MECHANIKA KWANTOWA IIB SERIA II 21.11.2018

(1) Z kursu mechaniki kwantowej I wiemy, że:

$$\langle\psi|\hat{\vec{j}}(\vec{x})|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(\vec{x})\vec{\nabla}\psi(\vec{x}) - \psi(\vec{x})\vec{\nabla}\psi^*(\vec{x})\right] =$$

$$= \left\{\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right\} = \frac{1}{2m}\left[\psi^*(\vec{x})\left(\hat{\vec{p}}\,\psi(\vec{x})\right) + \psi(\vec{x})\left(\hat{\vec{p}}\,\psi(\vec{x})\right)^*\right] =$$

$$= \frac{1}{2m}\left[\langle\psi|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{\vec{p}}|\psi\rangle + \langle\vec{x}|\psi\rangle\underbrace{\langle\vec{x}|\hat{\vec{p}}|\psi\rangle^*}_{=\langle\psi|\hat{\vec{p}}^+|\vec{x}\rangle}\right] =$$

$$= \langle\psi|\frac{1}{2m}\left(|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}^+|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\right)|\psi\rangle,$$

stąd $\hat{\vec{j}}(\vec{x}) = \frac{1}{2m}\left(|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}^+|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\right)$

w bazie $\{|\nu\rangle\}$ mamy:

$$\hat{\vec{j}}_{II}(\vec{x}) = \sum_{\nu,\nu'}\langle\nu|\hat{\vec{j}}(\vec{x})|\nu'\rangle a^+_\nu a_{\nu'} =$$

operator w II kwantyzacji

$$= \frac{1}{2m}\sum_{\nu,\nu'}\langle\nu|\left(|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}^+|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\right)|\nu'\rangle a^+_\nu a_{\nu'}$$

(2) Stany własne w nieskończonej studni potencjalnej: $\phi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$

Energie własne: $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 = E_1 n^2$,

gdzie $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$

(a) Hamiltonian w formie $\widehat{\text{II}}$ kwantyzacji:

Definiujemy operator pola: $\hat{\psi}_\sigma^+(x)=\sum_n \phi_n^*(x)\, a_{n\sigma}^+$,

wtedy

$$\hat{H}_{\text{II}}=\sum_\sigma \int_0^L dx\, \underbrace{\left(\sum_n \phi_n^*(x)\, a_{n\sigma}^+\right)}_{\hat{\psi}_\sigma^+(x)} \hat{H} \underbrace{\left(\sum_m \phi_m(x)\, a_{m\sigma}\right)}_{\hat{\psi}_\sigma(x)} =$$

$$= \sum_\sigma \sum_{nm} \int_0^L dx\, \phi_n^*(x)\, \underbrace{\hat{H}\phi_m(x)}_{E_m\phi_m(x)}\, a_{n\sigma}^+ a_{m\sigma} =$$

$E_m\phi_m(x)$ – z równania Schrödingera

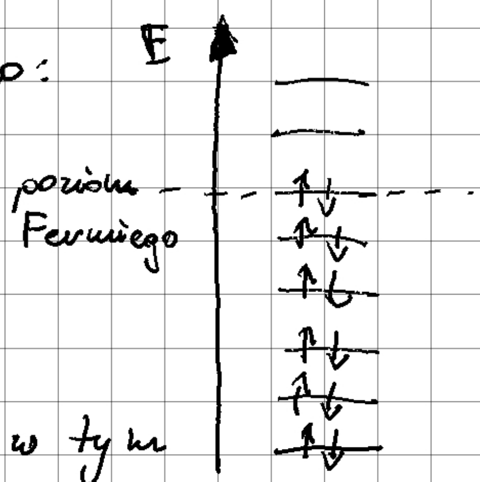
$$= \sum_\sigma \sum_{nm} E_m \underbrace{\int_0^L dx\, \phi_n^*(x)\phi_m(x)}_{\delta_{nm}}\, a_{n\sigma}^+ a_{m\sigma} = \sum_{\sigma n} E_n\, a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma},$$

czyli
$$\hat{H}_{\text{II}} = \sum_{n\sigma} E_1 n^2 \underbrace{a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma}}_{\hat{n}_{n\sigma}}$$

(b) stan podstawowy dla N-cząstek:

$$|GS\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}^+ |0\rangle \qquad (N\text{-parzyste})$$

Energia stanu podstawowego:

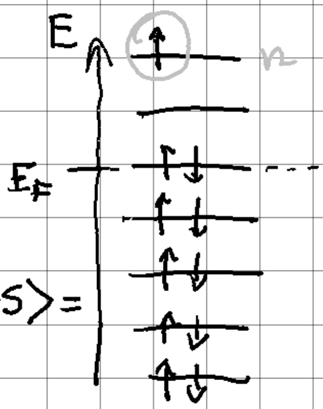


$$E_{GS} = 2\sum_{n=1}^{N/2} E_1 n^2 = 2E_1 \sum_{i=1}^{N/2} n^2 = \frac{E_1}{12} N(N+1)(N+2)$$

degeneracja spinowa

Energia Fermiego wynosi w tym przypadku: $E_F = E_1\left(\frac{N}{2}\right)^2 = \frac{E_1 N^2}{4}$

(c) Stany wzbudzone:



