 证明如下：

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \frac{1}{N} \sum_K |K\rangle \langle K| = \frac{1}{N} \sum_{mn} \sum_K |E_m\rangle \langle E_m| K \rangle \langle K| E_n \rangle \langle E_n| \\ &= \sum_{mn} |E_m\rangle \rho_{mn} \langle E_n| = \sum_{mn} |E_m\rangle \rho_n \delta_{mn} \langle E_n| = \sum_n \rho_n |E_n\rangle \langle E_n| \\ &= \sum_n \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} |E_n\rangle \langle E_n| = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} \sum_n |E_n\rangle \langle E_n| = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}\end{aligned}$$

由配分函数定义: $Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})$

所以密度算符改写为
$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})}$$

任意力学量 \hat{f} 在正则系综中的平均值为
$$\langle \hat{f} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{f}) = \frac{\text{Tr}(\hat{f} e^{-\beta \hat{H}})}{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})}$$

4. 单粒子约化密度矩阵

单粒子约化密度矩阵 (1-RDM)，双粒子约化密度矩阵 (2-RDM)

经典入门教材 Quantum Computation and Quantum Information 中解释约化密度矩阵，是对环境求偏迹。但在二次量子化下，我们可以直接算出 RDM，而不需要先得到密度矩阵再求偏迹。

1-RDM 用一个符号表示为 1D ，它的元素是这样定义的：

$$\begin{aligned}{}^1D_i^j &= \langle \phi | a_j^\dagger a_i | \phi \rangle \\ {}^2D_{ij}^{pq} &= \langle \phi | a_p^\dagger a_q^\dagger a_j a_i | \phi \rangle = {}^1D_i^p {}^1D_j^q - {}^1D_i^q {}^1D_j^p.\end{aligned}$$

可以看到，1-RDM 的每一项是 $\langle \psi | a_j^\dagger a_i | \psi \rangle$ 。显然，1-RDM 是一个矩阵。

显然，2-RDM 是一个 4 阶张量，也就是它有四个下标。我们可以通过合并前两个维度和后两个维度，将它转换成一个矩阵。

这两个东西，可能我们无法理解它们背后的深刻内涵，但是可以使用 **CS 人的终极奥义——黑箱**，把它当作一个黑箱，知道怎么用就行了。

一个化学分子的哈密顿量可以表示为：

$$E(\kappa) = \sum_{ij} h_{ij} \langle \phi(\kappa) | a_i^\dagger a_j | \phi(\kappa) \rangle + \sum_{ijkl} V_{ijkl} \langle \phi(\kappa) | a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l | \phi(\kappa) \rangle = \sum_{ij} h_{ij} {}^1D_j^i + \sum_{ijkl} V_{ijkl} {}^2D_{lk}^{ij}$$

等式最右中的 h_{ij} 和 V_{ijkl} 可以直接计算得到，暂时可以不管。

换言之，1-RDM 和 2-RDM 的存在，为我们提供了一种计算分子能量的方式。那么这种方式就可以运用到 VQE 当中去。

整理磁子玻色-爱因斯坦凝聚，磁子共振隧穿文章