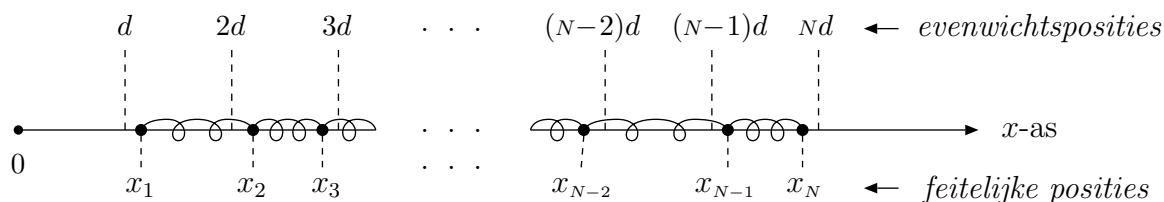


Opgaven bij het college Kwantummechanica 3

Week 3

Opgave 5: Akoestische fononen in een 1-dimensionaal mono-atomair kristal

Beschouw een 1-dimensionaal mono-atomair kristal bestaande uit een zeer groot, oneven aantal N nagenoeg gelocaliseerde atomen van hetzelfde type. In evenwicht hebben de atomen een vaste roosterafstand d met de naaste burens in het kristal. Een goed model voor de kristalvibraties wordt voor niet te grote afwijkingen ten opzichte van de atomaire evenwichtsposities gegeven door een keten van gekoppelde veren.



Dit model ontstaat door rond elke atomaire evenwichtspositie een parabolische benadering te gebruiken voor de potentiaal die het betreffende atoom ondervindt ten gevolge van naburige atomen. Als coördinaten worden de afwijkingen gebruikt die de atomen maken ten opzichte van de vaste evenwichtsposities, $q_n = x_n - nd$ voor $n = 1, \dots, N$. Randeffecten worden voor het gemak verwaarloosd door aan te nemen dat de zeer lange atomaire keten periodiek (ringvormig) is, zodat $q_n = q_{n+N}$. Dit resulteert in de volgende effectieve Hamilton-operator:

$$\sum_{n=1}^N \left[\frac{\hat{p}_n^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (\hat{q}_n - \hat{q}_{n-1})^2 \right] = \boxed{\sum_{n=1}^N \left[\frac{\hat{p}_n^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (2\hat{q}_n^2 - \hat{q}_n \hat{q}_{n-1} - \hat{q}_n \hat{q}_{n+1}) \right]} = \hat{H},$$

waarbij m de atomaire massa is en $\sqrt{m\omega^2}$ de effectieve veerconstante. De coördinaat q_n en impuls p_n vormen samen een geconjugerd paar, zodat voor de bijbehorende operatoren de gebruikelijke kanonieke kwantisatiecondities gelden:

$$[\hat{q}_n, \hat{p}_{n'}] = i\hbar \delta_{nn'} \hat{1} \quad \text{en} \quad [\hat{q}_n, \hat{q}_{n'}] = [\hat{p}_n, \hat{p}_{n'}] = 0.$$

Vervolgens gaan we de Hamilton-operator diagonaliseren om zo de eigentrillingen te bepalen. Ten gevolge van de translatiesymmetrie over de vaste roosterafstand d en de daarmee samenhangende Bloch-conditie is het verstandig om door middel van een Fourierontbinding over te gaan op normaalcoördinaten u_k en normaalimpulsen π_k :

$$\hat{q}_n \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \text{B.Z.}} e^{iknd} \hat{u}_k \quad \text{en} \quad \hat{p}_n \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \text{B.Z.}} e^{-iknd} \hat{\pi}_k ,$$

$$\hat{u}_k \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-iknd} \hat{q}_n \quad \text{en} \quad \hat{\pi}_k \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{iknd} \hat{p}_n ,$$

met bijbehorende orthonormaliteitsrelatie

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i(k-k')nd} = \delta_{kk'} .$$

In verband met de periodiciteitsconditie $q_{n+N} = q_n$ moet hierbij gelden dat $e^{ikdN} = 1$, zodat het golfgetal k slechts N verschillende waarden kan aannemen die voor oneven N symmetrisch rond 0 liggen:

$$\underline{\text{1}^{\text{e}} \text{ Brillouin-zone (B.Z.)}} : k = 0, \pm \frac{2\pi}{Nd}, \pm \frac{4\pi}{Nd}, \dots, \pm \frac{(N-1)\pi}{Nd} \quad (N \text{ oneven}) .$$

