

① Lemat: Jeżeli funkcja falowa ψ jest funkcją własną wszystkich operatorów translacji jednocześnie, wtedy ψ jest falą Blocha.

Dowód: Zbadamy, że funkcja falowa ψ jest funkcją własną wszystkich operatorów translacji, wtedy w szczególnym przypadku mamy:

$$\hat{T}_{\vec{a}_j} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a}_j) = C_j \psi(\vec{r}),$$

$\uparrow$
wektor sieci prymitywnej
w kierunku j -tym

gdzie C_j jest wartością własną, którą wygodnie jest sprowadzić do

jeżeli: $C_j = e^{2\pi i \theta_j}$, czyli

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}_j) = e^{2\pi i \theta_j} \psi(\vec{r}) \quad (j \in \{1, 2, 3\})$$

przy czym θ_j nie zależą od $\vec{r}$.
 Wybieramy $\vec{k} = \theta_1 \vec{b}_1 + \theta_2 \vec{b}_2 + \theta_3 \vec{b}_3$,
 gdzie $\vec{b}_j$ to wektory prymitywne
 sieci odwrotnej. Ponadto definiujemy
 wielkość $u(\vec{r}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r})$, wtedy

$$\begin{aligned} u(\vec{r} + \vec{a}_j) &= e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{a}_j)} \psi(\vec{r} + \vec{a}_j) = \\ &= \left(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_j} \right) \left(e^{2\pi i \theta_j} \psi(\vec{r}) \right) = \\ &= e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \underbrace{e^{-2\pi i \theta_j} e^{2\pi i \theta_j}}_{\substack{\parallel \\ 1}} \psi(\vec{r}) = u(\vec{r}), \end{aligned}$$

czyli tak zdefiniowane $u(\vec{r})$ jest
 periodyczne, przy translacji o $\vec{R} = \sum_{j=1}^3 n_j \vec{a}_j$,
 gdzie $n_j \in \mathbb{Z}$, zatem

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u(\vec{r}),$$

co jest faza Blocha, $\square$

Dowód tw. Blocha:

$$\hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R})$$

Operatory translacji i periodyczny hamiltonian komutują:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{R}} \hat{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) &= \hat{H}(\vec{r} + \vec{R}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) = \\ &= \hat{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r} + \vec{R}) = \hat{H}(\vec{r}) \hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

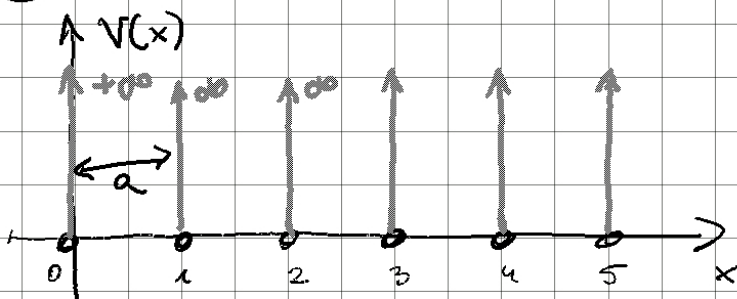
↑
periodyczność $\hat{H}$

$$\Rightarrow [\hat{T}_{\vec{R}}, \hat{H}] = 0, \hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}),$$

a tym samym możemy wybrać wspólną bazę funkcji własnych.

Dobrym wyborem są funkcje własne znalezione w lemacie, czyli własne fole Blocha $\square$

② $V(x) = \alpha \sum_{n=0}^{N-1} \delta(x - na)$ - potencjał „gzebien Diraca”



a) periodyczne warunki brzegowe (w kontekście kryształu zwane warunkami Borna-von Kármána)

w połączeniu z tw. Blocha dają:

$$\psi(x) = \psi(x + Na) = e^{iNka} \psi(x)$$

$$\Rightarrow e^{iNka} = 1 \Rightarrow Nka = 2\pi n \quad (n \in \mathbb{Z}),$$

$$\text{czyli} \quad k = \frac{2\pi n}{Na} \quad (n \in \mathbb{Z})$$

b) dla $0 < x < a$: $V(x) = 0$, czyli

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi \Rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi,$$

$$\text{gdzie} \quad k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}.$$

Ogólne rozwiązanie: $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$

w komórce : $-a < x < 0$ po zastosowaniu twierdzenia Blocha mamy:

$$\psi(x) = e^{-ika} [A \sin(k(x+a)) + B \cos(k(x+a))]$$

w $x=0$ funkcja falowa musi być ciągła, czyli

$$B = e^{-ika} [A \sin(ka) + B \cos(ka)],$$

czyli $A \sin ka = B[e^{-ika} - \cos ka]$ (*)

