

Mechanika kwantowa IIB: Zadania domowe #1

Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski — 30 października 2018



Info: * - oznacza, że zadanie to jest nieobowiązkowe

Zadanie 1: Twierdzenie Blocha

Definiującą własnością doskonałych kryształów jest ich translacyjna symetria. Trójwymiarowy kryształ jest opisywany przez trzy *wektory prymitywne* sieci krystalicznej $\mathbf{a}_i$ ($i \in \{1, 2, 3\}$). Nasz układ jest wtedy niezmienniczy ze względu na translację o wektor $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ ($n_i \in \mathbb{Z}$). Konsekwencją tej symetrii jest periodyczność potencjału, który doświadczają elektrony poruszające się w takiej sieci. Obserwacja ta pozwala na sformułowanie *twierdzenia Blocha*.

Dla elektronów w doskonałym kryształzie istnieje baza funkcji falowych o własnościach:

- 1) każda z tych funkcji falowych jest funkcją własną hamiltonianu układu,
- 2) każda z tych funkcji falowych ψ jest *falą Blocha*, tzn. możemy ją zapisać w postaci

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

gdzie $u(\mathbf{r})$ jest funkcją periodyczną o tej samej periodyczności, co kryształ, tzn. $u(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u(\mathbf{r})$.

Wprowadzamy operator translacji $\hat{T}_{\mathbf{R}}$ o wektor $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ taki, że $\hat{T}_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R} + \mathbf{r})$.

(a) Dowiedz następujący lemat:

Jeżeli funkcja falowa ψ jest funkcją własną wszystkich operatorów translacji jednocześnie wtedy ψ jest falą Blocha.

(b) Korzystając z powyższego lematu udowodnij twierdzenie Blocha.



Info: W dowodzie przydatne mogą się okazać wektory prymitywne sieci odwrotnej (pędowej) $\mathbf{b}_i$ o własności $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Zdefiniowana przez nie sieć jest niezmiennicza ze względu na translację o wektor $\mathbf{K} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3$. Komórka elementarna w przestrzeni odwrotnej zdefiniowana jako komórka Wignera-Seitz (komórka otrzymywana poprzez zastosowanie procedury tesselacji Voronoja dla węzłów rozważanej sieci) jest nazywana pierwszą strefą Brillouina (1BZ). Ponadto wektory $\mathbf{b}_i$ można wyznaczyć za pomocą relacji:

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}, \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}.\end{aligned}$$

Zadanie 2: Model Kroniga-Penneya

Rozważ pojedynczy elektron poruszający się w potencjale periodycznym $V(x) = -\alpha \sum_{n=0}^{N-1} \delta(x - na)$, gdzie α mierzy głębokość studni potencjału oraz a to stała sieci. Jest to jeden z najprostszych modeli jednowymiarowej sieci krystalicznej.

- (a) Korzystając z twierdzenia Blocha i zakładając periodyczne warunki brzegowe $\psi(x + Na) = \psi(x)$ pokaż, że $K = \frac{2\pi n}{Na}$, gdzie $n \in \mathbb{Z}$.
- (b) Wypisz ogólne rozwiązanie równanie Schrödingera w danej komórce sieci i podaj odpowiednie warunki brzegowe pomiędzy komórkami.
- (c) Rozwiąż otrzymane równanie graficznie. Jakie wnioski można wyciągnąć z otrzymanego wyniku?

Zadanie 3: Działanie operatorów kreacji i anihilacji

Oblicz dla operatorów fermionowych:

- (a) $a_4^\dagger a_5^\dagger a_2 |1110000\dots\rangle$
 (b) $a_1^\dagger a_5^\dagger a_2 |1110000\dots\rangle$

Zadanie 4: Stany Focka

Unormuj stan fermionowy $|\psi\rangle = A|100\dots\rangle + B|11100\dots\rangle$, a następnie policz dla niego wartość oczekiwaną operatora całkowitej liczby cząstek $\hat{N} = \sum_i a_i^\dagger a_i$.

Zadanie 5: Ważne komutatory

Oblicz następujące komutatory dla operatorów fermionowych:

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

Zadanie 6*: Stany Focka-Darwina

Znaleźć spektrum elektronu znajdując się w dwuwymiarowym potencjale parabolicznym w zewnętrznym polu magnetycznym skierowanym wzdłuż osi z . Stany uzyskiwane w tym przypadku to tak zwane stany Focka-Darwina. Potencjał taki może być realizowany w półprzewodnikowej kropce kwantowej zrobionej z GaAs i otoczonej $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ o profilu parabolicznym w płaszczyźnie (x, y) . Hamiltonian takiego układu jest postaci:

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

gdzie $\hat{\vec{p}}$ jest operatorem pędu elektronu, $\hat{\vec{A}}$ jest potencjałem wektorowym, m^* jest masą efektywną elektronu, a ω_0 parametrem charakteryzującym potencjał paraboliczny.

- (a) Zapisz ten hamiltonian *explicite* we współrzędnych (x, y) , wybierając przy tym cechowanie symetryczne dla potencjału wektorowego, tj. $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$, gdzie $\vec{B} = (0, 0, B)$, a $\vec{r} = (x, y, 0)$.
- (b) Przepisz uzyskany hamiltonian w zmiennych $z = x + iy$, $z^* = x - iy$, $\partial_z = \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y)$ oraz $\partial_{z^*} = \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y)$.
- (c) Oblicz komutatory $[\partial_z, z]f(z)$, $[\partial_z, z^*]f(z)$, $[\partial_{z^*}, z^*]f(z)$, $[\partial_{z^*}, z]f(z)$, $[\partial_z, \partial_{z^*}]f(z)$ oraz $[z, z^*]f(z)$.
- (d) Przeskaluj zmienne $z^{(*)} \rightarrow \tilde{z}^{(*)} = \frac{z}{l_0}$ i $\partial_{z^{(*)}} \rightarrow \partial_{\tilde{z}^{(*)}} = l_0 \partial_{z^{(*)}}$ wprowadzając charakterystyczną skalę długości

$$l_0 = \frac{\sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}}{\sqrt[4]{1 + 4\frac{\omega_0^2}{\omega_c^2}}},$$

gdzie $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ jest częstością cyklotronową. Wyraż hamiltonian w tych zmiennych.

Wskazówka: wygodnie wprowadzić jest $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}$.

- (e) Za pomocą operatorów kreujących i anihilujących elektrony rotujące w prawo:

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{z}^*}{2} + 2\partial_{\tilde{z}} \right), \quad u^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{z}}{2} - 2\partial_{\tilde{z}^*} \right)$$

oraz operatorów kreujących i anihilujących elektrony rotujące w lewo:

$$w = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{z}}{2} + 2\partial_{\tilde{z}^*} \right), \quad w^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\tilde{z}^*}{2} - 2\partial_{\tilde{z}} \right)$$

zapisz hamiltonian układu i podaj jego spektrum. Zastanów się jak wyglądałby operator z -owej składowej momentu pędu wyrażony przez operatory kreacji i anihilacji.