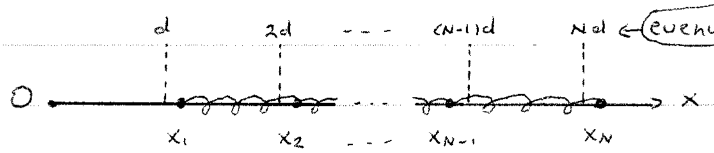
Opg. 5) Roostervibratiemodel voor een mono-atomair 1-dim. kristal: lineaire keten met N veren en periodieke randvoorwaarden



$$\Rightarrow \text{Ham. op.: } \hat{H} = \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{\hat{p}_n^2}{2m} + \tfrac{1}{2} m\omega^2 (2\hat{q}_n^2 - \hat{q}_n\hat{q}_{n-1} - \hat{q}_n\hat{q}_{n+1}) \right] \qquad (\hat{x}_n - nd)$$

Bloch-conditie + periodiciteitsconditie : Bloch-golven met golfvector k $(\in [-\pi/a, \pi/a])$ en $e^{ikdN} = 1 \Rightarrow k = 0, \pm\frac{2\pi}{Nd}, \pm\frac{4\pi}{Nd}, \dots, \pm\frac{(N-1)\pi}{Nd}$ voor N oneven

$\Rightarrow$ diagonaliseer het probleem d.m.v. de Fourier-transf.

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

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

(i) $[\hat{u}_k, \hat{\pi}_{k'}] = \frac{1}{N} \sum_{n,n'=1}^{N} e^{-iknd} e^{ik'n'd} \overbrace{[\hat{q}_n, \hat{p}_{n'}]}^{i\hbar\delta_{nn'}\hat{1}} = i\hbar\hat{1} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} e^{i(k'-k)nd} \stackrel{①}{=} i\hbar\delta_{kk'}\hat{1},$

(iii) $[\hat{u}_k, \hat{u}_{k'}] = [\hat{\pi}_k, \hat{\pi}_{k'}] = 0$ aangezien alle $\hat{q}_j$ onderling commuteren omdat ze bij verschillende deeltjes behoren én idem voor $\hat{p}_j$.

Deze Fourier-transf. is simpelweg een basistransformatie. Die zijn unitair, zodat operatoridentiteiten inderdaad vorm behouden.

(iv) $\sum_{n=1}^{N} \hat{p}_n^2 = \frac{1}{N} \sum_{k,k'} \sum_{n=1}^{N} \underbrace{e^{-iknd} e^{-ik'nd}}_{e^{i(-k-k')nd}} \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{k'} \stackrel{①}{=} \sum_{k,k'} \delta_{k,-k'} \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{k'} = \sum_k \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{-k},$

$\sum_{n=1}^{N} (2\hat{q}_n^2 - \hat{q}_n\hat{q}_{n-1} - \hat{q}_n\hat{q}_{n+1}) = \frac{1}{N} \sum_{k,k'} \sum_{n=1}^{N} \underbrace{e^{iknd} e^{ik'nd}}_{e^{i(k+k')nd}} \underbrace{(2 - e^{-ik'd} - e^{+ik'd})}_{2[1-\cos(k'd)]} \hat{u}_k \hat{u}_{k'}$

$\stackrel{①}{=} \sum_{k,k'} 2[1-\cos(k'd)] \delta_{k,-k'} \hat{u}_k \hat{u}_{k'} = \sum_k 2[1-\cos(kd)] \hat{u}_k \hat{u}_{-k}$

bijna ontkoppeld

$\Rightarrow \hat{H} = \sum_k \left(\frac{1}{2m} \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{-k} + \frac{1}{2} m\omega_k^2 \hat{u}_k \hat{u}_{-k} \right)$, met $\omega_k = \omega\sqrt{2[1-\cos(kd)]} = \omega_{-k}$

(v) Laatste stap v/d diagonalisatie: voer raising- en loweringoperatoren in

$\hat{a}_k = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} (\hat{u}_k + i\hat{\pi}_{-k}/m\omega_k) \xrightarrow[\hat{\pi}_k^\dagger = \hat{\pi}_{-k}]{\hat{u}_k^\dagger = \hat{u}_{-k}} \hat{u}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} (\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger), \quad \hat{\pi}_k = \sqrt{\frac{m\hbar\omega_k}{2}} (-i\hat{a}_{-k} + i\hat{a}_k^\dagger),$

