Bezdisperzní stavy v grafenu

Matěj Tušek, spolupráce s Vítem Jakubským (ÚJF Řež)

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze

Osnova

Úvod do direktního integrálu

Figure : Gustav railway gun

L^2-prostor s hodnotami v Hilbertově prostoru

$\mathscr{H}'$ ... separabilní Hilbertův prostor
(M, μ) ... σ-konečný měřitelný prostor

Definition

$L^2(M, \mathrm{d}\mu; \mathscr{H}')$ značí prostor všech (tříd ekvivalence s.v. shodných) měřitelných funkcí na M s hodnotami v $\mathscr{H}'$, které splňují

$$\int_M \|f(x)\|^2_{\mathscr{H}'} \, \mathrm{d}\mu(x) < +\infty.$$

Tato množina tvoří Hilbertův prostor se skalárním součinem

$$\langle f, g \rangle := \int_M \langle f(x), g(x) \rangle_{\mathscr{H}'} \, \mathrm{d}\mu(x).$$

pozn.: Měřitelností f se rozumí měřitelnost skalární funkce $\langle \varphi, f(x) \rangle_{\mathscr{H}'}$ pro všechna $\varphi \in \mathscr{H}'$.

L^2-prostor s hodnotami v Hilbertově prostoru-cont.

př.: $\mu\ldots$ konečná suma bodových měr v bodech $m_1, \ldots, m_k$
$\Rightarrow$ libovolná $f \in L^2(M, \mathrm{d}\mu; \mathscr{H}')$ je určena k-ticí $(f(m_1), \ldots, f(m_k))$
$\Rightarrow L^2(M, \mathrm{d}\mu; \mathscr{H}')$ je isomorfní $\oplus_{i=1}^{k} \mathscr{H}'$

Definition

$L^2(M, \mathrm{d}\mu; \mathscr{H}')$ budeme nazývat direktní integrál s konstatním vláknem ($\mathscr{H}'$). Značíme jej

$$\int_M^{\oplus} \mathscr{H}'.$$

Definition

Operátorová funkce $A(.)$ z M do $\mathscr{B}(\mathscr{H}')$ se nazývá měřitelná právě tehdy, je-li $\langle\varphi, A(.)\psi\rangle$ měřitelná pro všechna $\varphi, \psi \in \mathscr{H}'$. $L^\infty(M, \mathrm{d}\mu; \mathscr{B}(\mathscr{H}'))$ značí prostor všech (tříd ekvivalence s.v. shodných) měřitelných funkcí z M do $\mathscr{B}(\mathscr{H}')$, které splňují

$$\|A\|_\infty := \operatorname*{ess\,sup}_{m\in M} \|A(m)\|_{\mathscr{B}(\mathscr{H}')} < +\infty.$$

Definition

Omezený operátor A na $\mathscr{H} = \int_M^\oplus \mathscr{H}'$ se nazývá rozložitelný do direktního integrálu právě tehdy, existuje-li $A(.) \in L^\infty(M, \mathrm{d}\mu; \mathscr{B}(\mathscr{H}'))$ taková, že pro všechna $\psi \in \mathscr{H}$ platí

$$(A\psi)(m) = A(m)\psi(m).$$

Píšeme

$$A = \int_M^\oplus A(m)\,\mathrm{d}\mu(m).$$

Operátory $A(m)$ se nazývají vlákna operátoru A.

pozn.: $\|A\| = \|A(.)\|_\infty$

Definition

Operátorová funkce $A(.)$ z (M,μ) do samosdružených (ne nutně omezených) operátorů na $\mathscr{H}'$ se nazývá měřitelná právě tehdy, je-li $(A(.)+i)^{-1}$ měřitelná. Je-li $A(.)$ měřitelná zavádíme na $\mathscr{H}=\int_M^{\oplus}\mathscr{H}'$ operátor A s definičním oborem

$$\mathrm{Dom}(A)=\{\psi\in\mathscr{H}\,|\,\psi(m)\in\mathrm{Dom}(A(m))\,s.v.;\;\int_M \|A(m)\psi(m)\|^2_{\mathscr{H}'}\,\mathrm{d}\mu(m)<+\infty\}$$

