Формула Ландауэра

Теория вторичного квантования…

- Введение вторичного квантования обычно начинается с определения одночастичного гамильтониана $\widehat{H}_0$, описывающего невзаимодействующие тождественные частицы.

- Такой гамильтониан представляется в виде суммы гамильтонианов отдельных частиц:

$$\widehat{H}_0[N] = \sum_i^N \left(\hat{T} + U\right)_{x_i}.$$

- Ключевую роль в представлении вторичного квантования играют так называемые одночастичные волновые функции $\boldsymbol{\psi}_\alpha(x)$, собственные функции $\widehat{H}_0[N=1]$. Для двух частиц:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)\}$$

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_i, \ldots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_1) & \ldots & \psi_i(\mathbf{r}_1) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_1) \\ \psi_1(\mathbf{r}_2) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & \ldots & \psi_i(\mathbf{r}_2) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_2) \\ & & & \vdots & & \\ \psi_1(\mathbf{r}_i) & \psi_2(\mathbf{r}_i) & \ldots & \psi_i(\mathbf{r}_i) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_i) \\ & & & \vdots & & \\ \psi_1(\mathbf{r}_N) & \psi_2(\mathbf{r}_N) & \ldots & \psi_i(\mathbf{r}_N) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

Теория вторичного квантования…

Такой гамильтониан представляется в виде суммы гамильтонианов отдельных частиц:

$$\widehat{H}_0[N] = \sum_{i}^{N} (\widehat{T} + U)_{x_i}.$$

- Ключевую роль в представлении вторичного квантования играют так называемые одночастичные волновые функции $\boldsymbol{\psi}_\alpha(x)$, собственные функции $\widehat{H}_0[N = 1]$. Для двух частиц:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_i, \ldots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_1) & \ldots & \psi_i(\mathbf{r}_1) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_1) \\ \psi_1(\mathbf{r}_2) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & \ldots & \psi_i(\mathbf{r}_2) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_2) \\ & & & \vdots & & \\ \psi_1(\mathbf{r}_i) & \psi_2(\mathbf{r}_i) & \ldots & \psi_i(\mathbf{r}_i) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_i) \\ & & & \vdots & & \\ \psi_1(\mathbf{r}_N) & \psi_2(\mathbf{r}_N) & \ldots & \psi_i(\mathbf{r}_N) & \ldots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}$$

Коммутационные соотношения???

Спин:

$$\boxed{\hat{\Psi}(x) = \sum_{\alpha} \psi_\alpha(x) \hat{a}_\alpha}$$

$$\boxed{\hat{H}_0 = \int dx \hat{\Psi}^+(x)(\hat{T} + U)_x \hat{\Psi}(x)}$$

$$\boxed{\hat{\Psi}(x) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(x)\hat{a}_{\alpha}}$$

Наш одночастичный базис --- состояния Липпмана-Швингера:

$$\psi_E^{(1)}(x) = \begin{cases} \dfrac{e^{ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} + r\dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \textit{если } x \to -\infty; \\ t\dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \textit{если } x \to \infty; \end{cases} \qquad \psi_E^{(2)}(x) = \begin{cases} t'\dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \textit{если } x \to -\infty; \\ r'\dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} + \dfrac{e^{-ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \textit{если } x \to \infty. \end{cases}$$

Эти состояния составляют ОРТНОРМИРОВАННЫЙ БАЗИС!

