

Mechanika kwantowa IIB: Zadania domowe #2

Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski — 9 listopada 2018



Info: * - oznacza, że zadanie to jest nieobowiązkowe

Zadanie 1: Operator gęstości prądu

Wyraź operator gęstości prądu $\mathbf{J}$ posługując się dowolną bazą jednocząstkową $\{|\nu\rangle\}$ i związanymi z nią operatorami kreacji $a_\nu^\dagger$ i anihilacji a_ν .

Wsk. Zaczynij w bazie położeniowej, a potem przetransformuj wynik.

Zadanie 2: Nieoddziałujące elektrony w nieskończonej studni

Znajdź dla układu N nieoddziałujących elektronów w nieskończonej jednowymiarowej studni potencjału o szerokości L :

- (a) postać hamiltonianu układu w II kwantyzacji,
- (b) zapisz stan podstawowy dla tego układu,
- (c) znajdź energię dla wzbudzenia typu cząstkowego (dodatkowy elektron wykreowany powyżej poziomu Fermiego), typu dziurowego (jeden z elektronów został anihilowany poniżej poziomu Fermiego) oraz typu "ekscytonowego" (jeden elektron anihilowany poniżej poziomu Fermiego, a inny został wykreowany powyżej poziomu Fermiego).

Zadanie 3: Elektrony oddziałujące jednorodnym potencjałem

Oblicz energię stanu podstawowego N elektronów znajdujących się w jednowymiarowej nieskończonej jamie potencjału o szerokości L , które oddziałują ze sobą potencjałem długozasięgowym $V(x - x') = V_0$. Wykorzystaj postać potencjału $V(x - x')$ w II kwantyzacji, przy czym wyraż potencjał w bazie stanów własnych hamiltonianu dla problemu swobodnych elektronów z poprzedniego zadania.

Zadanie 4: Dwuatomowy łańcuch harmoniczny

W jednowymiarowym, nieskończonym układzie atomów o masach równych na przemian m i M ($M > m$) oddziałujących ze sobą potencjałem harmonicznym rozchodzą się fonony. Odległość międzyatomami wynosi a .

- (a) Znaleźć i narysować związek dyspersyjny $\omega(k)$ dla takich wzbudzeń.
- (b) Podać zakres dozwolonych częstości wzbudzeń i narysować konfiguracje przestrzenne kolejnych atomów dla fononów o $k = 0$ i $k = \frac{\pi}{2a}$.
- (c) Rozważyć przypadek $M = m$.

Zadanie 5: Trójwymiarowy kryształ o sieci regularnej

Rozpatrujemy prosty trójwymiarowy model kryształu, w którym hamiltonian dany jest przez

$$\hat{H} = \sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \sum_{j,\mathbf{a}} \frac{m\omega_0^2}{2} (\phi_{j+\mathbf{a}} - \phi_j)^2,$$

gdzie $j \in \{1, \dots, N\}$ numeruje węzły sieci regularnej. Stała sieci wynosi a , natomiast $\mathbf{a} \in \{a\mathbf{e}_x, a\mathbf{e}_y, a\mathbf{e}_z\}$. W rozpatrywanym modelu odchylenia od pozycji równowagi ϕ_j oraz pędy $\hat{p}_j$ są wielkościami skalarnymi. Wyraż hamiltonian poprzez fononowe operatory kreacji i anihilacji. Znajdź energię stanu podstawowego. Przyjmij okresowe warunki brzegowe i załóż, że objętość kryształu $L^3 \gg a^3$.

Zadanie 6: Bozony Schwingera

W tak zwanej reprezentacji Schwingera spin reprezentowany jest przy pomocy dwóch operatorów bozonowych a i b tak, że $\hat{S}^+ = a^\dagger b$, $\hat{S}^- = (\hat{S}^+)^\dagger$ oraz $\hat{S}^z = \frac{1}{2}(a^\dagger a - b^\dagger b)$, przy czym $\hbar = 1$.

(a) Pokaż, że ta definicja jest konsystentna ze związkami komutacyjnymi dla operatorów $\hat{S}^+$ i $\hat{S}^-$.

(b) Pokaż, że $|S, m\rangle = \frac{(a^\dagger)^{S+m}}{\sqrt{(S+m)!}} \frac{(b^\dagger)^{S-m}}{\sqrt{(S-m)!}} |\Omega\rangle$ jest zgodne z definicją stanów własnych operatora kwadratu całkowitego spin $\hat{S}^2$ oraz jego z -owej składowej. Stan $|\Omega\rangle$ oznacza próżnię bozonów Schwingera.

