جلسه پنجم : انرژی جنبش در T.B. حالتهای دو ذره‌ای ← مدل هابارد

فصل ۵: سیستم‌های ناپیوسته   چگالی واگرایشی و هامیلتونی

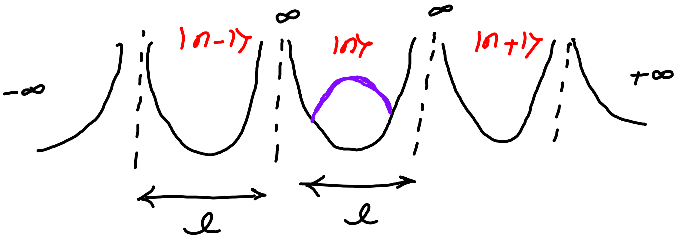
Note Title 1399/02/03

– اپراتورهای $\hat{\psi}$ و $\hat{\psi}^{+}$ که شبیه اپراتورهای خلق و فنا بودند اما در فضای مکان

– کوانتش دوم یعنی اپراتورها را به صورت ضرب اپراتورهای خلق و فنا بنویسیم.

انرژی جنبش و هامیلتونی   Tight Binding

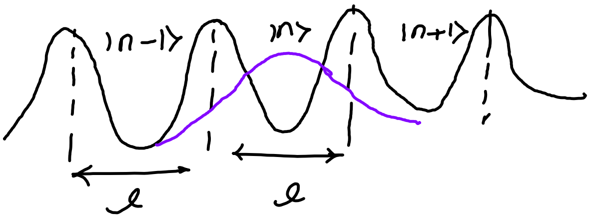
بحث Q.M.



$|n\rangle$: ویژه‌کت هامیلتونی و n شماره خانه است که می‌تواند از $-\infty$ تا $+\infty$ تغییر کند.

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle$$

ذره در هر کدام از خانه‌ها در حالت پایه (مثلاً) قرار گرفته است.



اگر پتانسیل محدود باشد ← نفوذ تابع موج به خانه‌های اطراف

T.B. : فرض کنید تابع موج فقط به خانه‌های همسایه کشیده می‌شود:

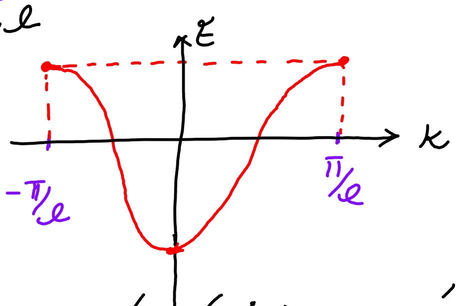
$$H|n\rangle = E_0|n\rangle - t\,|n+1\rangle - t\,|n-1\rangle$$

⟶ $|n\rangle$ ویژه‌کت هامیلتونی نیست

ویژه‌کت هامیلتونی را پیدا می‌کنیم : $|\theta\rangle$

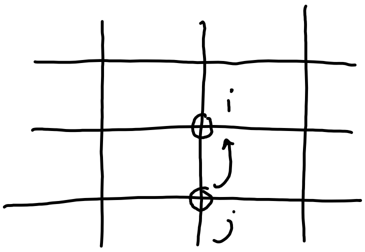
$$H|\theta\rangle = \underbrace{(E_0 - 2t\cos\theta)}_{\text{ویژه مقدار}}|\theta\rangle \qquad \theta = \overbrace{k}^{\text{عدد موج}} l$$

$$E = E_0 - 2t\cos kl \rightsquigarrow$$



بحث کوانتش دوم

شبکه‌ای از اتم‌های مختلف داریم که الکترون بین آنها حرکت می‌کند.