- wzbudzenie typu cząstkowego

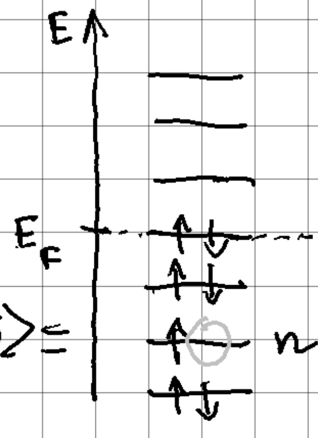
$$|ES_{par}\rangle = a^+_{n\sigma}|GS\rangle, \quad n > \frac{N}{2}$$

$$\hat{H}_{II}\, a^+_{n\sigma}|GS\rangle = \left([\hat{H}_{II}, a^+_{n\sigma}] + a^+_{n\sigma}\hat{H}_{II}\right)|GS\rangle =$$

$$= \left\{[\hat{H}_{II}, a_{n\sigma}] = E_n a^+_{n\sigma}\right\} = (E_{GS} + E_n)\, a^+_{n\sigma}|GS\rangle$$

Energia stanu $|ES_{par}\rangle$:

$$E^{(par)}_{ES} = E_1\left(\frac{(N+2)(N+1)N}{12} + n^2\right)$$



- wzbudzenie typu dziurowego

$$|ES_h\rangle = a_{n\sigma}|GS\rangle, \quad n \le \frac{N}{2}$$

$$\hat{H}_{II}\, a_{n\sigma}|GS\rangle = \left([\hat{H}_{II}, a_{n\sigma}] + a_{n\sigma}\hat{H}_{II}\right)|GS\rangle =$$

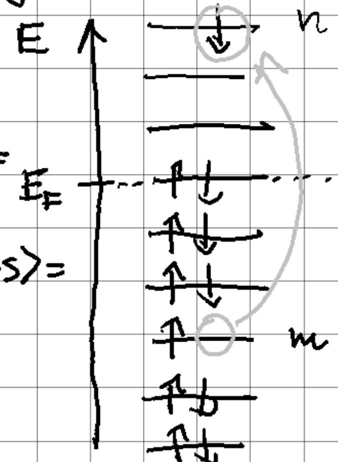
$$= \left\{ [\hat{H}_{\underline{II}}, a_{n\sigma}] = -E_n a_{n\sigma} \right\} = (E_{GS} - E_n) a_{n\sigma} |GS\rangle$$

Energia stanu $|ES_h\rangle$:

$$E_{ES}^{(h)} = E_1 \left(\frac{N(N+1)(N+2)}{12} - n^2 \right)$$

- wzbudzenie typu „ekscytonowego"

$$|ES_{ex}\rangle = a_{n\sigma}^{+} a_{m\sigma} |GS\rangle, \quad n > \frac{N}{2}, \; m \leq \frac{N}{2}$$



$$\hat{H}_{\underline{II}} a_{n\sigma}^{+} a_{m\sigma} |GS\rangle = \left([\hat{H}_{\underline{II}}, a_{n\sigma}^{+}] + a_{n\sigma}^{+} \hat{H}_{\underline{II}} \right) a_{m\sigma} |GS\rangle =$$

$$= E_n a_{n\sigma}^{+} a_{m\sigma} |GS\rangle + a_{n\sigma}^{+} \left([\hat{H}_{\underline{II}}, a_{m\sigma}] + a_{m\sigma} \hat{H}_{\underline{II}} \right) |GS\rangle =$$

$$= (E_n - E_m - E_{GS}) a_{n\sigma}^{+} a_{m\sigma} |GS\rangle,$$

czyli

$$E_{ES}^{(ex)} = E_1 \left(\frac{N(N+1)(N+2)}{12} + n^2 - m^2 \right)$$

③ Oddziaływanie: $V(x-x') = V_0 = \text{const}$

Analogicznie do poprzedniego zadania wprowadzamy operatora pola: $\hat{\psi}_\sigma(x) = \sum_n \phi_n(x) a_{n\sigma}$

Ponadto wprowadzam wygodne oznaczenie:

$$\int dx \int dx' \, \phi_n^*(x) \phi_m^*(x') \phi_l(x') \phi_k(x) \equiv \langle n m' | l' k \rangle$$

Operator energii potencjalnej w postaci $\underline{\text{II}}$ kwantyzacji:

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int dx \int dx'\, \hat{\psi}^{+}_{\sigma}(x)\, \hat{\psi}^{+}_{\sigma'}(x')\, V(x-x')\, \hat{\psi}_{\sigma'}(x')\, \hat{\psi}_{\sigma}(x) =$$

$$= \frac{V_0}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\substack{nm\\ lk}} \langle nm'|l'k\rangle\, a^{+}_{n\sigma}\, a^{+}_{m\sigma'}\, a_{l\sigma'}\, a_{k\sigma} =$$

$$= -\frac{V_0}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{nmlk} \langle nm'|l'k\rangle\, a^{+}_{n\sigma}\, \underbrace{a^{+}_{m\sigma'}\, a_{k\sigma}}_{\delta_{mk}\delta_{\sigma\sigma'} - a_{k\sigma}a^{+}_{m\sigma'}}\, a_{l\sigma'} =$$

$$= \underbrace{-\frac{V_0}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{nmlk} \langle nm'|l'k\rangle\, \delta_{mk}\delta_{\sigma\sigma'}\, a^{+}_{n\sigma}\, a_{l\sigma'}}_{\hat{V}_1} +$$

$$+ \underbrace{\frac{V_0}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{nmlk} \langle nm'|l'k\rangle\, a^{+}_{n\sigma}\, a_{k\sigma}\, a^{+}_{m\sigma'}\, a_{l\sigma'}}_{\hat{V}_2}$$

$$\hat{V}_1 = -\frac{V_0}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{nmlk} \langle nm'|l'k\rangle\, \delta_{mk}\delta_{\sigma\sigma'}\, a^{+}_{n\sigma}\, a_{l\sigma'} =$$

$$= -\frac{V_0}{2}\sum_{\sigma}\sum_{nml} \underbrace{\langle nm'|l'm\rangle}_{=\,\delta_{nm}\delta_{ml}}\, a^{+}_{n\sigma}\, a_{l\sigma'} = -\frac{V_0}{2}\sum_{n\sigma}\hat{n}_{n\sigma}$$

