Ελεύθερο σωματίδιο

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

$[H, \vec{P}] = 0 \Rightarrow H, \vec{P}$ κοινά ιδιοδιανύσματα

$$\hat{p}\, u_{\vec{k}} = \hbar \vec{k}\, u_{\vec{k}} \qquad u_{\vec{k}} \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad \hat{p} \to \hbar \vec{k}$$

$$H\psi = E\psi \Rightarrow \psi \equiv u_{\vec{k}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

χρήσιμη βάση $u_{\vec{k}} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$\vec{k}$ - συνεχείς τιμές
(δεν υπάρχει περιορισμός)

$$\psi(\vec{r},0) = \int \phi(\vec{k})\, u_{\vec{k}}\, d^3k.$$

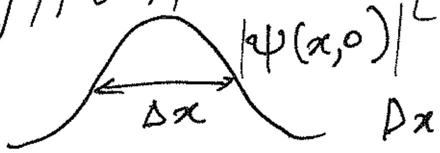
$$\phi(\vec{k}) = \langle u_{\vec{k}} | \psi(\vec{r},0) \rangle \equiv \int u_{\vec{k}}^{*}\, \psi(\vec{r},0)\, d^3r$$

$\phi(\vec{k})$ μετασχηματισμός Fourier του $\psi(\vec{r},0)$

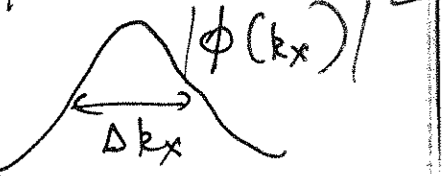
$|\phi(\vec{k})|^2 d\vec{k}$ πιθανότητα. $\vec{k}$ στο διάστημα $d\vec{k}$

$\psi(\vec{r},t) \Rightarrow ?$

$$\int |\phi(\vec{k})|^2 d^3k = 1$$



$\Delta x \cdot \Delta k_x \sim \frac{1}{2}$



30/9

Κυματοπακέτο → εντοπισμένο σωματίδιο

$$\phi_k(x) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \to |\psi|^2 = \frac{1}{2\pi}$$ ελεύθερο (πρόβλημα κανονικοποίησης)

$$\phi_k(x) = \sqrt{\frac{1}{L}}\, e^{ikx} \qquad k = \frac{2\pi}{L} n$$ ελεύθερο με περιοδικές συνθήκες

$$|\psi|^2 \sim \frac{1}{L} \qquad \psi(x+L) = \psi(x)$$

Εντοπισμένο σωματίδιο σε $\Delta x << L$

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k)\, e^{ikx}\, dk \equiv \int_{-\infty}^{\infty} g(k)\, \phi_k(x)\, dk$$

υπέρθεση των ιδιοκαταστάσεων του ελεύθερου ηλεκτρονίου
Το k - παίρνει συνεχείς τιμές → ολοκλήρωμα
Δεν είναι απαραίτητα στάσιμη κατάσταση
αν είναι προσεγγιστικά ικανοποιημένοι
Σημαντικό για να περιγράψουμε την κίνηση του ελεύθερου σωματιδίου. Θα επανέλθουμ

Αν $g(k)$ - εντοπισμένη γύρω από k_0 με εύρος Δk τότε από τις ιδιότητες μετασχηματισμού Fourier η $\psi(x,0)$ είναι εντοπισμένη σε Δx με $\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k}$.

Κβαντομηχανική ερμηνεία με την αρχή ...

Μέτρηση ορμής → $\hbar k$ με πιθανότητα $\sim |g(k)|$
Αβεβαιότητα στην ορμή → $\hbar \Delta k$.