پریدن الکترون از خانه j ام به خانه i ام ← اپراتور c_j الکترون را در خانه j نابود می‌کند و اپراتور c_i^{+} الکترون را در خانه i ام ایجاد می‌کند.

t_{ij} : تغییر انرژی جنبش

T.B. : $t_{ij} = t$ و فقط برای همسایه نزدیک

$$\hat{H} = \sum_{i,j} (-t_{ij}) \overbrace{\hat{c}_i^{+}\hat{c}_j}^{\text{غیرقطری نیست}} \longrightarrow H_{T.B.} = -t \sum_{\underbrace{i,\tau}_{\text{جهت حرکت}}} \hat{c}_i^{+} c_{i+\tau}$$

$\tau = \hat{x}$, $\tau = \hat{y}$

$$\underbrace{\hat{c}_i^{+}\hat{c}_i = \hat{n}_i}_{}$$

در این صورت هامیلتونی قطری است

شبکه یک بعدی : $H_{T.B.} = -t \sum_i c_i^{+} c_{i+1}$

هامیلتونی را به پایه متعامد می‌بریم و قطری می‌کنیم

$$\hat{c}_i = \sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik\cdot r_i}\,\hat{c}_k$$

فضای مکان — فضای معکوس

$$c_i^\dagger = \sum_q \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-iq\cdot r_i}\,\hat{c}_q^\dagger$$

$$\longrightarrow H = -t/V \sum_{i\tau}\sum_q e^{-iq\cdot r_i} c_q^\dagger \sum_k e^{ik(\vec r_i+\vec r_\tau)} c_k$$

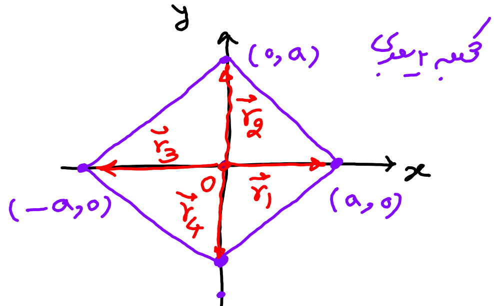
$$\Rightarrow H = -t/V \sum_{i\tau}\sum_{kq} e^{-i(\vec q-\vec k)\cdot\vec r_i + i\vec k\cdot\vec r_\tau}\,\hat c_q^\dagger c_k = -\frac{t}{\cancel{V}}\sum_\tau\sum_{kq}\cancel{V}\,\delta_{qk}\, e^{i\vec k\cdot\vec r_\tau} c_q^\dagger c_k$$

$$= -t\sum_\tau\sum_k e^{i\vec k\cdot\vec r_\tau}\, c_k^\dagger c_k \quad (1)$$

هامیلتونی قطری است.

داریم: $\sum_i e^{-i(\vec q-\vec k)\cdot\vec r_i} = V\delta_{qk}$

حل مستقل: $H=\sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k$ هامیلتونی کوانتش دوم یافته (۲)



(۲)، (۱) از مقایسه $\Rightarrow \varepsilon_k = -t\sum_\tau e^{i\vec k\cdot\vec r_\tau}$

$$\varepsilon_k = -t\left\{e^{i\vec k\cdot\underbrace{\vec r_1}_{a\hat x}} + e^{i\vec k\cdot\underbrace{\vec r_2}_{a\hat y}} + e^{i\vec k\cdot\underbrace{\vec r_3}_{-a\hat x}} + e^{i\vec k\cdot\underbrace{\vec r_4}_{-a\hat y}}\right\}$$

$$= -t\left\{e^{ik_xa} + e^{ik_ya} + e^{-ik_xa} + e^{-ik_ya}\right\} = -2t(\cos k_xa + \cos k_ya)$$

$2\cos k_xa$ $\quad$ $2\cos k_ya$

دوذره ⟵ باهم برهم‌کنش دارند.

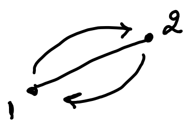
اپراتور کوانتش دوم یافته را تعمیم بدهیم؟

حالت تک ذره‌ای: $\hat A = \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta}\, a_\alpha^\dagger a_\beta$

حالا برای دوذره: $\hat A = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} A_{\alpha\beta\gamma\delta}\, a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta$

اپراتور A در فضای مکان: $\hat A = \int d^3x\, \psi^\dagger(x)\hat A(x)\psi(y)$

اپراتور دوذره‌ای در فضای مکان: $V = \frac{1}{2}\int d^3x\, d^3y\, \hat\psi^\dagger(\vec x)\hat\psi^\dagger(\vec y)\hat V(\vec x,\vec y)\hat\psi(\vec x)\hat\psi(\vec y)$ (۳)



برای این که برهم‌کنش دوباره شمرده نشود

normal ordering: اپراتورهای خلق سمت چپ اپراتورهای فنا هستند ⟶ $\langle 0|V|0\rangle = 0$

اگر این N.O. رعایت نشود، چه اتفاقی می‌افتد؟ ⟶ جمله خودانرژی در سیستم اضافه می‌آید.

