Wstęp do kwantowej teorii transportu elektronowego

Sylwia Gołąb, Paweł Rzońca

6 listopada 2015

Spis treści

1 Metody opisu klasycznej dynamiki cząstek

W rozważaniach opuszczamy mechanikę Lagrangowską.

1.1 Mechanika newtonowska

Siła Lorenza

$$\vec{F}_l(\vec{r},t) = q[\vec{E}(\vec{r},t) + \vec{v}(t) \times \vec{B}(\vec{r},t)]. \tag{1}$$

Jeżeli postać siły jest określona, to równanie ruchu możemy zapisać w postaci

$$m\frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F}_L(\vec{r},t). \tag{2}$$

Zauważmy, że w mechanice Newtonowskiej nie ma ograniczenia na postać siły $\vec{F}_L$. **Przykład - równanie Langevine'a**

$$m\frac{d^2}{dt^2}\vec{r}(t) = \vec{F}_R - \gamma\vec{v}(t) + \Gamma(t),$$

gdzie $\vec{F}_R$ to siła regularna (np. od zewnętrznego pola elektrycznego, γ to współczynnik tarcia, a $\Gamma(\vec{t})$ to siła stochastyczna. Rozwiązując równania Newtona otrzymujemy różne $\vec{r}(t)$. Oznaczmy przez $\{\vec{r}(t)\}$ - zbiór rozwiązań równania Newtona $\equiv$ PRZESTRZEŃ KONFIGURACYJNA.

RYSUNEK

$|\vec{r}(t)\rangle$ - klasyczny stan cząstki w mechanice Newtona niewystarczający ze względu na brak determinizmu.

Stan cząstki opisany w spsób (trik dodający determinizm)

$$|\vec{r}(t), \vec{v}(t)\rangle \text{ - klasyczny stan cząstki}$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\vec{r}(t) = \vec{v}(t) \\ m\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = \vec{F}(\vec{r},t) \end{cases} \quad + \text{war. początkowe (jednopunktowe)} \begin{cases} \vec{r}(t_0) = \vec{r}_0 \vec{v}(t_0) = \vec{v}_0 \end{cases}$$

Uwaga

Możemy określić $\vec{r}$ w chwili t, ale $\vec{v}$ okreśamy w otoczeniu t, bo

$$\vec{v}_0 = \vec{v}(t_0) = \frac{d}{dt}\vec{r}\bigg|_{t=t_0} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\vec{r}(t_0 + \Delta t) - \vec{r}(t_0)}{\Delta t},$$

ewentualnie

$$\vec{v}_0 = \vec{v}(t_0) = \frac{d}{dt}\vec{r}\bigg|_{t=t_0} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\vec{r}(t_0) - \vec{r}(t_0 - \Delta t)}{\Delta t}.$$

Wniosek

Trikiem Tym uzyskujemy determinizm, z wyjątkiem infinitezymalnych zmian.

1.2 Mechanika hamiltonowska

W mechanice hamiltonowskiej nie używamy pojęcia siły, ale pojęcia potencjału, co oznacza, że jest ona mniej ogólna.

formalizm kanoniczny

Funkcja Hamiltona: $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$. Kosztem straty na ogólności, zyskujemy niezależność zmiennych uogólnionych $\vec{q}$ i $\vec{p}$.

$$|\vec{q}(t), \vec{p}(t)\rangle \text{ - klasyczny stan układu.}$$

Funkcja Hamiltona przybiera wartość całkowitej energii mechanicznej układu, jeżeli siły działające na układ są potencjalne, a potencjał nie zależy od czasu.

$$H(\vec{q},\vec{p}) = \underbrace{J(\vec{q},\dot{\vec{q}}(\vec{q},\vec{p}))}_{\text{część kinetyczna}} + \underbrace{U(\vec{q})}_{\text{część potencjalna}} .$$

q, p - współrzędne i pędy uogólnione, zgodne z więzami skleronomicznymi, czyli takimi, że nie zależą jawnie od czasu.

1.2.1 Przestrzeń fazowa μ

Definicja
Przestrzenią fazowa μ układu mechanicznego nazywamy parzysto-wymiarową przestrzeń symplektyczną, której elementami są punkty fazowe o współrzędnych $(\vec{q},\vec{p})$, które reprezentują stany klasyczne układu.

$$H(\vec{q},\vec{p},t) = J(\vec{q},\dot{\vec{q}}(\vec{q},\vec{p})) + U(\vec{q},\vec{p},t)$$

$$H : \mu \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \quad \text{kl. } C^1[\mu].$$