Potencjał typu δ -Diraca powoduje, że pochodna $\psi(x)$ ma skok w $x=0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x) \psi(x) dx =$$

$$= E \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx$$

znika z powodu ciągłości $\psi(x)$

czyli

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{x=0^-} = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x) \psi(x) dx$$

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} B$$

Następnie liczymy pochodną $\psi(x)$ na lewo i prawo od 0 i przyrównujemy zgodnie z równaniem wyżej:

$$A k e^{-ika} k [A \cos(ka) - B \sin(ka)] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} B$$

wstawiając (*) dostajemy

$$[e^{ika} - \cos(ka)] [1 - e^{-ika} \cos(ka)] + e^{-ika} \sin^2(ka) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka)$$

po uproszczeniu mamy:

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka),$$

gdzie $z \equiv ka$, $\beta = m\alpha a / \hbar^2$,

$$\text{mamy } \boxed{\cos(Ka) = \cos(z) + \beta \frac{\sin(z)}{z}}$$

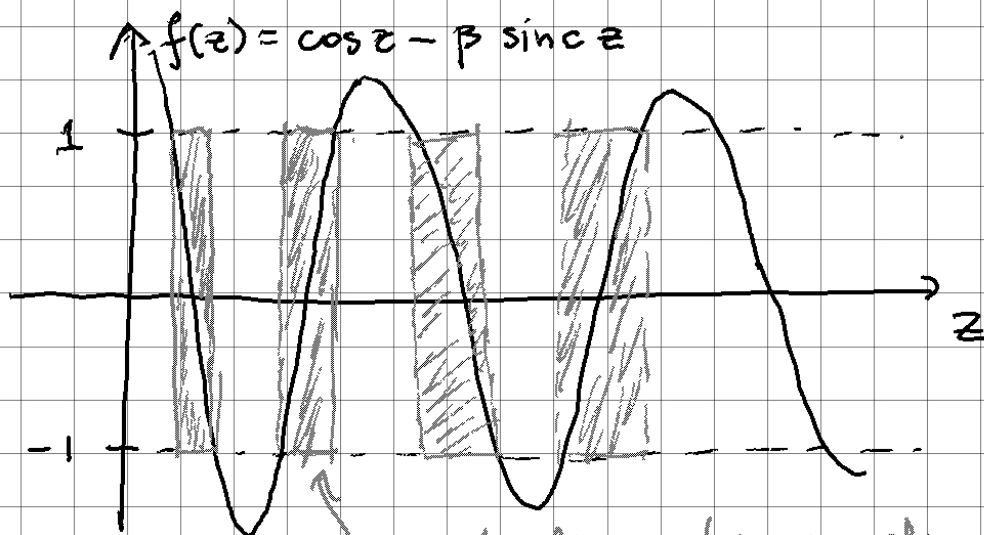
c) rozwiązanie graficzne powyższego równania

- $|\cos(Ka)| < 1$ - funkcja cosinus jest ograniczona od góry i dołu

- $\beta \frac{\sin z}{z}$ - funkcja sinc(z) przeskalowana przez β , jest zlokalizowana w $z=0$, oscyluje z amplitudą znikającą dla