Number operator density: $\hat\rho(x) \equiv \psi^\dagger(x)\psi(x)$

رابطه (۳) را اشتباهی می‌نویسیم: $V = \frac12\int d^3x\, d^3y\, V(x,y)\underbrace{\psi^\dagger(x)\psi(x)}_{\hat\rho(x)}\underbrace{\psi^\dagger(y)\psi(y)}_{\hat\rho(y)}$

$$\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(y) = \psi^{\dagger}(x)\underbrace{\psi(x)\psi^{\dagger}(y)}\psi(y)$$

$$-\psi^{\dagger}(y)\psi(x) + \delta^{(3)}(x-y) \longleftarrow \{\psi(x), \psi^{\dagger}(y)\} = \delta^{(3)}(x-y)$$

$$* \; \{\psi(x), \psi(y)\} = \{\psi^{\dagger}(x), \psi^{\dagger}(y)\} = 0$$

$$= -\psi^{\dagger}(x)\psi^{\dagger}(y)\underbrace{\psi(x)\psi(y)}_{*:\, -\psi(y)\psi(x)} + \delta^{3}(x-y)\psi^{\dagger}(x)\psi(y) = +\underbrace{\psi^{\dagger}(x)\psi^{\dagger}(y)\psi(x)\psi(y)}_{\text{اپراتورهای n.o. شده}} + \underbrace{\delta^{3}(x-y)\psi^{\dagger}(x)\psi(y)}_{\text{جمله اضافه}}$$

$$\Longrightarrow V_{\text{اشتباه}} = \underbrace{V_{\text{درست}}}_{\text{رابطه ③}} + \frac{1}{2}\underbrace{\int d^3x\, d^3y\, \delta^3(x-y)\psi^{\dagger}(x)\psi(y)V(x,y)}_{\int d^3x\, \psi^{\dagger}(x)\psi(x)V(x,x)}$$

self-energy term

به فضای معکوس می‌رویم:

$$\hat{\psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{v}}\sum_{p}\hat{a}_p e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}, \quad \hat{\psi}^{\dagger} = \dots$$

$$V = \frac{1}{2}\int d^3x\, d^3y\, \underbrace{\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x})}_{\sum_{p_4}}\underbrace{\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{y})}_{\sum_{p_3}}\hat{V}(\vec{x},\vec{y})\underbrace{\hat{\psi}(\vec{x})}_{\sum_{p_2}}\underbrace{\hat{\psi}(\vec{y})}_{\sum_{p_1}}$$

$$= \frac{1}{2v^2}\int d^3x\, d^3y\, e^{i(-p_4\cdot x - p_3\cdot y + p_2\cdot x + p_1\cdot y)}\sum_{p_1,p_2,p_3,p_4} a^{\dagger}_{p_4}a^{\dagger}_{p_3}V(x-y)\,a_{p_1}a_{p_2}$$

$$(-p_4+p_2)x + y\cdot(-p_3+p_1), \quad x = (z+y)$$

$$z = x-y \longrightarrow d^3z = d^3x$$

$$V = \frac{1}{2v^{2}}\sum_{p_1\cdots p_4} a^{\dagger}_{p_4}\cdots a_{p_1}\underbrace{\int d^3z\, e^{i\overbrace{(-p_4+p_2)}^{q}z}V(z)}_{v\,\tilde{V}_q}\underbrace{\int d^3y\, e^{i(p_1+p_2-p_3-p_4)}}_{v\,\delta(p_1+p_2-p_3-p_4)}$$

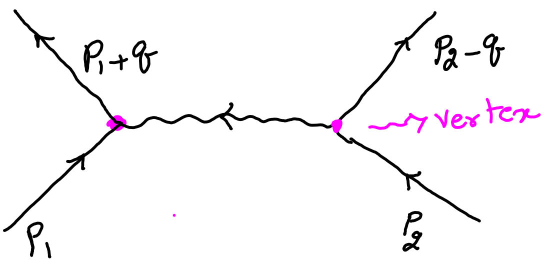
تبدیل فوریه V در فضای معکوس: $v\,\tilde{V}_q$