a akcí

$$(A\psi)(m)=A(m)\psi(m).$$

Opět píšeme

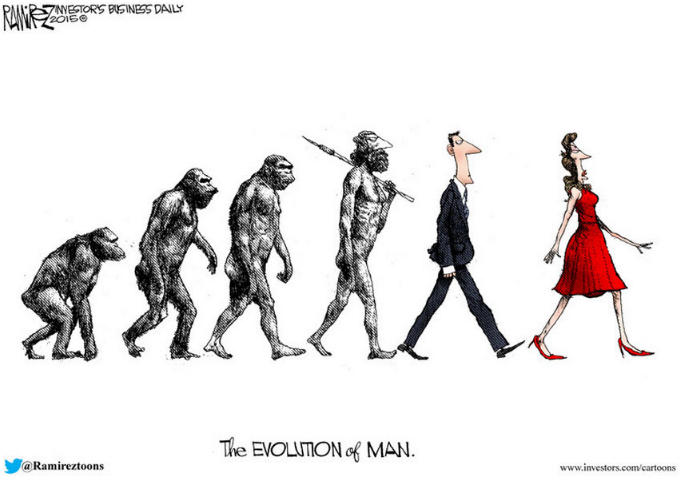
$$A=\int_M^{\oplus} A(m)\,\mathrm{d}\mu(m).$$

Theorem

Buď $A = \int_M^\oplus A(m)\,\mathrm{d}\mu(m)$*, kde* $A(.)$ *je měřitelná a* $A(m)$ *je samosdružený pro všechna* m*. Potom*

- A *je samosdružený.*
- *Pro libovolnou omezenou borelovskou funkci* F *na* $\mathbb{R}$ *platí*
$$F(A) = \int_M^\oplus F(A(m))\,\mathrm{d}\mu.$$
- $\lambda \in \sigma(A)$ *právě tehdy, pokud pro všechna* $\varepsilon > 0$
$$\mu(\{m|\,\sigma(A(m)) \cap (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) \neq \emptyset\}) > 0.$$
- λ *je vlastní číslo* A *právě tehdy, pokud*
$$\mu(\{m|\,\lambda \text{ je vlastní číslo } A(m)\}) > 0.$$

Časový vývoj v kvantové mechanice



$H \ldots$ samosdružený operátor celkové energie=Hamiltonián
$\psi() \ldots$ vektorová funkce z $\mathbb{R}$ do $\mathrm{Dom}(H) \subset \mathscr{H}$ =vlnová funkce

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t), \quad \psi(0) = \psi_0$$

tj. $\lim_{h\to 0} \|i\hbar(\psi(t+h) - \psi(t))/h - H\psi(t)\| = 0$ pro všechna t

Je-li H časově nezávislý,

Řešení Schrödingerovy rovnice

$$\psi(t) = \exp\left(-i\frac{t}{\hbar}H\right)\psi_0$$

pozn.: $\exp\left(-i\frac{t}{\hbar}H\right)$ je unitární a $\exp\left(-i\frac{(t+\tilde{t})}{\hbar}H\right) = \exp\left(-i\frac{t}{\hbar}H\right)\exp\left(-i\frac{\tilde{t}}{\hbar}H\right)$

pozn.: $H = \int_M^{\oplus} H(m)\,\mathrm{d}\mu \Rightarrow \exp\left(-i\frac{t}{\hbar}H\right) = \int_M^{\oplus} \exp\left(-i\frac{t}{\hbar}H(m)\right)\mathrm{d}\mu$

Příklady časového vývoje

Vlastní stavy Hamiltoniánu

$$H\psi_0 = E\psi_0 \Rightarrow \psi(t) = \exp\left(-i\frac{t}{\hbar}E\right)\psi_0.$$

Gaussovský vlnový balík

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \text{ na } L^2(\mathbb{R})$$

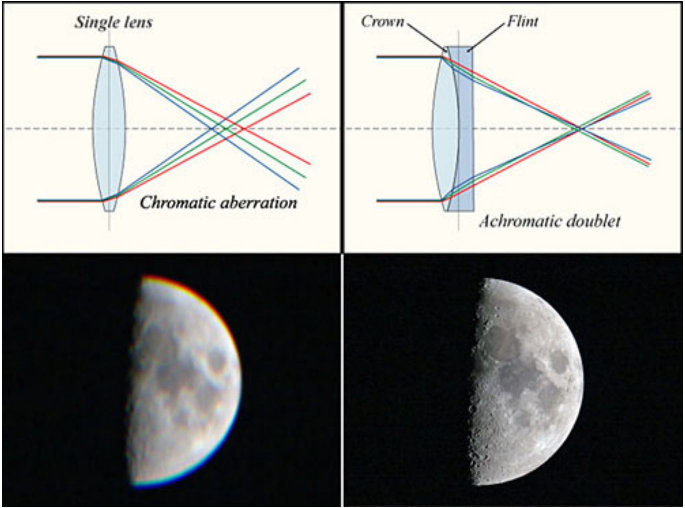
$$\psi_0 = \psi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma}}\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)\exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right)$$

$$\psi_t(x)\sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{\pi}(\sigma^2 + i\hbar t/m)}}\exp\left(\frac{1}{2}\frac{(x - p_0 t/m)^2}{\sigma^2 + i\hbar t/m}\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{(p_0 x - p_0^2 t)}{2m}\right)$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle_{\psi_t} - \langle x\rangle_{\psi_t}^2} = \sqrt{\frac{\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2\sigma^2}}{2}}$$

UKÁZAT ANIMACI!