Γκαουσιανό κυματοπακέτο

$$g(k) = g_0\, e^{-\alpha^2 (k-k_0)^2/4}, \qquad g_0 = \left(\frac{\alpha^2}{4\pi}\right)^{1/4}$$

από κανονικοποίηση

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2 dx = \frac{1}{2\pi}\int dx \left\{\int dk\, g^*(k) e^{-ikx}\right\}\left\{\int dk'\, g(k') e^{ik'x}\right\}$$
$$= \int dk\, |g(k)|^2 = g_0^2 \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha^2}} = 1$$

διότι $$\frac{1}{2\pi}\int dx\, e^{i(k'-k)x} = \delta(k'-k)$$

και $$\int_{-\infty} dk' f(k')\, \delta(k'-k) = f(k)$$

~~Συμπληρώνουμε το τετράγωνο~~
Χρησιμοποιήσαμε $$\int_{-\infty} dk\, e^{-\lambda (k-k_0)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$ με $\lambda = \alpha^2/4$

Ποιά είναι η κατανομή της πιθανότητας στο χώρο;

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi\alpha^2}\right)^{1/4} e^{ik_0 x}\, e^{-x^2/\alpha^2}$$

στον εκθέτη

$$ikx - \frac{\alpha^2 (k-k_0)^2}{4} = \frac{\alpha^2}{4}\left[k - k_0 - \right.$$

$$ikx - \frac{\alpha^2}{4}(k-k_0)^2 = ikx_0 + ix(k-k_0) - \frac{\alpha^2}{4}(k-k_0)^2$$

$$= ikx_0 - \frac{\alpha^2}{4}\left[k-k_0-\frac{2ix}{\alpha^2}\right]^2 - \frac{x^2}{\alpha^2}$$

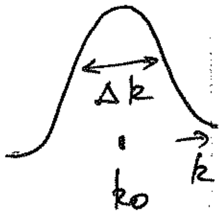
$$e^{ikx_0} \qquad \int dk \to \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha^2}} \qquad e^{-x^2/\alpha^2}$$

κατανομή πιθανότητας

$$|\psi(x,0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi\alpha^2}}\, e^{-2x^2/\alpha^2}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle\psi|x^2|\psi\rangle - \cancel{\langle\psi|x|\psi\rangle}^{\,0\;2}} = \alpha/2$$

$$\Delta k = \sqrt{\langle\psi|\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2|\psi\rangle - \langle\psi|\frac{p}{\hbar}|\psi\rangle^2} = \frac{1}{\alpha}$$



$$\Delta x\,\Delta k = \frac{1}{2} \quad = \quad \Delta x\,\Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad \text{σε } t=0$$

ελάχιστη απόκλιση (ισότητα)

$$e^{-\frac{\alpha^2}{4}(k-k_0)^2}$$

Αν $g(k) = |g(k)|\, e^{i\varphi(k)} \Longrightarrow$

$$\psi(x,0) \longrightarrow e^{i\varphi(k_0)}\psi(x-x_0,0) \qquad x_0 = \frac{d\varphi}{dk}\Big|_{k=k_0}$$

Χρονική εξέλιξη

Εύκολη για ελεύθερο σωματίδιο

$\psi(x,0)$ — υπέρθεση $\phi_k \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$

ιδιοκαταστάσεων ως $H = \frac{p^2}{2m}$

$$\phi_k(x) \xrightarrow{t} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\, e^{-iE_k t/\hbar} \qquad E_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

$$\to \phi_k(x)\, e^{-i\omega(k)t}, \quad \omega(k) = \frac{E_k}{\hbar}$$

Για εντοπισμένο $g(k)$ μόνο $k \simeq k_0$

$$\omega(k) = \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0}(k-k_0) + \underbrace{\frac{1}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}\Big|_{k_0}(k-k_0)^2 + \cdots}$$

ταχύτητα ομάδας

$$v_g(k_0) \equiv \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

Διασπορά.