$$\hat{V}_2 = \frac{V_0}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{nmkl} \underbrace{\langle nm'|l'k\rangle}_{=\,\delta_{nk}\delta_{ml}}\, a^{+}_{n\sigma}\, a_{k\sigma}\, a^{+}_{m\sigma'}\, a_{l\sigma'} =$$

$$= \frac{V_0}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{nm} \hat{n}_{n\sigma}\, \hat{n}_{m\sigma'}$$

zatem

$$\hat{V} = -\frac{V_0}{2}\sum_{n\sigma} \underbrace{a^{+}_{n\sigma} a_{n\sigma}}_{\hat{n}_{n\sigma}} + \frac{V_0}{2}\sum_{nm}\sum_{\sigma\sigma'} \hat{n}_{n\sigma}\hat{n}_{m\sigma'} \, ,$$

czyli $$\hat{H}_{\mathrm{I}} = \sum_{\sigma, n}\left(E_1 n^2 - \frac{V_0}{2}\right)\hat{n}_{n\sigma} + \frac{V_0}{2}\sum_{\sigma,\sigma'}\sum_{n,m} \hat{n}_{n\sigma}\hat{n}_{m\sigma'} \, ,$$

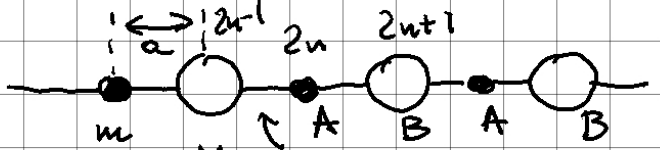
ponieważ $|GS\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} a^{+}_{i\uparrow} a^{+}_{i\downarrow}|0\rangle$, więc

$$E_{GS} = 2\left[\sum_{n=1}^{N/2}\left(E_1 n^2 - \frac{V_0}{2}\right) - \sum_{n\neq m}^{N/2} V_0\right] =$$

suma po parach cząstek

$$= \frac{1}{12}N\left[E_1(N^2+3N+2) - 6V_0\right] - \frac{V_0}{4}(N-1)N$$

4



λ - stała sprężystości

Relację dyspersji możemy w tym przypadku posługując się równaniami klasycznymi:

$$\begin{cases} m\ddot{u}_{2n} = -\lambda\left(2u_{2n} - u_{2n-1} - u_{2n+1}\right) \\ M\ddot{u}_{2n+1} = -\lambda\left(2u_{2n+1} - u_{2n} - u_{2n+2}\right) \end{cases}$$

Postulujemy rozwiązanie w postaci:

$$u_{2n} = A\exp(-i\omega t - 2ikna)$$
$$u_{2n+1} = B\exp(-i\omega t - 2ikna)$$

Zwróćmy uwagę, że wyrażenia te nie zmieniają się gdy $k \mapsto k + \frac{\pi}{a}$, z powodu podwojenia okresu sieci krystalicznej $(2a)$, czyli w tym przypadku:

$$k \in 1BZ \equiv \left[-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a} \right[$$

Wstawiając powyższy ansatz do równań ruchu otrzymujemy:

$$\omega^2 \begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 2, & -(e^{-2ika}+1) \\ -(1+e^{2ika}), & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

rozwiązanie powyższego równania własnego daje:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{\lambda}{mM}\left[m+M \pm \sqrt{(m-M)^2 + 4mM\cos^2(ka)} \right]$$

dla $k = \pm \frac{\pi}{2a}$ istnieje przerwa energetyczna:

$$\Delta E = \hbar(\omega_+ - \omega_-) = \hbar\sqrt{2\lambda}\left|\frac{1}{\sqrt{m}} - \frac{1}{\sqrt{M}}\right|$$

Kiedy rozważymy granicę $k \to 0$ dostaniemy, że

$$\omega_\pm(k) \underset{k \ll 1}{\simeq} \frac{\lambda}{\mu}\left(1 \pm \left(1 - \frac{1}{2}\frac{\mu}{\mathcal{M}}(ka)^2\right)\right),$$

gdzie $\underbrace{\mu}_{\text{masa zredukowana}} = \frac{mM}{m+M}$, $\mathcal{M} = m + M$,

czyli $\omega_-(k) \underset{k \ll 1}{\simeq} \sqrt{\frac{\lambda a}{2\mathcal{M}}}\, k = \underbrace{v}_{\text{prędkość dźwięku}} k \underset{k \to 0}{\longrightarrow} 0$

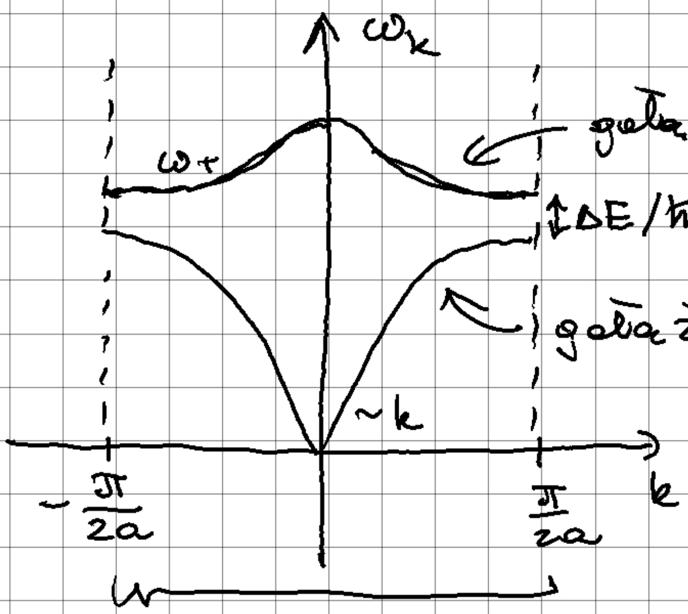
ω_- – odpowiada gałęzi akustycznej

$$\omega_+^2(k) \underset{k \ll 1}{\simeq} \frac{2\lambda}{\mu} - \frac{1}{2}\frac{\mu}{\mathcal{M}}(ka)^2 \underset{k \to 0}{\longrightarrow} \frac{2\lambda}{\mu},$$

czyli $\omega_+(k) \underset{k \to 0}{\longrightarrow} \sqrt{\frac{2\lambda}{\mu}} = \text{const}$

