Come è noto dalla teoria delle bande di Bloch, una particella sottoposta a un potenziale periodico presenta uno spettro duplice: una parte continua, caratterizzata da energia maggiore di zero, e diverse bande formate da stati legati, ognuna centrata intorno ad un'autovalore dell'hamiltoniana di singola buca e con larghezza determinata dall'interazione tra stati centrati in buche vicine. Nel limite $T \to 0$ un'espansione al termine quadratico della densità di stati della banda più bassa ci mostra che la particella può essere considerata libera, ma con una massa effettiva diversa dall'originale.

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\left(\frac{\partial \hat{x}}{\partial t}\right)^2 - V(\hat{x}) \overset{T\to 0}{\approx} \frac{m_{\text{eff}}}{2}\left(\frac{\partial \hat{x}}{\partial t}\right)^2 - c \qquad V(x+l) = V(x) \tag{1}$$

Uno studio analitico di m_{eff} è impossibile se non nei casi più semplici. Buoni risultati si ottengono con approsimazioni di *tight binding* ma lasciando parametri da misurare.

1 Misurare m_{eff}

m_{eff} è un moltiplicatore della lagrangiana in $T \to 0$. Questo significa che molti risultati non dipendono da esso se non in modo marginale. Un trucco semplice per misurarlo è aggiungere un potenziale quadratico alla lagrangiana, con apertura molto ampia, e misurare la distanza tra i livelli energetici di esso.

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\left(\frac{\partial \hat{x}}{\partial t}\right)^2 - V(\hat{x}) - \frac{1}{2}\frac{V_q}{l^2}\hat{x}^2 \overset{T\to 0}{\approx} \frac{m_{\text{eff}}}{2}\left(\frac{\partial \hat{x}}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{V_q}{l^2}\hat{x}^2 - c \tag{2}$$

Nel limite in cui il potenziale quadratico (particella libera) e la temperatura vanno a zero solo i primi due livelli sono significativi, e sono abbastanza ravvicinati da rientrare nella zona quadratica della prima banda di Bloch.

$$\Delta E \approx \hbar\omega_q = \hbar\sqrt{\frac{V_q}{m_{\text{eff}} l^2}} \tag{3}$$

Inoltre la differenza tra i livelli energetici nel limite di basse temperature è legata esponenzialmente al prodotto di x a tempi euclidei diversi, rendendolo un valore semplice da misurare.

2 Azione, adimensionalizzazione e discretizzazione

L'azione euclidea adimensionalizzata del sistema su un percorso $x(\tau)$ è:

$$\mathcal{S}_E = \frac{1}{\hbar}\int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} \mathrm{d}\tau \frac{m}{2}\left(\frac{\partial x}{\partial \tau}\right)^2 + V(x) + \frac{1}{2}\frac{V_q}{l^2}x^2 \tag{4}$$

Volendo studiare le dinamiche del reticolo adimensionalizziamo l'equazione tenendo le dimensioni di esso in conto. Usando V_0 come parametro di profondità delle buche e l come misura di lunghezza, possiamo fare le seguenti sostituzioni:

$$x = ly \qquad V(x) = V_0 \tilde{V}\left(\frac{x}{l}\right) \qquad \lambda = \frac{V_q}{V_0}$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{V_0}{ml^2}} \qquad z = \omega_0 \tau \qquad \tilde{\beta} = \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \qquad d = \frac{V_0 l^2 m}{\hbar^2}$$

L'azione ora è funzione solo dei parametri adimensionali λ, $\tilde{\beta}$ e d (e del cammino $y(z)$).

$$\mathcal{S}_E = \sqrt{d}\int_0^{\tilde{\beta}} \mathrm{d}z \frac{1}{2}\left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)^2 + \tilde{V}\left(y\right) + \frac{1}{2}\lambda y^2 \tag{5}$$

Infine possiamo discretizzare l'integrale dividendolo in parti di lunghezza η, ponendo $N = \frac{\tilde{\beta}}{\eta}$.

$$\mathcal{S}_E \approx \sqrt{d}\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1}{\eta} + \frac{\eta\lambda}{2}\right) y_n^2 - \frac{y_n y_{n+1}}{\eta} + \eta\tilde{V}\left(y_n\right) \tag{6}$$