$$\mu \equiv \frac{d^2\omega}{dk^2} = \frac{\hbar}{m}$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\, g(k)\, e^{i(kx-\omega_k t)}$$

$$\simeq e^{i(k_0x-\omega_0 t)}\, R(x-v_g t, t)$$

λόγω διασποράς

μετατόπιση σωματιδίου

$$R(x - v_g t, t) = \frac{1}{(\pi \sigma^2(t))^{1/4}} e^{-\frac{(x - \frac{\hbar k_0}{m} t)^2}{\sigma^2(t)}}$$

$$\sigma(t) = \sigma_0 \sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{m\sigma_0^2}} \qquad \sigma_0 = \frac{\alpha}{2}$$

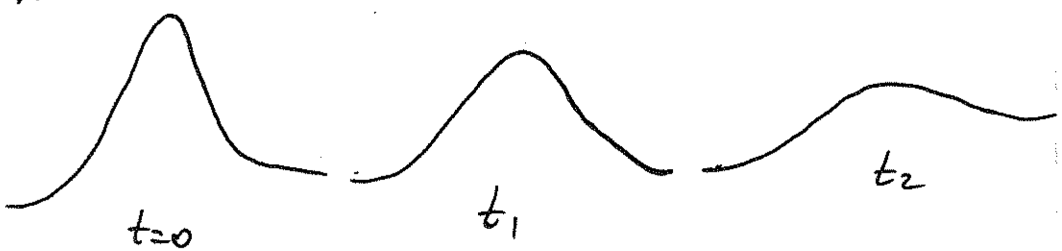
$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi |\sigma(t)|^2}} e^{-2\sigma_0^2 \frac{(x - \frac{\hbar k_0}{m} t)^2}{|\sigma(t)|^4}}$$

$$\sigma(t=0) = \sigma_0 = \frac{\alpha}{2} = \Delta x(t=0)$$

$$\Delta x(t) \simeq \sqrt{(\Delta x_0)^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 (\Delta x)^2}}$$ αυξάνει μ t

ελαττώνεται μέ t

Πλάτος ~



Ο.Κ $\tau = \frac{m \Delta x}{\hbar}$ - χρόνος διάχυσης

$\tau_\Delta = \frac{\Delta x}{v_g} = \frac{\Delta x\, m}{\hbar k_0}$ - χρόνος διέλευσης Δx

$$\frac{\tau}{\tau_t} \simeq \frac{k_0}{\Delta k} >> 1$$

Δk - παραμένει σταθερό μέ τόν χρόνο

$\Delta k\, \Delta x(t)$ - αυξάνει

$t>0$ $\qquad \Delta p\, \Delta x(t) \geq \frac{\hbar}{2}.$

Διεύρυνση είναι όπως γιά τήν διάχυση καθώς κινείται το κυματοπακέτο.

$$\psi_{k_0}(x,0) = \int \frac{dk}{2\pi}\, e^{ikx}\, g(k-k_0)$$

$$g_0\, e^{-\underline{(k-k_0)^2}\,\alpha^2/4} \quad , \quad g_0 = \left(\frac{\alpha^2}{4\pi}\right)^{1/4}$$

$t=0$

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\; e^{-2\frac{x^2}{\alpha^2}}$$

σε $t=0$ μέγιστο $x=0$

$$\psi_{k_0}(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi}\, e^{i\underbrace{(kx-\omega(k)t)}_{\phi(k)}}\, g(k-k_0)$$

Μέγιστη συνεισφορά

Διάφορα k έχουν ίδια φάση

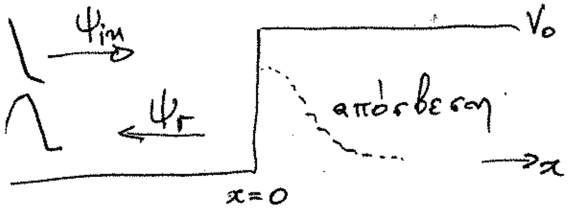
$$\frac{\partial}{\partial k}\phi(k) = 0 \implies \frac{\partial}{\partial k}\left(kx - \omega(k)t\right) = 0$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \to \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = v_g$$