Zadanie 7: Fale spinowe - magnony

Ferromagnetyczny łańcuch spinowy jest opisywany przy pomocy kwantowego modelu Heisenberga, który ma postać

$$\hat{H} = -J \sum_m \hat{\mathbf{S}}_m \cdot \hat{\mathbf{S}}_{m+1},$$

gdzie $J > 0$, a $\hat{\mathbf{S}}_m$ reprezentuje kwantowy operator spinu dla m -tego węzła sieci. Ze względu na dodatniość stałej J układ preferuje sytuację w której sąsiadujące ze sobą spiny są ustawione równoległe, co prowadzi do ferromagnetycznego porządkowania się układu. Jednoczesna zmiana orientacji wszystkich spinów nie powoduje zmiany energii stanu podstawowego, co oznacza, że układ posiada globalną symetrię rotacyjną. Występowanie globalnej ciągłej symetrii jest związane z występowaniem niskoenergetycznych wzbudzeń układu (tzw. mody Goldstona). Wywołanie bardzo małego zaburzenia konfiguracji spinów w stanie podstawowym, które rozciąga się na dużych odległościach (duża długość fali) będzie wymagało dostarczenia energii, która będzie dążyła do zera w granicy nieskończonych długości tak powstałej fali. Wzbudzenia takie nazywa się *falami spinowymi* i postaramy się je zrozumieć lepiej zrozumieć.

(a) Najpierw posłużymy się transformacją Holsteina-Primakoffa, aby zapisać hamiltonian Heisenberga przy pomocy bozonowych operatorów kreacji i anihilacji. Transformacja ta jest dana poniższymi równaniami

$$\hat{S}_m^- = a_m^\dagger (2S - a_m^\dagger a_m)^{1/2}, \quad \hat{S}_m^+ = (2S - a_m^\dagger a_m)^{1/2} a_m, \quad \hat{S}_m^z = S - a_m^\dagger a_m.$$

Pokaż, że ta definicja jest konsystentna ze związkami komutacyjnymi dla operatorów $\hat{S}_m^+$, $\hat{S}_m^-$ oraz $\hat{S}_m^z$. Następnie rozwiń pierwiastki występujące w definicji transformacji Holsteina-Primakoffa przy założeniu, że $S \gg 1$. Biorąc tylko dominujące wkłady przepisuj hamiltonian układu za pomocą operatorów $a_m^\dagger$ i a_m .

(b) Znajdź energię stanu podstawowego dla tego układu oraz relację dyspersji ω_k dla wzbudzeń spinowych w tym układzie przechodząc do przestrzeni Fouriera i nakładając w tym przypadku warunki Borna-von Kármána. Przedyskutuj jej zachowanie ω_k dla $k \rightarrow 0$. Co mówi ten wynik o charakterze tych wzbudzeń? Uzyskane w tym przypadku kwazicząstki są nazywane *magnonami* i są kwantami fal spinowych w ferromagnetyku podobnie jak fonony były kwantami drgań sieci krystalicznej.

Zadanie 8*: Niestabilność Peierlsa

Quasi-jednowymiarowe metale, które są na przykład realizowane w organicznych przewodnikach takich jak TTF·TCNQ (tetrathiafulvalene tetracyanoquinomethane), mogą wykazywać niestabilność morza

Fermiego wiodącą do izolującego stanu podstawowego. Rozważ następujący jednowymiarowy hamiltonian:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_k \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k_F^2) c_k^\dagger c_k}_{\hat{H}_{kin}} + \underbrace{\lambda \int dx \frac{du(x)}{dx} \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x)}_{\hat{H}_{el-ph}} + \underbrace{\frac{\kappa}{2} \int dx \left(\frac{du(x)}{dx} \right)^2}_{\hat{H}_{latt}},$$

gdzie $\hat{\psi}(x) = \sum_k c_k e^{ikx}$ jest elektronowym operatorem pola, $u(x)$ opisuje statyczną deformację sieci krystalicznej. Pierwszy człon opisuje energię kinetyczną elektronów dla energii Fermiego $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$, drugi odpowiada energii potencjalnej elektronów o gęstości $\hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x)$ w potencjale wywołanym przez deformację sieci krystalicznej $\lambda \frac{du(x)}{dx}$, a ostatni człon opisuje energię elastyczną sieci krystalicznej.