$$\psi_E(x) = \begin{cases} a_1 \dfrac{e^{ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} + b_1 \dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \text{если } x \to -\infty; \\ a_2 \dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} + b_2 \dfrac{e^{-ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \text{если } x \to \infty, \end{cases}$$

$$\boxed{\langle \psi_E | \psi_{E'} \rangle \approx (|a_1(E)|^2 + |b_2(E)|^2)\delta(E - E')}$$

$$j_E = \frac{1}{2\pi\hbar}(|a_1|^2 - |b_1|^2) = \frac{1}{2\pi\hbar}(|a_2|^2 - |b_2|^2).$$

$$\langle\psi_E|\psi_{E'}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi_E^*(x)\psi_{E'}(x) \approx$$

$$\approx \int_{-\infty}^{0} dx \frac{a_1^*(E)a_1(E')e^{i[k_1(E')-k_1(E)]x}}{2\pi\hbar\sqrt{v_1(E)v_1(E')}} +$$

$$+ \int_{-\infty}^{0} dx \frac{b_1^*(E)b_1(E')e^{-i[k_1(E')-k_1(E)]x}}{2\pi\hbar\sqrt{v_1(E)v_1(E')}} +$$

$$+ \int_{0}^{\infty} dx \frac{a_2^*(E)a_2(E')e^{i[k_2(E')-k_2(E)]x}}{2\pi\hbar\sqrt{v_2(E)v_2(E')}} +$$

$$+ \int_{0}^{\infty} \frac{b_2^*(E)b_2(E')e^{-i[k_2(E')-k_2(E)]x}}{2\pi\hbar\sqrt{v_2(E)v_2(E')}}.$$

$$\boxed{|a_2(E)|^2 + |b_1(E)|^2 = |a_1(E)|^2 + |b_2(E)|^2 = 1}$$

$$\boxed{\langle\psi_E|\psi_{E'}\rangle \approx (|a_1(E)|^2 + |b_2(E)|^2)\delta(E - E')}$$

$$\psi_E(x) = \begin{cases} a_1 \dfrac{e^{ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} + b_1 \dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \text{если } x \to -\infty; \\ a_2 \dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} + b_2 \dfrac{e^{-ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \text{если } x \to \infty, \end{cases}$$

$$\boxed{\langle \psi_E | \psi_{E'} \rangle \approx (|a_1(E)|^2 + |b_2(E)|^2)\delta(E - E')}$$

Отсюда очевидно, что тогда состояния Липпмана-Швингера нормированы.
Доказать их ортогональность!!!

$$\psi_E^{(1)}(x) = \begin{cases} \dfrac{e^{ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} + r \dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \text{если } x \to -\infty; \\ t \dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \text{если } x \to \infty, \end{cases},$$

$$\psi_E^{(2)}(x) = \begin{cases} t' \dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \text{если } x \to -\infty; \\ r' \dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} + \dfrac{e^{-ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \text{если } x \to \infty, \end{cases}.$$

$$\boxed{\hat{\Psi}(x) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(x)\hat{a}_{\alpha}}$$

Наш одночастичный базис --- состояния Липпмана-Швингера:

$$\psi_E^{(1)}(x) = \begin{cases} \dfrac{e^{ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} + r\dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \text{если } x \to -\infty; \\ t\dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \text{если } x \to \infty; \end{cases}$$

$$\psi_E^{(2)}(x) = \begin{cases} t'\dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \text{если } x \to -\infty; \\ r'\dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} + \dfrac{e^{-ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \text{если } x \to \infty. \end{cases}$$

$$\hat{\Psi}(x) = \int dE\left\{\psi_{E,1}(x)\hat{a}_{E,1} + \psi_{E,2}(x)\hat{a}_{E,2}\right\} = \int dE \sum_{\alpha=1,2} \psi_{E,\alpha}(x)\hat{a}_{E,\alpha},$$

Наш одночастичный базис --- состояния Липпмана-Швингера:

$$\psi_E^{(1)}(x) = \begin{cases} \dfrac{e^{ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} + r\dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \textit{если } x \to -\infty; \\ t\dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \textit{если } x \to \infty; \end{cases} \qquad \psi_E^{(2)}(x) = \begin{cases} t'\dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \textit{если } x \to -\infty; \\ r'\dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} + \dfrac{e^{-ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \textit{если } x \to \infty. \end{cases}$$