ω_+ – odpowiada gałęzi optycznej

$$\omega_-\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \sqrt{\frac{2\lambda}{M}}, \quad \omega_+\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \sqrt{\frac{2\lambda}{m}}$$



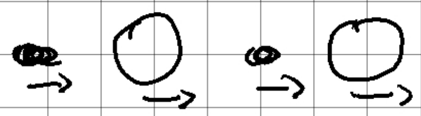
1BZ – I strefa Brillouina

z równania własnego możemy znaleźć także mody własne:

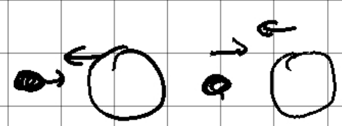
$$\left(\frac{A}{B}\right)_{\pm} = \frac{\cos(ka)}{1+\frac{M}{2\lambda}\omega_{\pm}^2(k)} = \frac{1-\frac{m}{2\lambda}\omega_{\pm}^2(k)}{\cos(ka)}$$

dla $k=0$:

$\left(\frac{A}{B}\right)_{-} = 1$ – drganie w fazie



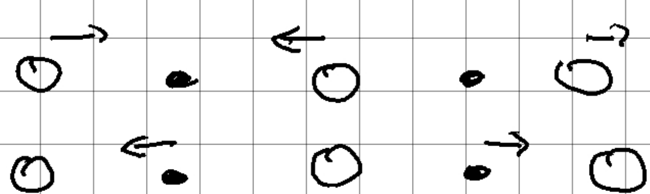
$\left(\frac{A}{B}\right)_{+} = -\frac{m}{M}$ – drgania w przeciwfazie



dla $k=\frac{\pi}{2a}$

$\left(\frac{A}{B}\right)_{-} = 0$

$\left(\frac{B}{A}\right)_{-} = 0$



Uwaga dotycząca kwantowania drgań w przypadku fononów akustycznych i optycznych.

W tym przypadku kwantując drgania musimy wprowadzić wektor polaryzacji $\vec{e}_{\pm}(k)$ taki, że

$$\begin{pmatrix} 2 & -\left(1+e^{-2ika}\right) \\ -\left(1+e^{2ika}\right) & 2 \end{pmatrix}\vec{e}_{\pm}(k) = \frac{\omega_{\pm}^2}{\lambda}\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}\vec{e}_{\pm}(k),$$

wtedy ogólne rozwiązanie można wyrazić przy pomocy operatorów kreacji i anihilacji:

$$\begin{pmatrix} u_{2n}(t) \\ u_{2n+1}(t) \end{pmatrix} = \sum_{k\in 1BZ}\sum_{s=\pm}\sqrt{\frac{\hbar}{2N\omega_s(k)}}\left[a_{ks}e_s(k)e^{i(\omega_s t+2kna)} + a_{ks}^{+}e_s^{*}(k)e^{-i(\omega_s t+2kna)}\right],$$

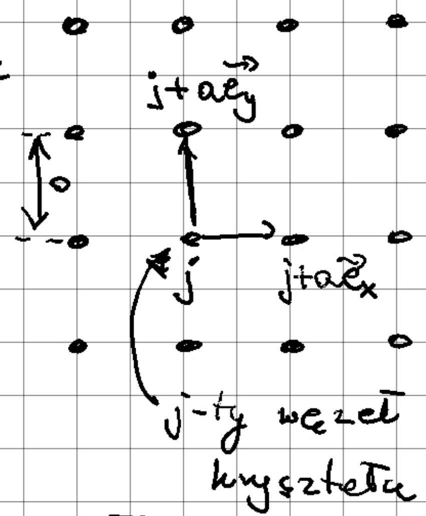
przy czym $[a_{ks}, a_{k's'}^{+}] = \delta_{kk'}\delta_{ss'}$

$$[a_{ks}, a_{k's'}] = 0$$

i ostatecznie postępując tak jak dla pola EM dostajemy: $\hat{H} = \sum_{k\in 1BZ}\sum_{s=\pm}\hbar\omega_s(k)\left(a_{ks}^{+}a_{ks}+\frac{1}{2}\right)$

(5) $\hat{H} = \sum_{j} \frac{p_j^2}{2m} + \sum_{j} \frac{m\omega_0^2}{2}\left(\phi_j - \phi_{j+\vec{a}}\right)$

Wykonujemy transformację Fouriera:



$$\begin{cases} \phi_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_j}\, \phi_{\vec{q}} \\ p_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_j}\, p_{\vec{q}}\, , \end{cases}$$

gdzie $\vec{R}_j$ – położenie j-tego węzła

$\left(\vec{R}_j = a\left(n_x^{(j)}, n_y^{(j)}, n_z^{(j)}\right)\right)$

- $\sum_j \frac{p_j^2}{2m} = \frac{1}{2mN} \sum_{j\vec{q},\vec{q}'} e^{i(\vec{q}+\vec{q}')\cdot\vec{R}_j}\, p_{\vec{q}}\, p_{\vec{q}'} =$

$$= \frac{1}{2mN} \sum_{\vec{q},\vec{q}'} p_{\vec{q}}\, p_{\vec{q}'}\, N\, \delta_{\vec{q}+\vec{q}',0} = \frac{1}{2m} \sum_{\vec{q}} p_{\vec{q}}\, p_{-\vec{q}}$$