$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \frac{m}{2\hbar} \sqrt{\omega_k\omega_{k'}} \underbrace{[\hat{u}_k + i\hat{\pi}_{-k}/m\omega_k, \hat{u}_{-k'} - i\hat{\pi}_{k'}/m\omega_{k'}]}_{\stackrel{(ii)}{=} (-i/m\omega_{k'} - i/m\omega_k) i\hbar\delta_{kk'}\hat{1}} = \delta_{kk'}\hat{1},$

bosonische commutatie-relaties

$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = \frac{m}{2\hbar} \sqrt{\omega_k\omega_{k'}} \underbrace{[\hat{u}_k + i\hat{\pi}_{-k}/m\omega_k, \hat{u}_{k'} + i\hat{\pi}_{-k'}/m\omega_{k'}]}_{\stackrel{(ii)}{=} (i/m\omega_{k'} - i/m\omega_k) i\hbar\delta_{k,-k'}\hat{1}} = 0 = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger].$

kinetische term elastische term

Gevolg: $\hat{H} = -\frac{1}{4}\sum_k \hbar\omega_k (\hat{a}_{-k}-\hat{a}_k^\dagger)(\hat{a}_k-\hat{a}_{-k}^\dagger) + \frac{1}{4}\sum_k \hbar\omega_k (\hat{a}_k+\hat{a}_{-k}^\dagger)(\hat{a}_{-k}+\hat{a}_k^\dagger)$

$$= \frac{1}{4}\left(\sum_k \hbar\omega_k\right)\left(\cancel{-\hat{a}_{-k}\hat{a}_k} \cancel{-\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_{-k}^\dagger} + \hat{a}_{-k}\hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k \cancel{+\hat{a}_k\hat{a}_{-k}} \cancel{+\hat{a}_{-k}^\dagger\hat{a}_k^\dagger} + \hat{a}_k\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_{-k}^\dagger\hat{a}_{-k}\right)$$

symmetrisch onder $k \to -k$

N ongekoppelde oscillatoren !

$$= \frac{1}{2}\sum_k \hbar\omega_k \underbrace{(\hat{a}_k\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k)}_{2\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k + \hat{1}} = \sum_k \hbar\omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k + \frac{1}{2}\hat{1}\right).$$

telt akoestische fononen met impuls $\hbar k$, energie $\hbar\omega_k$

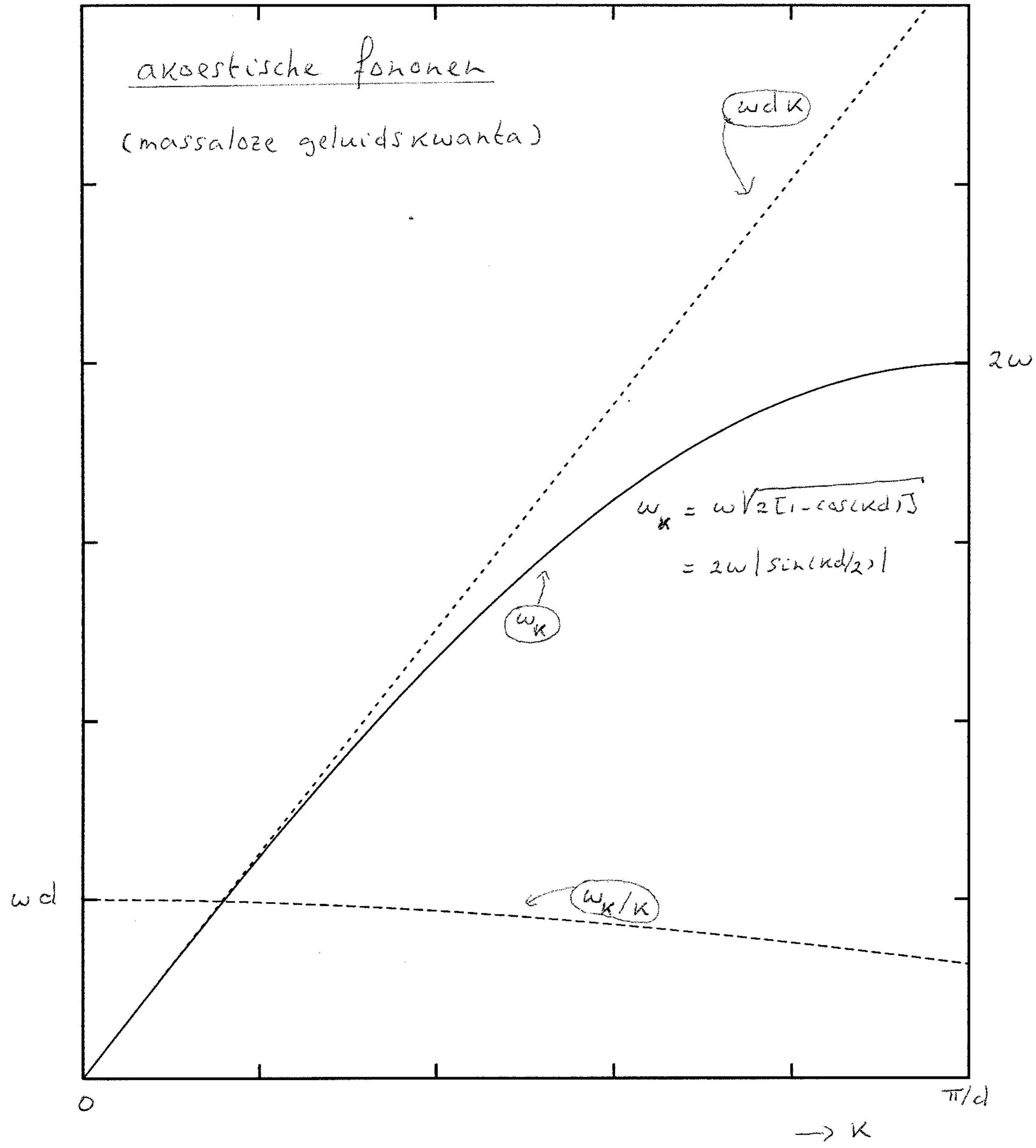
De Fourier-component $\hat{u}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}}(\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger)$ bevat twee termen: in de eerste wordt een fonon met impuls $\hbar k$ geannihileerd en in de tweede wordt een fonon met impuls $-\hbar k$ gecreëerd $\Rightarrow$ de totale impuls wordt door $\hat{u}_k$ met $\hbar k$ verlaagd.