$$\implies x - v_g t = 0 \implies \boxed{x = v_g t}$$

μετά χρόνο t τό μέγιστο μετατοπίζεται κατά $x = v_g t$ στό χώρο

Σκέδαση κυματοπακέτου από φράγμα



$\alpha \to$ μικρό (όλο το κυματοπακέτο ανακλάται

$V_0 \gg \hbar\omega_{k_0}$

$$\psi_{in}(x,t) = \int \frac{dk}{2\pi}\, e^{i(kx-\omega(k)t)}\; e^{+2i\Delta\phi(k)}\; g(k-k_0)$$

$$\psi_r(x,t) = (-)\int \frac{dk}{2\pi}\, e^{i(-kx-\omega(k)t)}\; e^{\cancel{+}2i\Delta\phi(k)}\; g(k-k_0)$$

γιά $V_0 \to \infty$ $\Delta\phi \to 0$ $\implies$ Τό $(-)$ παίρνει υπόψη φάση π

Στάσιμη φάση $\phi(k) = -kx - \omega(k)t \cancel{+} 2i\Delta\phi(k)$

$$\frac{\partial\phi}{\partial k} = 0 \implies x = -v_g t \cancel{+} 2\underline{\frac{d\Delta\phi}{dk}}$$

~~χρονική~~ καθυστέρηση

e σέ 3-δ (ελεύθερο)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec r) = E\psi(\vec r) \qquad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

χωριζομένων μεταβλητών $H = H_x + H_y + H_z$

κβαντικοί αριθμοί $k_x, k_y, k_z \Rightarrow \vec k$

$$\psi_{\vec k}(\vec r) = \psi_{k_x}(x)\,\psi_{k_y}(y)\,\psi_{k_z}(z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \to \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec k\cdot\vec r}$$

$$E_{\vec k} = \epsilon_{k_x} + \epsilon_{k_y} + \epsilon_{k_z} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2+k_z^2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Βεβαιωθείτε γιά τό αποτέλεσμα

Ελεύθερο e σέ κουτί $(L_x \times L_y \times L_z)$

εύκολο γιά περιοδικές συνθήκες

$$\psi_{k_x}(x+L_x) = \psi_{k_x}(x) \;\to\; e^{ik_x L_x} = 1$$

$$\Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2$$

$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x} \to 0 \quad \text{γιά } L_x \to \infty$$

Εύκολη καί η κανονικοποίηση

$$\psi_{k_x}(x) = \sqrt{\frac{1}{L_x}}\, e^{ik_x x}$$

Επέκταση σέ τρείς διαστάσεις

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z$$

$$\psi_{\vec k}(\vec r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec k\cdot\vec r} \qquad E_{\vec k} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)$$

Ω — όγκος κουτιού

Ικανοποιητικό γιά πολλά ανεξάρτητα e σέ ένα μεγάλο (κουτί)

Γιά 1 e σέ κουτί σέ 1-δ

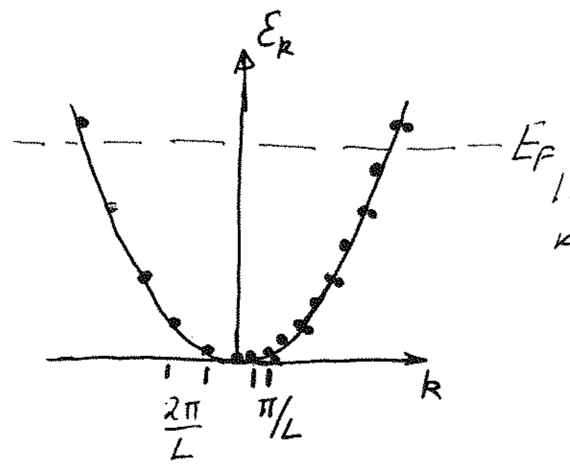
$$\psi_q = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin qx \qquad q = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Ίδιος αριθμός q καί k γιά τήν ίδια ενέργεια

Σέ 3-δ

$$\psi_{\vec q} = \sqrt{\frac{2}{\Omega}} \sin q_x x \, \sin q_y y \, \sin q_z z$$

$$E_{\vec q} = \frac{\hbar^2}{2m}(q_x^2+q_y^2+q_z^2)$$



Ίδιος αριθμός κουκίδων $\epsilon_k < E_F$

Πυκνότητα καταστάσεων $n(E)$

$$n(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E} \qquad 3-\delta$$

$$= \frac{\text{αριθμός καταστάσεων}}{\text{μονάδα όγκου μονάδα ενέργειας}}$$

1-κατάσταση όγκος $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \sim (\Delta k)^3$.