$$\hat{\Psi}(x) = \int dE \left\{\psi_{E,1}(x)\hat{a}_{E,1} + \psi_{E,2}(x)\hat{a}_{E,2}\right\} = \int dE \sum_{\alpha=1,2} \psi_{E,\alpha}(x)\hat{a}_{E,\alpha},$$

$$\{\hat{a}_{E,\alpha}, \hat{a}^\dagger_{E',\beta}\} = \delta(E-E')\delta_{\alpha\alpha'}, \quad \{\hat{a}_{E,\alpha}, \hat{a}_{E',\beta}\} = 0,$$

$$\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(x')\} = \delta(x-x'),$$

$$\langle \hat{a}^\dagger_{E,\alpha}\hat{a}_{E',\alpha'}\rangle = \delta(E-E')\delta_{\alpha\alpha'} f_\alpha(E), \qquad f_\alpha(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu_\alpha)/T_\alpha]+1},$$

Метод вторичного квантования
и
матрицы рассеяния

$$\hat{H}_0[N] = \sum_i^N (\hat{T} + U)_{x_i}$$

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(x)\hat{a}_\alpha$$

$$\hat{H}_0 = \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x)(\hat{T} + U)_x \hat{\Psi}(x)$$

$$\hat{\Psi}(x) = \int dE \left\{\psi_{E,1}(x)\hat{a}_{E,1} + \psi_{E,2}(x)\hat{a}_{E,2}\right\} =$$

$$= \int dE \sum_{\alpha=1,2} \psi_{E,\alpha}(x)\hat{a}_{E,\alpha}$$

$$\hat{\Psi}(x) = \int dE \left\{ \psi_{E,1}(x)\hat{a}_{E,1} + \psi_{E,2}(x)\hat{a}_{E,2} \right\} =$$

$$= \int dE \sum_{\alpha=1,2} \psi_{E,\alpha}(x)\hat{a}_{E,\alpha}$$

$$\psi_E^{(1)}(x) = \begin{cases} \dfrac{e^{ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} + r\dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \text{если } x \to -\infty \\ t\dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \text{если } x \to \infty, \end{cases}$$

$$\psi_E^{(2)}(x) = \begin{cases} t'\dfrac{e^{-ik_1 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}}, & \text{если } x \to -\infty; \\ r'\dfrac{e^{ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} + \dfrac{e^{-ik_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}}, & \text{если } x \to \infty, \end{cases}$$

$$\hat{H}_0 = \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x)(\hat{T} + U)_x \hat{\Psi}(x)$$

Оператор тока в представлении вторичного квантования

$$L = -mc^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\mathbf{v} - e\varphi$$

$$\mathcal{H} = \sqrt{m^2c^4 + c^2\left(\mathbf{P} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2} + e\varphi$$

Оператор тока в представлении вторичного квантования

$$\delta H = -\frac{1}{c}\int \mathbf{j}\,\delta\mathbf{A}\,dV$$

$$\overline{H} = \int \Psi^*\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{\mu}{s}\,\mathbf{H}\hat{\mathbf{s}}\right]\Psi\,dV$$

$$\delta\overline{H} = \int \Psi^*\left[-\frac{e}{2mc}(\hat{\mathbf{p}}\delta\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{mc^2}\mathbf{A}\delta\mathbf{A}\right]\Psi\,dV - \frac{\mu}{s}\int \operatorname{rot}\delta\mathbf{A}\cdot\Psi^*\hat{\mathbf{s}}\Psi\,dV$$

$$\int \Psi^*\hat{\mathbf{p}}\delta\mathbf{A}\Psi\,dV = -i\hbar\int \Psi^*\nabla(\delta\mathbf{A}\Psi)\,dV = i\hbar\int \delta\mathbf{A}\Psi\nabla\Psi^*\,dV$$

$$\mathbf{a}\operatorname{rot}\mathbf{b} = -\operatorname{div}[\mathbf{a}\mathbf{b}] + \mathbf{b}\operatorname{rot}\mathbf{a}$$

$$\int \Psi^*\hat{\mathbf{s}}\Psi\operatorname{rot}\delta\mathbf{A}\,dV = \int \delta\mathbf{A}\operatorname{rot}(\Psi^*\hat{\mathbf{s}}\Psi)\,dV$$