$$z \rightarrow \infty$$

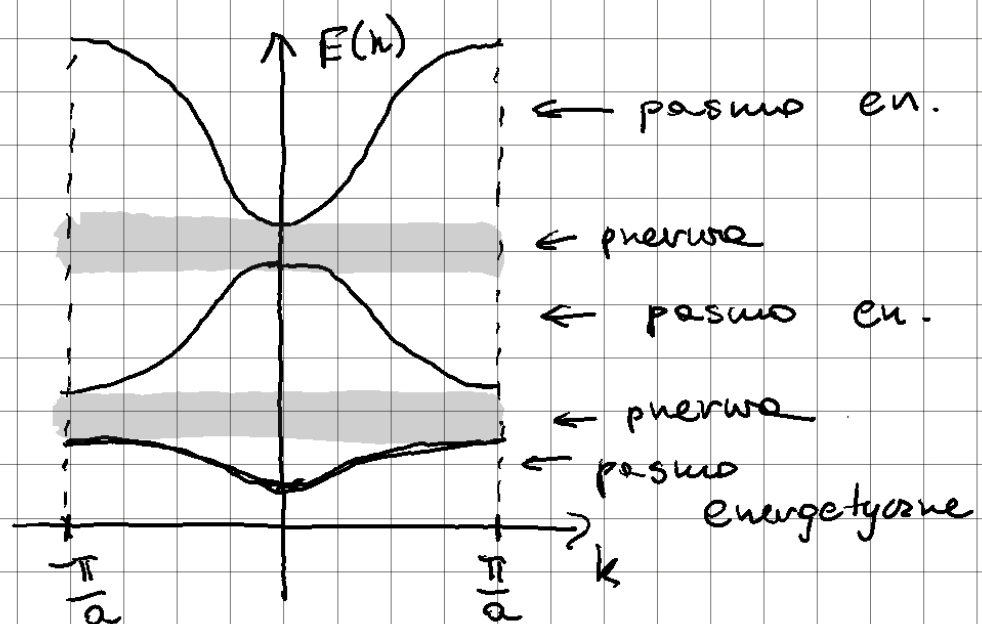
- $\cos z$ - funkcja oscylująca



w tych obszarach istnieje rozwiązanie

W rezultacie dostajemy obszary
wzbronione - przerwy, oraz obszary
dozwolone - pasma.

Wykorzystując np. Mathematicę możemy
dostać też zależność $E(k)$:



Pierwsza strefa Brillouina: $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$

ze względu na symetrię dla większych lub mniejszych k dostajemy to samo:

- jest to odpowiednik komórki prymitywnej dla sieci odwrotnej.

Gdy najwyższe pasmo jest całkowicie wypełnione elektronami (pasmo walencyjne), wtedy wzbudzenie elektronu do pasma przewodnictwa wymaga dostarczenia

energii większej niż szerokość pasma.

Typowo takie materiały zachowują się jak izolatory.

Gdy pasmo przewodnictwa jest również częściowo wypełnione

materiał taki typowo jest półprzewodnikiem

③ a) $a_4^+ a_5^+ a_2 | \underbrace{111000...} \rangle \leftarrow \begin{matrix} \text{notęgi liczby} \\ \text{obszaru} \end{matrix} =$
 $= -a_4^+ a_5^+ | 101000... \rangle =$

$$= - \underset{\substack{\uparrow \\ 1}}{(-1)^2} a_4^+ |101010\dots\rangle = -(-1)^2 |101110\dots\rangle = -|101110\dots\rangle$$

$$b) a_1^+ a_5^+ a_2 |1110\dots\rangle = -a_1^+ a_5^+ |1010\dots\rangle = -a_1^+ |\underline{1}0101\dots\rangle = 0$$

$\uparrow$
 $n_1 = 2 \leftarrow$ zakaz Pauliego!

$$\textcircled{3} \quad |\psi\rangle = A |100\dots\rangle + B |11100\dots\rangle$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = |A|^2 \langle 100\dots | 100\dots \rangle + |B|^2 \langle 11100\dots | 11100\dots \rangle = |A|^2 + |B|^2 = 1$$

wyrazy mieszane znikajac, bo maja inne liczby czastek!

$$\begin{aligned} \langle 100\dots | 11100\dots \rangle &= \langle 0 | a_1 a_1^+ a_2^+ a_3^+ | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | (1 - a_1^+ a_1) a_2^+ a_3^+ | 0 \rangle = \langle 0 | a_2^+ a_3^+ | 0 \rangle + \\ &\quad - \langle 0 | a_1^+ a_1 a_2^+ a_3^+ | 0 \rangle = 0, \text{ bo} \end{aligned}$$

$$(a_i | 0 \rangle)^+ = 0 \Leftrightarrow \langle 0 | a_i^+ = 0$$

Średnia liczba czastek:

