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)

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

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

Uwaga

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

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

ewentualnie

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

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.

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