

# 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  $\sigma_x$  in  $\sigma_y$  Paulijeve matrike.

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

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

Ker je problem dvodimenzionalni mora veljati tudi

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 = -\hbar \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \hbar \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

Zapišem Hamiltonko in vstavim zgornje količine

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

Ker seštevam skalar in matriko,

moram prvi del enačbe pomnožiti še z identiteto, da dobim matriko

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

Enačbo pomnožim z identiteto in zapišem po komponentah in upoštevam zvezo

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

in  $\psi$  je oblike

$$\psi = \begin{pmatrix} A(\vec{r}) \\ B(\vec{r}) \end{pmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}},$$

eksponentni del v naslednji enačbi že krajšam, ker se pojavi v produktu na obeh straneh

Kot rezultat dobim

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

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

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

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

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  $y$

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

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

in druga odvoda

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

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

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 ekponente na obeh straneh rezultat sta navadni enačbi

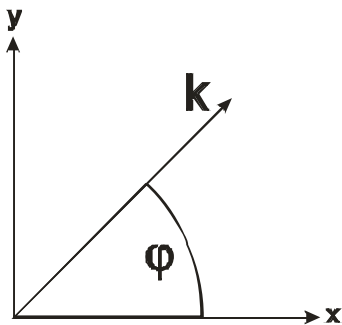
$$+\frac{\hbar^2}{2m} k^2 A + \lambda \hbar k_y B + i \lambda \hbar k_x B = E \cdot A$$

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

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 :



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

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

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

Poiščem 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

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

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

Lastna vektorja tega izraza sta

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

iz česar lahko zapišem prvo valovno funkcijo  $\psi_+$  za elektron

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

## ENERGIJA Z MINUSOM

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

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

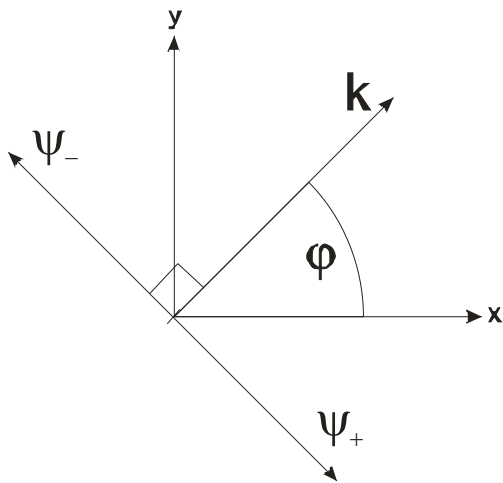
Lastna vektorja tega izraza sta

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

iz česar lahko zapišem drugo valovno funkcijo  $\psi_-$  za elektron

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

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



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