Przykład

$$\vec{F}_L(\vec{r},t) = q[\vec{E}(\vec{r},t) + \vec{v}(t) \times \vec{B}(\vec{r},t)]$$

$$\phi(\vec{r},\vec{v},t) = q[\underbrace{V(\vec{r},t)}_{\text{pot. skalarny}} - \vec{v}(t) \cdot \underbrace{\vec{A}(\vec{r},t)}_{\text{pot. wektorowy}}].$$

Poprzez transformatę Legendre'a

$$H(\vec{r},\vec{p}) = \underbrace{\frac{1}{2m}[\vec{p} + q\vec{A}(\vec{r},t)]^2}_{\text{część kinetyczna}} + \underbrace{U(\vec{r},t)}_{\text{część potencjalna}} .$$

1.2.2 Funkcja Hamiltona w przybliżeniu minimalnego sprzężenia eletromagnetycznego

$$H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{1}{2m}[\vec{p} + q\vec{A}(\vec{r},t)] \cdot [\vec{p} + q\vec{A}(\vec{r},t)] + U(\vec{r},t) = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r},t) + \frac{q}{m}\vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r},t) + \frac{q^2}{2m}A^2(\vec{r},t) \approx$$

$$\approx |\text{linearyzacja, zakładając, że A jest małe}| \approx \underbrace{\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r},t)}_{H_0(\vec{r},\vec{p},t)} + \frac{q}{m}\vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r},t),$$

gdzie $H_0(\vec{r},\vec{p},t)$ to niezaburzona funkcja Hamiltona, a pozostały składnik jest zaburzeniem liniowym spowodowanym potencjałem wektorowym $\vec{A}$.

1.2.3 Kanoniczne równania Hamiltona

$$\begin{cases} \dot{\vec{q}}(t) = \nabla_{\vec{p}} H(\vec{q},\vec{p},t) \\ \dot{\vec{p}}(t) = -\nabla_{\vec{q}} H(\vec{q},\vec{p},t) \end{cases} + \begin{cases} \vec{q}(t_0) = \vec{q}_0 \\ \vec{p}(t_0) = \vec{p}_0 \end{cases} \tag{3}$$

$$\begin{cases} \vec{q}(t) = \vec{q}(t_0) + \int_{t_0}^{t} dt' \nabla_{\vec{p}} H(\vec{q},\vec{p},t') \\ \vec{p}(t) = \vec{p}(t_0) + \int_{t_0}^{t} dt' \nabla_{\vec{q}} H(\vec{q},\vec{p},t'). \end{cases}$$

Rozwiazanie powyższe wyznacza trajektorię fazową w przestrzni fazowej, która to jest zbiorem klasycznych stanów realizowanych przez układ w kolejnych chwilach czasu t.

Inna forma równań Hamiltona
Wprowadzamy wektor fazowy $\vec{w}(\vec{q},\vec{p})$ oraz hamiltonowskie pole wektorowe $\vec{X}_H(\vec{q},\vec{p},t)$. Wtedy

$$\frac{d}{dt}\vec{w}(\vec{q},\vec{p}) = \vec{X}_H(\vec{q},\vec{p},t) \tag{4}$$

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix}\vec{q}(t)\\ \vec{p}(t)\end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{bmatrix}}_{g}\begin{bmatrix}\nabla_{\vec{q}}H(\vec{q},\vec{p},t)\\ \nabla_{\vec{p}}H(\vec{q},\vec{p},t)\end{bmatrix}, \tag{5}$$

gdzie g to anysymetryczny tensor metryczny, który określa geomerię symplektyczną przestreni fazowej.

1.2.4 Zależność funkcji Hamitona od czasu

$H(\vec{q},\vec{p},t)$ może się zmieniać w czasie na dwa sposoby

1. $\vec{q}=\vec{q}(t),\ \vec{p}=\vec{p}(t)$,
2. t (jawnie)

$$\frac{d}{dt}H(\vec{q},\vec{p},t) = \left[\frac{d}{dt}\vec{q}(t)\right]\cdot\nabla_{\vec{q}}H(\vec{q},\vec{p},t) + \left[\frac{d}{dt}\vec{p}(t)\right]\cdot\nabla_{\vec{p}}H(\vec{q},\vec{p},t) + \partial_t H(\vec{q},\vec{p},t) =$$
$$= \nabla_{\vec{p}}H(\vec{q},\vec{p},t)\cdot\nabla_{\vec{q}}H(\vec{q},\vec{p},t) - \nabla_{\vec{q}}H(\vec{q},\vec{p},t)\cdot\nabla_{\vec{p}}H(\vec{q},\vec{p},t) + \partial_t H(\vec{q},\vec{p},t).$$

Zatem

$$\frac{d}{dt}H(\vec{q},\vec{p},t) = \partial_t H(\vec{q},\vec{p},t).$$

Stąd wynika, iż funkcja Hamiltona zmieniasię tak w czasie jak zależy od czasu.