(Matematická) konstrukce bezdisperzních stavů



$\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^{n+1}, \mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}y)$
$\hbar = 1$
$H\ldots$ translačně invariantní ve směru y, tj.

$$[H, -i\partial_y] = 0 \tag{1}$$

$\mathscr{F}_{y\to k}\ldots$ částečná (unitární) Fourierova transformace $\hat{H} := \mathscr{F}_{y\to k} H \mathscr{F}_{y\to k}^{-1}$

$$(1) \Rightarrow [\hat{H}, k] = 0 \tag{2}$$

$\hat{\mathscr{H}} := \mathscr{F}_{y\to k}\mathscr{H} = L^2(\mathbb{R}^{n+1}, \mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}k) \equiv L^2(\mathbb{R}, \mathrm{d}k; L^2(\mathbb{R}^n, \mathrm{d}\mathbf{x}))$

$$(2) \Rightarrow \hat{H} = \int_{\mathbb{R}}^{\oplus} \hat{H}(k)\,\mathrm{d}k$$

Předpoklad lineární disperzní relace

Nechť pro všechna $k \in I_n \subset \mathbb{R}$ (typicky interval),

$$\hat{H}(k)\hat{\psi}_n(\mathbf{x}, k) = E_n(k)\hat{\psi}_n(\mathbf{x}, k)$$

$$E_n(k) = v_n k + e_n, \text{ kde } v_n, e_n \in \mathbb{R}.$$

Bezdisperzní stav

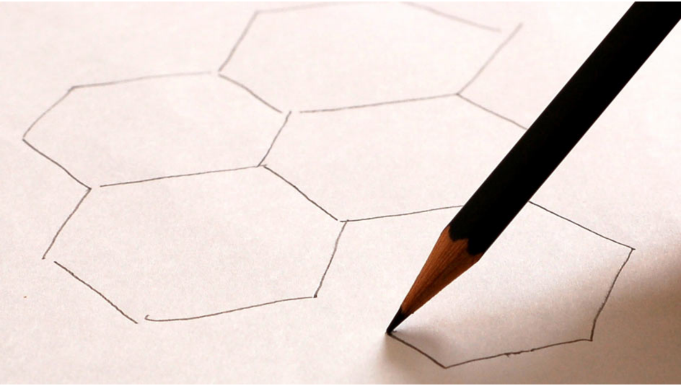
$\hat{\Psi}_n(\mathbf{x}, k) := \int_{I_n}^{\oplus} \beta_n(k)\hat{\psi}_n(\mathbf{x}, k)\,\mathrm{d}k$, tj.

$$\Psi_n(\mathbf{x}, y) = (2\pi)^{-1/2} \int_{I_n} \mathrm{e}^{iky}\beta_n(k)\hat{\psi}_n(\mathbf{x}, k)\,\mathrm{d}k,$$

kde $\int_{I_n} |\beta_n(k)|^2\,\mathrm{d}k = 1 \Rightarrow \|\Psi_n\| = 1$

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{e}^{-itH}\Psi_n(\mathbf{x},y) \\
&\quad = (2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{iky}\mathrm{e}^{-it\hat{H}}\left(\int_{I_n}^{\oplus}\beta_n(k)\psi_n(\mathbf{x},k)\right)\mathrm{d}k \\
&\quad = (2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{iky}\left(\int_{I_n}^{\oplus}\beta_n(k)\mathrm{e}^{-it\hat{H}(k)}\psi_n(\mathbf{x},k)\right)\mathrm{d}k \\
&\quad = (2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{iky}\left(\int_{I_n}^{\oplus}\beta_n(k)\mathrm{e}^{-it(v_n k+e_n)}\psi_n(\mathbf{x},k)\right)\mathrm{d}k \\
&\quad = \mathrm{e}^{-ie_n t}(2\pi)^{-1/2}\int_{I_n}\mathrm{e}^{ik(y-v_n t)}\beta_n(k)\psi_n(\mathbf{x},k)\,\mathrm{d}k \\
&\quad = \mathrm{e}^{-ie_n t}\Psi_n(\mathbf{x},y-v_n t). \qquad (3)
\end{aligned}
$$

Příklad



Grafen s defektem podél přímky [G.W. Semenoff, V. Semenoff, F. Zhou. Phys. Rev. Lett. (2008)]

Hamiltonián

$$H = v_F \sigma_3 \otimes \left(-i\hbar\sigma_1\partial_x - i\hbar\sigma_2\partial_y + \frac{\gamma_0}{v_F} m(x)\sigma_3 \right)$$

