

Kvanttimekaniikka: Luento 11

Martikainen Jani-Petri

Viimeksi

- Qubitin fysiikka
- Matriisi pyörittelyä
- Kvantti-informaatiointro

Viimeisen laskarin dedis
Pe 11.12 12:15

Tänään

- Häiriöteoria ja approksimatiiviset menetelmät
- Aineen rakenteesta kvalitatiivisesti
- Mitä tästä eteenpäin? Mitä tärkeitä asioita jäi pois...

Aproksimatiiviset menetelmät

- Aina et voi laskea ratkaisua analyyttisesti
- Numeerinen ratkaisu voi toki olla mahdollinen...
- ...mutta ehkä myös analyyttinen tulos mikä on...

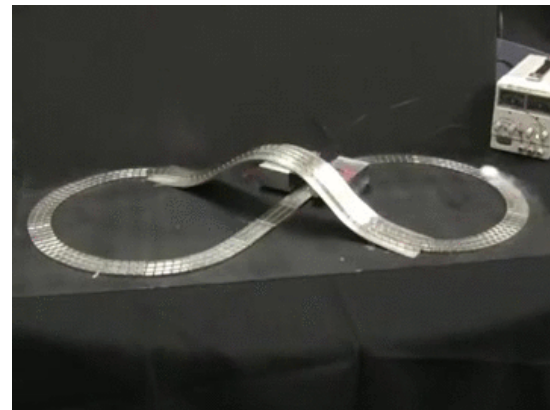
good enough for government work

Yrite aka ansatz aaltofunktiolle

- Usein meitä kiinnostaa ennen kaikkea perustila
- Ehkä voimme arvata aaltofunktion muodon ja jättää arvaukseen vapaita parametrejä
 - ...sitten minimoidaan energia ja määritetään näin optimiarvot parametreille
- Esimerkkejä:

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \right) |0\rangle$$

BCS ansatz suprajohtavuudelle...
Määritä $u_{\mathbf{k}}$ ja $v_{\mathbf{k}}$?



Häiriöteoria

- Oletetaan, että tunnemme ominaistilat jossain tilanteessa ja systeemiä häiritään hiukan uudella H' termillä
- Haluamme löytää hyvän arvion uuden systeemin ominaistiloista

- Siis Hamiltonin operaattori on
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$$

- Tunnemme ratkaisut
$$\hat{H}_0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle$$

- ...ja haemme ratkaisuja
$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

- Lambda on dimensioton luku, jolla pidämme kirjaa kertaluvusta...lopussa voi olla yksi.

Häiriöteoria

- Kehitetään ominaistilat ja -energiat sarjaksi

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle \dots$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2,$$

Mitä saadaan?...taudulla...muistiinpanot

Häiriöteoria: 1. kertaluku

- Kokoamalla ensimmäisen kertaluvun termit saadaan

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | \hat{H}' | \psi_n^0 \rangle$$

- ...ja lopulta myös (vähän pidempi lasku)

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | \hat{H}' | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\psi_m^0\rangle$$

Häiriöteoria: 2. kertaluku

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | \hat{H}' | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}.$$

**Huom! Oletimme, että ei ole degeneraatiota!
Nimittäjä voi olla ongelma degeneraation tapauksessa.
Lue degeneroituneesta häiriöteoriasta kirjoista.**

Yleensä toisen kertaluvun aaltofunktion korjausta ei tehdä...sotkuista

Korkeammassa kertaluvussa yleensä helpompaa tehdä jotain muuta...

Häiriöteoria esimerkkejä

- Taululla, muistiinpanot...