- (i) Met wat voor type transformatie hebben we hier feitelijk te maken?
- (ii) Laat zien dat $[\hat{u}_k, \hat{\pi}_{k'}] = i\hbar \delta_{kk'} \hat{1}$ en bereedeneer dat $[\hat{u}_k, \hat{u}_{k'}] = [\hat{\pi}_k, \hat{\pi}_{k'}] = 0$.
- (iii) Geef een simpel argument waarom het te verwachten was dat ook de normaalcoördinaten en normaalimpulsen aan kanonieke kwantisatiecondities voldoen.
- (iv) Leid met behulp van de orthonormaliteitsrelatie af dat

$$\hat{H} = \sum_{k \in \text{B.Z.}} \left(\frac{1}{2m} \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{-k} + \frac{m\omega_k^2}{2} \hat{u}_k \hat{u}_{-k} \right) \quad \text{met} \quad \omega_k = \omega \sqrt{2[1 - \cos(kd)]} .$$

Hiermee zijn de vibratiebewegingen bijna volledig ontkoppeld.

- (v) In analogie met de lineaire harmonische oscillator voeren we nu een geschikte set raising- en loweringoperatoren in:

$$\hat{a}_k = \left(\hat{u}_k + \frac{i\hat{\pi}_{-k}}{m\omega_k} \right) \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \quad \text{en} \quad \hat{a}_k^\dagger = \left(\hat{u}_{-k} - \frac{i\hat{\pi}_k}{m\omega_k} \right) \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}}$$

$$\Rightarrow \hat{u}_k = (\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} \quad \text{en} \quad \hat{\pi}_k = (i\hat{a}_k^\dagger - i\hat{a}_{-k}) \sqrt{\frac{m\hbar\omega_k}{2}} ,$$

waarbij is gebruikt dat $\hat{u}_k^\dagger = \hat{u}_{-k}$ en $\hat{\pi}_k^\dagger = \hat{\pi}_{-k}$.

- Toon aan dat deze operatoren voldoen aan de bosonische commutatierelaties

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \hat{1} \quad \text{en} \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] = 0 .$$

- Leid af dat de Hamilton-operator ontkoppelt in N onafhankelijke oscillatiemodes:

$$\hat{H} = \sum_{k \in \text{B.Z.}} \hbar\omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \hat{1} \right) .$$

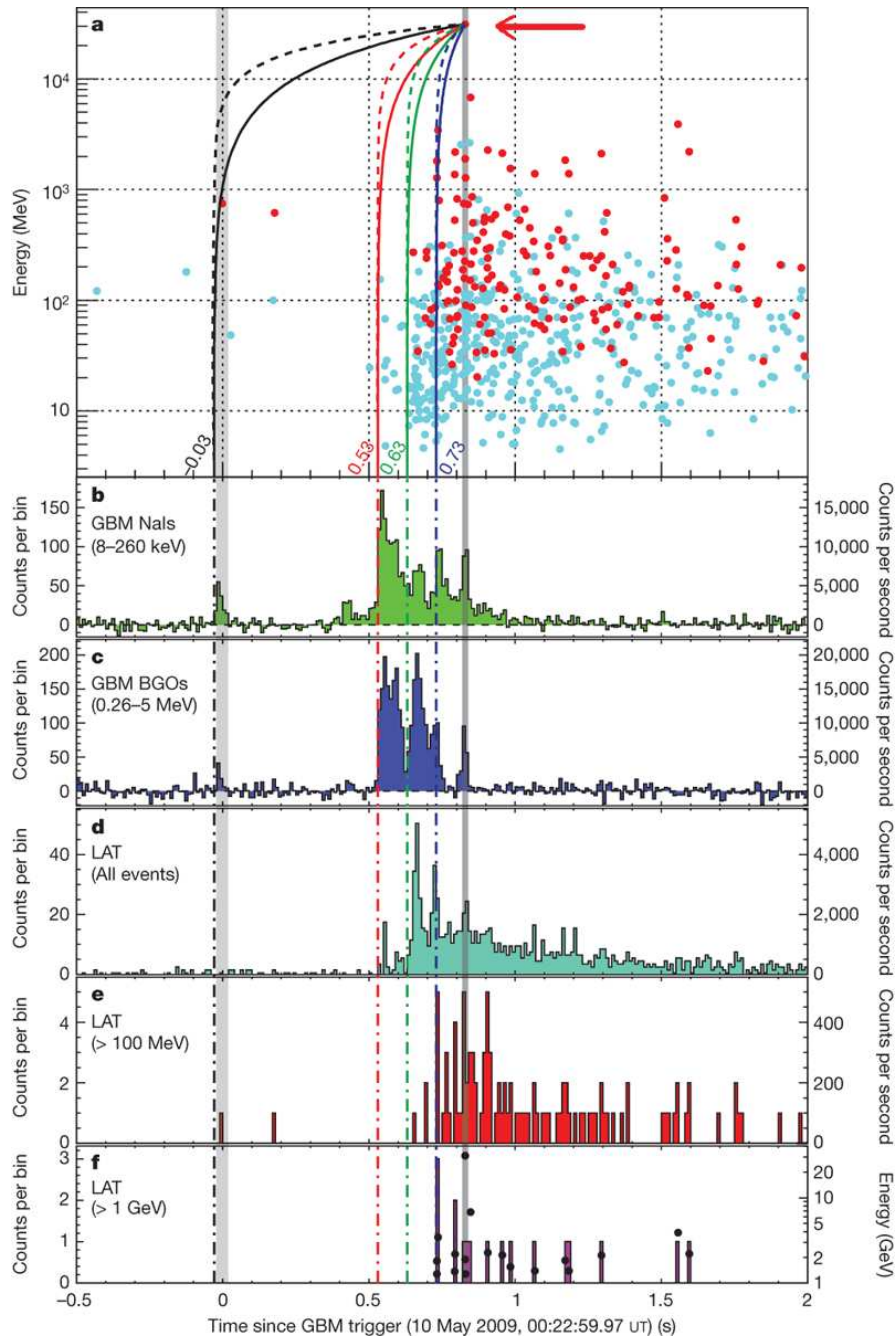
De bijbehorende bosonische vibratiekwanta, met een energie $\hbar\omega_k$ en impuls $\hbar k$, worden akoestische fononen (gekwantiseerde geluidsgolven) genoemd.

