

Kvantna mehanika
 Domaca naloga
 april 2008
 Matic Ocepek

Spin II

NALOGA:

Gibanje elektrona v dvodimenzionalnem elektronskem plinu opisuje Hamiltonjan
 $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$
 kjer je $\vec{p} = (p_x, p_y)$ s $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial_x}$ in $p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial_y}$ operator gibalne količine delca.
 Določi lastne energije in zapiši lastne funkcije elektrona v dvodimenzionalnem elektronskem plinu!

V nekaterih sistemih igra pomembno vlogo tudi sklopitev med tirno in spinsko vrtilno količino elektrona. Take sisteme opišemo z Rashbinim Hamiltonijanom
 $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \lambda (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)$.

kjer sta σ_x in σ_y Paulijevi matriki.

Kakšne so lastne energije in lastne funkcije elektrona, katerega gibanje opisuje Rashbin Hamiltonjan? Namig: Kot nastavek uporabi spinor

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \text{ kjer je } \vec{r} = (x, y) \text{ položaj delca.}$$

V katero smer je obrnjen spin elektrona v lastnih stanjih, ki jih opisuje zgornji nastavek?

REŠITEV:

Pri nalogi bomo potrebovali nekatere že znane količine

■ odvoda gibalne količine

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial_x}$$

$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial_y}$$

■ Paulijeve matrike

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (0 & 1) \\ (1 & 0) \\ (0 & -i) \\ (i & 0) \\ (1 & 0) \\ (0 & -1) \end{pmatrix}$$

Ker je problem dvodimenzionalni mora veljati tudi

$$\mathbf{p}^2 = \mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2}$$

Zapišem Hamiltonko in vstavim zgornje količine

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \right) - \lambda \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right)$$

Ker seštevam skalar in matriko,
moram prvi del enačbe pomnožiti še z identiteto, da dobim matriko

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \right) \cdot I + -i\hbar\lambda \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \right) - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \right]$$

Enačbo pomnožim z identiteto in zapišem po komponentah in upoštevam zvezo

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

in ψ je oblike

$$\psi = \begin{pmatrix} A(\vec{r}) \\ B(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

Kot rezultat dobim

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \right) & -i\hbar\lambda \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} + \hbar\lambda \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \\ -i\hbar\lambda \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} - \hbar\lambda \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \right) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A(\vec{r}) \\ B(\vec{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A(\vec{r}) \\ B(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

2 D matriki na obeh straneh pomnožim in dobim 2 parcialni diferencialni enačbi II. reda

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \right) A(\vec{r}) + \lambda \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} + \hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) B(\vec{r}) = E \cdot A(\vec{r}) \quad (1)$$

$$-\lambda \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} + \hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) A(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} \right) B(\vec{r}) = E \cdot B(\vec{r}) \quad (2)$$

Za reševanje uporabim spinor nastavek

$$A(\vec{r}) = A e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$B(\vec{r}) = B e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Če odvajam nastavka po x in y

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} A(\vec{r}) = ik_x A(\vec{r})$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} B(\vec{r}) = ik_y B(\vec{r})$$

in druga odvoda

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} A(\vec{r}) = -k_x^2 A(\vec{r})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{y}^2} B(\vec{r}) = -k_y^2 B(\vec{r})$$

Ker je problem 2 D velja tudi $k_x^2 + k_y^2 = k^2$

Nastavka nesem v enačbi (1) in (2) in sproti pokrajšam
še eksponente na obeh straneh rezultat sta navadni enačbi

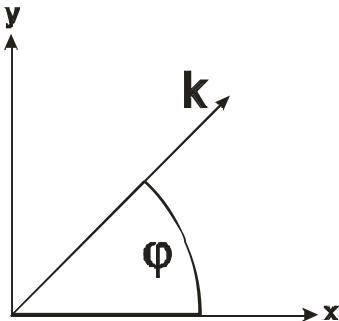
$$+\frac{\hbar^2}{2m} k^2 A + \lambda\hbar k_y B + i\lambda\hbar k_x B = E \cdot A$$

$$\lambda\hbar k_y A - \lambda i\hbar k_x A + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 B = E \cdot B$$

Spet sestavim matriko

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) & i\hbar\lambda (-ik_y + k_x) \\ i\hbar\lambda (-ik_y - k_x) & \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Uvedem polarne koordinate :



$$k_x = k \cdot \cos\varphi$$

$$k_y = k \cdot \sin\varphi$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & ik\hbar\lambda e^{-i\varphi} \\ -ik\hbar\lambda e^{i\varphi} & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Poiskem determinanto tega izraza

$$H \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \Rightarrow (H - E \cdot I) \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E = \pm \lambda\hbar k$$

Izrazim energijo elektrona

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mp \lambda\hbar k$$

To energijo sedaj uporabim v enačbi (3) da dobim še lastne funkcije elektrona
 Ker sta za energijo elektrona dve možnosti (plus in minus), rešujem vsako posebej

ENERGIJA S PLUSOM

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m} + \lambda \hbar k$$

$$\begin{pmatrix} -\lambda \hbar k & i k \hbar \lambda e^{-i\varphi} \\ -i k \hbar \lambda e^{i\varphi} & -\lambda \hbar k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

Lastna vektorja tega izraza sta

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

iz česar lahko zapišem prvo valovno funkcijo ψ_+ za elektron

$$\psi_+ = \cos \frac{\theta}{2} | \uparrow \rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} | \downarrow \rangle$$

ENERGIJA Z MINUSOM

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m} - \lambda \hbar k$$

$$\begin{pmatrix} \lambda \hbar k & i k \hbar \lambda e^{-i\varphi} \\ -i k \hbar \lambda e^{i\varphi} & \lambda \hbar k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

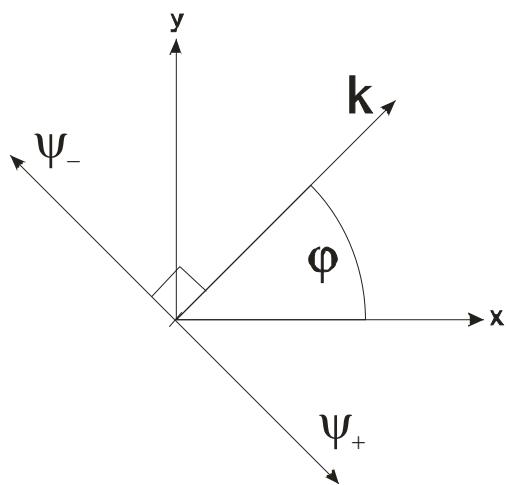
Lastna vektorja tega izraza sta

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

iz česar lahko zapišem drugo valovno funkcijo ψ_- za elektron

$$\psi_- = \cos \frac{\theta}{2} | \uparrow \rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} | \downarrow \rangle$$

Spin elektrona v lastnih stanjih je po zgornjih nastavkih pravokoten na valovni vektor \vec{k} , kar je razvidno s slike



$$\text{Za kota sem uporabil } \theta = \frac{\pi}{2} \text{ in } \phi = \varphi + \frac{\pi}{2} .$$