$v_F \ldots$ Fermiho rychlost ($\approx c/300$)
$\gamma_0 \ldots$ "hopping energy"
$\sigma_i \ldots$ Pauliho matice: $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\lim_{x\to+\infty} m(x) > 0$, $\lim_{x\to-\infty} m(x) < 0$

pozn.: H působí na bispinorech $\Psi = (\psi_{K,A}, \psi_{K,B}, \psi_{K',B}, \psi_{K',A})^T$, kde první index značí dva Diracovy body a A, B odpovídají podmřížím grafenové mříže

$$\hat{H} = \int_k^{\oplus} \hat{H}(k)\,\mathrm{d}k, \text{ kde } \hat{H}(k) := v_F\sigma_3 \otimes \left(-i\hbar\sigma_1\partial_x + k\sigma_2 + \frac{\gamma_0}{v_F} m(x)\sigma_3 \right)$$

Vlastní funkce $\hat{H}(k)$

$$\hat{H}(k)F_{\pm} = \pm v_F k F_{\pm}$$

$$F_{+}(x) = (1, i, 0, 0)^T \exp\left(-\frac{\gamma_0}{\hbar v_F}\int_0^x m(s)ds\right)$$

$$F_{-}(x) \equiv \sigma_1 \otimes \sigma_2\, F_{+}(x) = (0, 0, 1, i)^T \exp\left(-\frac{\gamma_0}{\hbar v_F}\int_0^x m(s)ds\right)$$

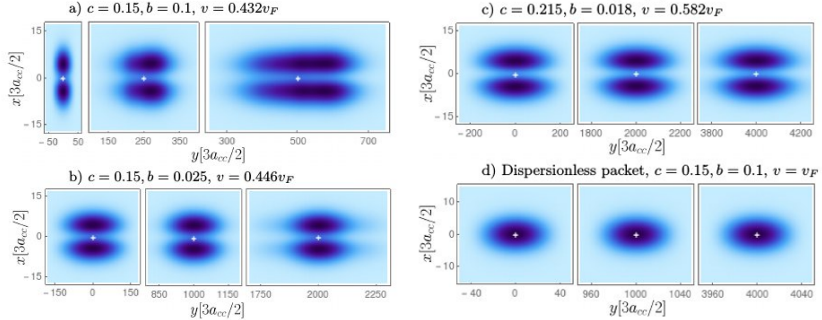
př: $m(x) = \alpha\omega \tanh(\alpha x)$, $\alpha \in \mathbb{R}, \omega > 0 \Rightarrow$ pro efektivní Hamiltonián na okolí Diracova bodu K máme další vlastní hodnoty $E_n(k) = \sqrt{n(2\omega - n)\alpha^2 + k^2}$, $n = 0, 1, \ldots, \lfloor\omega\rfloor$ (ve vhodně zvolených jednotkách) s vlastními funkcemi $\hat{\psi}_n(k)$

Numerická simulace časového vývoje-př. cont.

$$\beta(k) = C_b \chi_{(c-b,c+b)} \exp\left(-\frac{1}{b^2-(k-c)^2}\right)$$

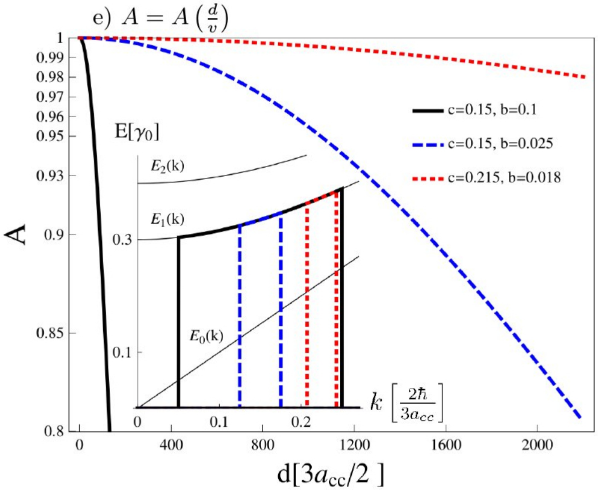
$$\Psi_i = \int_{(c-b,c+b)} e^{iky}\beta(k)\hat{\psi}_i(k)\,\mathrm{d}k$$

Figure : $|\psi_1|^2$, resp. $|\psi_0|^2$, $v = \frac{\int_{(c-b,c+b)} E_i'(k)dk}{2b} = \frac{E_i(c+b)-E_i(c-b)}{2b}$



Míra disperze v závislosti na volbě koeficientní funkce

Figure : $A(t) = |\langle \Psi_1(x, y - vt), e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi_1(x, y)\rangle|^2$, $a_{cc} \sim 0.142 \times 10^{-9}\, m$



Thank you for your attention!