- Welke werking heeft de Fourier-component \hat{u}_k op de totale impuls van het systeem?
 - Bepaal de operator $\hat{q}_{n_H}(t)$ in het Heisenbergbeeld.
- (vi) Plot het verband tussen ω_k en k (dispersierelatie) op het interval $k \in [0, \pi/d]$. Doe hetzelfde voor de voortplantingssnelheid $\omega_k/|k|$ van een harmonische geluidsgolf.
- (vii) Waarom kan een geluid dat bestaat uit een pakketje geluidsgolven met uitsluitend lage ω_k -waarden bijna zonder vervorming door het kristal propageren, terwijl bij toenemende bijdrage van hogere frequenties wel vervorming (dispersie) zal optreden?
- (viii) Welke eigenschap van het beschouwde systeem is hiervoor verantwoordelijk?
- (ix) Presentatie-opdracht. Er bestaan gravitatie modellen waarbij de ruimte op zeer kleine lengteschalen discreet is, in analogie met bovenstaand kristal.

Op 10 mei 2009 werd een “gamma-ray burst” waargenomen waarvan het licht minstens 10 miljard jaar nodig heeft gehad om ons te bereiken. Binnen een seconde na de eerste puls van de burst werd een zeer energetisch foton met $|k| = 1.5 \times 10^{17} \text{ m}^{-1}$ waargenomen (zie plaatje). Neem aan dat dit foton op hetzelfde moment als de eerste puls is afgestraald.¹ Gebruik bovenstaande formule voor de voortplantingssnelheid in een kristal om de k -afhankelijkheid van de lichtsnelheid te beschrijven en leid hieruit een bovengrens af op de “roosterafstand van de discrete ruimte”. In dit voorbeeld spelen de fotonen dus de rol die de fononen hadden in het kristal.

Ter verduidelijking: de presentatie van ongeveer 10–15 minuten telt als een volledig werkcollege en zal door één groep van ongeveer 3–4 studenten op het eerstvolgende werkcollege worden verzorgd. In totaal zijn er vier of vijf van zulke opdrachten, zodat het de bedoeling is dat iedereen één keer meedoet met het verzorgen van een presentatie. Mocht je een laptop nodig hebben tijdens je presentatie, neem dan contact op met de assistent. Als je niet in het “presentatieteam” zit, dan mag je deze opdracht als een bonusopgave inleveren op datzelfde eerstvolgende werkcollege.

¹Deze aanname hoeft natuurlijk niet waar te zijn, maar het geeft wel een conservatieve bovengrens op de “roosterafstand van de discrete ruimte”, aangezien we wel weten dat het energetische foton niet vóór de eerste puls is afgestraald.



Figuur 1: Fotonen van de “gamma-ray burst” GRB090510 zoals waargenomen door de “Gamma-ray Burst Monitor” (GBM) en de “Large Area Telescope” (LAT) aan boord van de Fermi ruimtetelescoop. In venster **a** staat de energie van de hoog-energetische LAT-fotonen uitgezet tegen de aankomsttijd in seconden, waarbij als nulpunt van de tijd het begintijdstip van de burst wordt gekozen zoals gezien door de GBM. In de overige vensters zijn voor verschillende energiedomeinen de lichtcurves gegeven in de vorm van histogrammen voor het aantal fotonen per tijdsbin.