Heisenbergbeeld: $\hat{q}_{n_H}(t) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{iknd}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}}\left(\hat{a}_{k_H}(t) + \hat{a}_{-k_H}^\dagger(t)\right).$

$\hat{a}_{k_H}(t) = \hat{a}_k e^{-i\omega_k t}$ want $[\hat{a}_k, \hat{H}] = \hbar\omega_k\hat{a}_k$

$\hat{a}_{-k_H}^\dagger(t) = \hat{a}_{-k}^\dagger e^{i\omega_k t}$ want $[\hat{a}_{-k}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega_k\hat{a}_{-k}^\dagger$

Dispersierelatie voor $\kappa > 0$ $(\omega_{-\kappa} = \omega_\kappa)$



Opg. 5, onderdelen (vi)-(viii):

*) kleine κ (en ω_κ) waarden:
alle golven hebben dezelfde voortplantingssnelheid ωd $\Rightarrow$ geen vervorming v/e golfpakketje

*) hogere κ (en ω_κ) waarden:
afnemende voortplantingssnelheid
$\Rightarrow$ wel vervorming v/e golfpakketje (dispersie)

Dit is een gevolg v/d eindigheid v/d roosterafstand d !

Opg. 5 (ix): op 10 mei 2009 werd een "γ-ray burst" (GRB090510) waargenomen door de Fermi γ-ray Space Telescope.

*) Afstand tot astrofysisch object: $\gtrsim 10^{10}$ lichtjaar.

*) Binnen 1 seconde na de eerste puls (met 30 ms tijdsduur) werd een 31 GeV foton waargenomen.

$\hookrightarrow |k| = E/\hbar c = 1.5 \times 10^{17}\ m^{-1}$

*) Aannemende dat dit foton tijdens de eerste puls is afgestraald(†) verwachten we een vertraging in de aankomsttijd van

$$\Delta t = \frac{\text{afstand afgelegd}}{c_k} - \frac{\text{afstand afgelegd}}{c} = \underbrace{\frac{\text{afstand afgelegd}}{c}}_{\sim 10^{10}\,\text{jaar} = 3\times10^{17}\,s} \left(\frac{c}{c_k} - 1\right)$$

$$\text{met } c_k = \omega_k/|k| = \omega/|k| \sqrt{2(1-\cos(kd))} \overset{kd \ll 1}{\approx} \omega/|k| \sqrt{k^2d^2 - \tfrac{1}{12}k^4d^4}$$

$$\approx \underbrace{\omega d}_{\equiv c,\ \text{lichtsnelheid voor } |k|\to 0} \left(1 - \frac{k^2d^2}{24}\right) \Rightarrow \Delta t \approx 3\times10^{17}\,s \left(\underbrace{\frac{1}{1-k^2d^2/24} - 1}_{\approx \frac{k^2d^2}{24}}\right).$$

*) Gevolg v/d waarneming en de aanname:

$$1\,s \gtrsim \Delta t \approx \frac{k^2}{24} d^2 * 3\times10^{17}\,s \Rightarrow d \leq \sqrt{\frac{24}{k^2} \Big/ 3\times10^{17}} \approx 6\times10^{-26}\ m.$$

(†) De gebruikte aanname hoeft niet waar te zijn, maar het geeft wel een conservatieve bovengrens op de "roosterafstand" d v/d ruimte aangezien we wel weten dat het energetische foton niet vóór de eerste puls is afgestraald!