در صورتی غیر صفر است که: $p_1+p_2-p_3-p_4=0$

$$p_2 - p_4 = p_3 - p_1 = q$$

$$p_4 = p_2 - q, \quad p_3 = p_1 + q$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{p_1,p_2,q}\tilde{V}_q\, a^{\dagger}_{p_2-q}\, a^{\dagger}_{p_1+q}\, a_{p_2}\, a_{p_1}$$



نمودارهای فاینمن

Feynman diagrams

مدل Hubbard

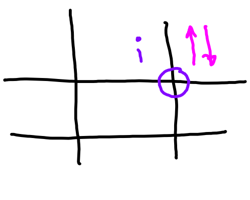
$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma}(-t_{ij})\,c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{ijkl\sigma\sigma'}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{j\sigma'}V_{ijkl\cancel{\sigma\sigma'}}\hat{c}_{k\sigma'}\hat{c}_{l\sigma}$$

۱. الکترونها برگشت اسپین ندارند.

۲. پتانسیل به درجه آزادی اسپین ربط ندارد ← مثلاً پتانسیل کولنی است.

۳. پتانسیل بین الکترونهایی است که در یک سایت هستند: $V_{iiii} = U$

الکترونها اسپین‌های متفاوت دارند



$$H = \sum_{ij\sigma} (-t_{ij})\, c_{i\sigma}^{+} c_{j\sigma} + U \sum_i \underbrace{c_{i\uparrow}^{+} c_{i\downarrow}^{+} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}}_{} \qquad n = c^{+}c$$

$$c_{i\uparrow}^{+} c_{i\uparrow}\, c_{i\downarrow}^{+} c_{i\downarrow} = n_{i\uparrow}\, n_{i\downarrow}$$

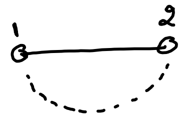
اگر سایت‌ها فاصله‌ی زیادی داشته باشیم و تابع‌ها همپوشانی نداشته باشیم : $U = 0$

T.B.

$$H = -t \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^{+} c_{i+1\sigma} = -t \left\{ \sum_i c_{i\uparrow}^{+} c_{i+1\uparrow} + \sum_j c_{j\downarrow}^{+} c_{i+1\downarrow} \right\}$$

$$= -t \left\{ c_{1\uparrow}^{+}\ {}_{2\downarrow} + c_{1\downarrow}^{+} c_{2\downarrow} \right\} = -t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

یک شبکه دو سایتی داریم :



* مسائل 4.2 و 4.3 فصل چهارم را حل کنید.

فصل ۵: سیستم‌های پیوسته

$$L = L(q_i, \dot q_i, \cancel{t})$$

دیدگاه هامیلتونی :

$$\boxed{\frac{dL}{dt}} = \underbrace{\frac{\partial L}{\partial q_i}} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial L}{\partial \dot q_i} \frac{d\dot q_i}{dt} = \boxed{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q_i} \dot q_i\right)} \Longrightarrow \frac{d}{dt}(\underbrace{p_i \dot q_i - L}_{H}) = 0$$

p_i : تکانه کانونیک

H : هامیلتونی

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q_i}\right) \leftarrow \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q_i} = 0$$

$$H = p_i \dot q_i - L \Longrightarrow \delta H = p_i\, \cancel{\delta \dot q_i} + \boxed{\delta p_i}\, \dot q_i - \Big(\frac{\partial L}{\partial q_i} \boxed{\delta q_i} + \cancel{\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot q_i}}_{p_i} \delta \dot q_i} \Big)$$

$$H = H(q_i, p_i) \Longrightarrow \delta H = \frac{\partial H}{\partial q_i} \boxed{\delta q_i} + \frac{\partial H}{\partial p_i} \boxed{\delta p_i}$$

$$\Longrightarrow \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i} = -\dot p_i \quad , \quad \dot q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

معادلات هامیلتون :

$$\{A, B\}_{P.B.} \equiv \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}$$

$$\dot q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \dot p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$F = F(p_i, q_i, \cancel{t}) \Longrightarrow \frac{dF}{dt} = \cancel{\frac{\partial F}{\partial t}} + \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt} = \{F, H\}_{P.B.}$$