Per un cambio nel percorso $y_n \to y_n + \delta$ abbiamo un $\Delta\mathcal{S}_E$ di

$$\Delta\mathcal{S}_E = \sqrt{d}\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1}{\eta} + \frac{\eta\lambda}{2}\right)\left(2y_n\delta + \delta^2\right) - \frac{y_{n-1} + y_{n+1}}{\eta}\delta + \eta\left(\tilde{V}\left(y_n + \delta\right) - \tilde{V}\left(y_n\right)\right) \tag{7}$$

3 Validità dei limiti

I limiti di bassa temperatura, particella libera e continuo sono ora $\tilde{\beta} \to +\infty$, $\lambda \to 0$ e $\eta \to 0$

3.1 Limite di bassa temperatura

Perchè la temperatura sia bassa $k_B T$ deve essere molto minore sia della spaziatura dei livelli della singola buca, che di quelli dell'oscillatore. Una grossolana stima dimensionale dice (con $m_{\text{eff}} = \gamma m$):

$$\frac{\hbar\omega_0}{\hbar\omega_q} \approx \sqrt{\frac{m_{\text{eff}} V_0}{m V_q}} = \sqrt{\frac{\gamma}{\lambda}}$$

Nel limite di particella libera ($\lambda \to 0$) come previsto la condizione più stringente è sui livelli dell'oscillatore:

$$k_B T \ll \hbar\omega_q \implies \tilde{\beta} \gg \sqrt{\frac{\gamma}{\lambda}} \tag{8}$$

Il raggiungimento di questo limite sarà comunque ben verificato dal raggiungimento di un buon fit esponenziale per ΔE

3.2 Limite di particella libera

Perchè la misura sia buona vi deve essere un numero sufficiente di siti dove il gradiente del potenziale quadratico non interferisca sostanzialmente con la forma delle buche. Ciò accade per:

$$|V_0| > \left| l \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2}\frac{V_q}{l^2}x^2\right)\right| \implies |y| < \frac{1}{\lambda}$$

Abbiamo quindi che il numero di siti dove la particella è libera è $n = \frac{2}{\lambda}$. Perchè vi siano almeno n_{min} siti liberi imponiamo la condizione

$$\lambda < \frac{2}{n_{min}} \tag{9}$$

3.3 Limite al continuo

η deve essere molto inferiore ad entrambi le scale temporali presenti. Di esse la più stringente nel limite di particella libera è ω_0^{-1}, il che si semplifica, essendo già η in unità di ω_0^{-1}, a:

$$\eta \ll 1 \tag{10}$$

4 Stima della separazione ΔE

A $T = 0$ le medie sono prese sullo stato fondamentale. Espandendo le medie si può ottenere:

$$\lim_{\tau \to +\inf} \left(\langle x(\tau)\, x(0) \rangle - \langle x \rangle^2 \right) = k e^{-\frac{\Delta E}{\hbar}\tau}$$

Riscrivendo in termini di variabili adimensionali e linearizzando:

$$-\frac{\Delta E}{\hbar\omega_0} z + c = \ln \left(\lim_{z \to +\inf} \left(\langle y(z)\, y(0) \rangle - \langle y \rangle^2 \right) \right) \tag{11}$$

sxz Il gap può essere ottenuto quindi con un fit lineare. Esso va eseguito dove z è sufficentemente grande perchè il fit sia buono, ma con $z \ll \frac{\tilde{\beta}}{2}$ per evitare gli effetti delle condizioni periodiche. Infine possiamo usare (**??**) per esprimere m_{eff} in base al gap energetico:

$$\frac{m_{eff}}{m} = \lambda \left(\frac{\Delta E}{\hbar\omega_0} \right)^{-2} \tag{12}$$

5 Che cosa misurare

Il rapporto $\frac{m_{eff}}{m}$ dipende dalla funzione $\tilde{V}(y)$ e dal parametro di dimensione delle buche adimensionale $d = \frac{V_0 l^2 m}{\hbar^2}$ Il caso speciale di potenziale a onda quadra gode di una soluzione esatta per la funzione d'onda. Purtroppo non ho trovato una soluzione analitica della dipendenza di m_{eff} da d, ma è possibile uno studio numerico a partire dalla condizione per le bande di Bloch. Per $d < 100$, un'approssimazione quadratica è ottima e otteniamo:

$$\frac{m_{eff}}{m} = 1 + \left(0.00589 \pm 3.2 \times 10^{-8} \right) \left(\frac{V_0 l^2 m}{\hbar^2} \right)^2 \tag{13}$$

Voglio quindi confermare questo risultato, e trovare i coefficienti per diversi $\tilde{V}(y)$