FONÓNY – kvantové kmity

A) Harmonický oscilátor

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2$$

definujme $\omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$, $x = \xi\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

potom $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = -i\sqrt{\hbar m\omega}\,\frac{\partial}{\partial \xi}$

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar\omega}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}, \quad \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{\hbar\omega}{2}\xi^2$$

$$\rightarrow \boxed{H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \xi^2\right)}$$

definujme
$$\boxed{\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi}\right) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)\end{aligned}}$$

použili sme $\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\right)^+ = -\frac{\partial}{\partial\xi}$

Naozaj:

$$\langle\varphi|\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\right)^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|\frac{\partial}{\partial\xi}|\varphi\rangle^*$$
$$= \int d\xi\,\frac{\partial\varphi^*}{\partial\xi}\varphi = \int d\xi\,\varphi^*\left(-\frac{\partial}{\partial\xi}\right)\varphi$$

Máme:

$$a^+a = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{\partial^2}{\partial\xi^2} - 1\right)$$
$$aa^+ = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 1\right)$$

$$\rightarrow \boxed{\begin{aligned} H &= \frac{\hbar\omega}{2}(a^+a + aa^+) \\ [a, a^+] &= 1 \\ [a, a] = [a^+&, a^+] = 0 \end{aligned}}$$

$\rightarrow$ komutačné vzťahy

s využitím komutačných vzťahov dáme

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)}$$

Spektrum operátora H je nezáporné.

Naozaj: $\langle\varphi|(a^+a + \frac{1}{2})|\varphi\rangle = \frac{1}{2}\langle\varphi|\varphi\rangle + \langle\varphi|a^+\underbrace{a|\varphi\rangle}_{|\psi\rangle} = \underbrace{\frac{1}{2}\langle\varphi|\varphi\rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{\geq 0}$

2)

Nech stav s najnižšou energiou je $|0\rangle$. Potom $a|0\rangle = 0$.

↳ nech $H|0\rangle = E_0|0\rangle$, $\langle 0|0\rangle = 1$.

Dôkaz sporom:

Nech $a|0\rangle \neq 0$. Potom

$Ha|0\rangle = (E_0 - \hbar\omega)\,a|0\rangle$ a teda stav $a|0\rangle$ má nižšiu energiu než stav $|0\rangle$. To je spor. Preto $a|0\rangle = 0$.

vyplýva z $\boxed{[H, a] = -\hbar\omega a}$, lebo $Ha|0\rangle = aH|0\rangle - \hbar\omega a|0\rangle$
$= (E_0 - \hbar\omega)\,a|0\rangle$

Potom $\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$. [lebo $\hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle$].

Nech $H|n\rangle = E_n|n\rangle$.

Potom $Ha^+|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)\,a^+|n\rangle$ .. vyplýva z $\boxed{[H, a^+] = \hbar\omega a^+}$

Teda energia stavu $a^+|n\rangle$ je o $\hbar\omega$ väčšia, ako energia stavu $|n\rangle$

→ Operátor a^+ pridáva kvantum energie $\hbar\omega$.

Definujme $\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle}$

Takýto stav je normovaný, $\langle n|n\rangle = 1$.

Dôkaz: platí $[a, (a^+)^n] = n(a^+)^{n-1}$ (dôkaz indukciou)

$$\langle n|n\rangle = \frac{1}{n!}\langle 0|a^n (a^+)^n|0\rangle = \frac{1}{n!}\langle 0|a^{n-1} a (a^+)^n|0\rangle$$

$$= \frac{1}{n!}\langle 0|a^{n-1}\left[n(a^+)^{n-1} + \cancel{(a^+)^n a}\right]|0\rangle = \frac{1}{(n-1)!}\langle 0|a^{n-1}(a^+)^{n-1}|0\rangle$$

$$= \langle n-1|n-1\rangle = \ldots = \langle 0|0\rangle = 1$$

Energia stavu $|n\rangle$: $\boxed{E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega}$

Platí:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \quad \text{... anihilačný operátor}$$

$$(*) \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \quad \text{-- kreačný operátor}$$

$$a^+a|n\rangle = n|n\rangle \rightarrow a^+a = \text{operátor počtu častíc}$$

Súhrn:

Hilbertov priestor harmonického oscilátora: báza $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \ldots$

operátor súradnice

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a+a^+)$$

hybnosti

$$p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\,(a^+-a)$$

→ ich pôsobenie na bázové stavy popísané rovnicami (*)

$$H = \hbar\omega\left(a^+a+\frac{1}{2}\right) \quad \text{.. hamiltonián}, \qquad H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