- $\sum_{j\vec{a}} \frac{m\omega_0^2}{2}\left(\phi_j - \phi_{j+\vec{a}}\right)^2 = \frac{m\omega_0^2}{2} \sum_{j\vec{a}} \left(\phi_j^2 - \phi_j\phi_{j+\vec{a}} - \phi_{j+\vec{a}}\phi_j + \phi_{j+\vec{a}}^2\right) =$

$$= \frac{m\omega_0^2}{2} \sum_{j\vec{a}} \left(2\phi_j^2 - \phi_j\phi_{j+\vec{a}} - \phi_{j+\vec{a}}\phi_j\right) =$$

periodyczności kryształu

$$= \frac{m\omega_0^2}{2} \sum_{j\vec{a}} \left(2\phi_j^2 - \phi_j\phi_{j+\vec{a}} - \phi_j\phi_{j-\vec{a}}\right) =$$

$$= \frac{m\omega_0^2}{2N}\sum_{j\vec a}\sum_{\vec q\vec q'}\Big[2e^{i\vec q\cdot\vec R_j}e^{i\vec q'\cdot\vec R_j}\phi_{\vec q}\phi_{\vec q'} - e^{i\vec q\cdot\vec R_j}e^{i\vec q'\cdot(\vec R_j+\vec a)}\phi_{\vec q}\phi^{+}_{\vec q'}$$

$$- e^{i\vec q\cdot\vec R_j}e^{i\vec q'\cdot(\vec R_j-\vec a)}\phi_{\vec q}\phi_{\vec q'}\Big] =$$

$$= \frac{m\omega_0^2}{2N}\sum_{j\vec a}\sum_{\vec q,\vec q'} e^{i(\vec q+\vec q')\cdot\vec R_j}\phi_{\vec q}\phi_{\vec q'}\Big[2-\big(e^{i\vec q'\cdot\vec a}+e^{-i\vec q'\cdot\vec a}\big)\Big] =$$

$$\left\{ 2-\big(e^{i\vec q'\cdot\vec a}+e^{-i\vec q'\cdot\vec a}\big) = 2\big(1-\cos(\vec q'\cdot\vec a)\big) = 2\Big(1-\cos^2\Big(\frac{\vec q'\cdot\vec a}{2}\Big)+\sin^2\Big(\frac{\vec q'\cdot\vec a}{2}\Big)\Big) = 4\sin^2\Big(\frac{\vec q'\cdot\vec a}{2}\Big) \right\}$$

$$= \frac{m\omega_0^2}{2}\sum_{\vec q,\vec q'}\sum_{\vec a}\delta_{\vec q+\vec q',0}\,\phi_{\vec q}\phi_{\vec q'}\,4\sin^2\Big(\frac{\vec q'\cdot\vec a}{2}\Big) =$$

suma po j

$$= \frac{m}{2}\sum_{\vec q}\omega_{\vec q}^2\,\phi_{\vec q}\phi_{-\vec q}\,,\quad \text{gdzie}$$

$$\omega_{\vec q}^2 = 4\omega_0^2\Big[\sin^2\Big(\frac{q_x a}{2}\Big)+\sin^2\Big(\frac{q_y a}{2}\Big)+\sin^2\Big(\frac{q_z a}{2}\Big)\Big],$$

przy czym $\vec q = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$, $n_i \in \mathbb{Z}$.

Zatem hamiltonian ma postać:

$$\hat H = \sum_{\vec q}\Big[\frac{1}{2m}p_{\vec q}p_{-\vec q} + \frac{m\omega_{\vec q}^2}{2}\phi_{\vec q}\phi_{-\vec q}\Big]$$

Wprowadzamy operatory kreacji i anihilacji:

$$\phi_{\vec q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\vec q}}}\big(a_{\vec q}+a^{+}_{-\vec q}\big)\,,\quad p_{\vec q} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_{\vec q}}{2}}\big(a_{\vec q}-a^{+}_{-\vec q}\big)$$

Analogicznie jak na wykładzie i ćwiczeniach:

$$[a_{\vec{q}}, a^+_{\vec{q}'}] = \delta_{\vec{q}\vec{q}'},$$

wtedy:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{q}} \Big[\frac{1}{2m}\frac{m\hbar}{2}\sqrt{\omega_{\vec{q}}\omega_{-\vec{q}}}\,(-1)\big(a_{\vec{q}}a_{-\vec{q}} - a^+_{-\vec{q}}a_{-\vec{q}} - a_{\vec{q}}a^+_{\vec{q}} +$$

$$+ a^+_{-\vec{q}}a^+_{\vec{q}}\big) + \frac{m\omega^2_{\vec{q}}}{2}\frac{\hbar}{2m}\frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{q}}\omega_{-\vec{q}}}}\big(a_{\vec{q}}a_{-\vec{q}} + a_{\vec{q}}a^+_{\vec{q}} + a^+_{-\vec{q}}a_{-\vec{q}} +$$

$$+ a^+_{-\vec{q}}a^+_{\vec{q}}\big)\Big] = \{\omega_{\vec{q}} = \omega_{-\vec{q}}\} =$$

$$= \sum_{\vec{q}} \frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{2}\big(a^+_{-\vec{q}}a_{-\vec{q}} + \underbrace{a_{\vec{q}}a^+_{\vec{q}}}_{1 + a^+_{\vec{q}}a_{\vec{q}}}\big) = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}}\big(\underbrace{a^+_{\vec{q}}a_{\vec{q}}}_{\hat{n}_{\vec{q}}} + \tfrac{1}{2}\big)$$