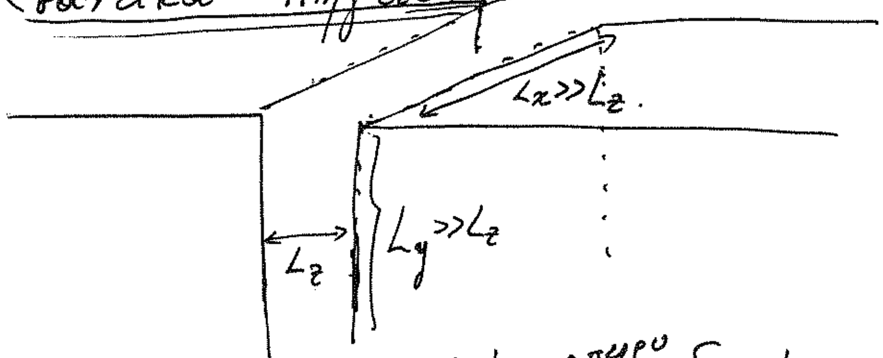
N = αριθμός καταστάσεων σε εύρος δk.

$$= \frac{\text{όγκος } \cancel{\text{\# καταστάσεων}} \text{ ανάμεσα σε δύο σφαίρες}}{\text{όγκο μιας κατάστασης}}$$

$$\delta N = \frac{4\pi k^2 \delta k}{(2\pi)^3/\Omega} \cdot 2 \leftarrow \text{λόγω σπίν}$$

$$n(E) = \frac{\delta N}{\Omega\, \delta E} = \frac{k^2}{\pi^2}\frac{\delta k}{\delta E} \sim k \sim \sqrt{E}$$

Κβαντικά πηγάδια $\qquad S = L_x L_y$

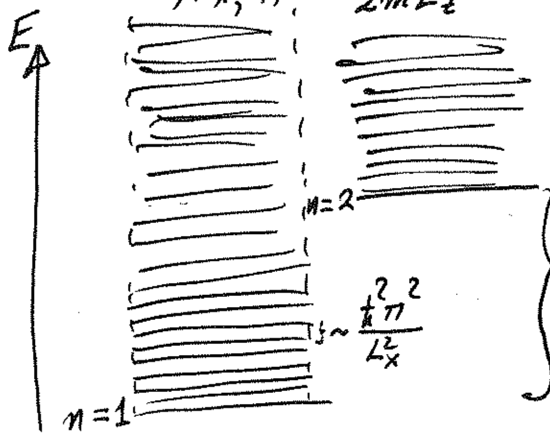


Ηλ. εντοπισμένα σε ένα άπειρο πηγάδι εύρους L_z στην z-

Ελεύθερα στις άλλες δύο x-y

$$\psi_{n,k_x,k_y}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{L_z S}}\; e^{ik_x x}\, e^{ik_y y} \sin\frac{n\pi z}{L_z}$$