$$\hat{N} = \langle \hat{N} \rangle = \langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_{i=1}^{\infty} a_i^+ a_i | \psi \rangle$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} a_i^{\dagger} a_i (A a_1^{\dagger} |0\rangle + B a_1^{\dagger} a_2^{\dagger} a_3^{\dagger} |0\rangle) =$$

$$= A |100\dots\rangle + 3B |1110\dots\rangle$$

$$N = \langle \hat{N} \rangle = |A|^2 + 3|B|^2 \underset{\substack{\uparrow \\ |A|^2 + |B|^2 = 1}}{=} 2|B|^2 + 1,$$

ponieważ

$$A \sum_{i=1}^{\infty} a_i^{\dagger} a_i a_1^{\dagger} |0\rangle = A \sum_{i=1}^{\infty} a_i^{\dagger} (\delta_{i1} - a_1^{\dagger} a_i) |0\rangle =$$

$$= A \sum_{i=1}^{\infty} a_i^{\dagger} \delta_{i1} |0\rangle = A a_1^{\dagger} |0\rangle = A |100\dots\rangle$$

analogicznie dla członu z B.

$$\textcircled{5} \quad a) [a_i, \sum_j a_j^{\dagger} a_j] =$$

$$= \sum_j (a_i a_j^{\dagger} a_j - a_j^{\dagger} a_j a_i) = \sum_j (\delta_{ij} a_j - a_j^{\dagger} a_i a_j - a_j^{\dagger} a_j a_i) =$$

$$= \sum_j (\delta_{ij} a_j + \cancel{a_j^{\dagger} a_j a_i} - \cancel{a_j^{\dagger} a_j a_i}) = a_i$$

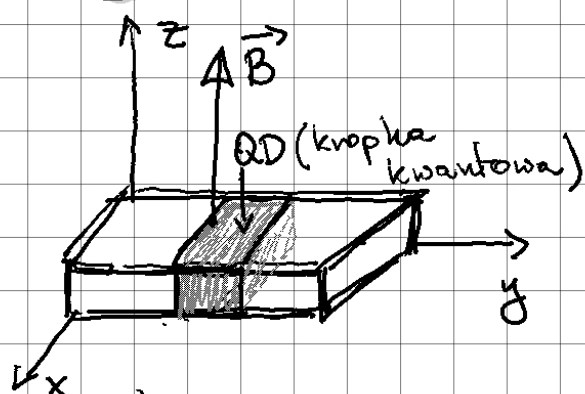
$$b) [a_i, \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha}] = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} (a_i a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} - a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} a_i) =$$

$$= \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{i\alpha} - a_{\alpha}^{\dagger} a_i) a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \delta_{i\alpha} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} + \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} a_{\alpha}^{\dagger} (\delta_{i\beta} - a_{\beta}^{\dagger} a_i) a_{\beta} a_{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \delta_{i\alpha} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} + \right.$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} \delta_{i\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} a_i \} = \\
 & = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \delta_{i\alpha} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} \delta_{i\beta} \overleftrightarrow{a_{\beta} a_{\alpha}} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} a_i
 \end{aligned}$$

6*



Stany Focka-Darwina

są stanami własnymi

oscylatora w zewnętrznym polu magnetycznym.

a) Hamiltonian: $\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 |\vec{r}|^2$

Cechowanie symetryczne:

$$\vec{B} = (0, 0, B), \quad \vec{r} = (x, y, 0)$$

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} = \frac{1}{2} (-By, Bx, 0)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left[\hat{\vec{p}}^2 - 2 \frac{e}{c} \vec{p} \cdot \vec{A} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \vec{A}^2 \right] + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 |\vec{r}|^2,$$

gdzie $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i} (\partial_x, \partial_y, 0)$, wtedy

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left[-\hbar^2 (\partial_x^2 + \partial_y^2) + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \vec{A}^2 - \frac{e\hbar}{ic} (-By \partial_x + Bx \partial_y) \right] + \frac{m^* \omega_0^2}{2} |\vec{r}|^2 =$$

$$= \frac{1}{2m^*} \left[\hat{\vec{p}}^2 + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \vec{A}^2 - \frac{e}{c} \vec{B} \cdot \vec{L} \right] + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 |\vec{r}|^2 =$$

operator momentu pędu

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m^*} - \frac{eB}{2m^*} L_z + \left[\frac{e^2 B^2}{8m^* c^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 \right] |\vec{r}|^2$$

b) i c) Wprowadzamy nowe zmienne

$$\begin{cases} z = x + iy \\ z^* = x - iy \\ \partial_z = \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y) \\ \partial_{z^*} = \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = \frac{z + z^*}{2} \\ y = \frac{z - z^*}{2i} \\ \partial_x = \partial_z + \partial_{z^*} \\ \partial_y = i(\partial_z - \partial_{z^*}) \end{cases}$$