Energia stanu podstawowego: $\forall_{\vec{q}}\ \hat{n}_{\vec{q}} = 0$

$$E_0 = \sum_{\vec{q}} \frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{2} \xrightarrow[V\to\infty]{} V\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{2} =$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq_x \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq_y \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq_z\, \frac{\hbar}{2}\, 2\omega_0 \sqrt{\sin^2\left(\frac{q_x a}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{q_y a}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{q_z a}{2}\right)} =$$

$$= \left\{ u_i = \frac{q_i a}{2},\ i = x,y,z \right\} = \underbrace{\frac{V}{a^3}}_{N}\frac{\hbar\omega_0}{\pi^3}\underbrace{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} du_x \int_{-\pi/2}^{\pi/2} du_y \int_{-\pi/2}^{\pi/2} du_z \sqrt{\sum_{i=x,y,z}\sin^2 u_i}}_{I},$$

I – stała liczbowa ($I \simeq 37$)

czyli

$$E_0 = \frac{I}{\pi^2} N\hbar\omega_0 \simeq 1{,}19\, N\hbar\omega_0$$

6 (a) $[S^+, S^-] = a^+ b b^+ a - b^+ a a^+ b =$

$$= a^+ a \underbrace{b b^+}_{b^+b+1} - \underbrace{a a^+}_{a^+a+1} b^+ b = a^+ a (b^+ b + 1) - (a^+ a + 1) b^+ b =$$

$$= a^+ a - b^+ b = 2 \underline{\underline{S^z}} \qquad \text{ok!}$$

(b) Niech $n_a = a^+ a$ i $n_b = b^+ b$

Korzystając ze związku $\vec{S}^2 = (S^z)^2 + \frac{1}{2}(S^+ S^- + S^- S^+)$

mamy:

- $\vec{S}^2 |S, m\rangle = \left[(S^z)^2 + \frac{1}{2}(S^+ S^- + S^- S^+) \right] |S, m\rangle =$

$$= \left[\frac{1}{4}(n_a - n_b)^2 + \frac{1}{2}(a^+ b b^+ a + b^+ a a^+ b) \right] |S, m\rangle =$$

$$= \left[\frac{1}{4}(n_a - n_b)^2 + \frac{1}{2}\left(a^+ a b^+ b + a^+ a + a^+ a b^+ b + b^+ b\right) \right] |S, m\rangle =$$

$$= \left[\frac{1}{4}(n_a - n_b)^2 + n_a n_b + \frac{1}{2}(n_a + n_b) \right] |S, m\rangle =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{z definicji stanu } |S, m\rangle: \\ n_a \to S + m \;, \quad n_b \to S - m \end{array} \right\} =$$

$$= \left[\frac{1}{4}(4m^2) + (S+m)(S-m) + S \right] |S, m\rangle = S(S+1) |S, m\rangle$$

ok!

- $S^z |S, m\rangle = \frac{1}{2}(n_a - n_b) |S, m\rangle = m |S, m\rangle$

7 (a) Relacje komutacyjne

$$\frac{1}{2S}\left[\hat{S}^+,\hat{S}^-\right] = \left(1-\frac{a^+a}{2S}\right)^{1/2}\underbrace{a\,a^+}_{1+a^+a}\left(1-\frac{a^+a}{2S}\right)^{1/2} +$$

$$-a^+\left(1-\frac{a^+a}{2S}\right)a =$$

$$= \left(1-\frac{a^+a}{2S}\right) + a^+a\left(1-\frac{a^+a}{2S}\right) - a^+a + \frac{a^+a^+aa}{2S} =$$

$$= 1-\frac{a^+a}{S} \Rightarrow \left[\hat{S}^+,\hat{S}^-\right] = 2\hat{S}^z, \text{ bo } \hat{S}^z = S - a^+a$$

ok!

Między różnymi węzłami dostajemy po prostu:
$$\left[\hat{S}^+_m,\hat{S}^-_n\right] = 2\hat{S}^z_n\,\delta_{nm}$$

Gdy $S \gg 1$, wtedy

$$\hat{S}^z_m = S - a^+_m a_m$$
$$\hat{S}^-_m = \sqrt{2S}\,a^+_m\left(1-\frac{a^+_m a_m}{2S}\right)^{1/2} = \sqrt{2S}\,a^+_m + \mathcal{O}(S^{-1/2})$$
$$\hat{S}^+_m = \sqrt{2S}\left(1-\frac{a^+_m a_m}{2S}\right)^{1/2}a_m = \sqrt{2S}\,a_m + \mathcal{O}(S^{1/2})$$

Komentarz

Stosowane tu przybliżenie ma charakter przybliżenia semiklasycznego, aby się o tym przekonać przyjmijmy zasadnie nieoznaczoności w tym przypadku:

$$\Delta \hat{S}^i \Delta \hat{S}^j \leq |\langle [\hat{S}^i, \hat{S}^j] \rangle| = \varepsilon_{ijk} |\langle \hat{S}^k \rangle|$$

Wykorzystując fakt, że $|\langle \hat{S}^k \rangle| \leq S$ dostajemy, że $\frac{\Delta \hat{S}^i}{S} \cdot \frac{\Delta \hat{S}^j}{S} \leq \frac{S}{S^2} \xrightarrow[S \gg 1]{} 0$, co oznacza, że w tej granicy kwantowe fluktuacje spinu są mniej istotne.