Оператор тока в представлении вторичного квантования

$$\delta H = -\frac{1}{c}\int \mathbf{j}\,\delta\mathbf{A}\,dV$$

$$\delta\overline{H} = -\frac{ie\hbar}{2mc}\int \delta\mathbf{A}\,(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)\,dV +$$

$$+\frac{e^2}{mc^2}\int \mathbf{A}\delta\mathbf{A}\Psi\Psi^*\,dV - \frac{\mu}{s}\int \delta\mathbf{A}\,\mathrm{rot}\,(\Psi^*\hat{\mathbf{s}}\Psi)\,dV$$

$$\mathbf{j} = \frac{ie\hbar}{2m}[(\nabla\Psi^*)\Psi - \Psi^*\nabla\Psi] - \frac{e^2}{mc}\mathbf{A}\Psi^*\Psi + \frac{\mu}{s}c\,\mathrm{rot}\,(\Psi^*\hat{\mathbf{s}}\Psi)$$

$$\hat{I}(x,t) = \frac{-ie\hbar}{m}\left\{\hat{\Psi}^\dagger(x,t)\frac{d}{dx}\hat{\Psi}(x,t) - \right.$$
$$\left. - \left[\frac{d}{dx'}\hat{\Psi}^\dagger(x',t)\right]_{x=x'}\hat{\Psi}(x,t)\right\}$$

Итак, найдем $\hat{\Psi}$ в левой волновой зоне, используя (2.8) –

$$\hat{\Psi}(x \to -\infty) = \\ = \int \frac{dE}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} \left\{ \left(e^{ik_1 x} + r_E e^{-ik_1 x} \right) \hat{a}_{E,1} + t_E e^{-ik_1 x} \hat{a}_{E,2} \right\}. \quad (5.5)$$

Аналогично можно найти выражение для $\hat{\Psi}$ в правой волновой зоне:

$$\hat{\Psi}(x \to +\infty) = \\ = \int \frac{dE}{\sqrt{2\pi\hbar v_2}} \left\{ \hat{a}_{E,1} t_E e^{ikx} + \hat{a}_{E,2} (r_E e^{ikx} + e^{-ikx}) \right\}. \quad (5.6)$$

Итак, найдем $\hat{\Psi}$ в левой волновой зоне, используя

$$\hat{\Psi}(x \to -\infty) = \\ = \int \frac{dE}{\sqrt{2\pi\hbar v_1}} \left\{ \left(e^{ik_1 x} + r_E e^{-ik_1 x} \right) \hat{a}_{E,1} + t_E e^{-ik_1 x} \hat{a}_{E,2} \right\}.$$

Удобно переписать это выражение в более компактом виде, введя новые операторы уничтожения:

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_{E,1} \\ \hat{b}_{E,2} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \hat{a}_{E,1} \\ \hat{a}_{E,2} \end{pmatrix},$$

где S — матрица рассеяния. Так что, например, $\hat{b}_{E,1} = r\hat{a}_{E,1} + t'\hat{a}_{E,2}$,

$$\boxed{\hat{I}(x,t) = \frac{-ie\hbar}{m} \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(x,t) \frac{d}{dx} \hat{\Psi}(x,t) - \\ - \left[\frac{d}{dx'} \hat{\Psi}^\dagger(x',t) \right]_{x=x'} \hat{\Psi}(x,t) \right\}}$$