Relacje komutacyjne:

$$[\partial_z, z] f(z) = \partial_z(z f) - z \partial_z f = f + z \partial_z f - z \partial_z f = f(z)$$

$$\Rightarrow [\partial_z, z] = 1$$

$$[\partial_z, z^*] f(z) = \partial_z(z^* f) - z^* \partial_z f = 0 + z^* \partial_z f - z^* \partial_z f = 0$$

$$\Rightarrow [\partial_z, z^*] = 0$$

Analogicznie dostajemy: $[\partial_{z^*}, z^*] = 1,$

$$[\partial_{z^*}, z] = [\partial_z, \partial_{z^*}] = [z, z^*] = 0$$

$$|\vec{r}|^2 = x^2 + y^2 = z z^* = |z|^2$$

$$\partial_x^2 + \partial_y^2 = 4 \partial_z \partial_{z^*}$$

$$x \partial_y - y \partial_x = i(z \partial_z - z^* \partial_{z^*})$$

$$\frac{1}{2} \omega_c = \frac{eB}{2m^* c} - \text{częstość cyklotronowa}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \left(\frac{e^2 B^2}{8c^2 m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_o^2 \right) (x^2 + y^2) + \frac{i\hbar}{2} \omega_c (x \partial_y - y \partial_x) = \\
&= -\frac{2\hbar^2}{m^*} \partial_z \partial_{z^*} + \left(\frac{e^2 B^2}{8m^* c^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_o^2 \right) |z|^2 - \frac{\hbar \omega_c}{2} (z \partial_z - z^* \partial_{z^*}) = \\
&= -\frac{\hbar^2}{m^*} (\partial_z \partial_{z^*} + \partial_{z^*} \partial_z) + \frac{1}{2} m^* \left(\omega_o^2 + \frac{\omega_c^2}{4} \right) z^* z - \frac{\hbar \omega_c}{2} (z \partial_z - z^* \partial_{z^*})
\end{aligned}$$

d) Wprowadzamy charakterystyczne skale długości

$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega_c}}$ - elektronowa długość magnetyczna

$l_o = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \Omega}}$ - efektywna długość magnetyczna,

gdzie $\Omega^2 = \omega_o^2 + \frac{\omega_c^2}{4}$

Przekalujemy zmienne: $l_o^2 = \frac{\hbar}{m^* \Omega}$

$z \mapsto \tilde{z} = l_o^{-1} z$, $\partial_z \mapsto \partial_{\tilde{z}} = l_o \partial_z$

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{m^*} \frac{1}{l_o^2} (\partial_{\tilde{z}} \partial_{\tilde{z}^*} + \partial_{\tilde{z}^*} \partial_{\tilde{z}}) + \frac{1}{2} m^* \Omega^2 l_o^2 \tilde{z} \tilde{z}^* + \\
&\quad - \frac{\hbar \omega_c}{2} (\tilde{z} \partial_{\tilde{z}} - \tilde{z}^* \partial_{\tilde{z}^*}) = \\
&= -\hbar \Omega (\partial_{\tilde{z}} \partial_{\tilde{z}^*} + \partial_{\tilde{z}^*} \partial_{\tilde{z}}) + \frac{1}{2} \hbar \Omega \tilde{z} \tilde{z}^* - \frac{\hbar \omega_c}{2} (\tilde{z} \partial_{\tilde{z}} - \tilde{z}^* \partial_{\tilde{z}^*})
\end{aligned}$$

e) Wprowadzamy operatory

$$\begin{cases} u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{z}^*}{2} + 2 \partial_{\tilde{z}} \right), & u^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{z}}{2} - 2 \partial_{\tilde{z}^*} \right) \\ w = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{z}}{2} + 2 \partial_{\tilde{z}^*} \right), & w^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{z}^*}{2} - 2 \partial_{\tilde{z}} \right) \end{cases}$$

$$[u, u^\dagger] = 1, [w, w^\dagger] = 1, [u, w^\dagger] = [w, u^\dagger] = [u, w] = \dots = 0$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \left(\Omega - \frac{\omega_c}{2} \right) (u^\dagger u + u u^\dagger) + \frac{\hbar}{2} \left(\Omega + \frac{\omega_c}{2} \right) (w^\dagger w + w w^\dagger) =$$

