Wstęp do kwantowej teorii transportu elektronowego- ćwiczenia

Sylwia Gołąb, Paweł Rzońca

28 listopada 2015

Spis treści

1 Ćwiczenia 1.

1.1 Zadanie. Pierwsza kwantyzacja - podstawowe pojęcia

uw. Gaz doskonały to gaz elektronowy.

- Hamiltonian:

$$\underbrace{H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{p^2}{2m}}_{\text{mechanika klasyczna}} \quad \rightarrow \quad \underbrace{\hat{H}(\vec{r},\vec{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m}}_{textmechanikakwantowa} \tag{1}$$

- Reprezentacja położeniowa:

$$\hat{x} = x$$

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$$

- Zatem Hamiltonian ma postać:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \tag{2}$$

- Algebra liniowa → równanie własne:
  Ogólnie:

$$\hat{A}\vec{x} = \lambda\vec{x} \tag{3}$$

  Dla hamiltonianu:

$$\hat{H}|\ \Psi > \ = \ E|\ \Psi > \tag{4}$$

- Funkcja falowa

$$\begin{aligned} \hat{H}|\ \Psi > \ &= \ E|\ \Psi > \qquad\qquad /\cdot < x| \\ < x|\hat{H}|\Psi > \ &= \ E < x|\Psi > \end{aligned}$$

  gdzie:

$$< x|\Psi >= \Psi(x) \tag{5}$$

  to funkcja falowa. Jest ona określona jako współrzędna abstrakcyjna wektora stanu kwantowego względem ustalonej bazy (u nas - bazy położeniowej).

1.2 Zadanie. Rozwiązanie równania Schroedingera dla cząstki swobodnej

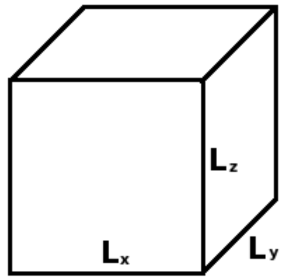
1. Wychodzimy od równania Schroedingera:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{6}$$

   czyli:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{7}$$

   Rozwiązujemy je w pudle:



gdzie:

$$L_i \to \infty \tag{8}$$

2. Postulujemy separację zmiennych:

$$\Psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \tag{9}$$

Laplasjan we współrzędnych kartezjańskich:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{10}$$

Zatem równanie Schroedingera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[Y(y)Z(z)X''(x) + X(x)Z(z)Y''(y) + X(x)Y(y)Z''(z)] = EX(x)Y(y)Z(z) \quad / : (XYZ) \tag{11}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Y''(y)}{Y(y)} + \frac{Z''(z)}{Z(z)}] = E \tag{12}$$

X(x) wyliczymy następująco:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X''(x)}{X(x)} = E + \frac{\hbar^2}{2m}[\frac{Y''(y)}{Y(y)} + \frac{Z''(z)}{Z(z)}] \tag{13}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X''(x)}{X(x)} = E_x \tag{14}$$

gdzie:

$$E_x = E + \frac{\hbar^2}{2m}[\frac{Y''(y)}{Y(y)} + \frac{Z''(z)}{Z(z)}] \tag{15}$$

Y(y) wyliczymy analogicznie:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''(y)}{Y(y)} = E + \frac{\hbar^2}{2m}[\frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Z''(z)}{Z(z)}] \tag{16}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''(y)}{Y(y)} = E_y \tag{17}$$

gdzie:

$$E_y = E - E_x + \frac{Z''(z)}{Z(z)}] \tag{18}$$

Z(z) również:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Z''(z)}{Z(z)} = E + \frac{\hbar^2}{2m}[\frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Y''(y)}{Y(y)}] \tag{19}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Z''(z)}{Z(z)} = E_z \tag{20}$$

gdzie:

$$E_z = E - E_x - E_y \tag{21}$$

3. Mamy zatem układ równań:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X''(x)}{X(x)} = E_x \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y''(y)}{Y(y)} = E_y \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Z''(z)}{Z(z)} = E_z \\ E = E_x + E_y + Z_z z \end{cases} \tag{22}$$

gdzie ostatnie równanie to równanie więzów.

4. Rozwiązanie X(x)
To kombinacja liniowa:

$$X(x) = A_1 e^{ik_x x} + A_2 e^{-ik_x x} \tag{23}$$

Z warunkiem brzegowym:

$$X(0) = X(L_x) = 0 \tag{24}$$

Zatem:

$$\begin{cases} X(0) = A_1 + A_2 = 0 \\ X(L_x) = A_1 e^{ik_x L_x} + A_2 e^{-ik_x L_x} = 0 \end{cases} \tag{25}$$

Co można zapisać jako:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{ik_x L_x} & e^{-ik_x L_x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dostaliśmy więc równanie macierzowe typu:

$$M\vec{A} = \vec{0} \tag{26}$$

Rozwiązaniem tego równania jest:

$$detM = 0 \tag{27}$$

$$e^{-ik_x L_x} - e^{ik_x L_x} = 0 \tag{28}$$

$$cos(k_x L_x) - isin(k_x L_x) - (cos(k_x L_x) + isin(k_x L_x)) = 0 \tag{29}$$

$$-2isin(k_x L_x) = 0 \tag{30}$$

Rozwiązaniem powyższego równania jest:

$$k_x L_x = \pi n_x \tag{31}$$

gdzie:

$$n_x \epsilon \mathbb{Z} \tag{32}$$

Ponieważ jednak:

$$k_x > 0 \quad \wedge \quad L_x > 0 \tag{33}$$

to ostatecznie:

$$k_x L_x = \pi n \quad , n = 1, 2, 3, ... \tag{34}$$

5. Rozwiązanie Y(y), Z(z)- analogicznie

6. Skwantowanie wektora falowego
   Z równania (34) wynika **skwantowanie wektora falowego** k_n:

$$k_{nx} = \frac{\pi n}{L_x} \tag{35}$$

   Ogólnie:

$$k_{ni} = \frac{\pi n}{L_i} \quad ,i = x, y, z \tag{36}$$

7. Energia

   - dla 1 zmiennej:

$$E_{nx} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X''}{X} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{A_1(ik_x)^2 e^{ik_x x}}{A_1 e^{ik_x x}} + \frac{A_2(-ik_x)^2 e^{-ik_x x}}{A_2 e^{-ik_x x}}) = \frac{\hbar^2}{2m}k_x^2 \tag{37}$$

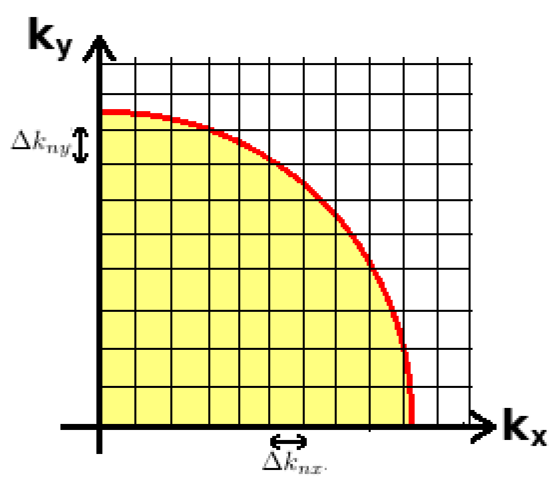
     Po podstawieniu wyrażenia (36), dostajemy:

$$E_{nx} = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi n_x}{L_x})^2 = \tag{38}$$

   - Ogólnie:

$$E_{n_x n_y n_z} = E_{nx} + E_{ny} + E_{nz} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \tag{39}$$

8. Konsekwencje skwantowania wektora falowego $\vec{k}$ w przestrzeni wektora falowego. Ponieważ wektor $\vec{k}$ jest skwantowany, to kolejne stany cząstki, czyli kolejne wartości $\vec{k}$ to punkty na siatce, pokazane schematycznie (w 2D) na rysunku pokazanym poniżej.



   Taka siatka wyznacza sześciany. Można powiedzieć, że na 1 stan w przestrzeni wektora $\vec{k}$ przypada sześcian o bokach:

$$\Delta k_{ni} = k_{(n+1)i} - k_{ni} = \frac{\pi(n+1)}{L_i} - \frac{\pi n}{L_i} = \frac{\pi}{L_i} \tag{40}$$

   czyli objętości:

$$v_k = \Delta k_{nx}\Delta k_{ny}\Delta k_{nz} = \frac{\pi^3}{L_x L_y L_z} = \frac{\pi^3}{V} \tag{41}$$

Jest to tzw. **objętość na 1 stan**.
Wszystkie dozwolone stany cząstki zajmują w przestrzeni wektora falowego pewien obszar. Gdyby n było całkowite, byłaby to cała kula. Jednak n jest naturalne, dlatego jest to $\frac{1}{8}kuli$, co również pokazano na powyższym rysunku. Objętość tej części kuli, czyli objętość zajmowana przez wszystkie dozwolone stany cząstki, wynosi:

$$V_k = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3}\pi k^3 = \frac{1}{6}\pi k^3 \tag{42}$$

9. Konsekwencje skwantowania wektora falowego $\vec{k}$ - liczba dozwolonych stanów N Liczbę dozwolonych stanów możemy uzyskać poprzez podzielenie objętości wszystkich stanów przez objętość 1 stanu.
   Biorąc pod uwagę jeszcze spin, **liczba stanów** wyraża się wzorem:

$$N = (2\sigma + 1)\frac{V_k}{v_k} \tag{43}$$

   gdzie: $(2\sigma + 1)$ to rzut spinu.
   Dla elektronu:

$$\sigma = \frac{1}{2} \tag{44}$$

   zatem:

$$N = 2\frac{\frac{1}{6}\pi k^3}{\frac{\pi^3}{V}} = \frac{V}{3\pi^2}k^3 \tag{45}$$

10. Konsekwencje skwantowania wektora falowego $\vec{k}$ - gęstość stanów DOS Z definicji:

$$DOS(E) = \rho(E) = \frac{dN(E)}{dE} \tag{46}$$

   zatem musimy znaleźć związek N(E). Ponieważ zarówno N i E zależą od k, to wyliczymy:

$$E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{47}$$

$$N = \frac{V}{3\pi^2}k^3 = \frac{V}{3\pi^2}(\frac{2mE}{\hbar^2})^{3/2} \tag{48}$$

   Zatem:

$$DOS(E) = \rho(E) = \frac{dN}{dE} = \underbrace{\frac{V}{2\pi^2}(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}}_{const.}E^{1/2} = CE^{1/2} \tag{49}$$

1.3 Zadanie Domowe

Obliczyć całkę:

$$\int_0^\mu \rho(E)EdE \tag{50}$$

$$\int_0^\mu CE^{3/2}dE = \frac{2}{5}C\mu^{5/2} \tag{51}$$