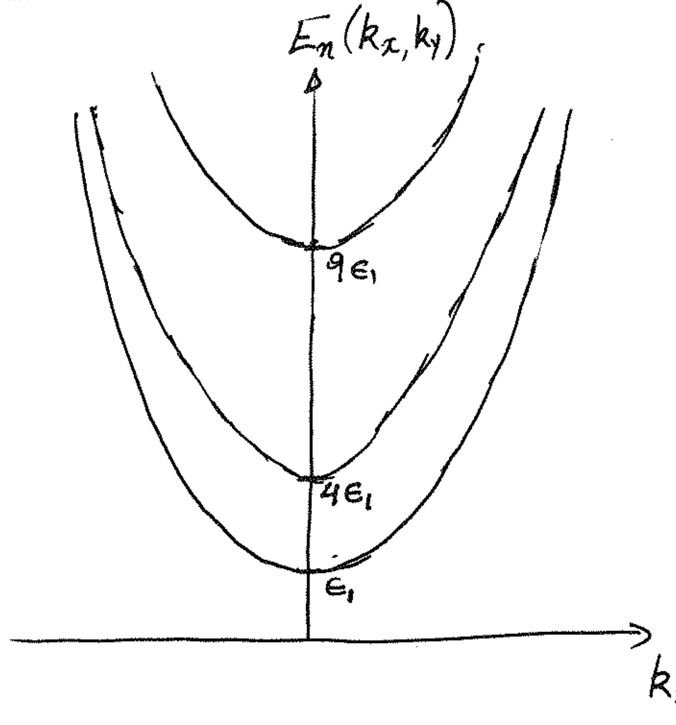
$$E_{n,k_x,k_y} = \overbrace{\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_z^2} n^2}^{\epsilon_n} + \frac{\hbar^2(k_x^2+k_y^2)}{2m} \qquad n = 1, 2, \cdots$$



$$3\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_z} >> \frac{\hbar^2 2\pi^2}{2mL_x^2}$$

$L_x \to \infty$

υποζώνες

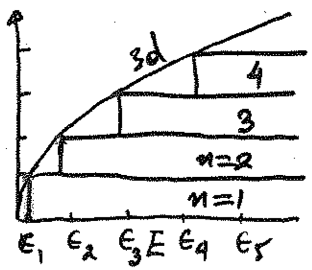


Παραβολική επιφάνεια για κάθε n

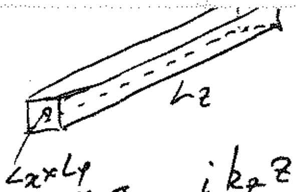
Για κάθε n-υποζώνη   2-δ ηλεκτρονικό αέριο $\epsilon = \hbar^2 k^2/2m$

$$\delta N_2 = \frac{2\pi k\,\delta k}{(2\pi)^2/S}\cdot 2 \qquad \frac{\delta k}{\delta E} = \frac{1}{\hbar^2 k/m}$$

$$n_{2d}(E) = \frac{\delta N_2}{S\,\delta E} = \frac{1}{\pi}\,k\,\frac{\delta k}{dE} = \frac{m}{\pi\hbar^2}$$



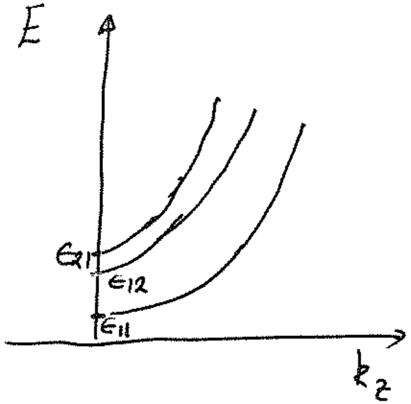
Κβαντικά Σύρματα

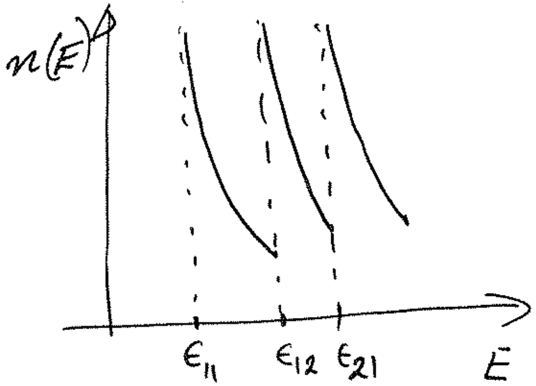


$L_z \to \infty$ $L_x, L_y << L_z$.