Теперь мы можем найти оператор тока:

$$\hat{I}(x,t) = \frac{-ie\hbar}{m}\left\{\hat{\Psi}^\dagger(x,t)\frac{d}{dx}\hat{\Psi}(x,t) - \right.$$
$$\left. - \left[\frac{d}{dx'}\hat{\Psi}^\dagger(x',t)\right]_{x=x'}\hat{\Psi}(x,t)\right\}$$

$$\hat{I}(x\to-\infty) = e\int dEdE' e^{-i(E-E')t/\hbar}\frac{k_1+k_1'}{2\pi m\sqrt{v_1 v_1'}}\times$$
$$\times\left\{e^{i(k_1-k_1')x}\hat{a}^\dagger_{E',1}\hat{a}_{E,1} - e^{-i(k_1-k_1')x}\hat{b}^\dagger_{E',1}\hat{b}_{E,1}\right\} +$$
$$+ e\int dEdE' e^{-i(E-E')t/\hbar}\frac{k_1-k_1'}{2\pi m\sqrt{v_1 v_1'}}\times$$
$$\times\left\{e^{-i(k_1+k_1')x}\hat{a}^\dagger_{E',1}\hat{b}_{E,1} - e^{i(k_1+k_1')x}\hat{b}^\dagger_{E',1}\hat{a}_{E,1}\right\}.$$

Низкоэнергетическая часть оператора тока:

$$\hat{I}(x \to -\infty, t) \approx$$

$$\approx \frac{e}{\pi\hbar} \int dE dE' e^{-i(E-E')t/\hbar} \left\{ \hat{a}^{\dagger}_{E',1} \hat{a}_{E,1} - \hat{b}^{\dagger}_{E',1} \hat{b}_{E,1} \right\}$$

$$\hat{I}(x_{\alpha}, t) \approx \frac{e}{\pi\hbar} \int dE dE' e^{-i(E-E')t/\hbar} \hat{a}^{\dagger}_{E',\delta} A_{\delta\gamma}(\alpha, E, E') \hat{a}_{E,\gamma},$$

$$A_{\delta\gamma}(\alpha, E, E') = \delta_{\alpha\delta}\delta_{\alpha\gamma} - s^{\dagger}_{\delta\alpha}(E') s_{\alpha\gamma}(E),$$

где $x_{1(2)}$ означает, что оператор тока вычисляется в левой (правой) волновой зоне и $s_{\alpha\beta}$ — матричные элементы матрицы рассеяния (например, $s_{11} = r$ и $s_{12} = t'$).

Средний ток

$$\hat{I}(x \to -\infty, t) \approx$$

$$\approx \frac{e}{\pi\hbar} \int dE dE' e^{-i(E-E')t/\hbar} \left\{ \hat{a}^{\dagger}_{E',1} \hat{a}_{E,1} - \hat{b}^{\dagger}_{E',1} \hat{b}_{E,1} \right\}$$

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{e}{\pi\hbar} \int dE \left\{ \langle \hat{a}^{\dagger}_{E,1} \hat{a}_{E,1} \rangle - \langle \hat{b}^{\dagger}_{E,1} \hat{b}_{E,1} \rangle \right\}$$

$$\langle \hat{a}^{\dagger}_{E,1} \hat{a}_{E,1} \rangle \;=\; f_1(E)$$

$$\langle \hat{b}^{\dagger}_{E,1} \hat{b}_{E,1} \rangle = \mathcal{R} f_1(E) + \mathcal{T} f_2(E)$$

Средний ток

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{e}{\pi\hbar} \int dE \left\{ \langle \hat{a}^{\dagger}_{E,1} \hat{a}_{E,1} \rangle - \langle \hat{b}^{\dagger}_{E,1} \hat{b}_{E,1} \rangle \right\}$$

$$\langle \hat{a}^{\dagger}_{E,1} \hat{a}_{E,1} \rangle \;=\; f_1(E)$$

$$\langle \hat{b}^{\dagger}_{E,1} \hat{b}_{E,1} \rangle = \mathcal{R} f_1(E) + \mathcal{T} f_2(E)$$

<u>Формула Ландауэра:</u>

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{T}(E) \left\{ f_1(E) - f_2(E) \right\} dE$$