Wykorzystując powyższy wynik możemy zapisać hamiltonian Heisenberga przy pomocy operatorów kreacji i anihilacji:

$$\hat{H} = -J \sum_m \left\{ \hat{S}^z_m \hat{S}^z_{m+1} + \frac{1}{2}\left(\hat{S}^+_m \hat{S}^-_{m+1} + \hat{S}^-_m \hat{S}^+_{m+1} \right) \right\} =$$

$$\simeq -JNS^2 + JS \sum_m \left[a^+_m a_m + a^+_{m+1} a_{m+1} - \left(a^+_m a_{m+1} + h.c. \right) \right] =$$

$$= -JNS^2 + JS \sum_m \left(a^+_{m+1} - a^+_m \right)\left(a_{m+1} - a_m \right).$$

(b) Stosując warunki Borna-von Kármána dla spinów w sieci mamy $\hat{S}_{m+N} = \hat{S}_m$, czyli $a_{m+N} = a_m$ pozwala nam na wykonanie transformacji Fouriera:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^{N} e^{ikm} a_m \,, \quad a_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in 1BZ} e^{-ikm} a_k \,,$$

gdzie przyjęto, że odległość między węzłami sieci wynosi 1.

Operatory w przestrzeni odwrotnej spełniają relacje komutacyjne: $[a_k, a^+_{k'}] = \delta_{kk'}$

$$\sum_m a^+_m a_m = \sum_m \sum_{kk'} \frac{1}{N} e^{+i(k-k')m} a^+_k a_{k'} = \sum_k a^+_k a_k$$

$$\sum_m a^+_{m+1} a_{m+1} = \sum_m \sum_{kk'} \frac{1}{N} e^{i(k-k')(m+1)} a^+_k a_{k'} = \sum_k a^+_k a_k$$

$$\sum_m a^+_{m+1} a_m = \sum_m \sum_{kk'} \frac{1}{N} e^{ik} e^{i(k-k')m} a^+_k a_{k'} = \sum_k e^{ik} a^+_k a_k$$

$$\sum_m a^+_m a_{m+1} = \sum_m \sum_{k,k'} \frac{1}{N} e^{-ik} e^{i(k-k')m} a^+_k a_{k'} = \sum_k e^{-ik} a^+_k a_k$$

czyli $\hat{H} = -JNS^2 + \sum_{k \in 1BZ} \omega_k a^+_k a_k$,

gdzie $\omega_k = 2JS\left(1 - \frac{e^{ik} + e^{-ik}}{2}\right) =$

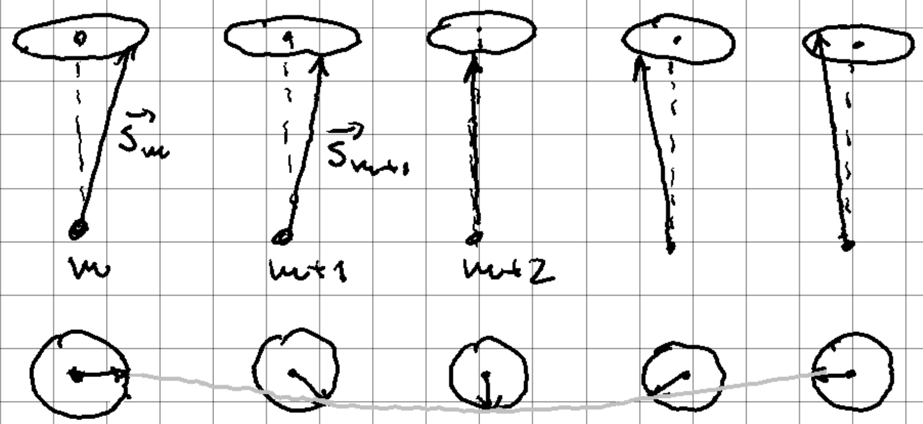
$$= 2JS(1 - \cos k) = 4JS \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)$$

Energia stanu podstawowego wynosi: $E_0 = -JNS^2$

Dla małych k relacja dyspersji magnonów ma postać:

$$\omega_k = 4JS\sin^2\left(\frac{k}{2}\right) \xrightarrow[k\ll 1]{} JSk^2 \xrightarrow[k\to 0]{} 0,$$

czyli magnony są bezmasowymi wzbudzeniami kolektywnymi w ferromagnetyku.



Konfiguracja spinów dla fali spinowej w ferromagnetykach.

Magnony są kwantami fal spinowych, których schematyczne przedstawienie narysowane jest powyżej. Przy uwzględnieniu wyrazów rzędu $1/S$ dostalibyśmy oddziaływanie między magnonami w Hamiltonianie.

(8*) (a) $\hat{H}_{el-ph} = \lambda \int dx \, \frac{du(x)}{dx} \hat{\psi}^+(x)\hat{\psi}(x)$

$$\lambda \frac{du}{dx} \underset{\uparrow}{=} -\lambda 2k_F u_0 \sin(2k_F x) = \underbrace{i\lambda k_F u_0}_{\Delta}\left[e^{i2k_F x} - e^{-i2k_F x}\right]$$

$u(x) = u_0 \cos(2k_F x)$

$$\hat{H}_{el-ph} = \Delta \int dx \left(e^{i2k_F x} - e^{-i2k_F x}\right) \frac{1}{L} \sum_k c_k^+ e^{-ikx} \sum_{k'} e^{ik'x} c_{k'} =$$

$$= \frac{\Delta}{L} \int dx \sum_{kk'} \left[e^{i(2k_F - k + k')x} - e^{i(k' - 2k_F - k)x}\right] c_k^+ c_{k'} =$$

$$= \Delta \sum_{kk'} \left[\delta_{2k_F - k + k', 0} - \delta_{k' - 2k_F - k}\right] c_k^+ c_{k'} =$$

$$= \Delta \sum_k \left(c_k^+ c_{k-2k_F} - c_k^+ c_{k+2k_F}\right) = \left\{\begin{matrix} \text{w drugim wyrazie} \\ k \to k - 2k_F \end{matrix}\right\}$$

$$= \sum_k \left(\Delta c_k^+ c_{k-2k_F} + \Delta^* c_{k-2k_F}^+ c_k\right)$$

Wtedy macierz elektronowej części hamiltonianu ma postać:

$$\hat{H}_{el} = \sum_k \left(c_k^+, c_{k-2k_F}^+\right) \underbrace{\begin{pmatrix} \hbar v_F(k-k_F), & \Delta \\ \Delta^*, & -\hbar v_F(k-k_F) \end{pmatrix}}_{\hat{\mathcal{H}}_k} \begin{pmatrix} c_k \\ c_{k-2k_F} \end{pmatrix}$$