B) Kvantovanie kmitov mriežky

ukázali sme:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{k\lambda}\left[P_{k\lambda}P_{-k\lambda} + \omega_{k\lambda}^2\, Q_{k\lambda}Q_{-k\lambda}\right] \qquad (1)$$

→ hamiltonián kmitov mriežky (harmonická aproximácia)

kde

$$P_{k\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{Rs}\frac{1}{\sqrt{M_s}}\,\vec{p}_{Rs}\cdot\vec{e}_s(k\lambda)\,e^{ik\cdot R}$$

$$Q_{k\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{Rs}\sqrt{M_s}\,\vec{u}_{Rs}\cdot\vec{e}_s(k\lambda)^*\,e^{-ik\cdot R} \qquad (2)$$

s použitím $[u^{\alpha}_{Rs}, p^{\alpha'}_{R's'}] = i\hbar\,\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{RR'}\delta_{ss'}$

ľahko vidno:

$$[Q_{k\lambda}, P_{k'\lambda'}] = i\hbar\,\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

$$[Q_{k\lambda}, Q_{k'\lambda'}] = [P_{k\lambda}, P_{k'\lambda'}] = 0 \qquad (3)$$

kanonické komutačné vzťahy

Přejdeme od operátorů $q_{k\lambda}, P_{k\lambda}$ k novým operátorům $a_{k\lambda}, a^+_{k\lambda}$:

$$\boxed{\begin{aligned} q_{k\lambda} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{k\lambda}}}\left(a_{k\lambda} + a^+_{-k\lambda}\right) \\ P_{k\lambda} &= i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{k\lambda}}{2}}\left(a^+_{k\lambda} - a_{-k\lambda}\right) \end{aligned}} \quad (4) \xrightarrow[\text{vztahy}]{\text{inv.}} \quad \boxed{\begin{aligned} a_{k\lambda} &= \sqrt{\frac{\omega_{k\lambda}}{2\hbar}}\, q_{k\lambda} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_{k\lambda}}} P_{-k\lambda} \\ a^+_{-k\lambda} &= \sqrt{\frac{\omega_{k\lambda}}{2\hbar}}\, q_{k\lambda} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_{k\lambda}}} P_{-k\lambda} \end{aligned}} \quad (5)$$

Dosazením do (1) máme:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{k\lambda} \hbar\omega_{k\lambda}\left(a^+_{k\lambda}a_{k\lambda} + a_{k\lambda}a^+_{k\lambda}\right)$$ — použijeme $\omega_{k\lambda} = \omega_{-k\lambda}$

Pomocí (5) a (3) lehce zjistíme:

$$\boxed{\begin{aligned} \left[a_{k\lambda}, a^+_{k'\lambda'}\right] &= \delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'} \\ \left[a_{k\lambda}, a_{k'\lambda'}\right] &= \left[a^+_{k\lambda}, a^+_{k'\lambda'}\right] = 0 \end{aligned}} \quad (6)$$

kanonické komutační vztahy

Pomocí (6) můžeme hamiltonián přepsat do tvaru:

$$\boxed{H = \sum_{k\lambda} \hbar\omega_{k\lambda}\left(a^+_{k\lambda}a_{k\lambda} + \frac{1}{2}\right)} \quad (7)$$

Rovnice (6), (7) jsou zobecněním teorie harmonického oscilátoru na případ mnohých nezávislých oscilátorů.

Báze v prostoru kvantových stavů – [illegible]:

$|\{n_{k\lambda}\}\rangle$ kde $\{n_{k\lambda}\}$ = sada obsazovacích čísel pro všechny módy $k\lambda$

Energie stavu $|\{n_{k\lambda}\}\rangle$:

$$E = \sum_{k\lambda} \hbar\omega_{k\lambda}\left(n_{k\lambda} + \frac{1}{2}\right)$$

Inverzné vzťahy k rovnici (2):

$$\vec{P}_{R\sigma} = \sqrt{\frac{M_\sigma}{N}} \sum_{k\lambda} P_{k\lambda}\, \vec{e}_\sigma(\vec{k}\lambda)^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}$$

$$\vec{u}_{R\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N M_\sigma}} \sum_{k\lambda} Q_{k\lambda}\, \vec{e}_\sigma(\vec{k}\lambda)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$$

keď tam dosadíme rovnice (4), máme

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{P}_{R\sigma} &= \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{k\lambda} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{k\lambda} M_\sigma}{2}} \left(a^+_{k\lambda} - a_{-k\lambda}\right) \vec{e}_\sigma(-k\lambda)\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \\ \vec{u}_{R\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2M_\sigma \omega_{k\lambda}}} \left(a_{k\lambda} + a^+_{-k\lambda}\right) \vec{e}_\sigma(k\lambda)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \end{aligned}}$$