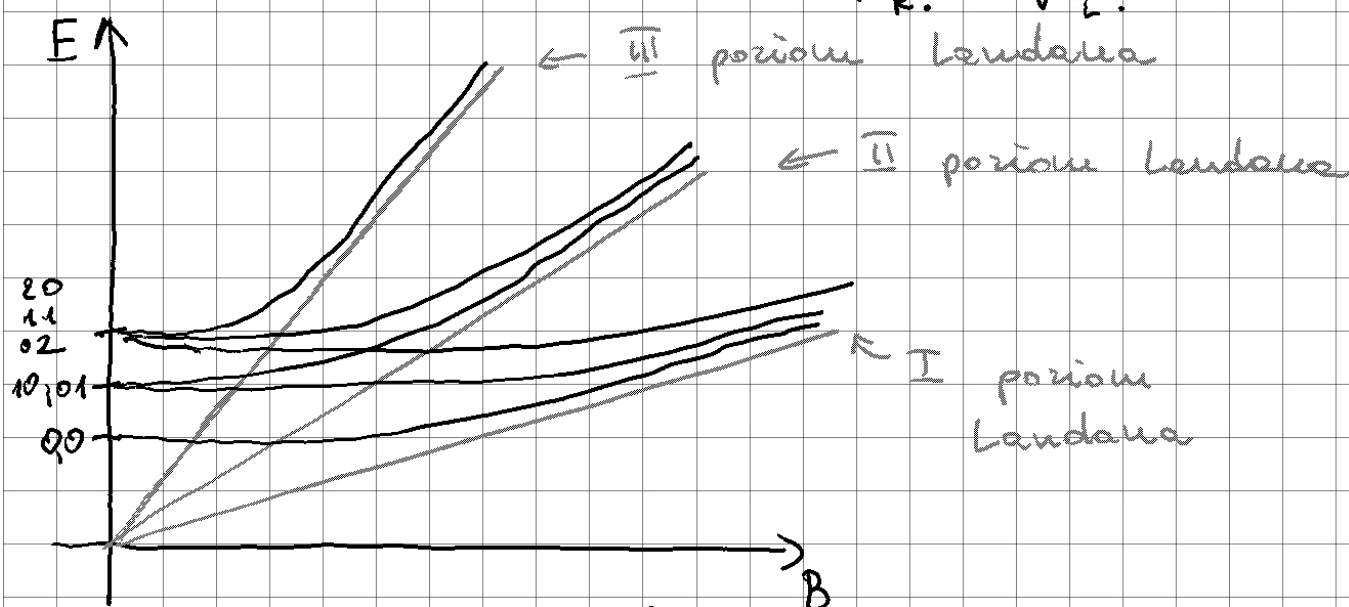
$$= \hbar \omega_- \left(\underbrace{u^\dagger u + \frac{1}{2}}_{\text{liczba}} \right) + \hbar \omega_+ \left(\underbrace{w^\dagger w + \frac{1}{2}}_{\text{liczba}} \right)$$

liczba
cząstek
rotujących
w prawo

liczba
cząstek
rotujących
w lewo

z-towa składowa operatora momentu
pędu: $L_z = \hbar \tilde{z} \partial_{\tilde{z}} - \hbar \tilde{z}^* \partial_{\tilde{z}^*} = \hbar (u^\dagger u - w^\dagger w)$

Spektrum: $|n_R, n_L\rangle = \frac{(u^\dagger)^{n_R}}{\sqrt{n_R!}} \frac{(w^\dagger)^{n_L}}{\sqrt{n_L!}} |0\rangle$



Dla $B=0$ stany focka - Darwina s_z

zdegenerowane, a dla dużych pól
magnetycznych pokrywają się z poziomami Landaua.