(b) Diagonalizując macierz hamiltonianu

$$\det\left(\hat{\mathcal{H}}_k - \varepsilon \mathbb{1}\right) = 0$$

otrzymujemy:

$$\varepsilon_\pm(k) = \pm\sqrt{\hbar^2 v_F^2 (k-k_F)^2 + |\Delta|^2} \, ,$$

czyli przerwa energetyczna dla $k=k_F$ mamy:

$$\Delta\varepsilon(k=k_F) = \varepsilon_+(k_F) - \varepsilon_-(k_F) = 2|\Delta|$$

Dla połówkowego obsadzenia energia stanu podstawowego zmniejsza się o

$$\delta E_{el} = E_{el}(\Delta) - E_{el}(\Delta=0) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{deg.} \\ \text{spinowa}}}{2} \sum \left(\varepsilon_-(k,\Delta) - \varepsilon_-(k,\Delta=0)\right) =$$

$$= -2 \sum_{|k-k_F|<E_F/\hbar v_F} \left(\sqrt{\hbar^2 v_F^2 (k-k_F)^2 + |\Delta|^2} - \hbar v_F |k-k_F|\right)$$

Wykonując granicę termodynamiczną ($L \to \infty$) oraz przesuwając zmienną całkowania $k \to k + k_F$ otrzymujemy:

$$\delta E_{el} = -\frac{L}{\pi} \int_{-E_F/\hbar v_F}^{E_F/\hbar v_F} dk \left(\sqrt{\hbar^2 v_F^2 k^2 + |\Delta|^2} - \hbar v_F |k|\right) =$$

$$= \left\{ \text{parzystość wyrażenia podcałkowego} \right\} =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{zamiana} \\ \text{zmiennych} \\ x = \hbar v_F |k| / |\Delta| \end{array} \right\} = -\frac{2L}{\pi} \frac{|\Delta|^2}{\hbar v_F} \int_0^{E_F/|\Delta|} dx \left(\sqrt{x^2+1} - x \right)$$

$$\int_0^a dx \left(\sqrt{x^2+1} - x \right) = \frac{1}{2}\left[a\left(-a + \sqrt{1+a^2}\right) + \operatorname{arcsinh}(a) \right] \simeq$$

$$\underset{a \gg 1}{\simeq} \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + \ln(2a) \right), \quad \text{bo} \quad \operatorname{arcsinh}(a) = \ln\left(a + \sqrt{a^2+1}\right) \simeq$$

$$\underset{a \gg 1}{\simeq} \ln(2a)$$

$$\sqrt{1+a^2} \underset{a \gg 1}{\simeq} a + \frac{1}{2a} + \ldots$$

zatem dostajemy

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

(c) Zajmiemy się teraz energią sprężystą sieci krystalicznej

$$E_{latt} = \frac{K}{2} (2k_F)^2 u_0^2 \int_0^L dx \, \sin^2(2k_F x) = \left\{ \begin{array}{l} \text{zamiana} \\ \text{zmiennych} \\ y = 2k_F x \end{array} \right\}$$

$$= \frac{K}{2} (2k_F)^2 u_0^2 \frac{1}{2k_F} \int_0^{2k_F L} dy \, \sin^2 y = \left\{ \begin{array}{l} \text{dla połówkowego} \\ \text{obsadzenia} \\ L k_F = \pi \end{array} \right\} =$$

$$= \frac{K}{2} (2k_F)^2 u_0^2 \frac{1}{\cancel{2k_F}} \frac{\cancel{2k_F} L}{2\pi} \underbrace{\int_0^{2\pi} \sin^2 y \, dy}_{\pi} = \frac{K}{2} (2k_F)^2 u_0^2 \frac{L}{2}$$

$|\Delta|^2 = \lambda^2 k_F^2 u_0^2$, czyli $\frac{\delta E_{latt}}{L} = \frac{k_2 |\Delta|^2}{\lambda^2}$

Zatem gęstość energii całkowitej w tym przypadku wynosi:

$$\frac{\delta E}{L} = \frac{\delta E_{el}}{L} + \frac{\delta E_{latt}}{L} = |\Delta|^2 \left\{ -\frac{1}{\pi \hbar v_F} \left[\ln\left(\frac{2E_F}{|\Delta|}\right) + \frac{1}{2} \right] + \frac{k_2}{\lambda^2} \right\}$$

minimalizujemy gęstość energii ze względu na $|\Delta|$:

$$2|\Delta| \left\{ -\frac{1}{\hbar v_F \pi} \ln\left(\frac{2E_F}{|\Delta|}\right) + \frac{k_2}{\lambda^2} \right\} \stackrel{!}{=} 0$$

stąd dostajemy wartość przerwy:

$$|\Delta_0| = 2E_F \exp\left(-\frac{\pi \hbar v_F k_2}{\lambda^2}\right)$$

odpowiada temu zmiana energii:

$$\frac{\delta E_0}{L} = \frac{\delta E(\Delta = \Delta_0)}{L} = -\frac{|\Delta_0|^2}{2\pi \hbar v_F}$$

W jednym wymiarze połowicznie obsadzenie jest niestabilne i sieć deformuje się w taki sposób, aby wytworzyć przerwę energetyczną, która sygnalizuje przem.- metal-izolator.