(a) Zakładając, że tylko wzbudzenia w pobliżu poziomu Fermiego są istotne możemy zlinearyzować elektronowy człon kinetyczny jak niżej:

$$\begin{aligned} \hat{H} &\approx \sum_{k \approx k_F} \hbar v_F (k - k_F) c_k^\dagger c_k + \sum_{k \approx -k_F} (-\hbar v_F) (k - k_F) c_k^\dagger c_k = \\ &= \sum_{k \approx k_F} \hbar v_F (k - k_F) \left[c_k^\dagger c_k - c_{k-2k_F}^\dagger c_{k-2k_F} \right], \end{aligned}$$

gdzie $v_F = \hbar k_F / m$ jest prędkością Fermiego. Zakładając periodyczną modulację sieci krystalicznej $u(x) = u_0 \cos(2k_F x)$, pokaż że człon z oddziaływaniem $\hat{H}_{el-ph}$ może zostać przepisany do postaci

$$\hat{H}_{el-ph} = \sum_{k \approx k_F} \Delta \left[c_k^\dagger c_{k-2k_F} - c_{k-2k_F}^\dagger c_k \right],$$

gdzie $\Delta = i\lambda u_0 k_F$. Tak, że $\hat{H}_{el} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_{el-ph}$ możemy przepisać w postaci macierzowej

$$\hat{H}_{el} = \sum_{k \approx k_F} (c_k^\dagger, c_{k-2k_F}^\dagger) \begin{pmatrix} \hbar v_F (k - k_F) & \Delta \\ \Delta^* & -\hbar v_F (k - k_F) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ c_{k-2k_F} \end{pmatrix}.$$

(b) Poprzez diagonalizację powyższego hamiltonianu otrzymujemy relację dyspersji $\varepsilon_\pm(k)$. Sprawdź, że w tym przypadku otwiera się przerwa energetyczna dla $k = k_F$, co jest związane z obniżeniem energii stanów elektronowych w niższym paśmie. Jest to przykład niestabilności zwanej niestabilnością morza Fermiego. Dla połówkowego obsadzenia wszystkie stany "−" są obsadzone, a stany "+" są puste, co powoduje, że energia stanu podstawowego ulega zmniejszeniu

$$\delta E_{el} = E_{el}(\Delta) - E_{el}(\Delta = 0) = 2 \sum_k (\varepsilon_-(k, \Delta) - \varepsilon_-(k, \Delta = 0)),$$

gdzie czynnik 2 uwzględnia degenerację spinową. Wyrażenie to jest logarytmicznie rozbieżne, gdy $k \rightarrow \pm\infty$, co nie powinno nas dziwić z powodu linearyzacji, która jest dobrym przybliżeniem tylko gdy $k \approx k_F$. Musimy zregularyzować sumę poprzez wprowadzenie obciążenia, które wybieramy tak, aby $|k - k_F| < E_F / \hbar v_F$. Przez zastąpienie sumy całką wykonaj powyższą sumę i pokaż, że gdy $|\Delta| \ll E_F$, wtedy

$$\frac{\delta E_{el}}{L} = -\frac{2|\Delta|^2}{\hbar v_F} \left[\ln \left(\frac{2E_F}{|\Delta|} \right) + \frac{1}{2} \right],$$

gdzie L jest długością naszego jednowymiarowego układu.

(c) Pozostało nam tylko policzyć energię elastyczną sieci krystalicznej. Zakładając periodyczną modulację sieci (patrz wyżej) pokaż, że

$$\frac{\delta E_{latt}}{L} = \frac{4\kappa |\Delta|^2}{\pi \lambda^2}.$$

Zatem powyższa modulacja sieci powoduje obniżenie energii elektronowej przy jednoczesnym zwiększeniu energii elastycznej sieci krystalicznej. Dla małych $|\Delta|$, całkowita zmiana energii może być ujemna, co oznacza, że stan izolujący jest preferowany. Jest to tak zwana *niestabilność Peierlsa*, która powoduje zniszczenie cieczy Fermiego w jednym wymiarze. Wariując $|\Delta|$ zminimalizuj energię całkowitą układu $\delta E = \delta E_{el} + \delta E_{latt}$, aby znaleźć optymalną wartość przerwy energetycznej oraz odpowiadającą wartość zysku energetycznego.