Mechanika Kwantowa

kurs dla doktorantów – 26 i 27

15.6.2009

Polaron.

1. Oddziaływanie elektronu z siecią krystaliczną opisujemy przy pomocy hamiltonianu:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \hbar\omega \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a^\dagger_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + V(x). \tag{1}$$

gdzie $\vec{p}$ jest pędem elektronu a opeatory $a^\dagger_{\vec{k}}$, $a_{\vec{k}}$ opisują podłużne wzbudzenia sieci (polaron). Potencjał oddziaływania dany jest wzorem

$$V(x) = i\left(\sqrt{2}\pi\alpha\right)^{1/2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{k}\left[a^\dagger_{\vec{k}}\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} - a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\right] \tag{2}$$

gdzie α jest stałą materiałową.

2. Połóżmy $\hbar = \omega = m = 1$. Wprowadzając zmienne

$$q_{\vec{k}} = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger_{-\vec{k}} - a_{\vec{k}}\right),\ q^\dagger_{\vec{k}} = -\frac{i}{\sqrt{2}}\left(a_{-\vec{k}} - a^\dagger_{\vec{k}}\right) = q_{-\vec{k}} \tag{3}$$

pokazać, że hamiltonianowi (1) odpowiada euklidesowy lagranżjan

$$L_E = \frac{1}{2}\vec{p}^2 + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left\{\frac{1}{2}\left(\dot{q}^\dagger_{\vec{k}}\dot{q}_{\vec{k}} + q^\dagger_{\vec{k}} q_{\vec{k}}\right) + \left(2\sqrt{2}\pi\alpha\right)^{1/2}\frac{1}{k}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} q_{\vec{k}}\right\}. \tag{4}$$

3. Uzasadnić, że funkcja rozdziału dana jest wzorem

$$\mathcal{Z} = \int dx(0) \int\limits_{x(0)=x(\beta)} \mathcal{D}[x(\tau)] \int dq(0) \int\limits_{q(0)=q(\beta)} \mathcal{D}[q(\tau)]\, e^{-\int_0^\beta dt\, L_E[\dot{x}(t),x(t),\dot{q}(t),q(t)]} \tag{5}$$

gdzie $\dot{x} = p$. Ponieważ (4) w zmiennych q jest w istocie lagranżjanem wymuszonego oscylatora z siłą

$$f_{\vec{k}}(x(t)) = \left(2\sqrt{2}\pi\alpha\right)^{1/2}\frac{1}{k}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}(t)}, \tag{6}$$

proszę zapisać wynik całki po $dq(0)$ korzystając z wyniku zadania z poprzedniego zestawu.

Aby oszacować energię polaronu skorzystamy z zasady wariacyjnej:

$$E - E_0 \leq \frac{1}{\beta}\left\langle S - S_0\right\rangle_{S_0}, \tag{7}$$

gdzie wariację przeprowadza się wybierając S_0. Z praktycznych powodów wybierzmy S_0 jako swobodne działanie elektronu.

4. Pokazać, że

$$S - S_0 = -\sqrt{2}\alpha \int\limits_0^\infty \frac{d^3k}{(2\pi)^2}\frac{1}{k^2}\int\limits_0^\beta dt \int\limits_0^t ds\, e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}(s)-\vec{x}(t))}\frac{e^{|t-s|-\beta}+e^{-|t-s|}}{1-e^{-\beta}} \tag{8}$$

5. Definiujemy $I(\beta)$

$$\frac{1}{\beta}\left\langle S - S_0\right\rangle_{S_0} = -\frac{\sqrt{2}\alpha}{\beta} I(\beta) \tag{9}$$

Pokazać, że wprowadzając nową *siłę*

$$\vec{f}(\tau) = i\vec{k}\left(\delta\left(\tau - t\right) - \delta\left(\tau - s\right)\right). \tag{10}$$

$I(\beta)$ jest dana jako całka po trajektoriach

$$I(\beta) \sim \int\limits_0^\beta dt \int\limits_0^t ds\, \frac{e^{-(t-s)}+e^{-\beta+(t-s)}}{1-e^{-\beta}}\frac{1}{2\pi^2}\int \frac{d^3\vec{k}}{k^2}\int\limits_{\vec{r}(0)=\vec{x}}^{\vec{r}(\beta)=\vec{x}} \mathcal{D}\left[\vec{r}(\tau)\right]\, e^{-\int\limits_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2}\frac{d\vec{r}}{d\tau}^2 - \vec{f}(\tau)\,\vec{r}(\tau)\right]}. \tag{11}$$

6. Proszę wyliczyć występującą w (11) całkę po trajektoriach zauważając, że opisuje ona ruch swobodnej cząstki, za wyjątkiem punktów $\tau = t, s$. Do jej wyliczenia można zastosować metody funkcji Greena. Pokazać, że ostatecznie otrzymujemy

$$I(\beta) \sim \int\limits_0^\beta dt \int\limits_0^t ds\, \frac{e^{-(t-s)}+e^{-\beta+(t-s)}}{1-e^{-\beta}}\frac{1}{2\pi^2}\int \frac{d^3\vec{k}}{k^2}\, e^{-\frac{1}{2\beta}k^2(t-s)(\beta-t+s)}. \tag{12}$$

7. Proszę pokazać, że wykonując w (12) całkę po $d^3\vec{k}$ otrzymujemy

$$I(\beta) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\beta^{3/2}}{1-e^{-\beta}}\int\limits_0^1 dt \int\limits_0^t ds\, \frac{e^{-\beta(t-s)}+e^{-\beta(1-(t-s))}}{\sqrt{(t-s)\left(1-(t-s)\right)}}. \tag{13}$$

8. Proszę wykonać całkę

$$J = \int\limits_0^1 dt \int\limits_0^t ds\, \frac{e^{-\beta(t-s)}+e^{-\beta(1-(t-s))}}{\sqrt{(t-s)\left(1-(t-s)\right)}} \tag{14}$$

po ds i dt wprowadzając zmienne

$$x = t - s,\; y = \frac{1}{2}\left(t+s\right) \tag{15}$$

i korzystając z symetrii $x \leftrightarrow 1-x$. Pokazać, że ostatecznie

$$J == \pi e^{-\frac{\beta}{2}} I_0\left(\frac{\beta}{2}\right), \tag{16}$$

gdzie I_0 jest funkcją Bessela.

9. Podać oszacowanie energii polaronu dla dużego β.