0

اگر $\{F, H\} = 0 \Longrightarrow dF/dt = 0 \Longrightarrow F$: ثابت حرکت

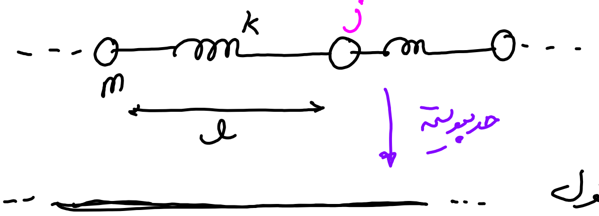
معادله حرکت هایزنبرگ : $\frac{d}{dt}\langle \hat F \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat F, \hat H] \rangle$

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\}_{P.B.}$$

$$\{F, H\}_{P.B} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat F, \hat H] \rangle$$

$$\{q_j, p_k\}_{P.B.} = \delta_{jk} \Longrightarrow [\hat q_i, \hat p_k] = i\hbar\, \delta_{jk} \checkmark$$

سیستم‌های کلاسیک



در حد پیوسته : $l \to 0$ ، $m \to 0$

$\rho = \frac{m}{l} = $ ثابت : جرم واحد طول

$q_j(t)$: جابجایی جرم j ام در زمان t $\xrightarrow{\text{در حد پیوسته}}$ $\varphi(\vec{x},t)$: در هر نقطه $\vec{x}$ یک درجه آزادی مستقل φ تعریف می‌کنیم

میدان کلاسیکی : یک ماشین که یک position را در هر فضا ـ زمان می‌گیرد و یک موجود را به عنوان خروجی تحویل می‌دهد

دامنه میدان در آن نقطه

- scalar : میدان دما $T(\vec{x},t) \longrightarrow$ میدان اسکالر
- vector : میدان E.M. $\vec{E}(\vec{x},t)$ یا $\vec{B}(\vec{x},t) \longrightarrow$ میدان برداری
- tensor : تانسور میدان E.M. $F_{\mu\nu} \longrightarrow$ میدان تانسوری

چگالی‌های هامیلتونی و لاگرانژی

مثال بخش 2.4 : $H = \sum_j \frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2} k (q_{j+1} - q_j)^2$

$L = $ ″ $-$ ″

در حد پیوسته : $l \to 0$ ، $\sum \to \int \Longrightarrow \sum_j \to \frac{1}{l}\int dx$

$$\sum \frac{p_j^2}{2m} = \sum \frac{1}{2} m v^2 \longrightarrow \frac{1}{l}\int dx \, \frac{1}{2} m \left(\frac{\partial \varphi(\vec{x},t)}{\partial t} \right)^2 = \int dx \, \frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2$$

$v = dx/dt$

تعریف مشتق : $df/dx = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{f(x+\epsilon) - f(x)}{\epsilon} \longrightarrow \frac{q_{j+1} - q_j}{l} = \frac{\partial \varphi(\vec{x},t)}{\partial x}$

جمله پتانسیل $= \sum \frac{1}{2} k l^2 \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{l} \right)^2 \longrightarrow \frac{1}{\cancel{l}} \int dx \, \frac{1}{2} \underbrace{k l^{\cancel{2}}}_{\mathcal{T}} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2$

$\mathcal{T}$: string tension = ثابت

$$\longrightarrow H = \int d^3x \, \underbrace{\left[\frac{1}{2} \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} \mathcal{T} (\vec{\nabla} \varphi)^2 \right]}_{\text{چگالی هامیلتونی} : \mathcal{H}}$$

$$L = \int d^3x \, [\underbrace{\text{″} \quad - \quad \text{″}}_{\text{چگالی لاگرانژی} : \mathcal{L}}] \quad , \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2} \rho \dot{\varphi}^2 + \frac{1}{2} \mathcal{T} (\vec{\nabla} \varphi)^2$$

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \longrightarrow \pi(x) = \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \dot{\varphi}} = \rho \dot{\varphi} = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial t}$$

که مشتق زمانی

$$H = p_i \dot{q}_i - L \longrightarrow \mathcal{H} = \pi \dot{\varphi} - \mathcal{L}$$