$$\psi_{n_x,n_y,k_z} = \frac{2}{\sqrt{L_x L_y L_z}}\sin\frac{n_x\pi}{L_x}x\,\sin\frac{n_y\pi}{L_y}y\;e^{ik_z z}$$

$$E_{n_x n_y k_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_x^2}n_x^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_y^2}n_y^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$





$$n_{1d}(E) = 2\frac{\delta k_z/(2\pi/L_z)}{L_z\,\delta E} = \frac{2}{2\pi}\frac{\delta k_z}{\delta E}\frac{1}{\hbar^2 k_z/m}$$

$$= \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}}\left(E-\epsilon_{11}\right)^{-1/2}$$ 1η υποζώνη

διότι $E = \epsilon_{nm} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$

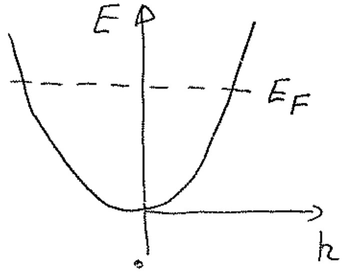
N- ηλεκτρόνια σε 3-δ (T=0)

$\Omega = L_x L_y L_z$

$\psi_{\vec k} = \sqrt{\frac{1}{\Omega}}\, e^{i\vec k\cdot\vec r}$ $\vec k \equiv (k_x, k_y, k_z)$

$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x$

$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



Αρχή Pauli

$0 < E < E_F \; (T=0)$

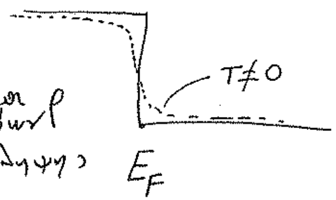
$f(E) = \begin{cases} 1 & E<E_F \\ 0 & E>E_F \end{cases}$

$$\int_0^{E_F} n(E)\, dE = \frac{N}{\Omega}$$

$f(E)=1$ πιθανότητα κατάληψης

πυκνότητα ηλεκτρονίων ρ

πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα E & Ω



$$\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^{E_F} dE\,\sqrt{E} = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2} = \rho \Rightarrow E_F$$

$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2\rho)^{2/3}$ $m \to m_{eff}$ σε στερε

$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \Rightarrow k_F = (3\pi^2\rho)^{1/3}$

$V_F = \frac{\hbar k_F}{m}$ σημαντική ταχύτητα για ιδιότητες μεταφοράς

$V_F \gg V_{drift}$ λόγω σκεδάσεων

Φωτόνια σε 3-δ κύβο

$\Omega = L^3$ $e^{i(\vec k\cdot\vec r - \omega t)}$ $E=\hbar\omega$, $\omega=c$

περιοδικές οριακές συνθήκες

$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x \ldots$ $E = \hbar c k$

$$n(E) = \frac{(4\pi k^2\delta k)/[(2\pi)^3/\Omega]}{\Omega\,\delta E}\cdot 2 = \frac{k^2}{\pi^2}\frac{\delta k}{\delta E} = \frac{k^2}{\pi^2}\frac{1}{\hbar c}$$

$n(E) = \frac{E^2}{\pi^2\hbar^3 c^3}$ $\frac{\text{αριθμός καταστάσεων φωτονίων}}{\text{μονάδα } \Omega \text{ \& } E}$

φωτόνια - μποζόνια | 2 κάθετες πολώσεις φωτός στο χώρο

πιθανότητα κατάληψης

$g(E) = \frac{1}{e^{E/k_BT}-1}$

φασματική πυκνότητα φωτονίων $n(E)g(E)$

$\int dE\, n(E) g(E)$ - πυκνότητα φωτονίων

$\omega = \frac{ck}{n_r}$, n_r - δείκτης διάθλασης

Ισοτροπικά διηλεκτρικά χωρίς απώλειες