C) Príspevok kmitov mriežky k mernému teplu

$$E(T) = \sum_{k\lambda} \frac{\hbar\omega_{k\lambda}}{e^{\frac{\hbar\omega_{k\lambda}}{T}} - 1}$$

- vysoké teploty: $T \gg$ fonónové frekvencie $\longrightarrow E(T) = T \sum_{k\lambda} 1$

$$C_V = \frac{1}{\Omega}\frac{dE}{dT} = 3r\frac{N}{\Omega} = 3n \longleftarrow E(T) = 3rNT$$

klasická limita (Dulong-Petit)

koncentrácia všetkých atómov

- nízke teploty: $T \ll$ optické frekvencie

$$E(T) = \sum_\lambda \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k\, \frac{\hbar v_\lambda(\hat{k}) k}{e^{\frac{\hbar v_\lambda(\hat{k}) k}{T}} - 1}$$

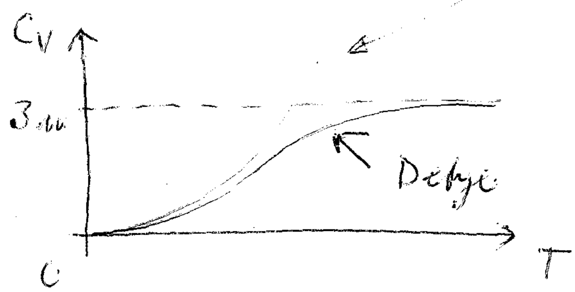
$$= \sum_\lambda \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dk\, k^2\, \frac{\hbar v_\lambda(\hat{k}) k}{e^{\hbar v_\lambda(\hat{k}) k/T} - 1}$$

$$\longrightarrow \boxed{\frac{E(T)}{\Omega} = \frac{\pi^2}{10} \frac{T^4}{(\bar{v}\hbar)^3}}$$

Použili sme: $\int_0^\infty \frac{dx\,x^3}{e^x-1} = \frac{\pi^4}{15}$

$$\frac{1}{v^3} \equiv \frac{1}{3}\sum_\lambda \left\langle \frac{1}{v_\lambda^3} \right\rangle = \frac{1}{3}\sum_\lambda \int \frac{d\vartheta \sin\vartheta\, d\varphi}{4\pi} \frac{1}{v_\lambda^3(\vartheta,\varphi)}$$

Preto $c_V = \frac{1}{\Omega}\frac{dE}{dT} \longrightarrow \boxed{c_V = \frac{2\pi^2}{5}\left(\frac{T}{\hbar v}\right)^3}$ v súhlade s 3. vetou termodynamickou



- <u>Debyeova interpolačná formula</u>

aproximujme spektrum fonónov 3 identickými zvukovými vlnami s frekvenciami $\omega = v k$, ktoré však existujú pre $k < k_D$

Potom

$$\frac{E(T)}{\Omega} = \frac{3}{8\pi^3}\int_{k<k_D} d^3k \, \frac{\hbar v k}{e^{\frac{\hbar v k}{T}}-1} = \frac{3}{2\pi^2}\frac{T^4}{(\hbar v)^3}\int_0^{\theta/T}\frac{dx\,x^3}{e^x-1} \qquad (*)$$

kde $\boxed{\theta = \hbar v k_D}$ je Debyeova teplota

Formula (*) reprodukuje exaktný výsledok pre $T \to 0$

Aby sme dostali Dulong-Petit v limite $T \to \infty$, musíme žiadať $\boxed{k_D^3 = 6\pi^2 n}$

Teda

$$\boxed{\begin{aligned} \theta &= \hbar v (6\pi^2 n)^{1/3} \\ \frac{E(T)}{\Omega} &= \frac{3}{2\pi^2}\frac{T^4}{(\hbar v)^3}\int_0^{\theta/T}\frac{dx\,x^3}{e^x-1} \end{aligned}}$$

napr. LiF ... $\theta = 730K$
NaCl ... $\theta = 321K$
Na ... $\theta = 152K$
C ... 1860K
Si ... 625K
Pb ... 88K