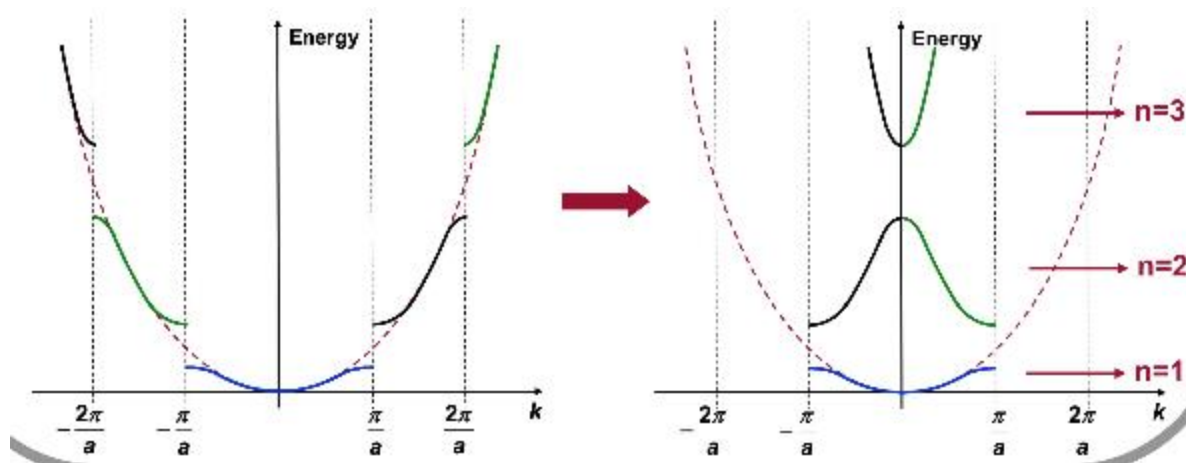
Häiriöteoria vs. Ansatz

- Häiriöteoria suoraviivaisempi eikä vaadi "visiota"
- Aaltofunktio yritteeseen voi yrittää laittaa sen fysiikan mitä odottaa ongelman sisältävän...aaltofunktion rakenne voi olla hyvin erilainen eri parametreillä
- Joskus häiriöteoria ei toimi, mutta inspiroitunut yrite toimii
 - Esim. BCS-teoria suprajohtavuudelle
 - T_c :ä ei voi kehittää sarjaksi "pienessä vuorovaikutuksessa"

$$|\Delta| = 2\hbar\omega_D \exp\left[-\frac{1}{N(0)V}\right]$$
$$k_B T_c = 1.14\hbar\omega_D \exp\left[-\frac{1}{N(0)V}\right]$$

Periodinen rakenne...vyörakenne

- Applet...detaljit riippuvat hilasta ja potentiaalista
- Periodisessa rakenteessa tilat leviävät vöiksi. Paljon tiloja lähekkäin eikä niitä ole helppoa edes erottaa toisistaan
- Voi olla myös energioita missä tiloja ei ole: energia-aukko.
 - Yksittäisessä potentiaaliuopassa näin on tietenkin aina
 - ...mutta esim. vapaalle elektronille kaikki positiiviset energiat ovat ok



Vyörakenne: tutkimusta Aallossa

Esimerkki... materiaalfysiikkaa tehdään
monessa ryhmässä

NATURE COMMUNICATIONS | ARTICLE OPEN



Superfluidity in topologically nontrivial flat bands

Sebastiano Peotta & Päivi Törmä

[Affiliations](#) | [Contributions](#) | [Corresponding author](#)

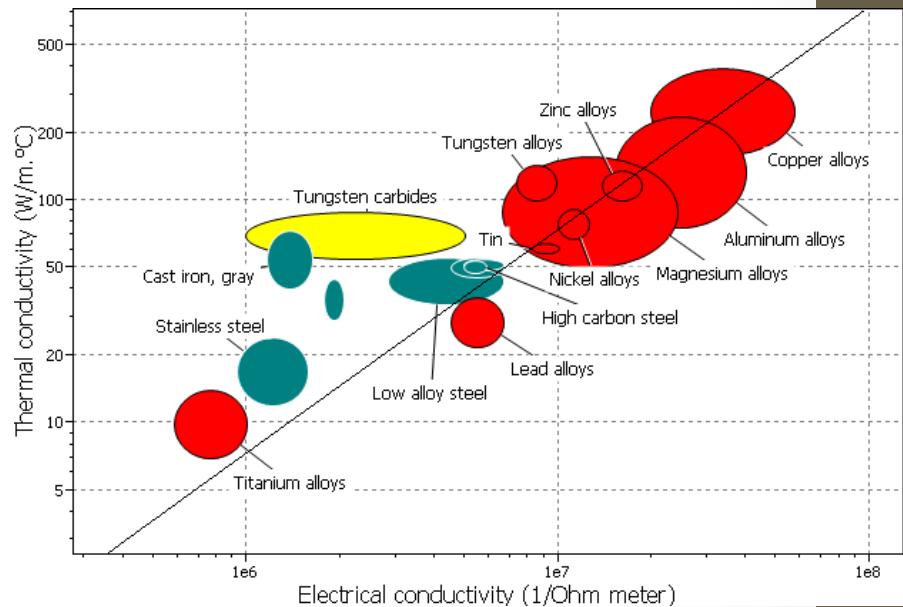
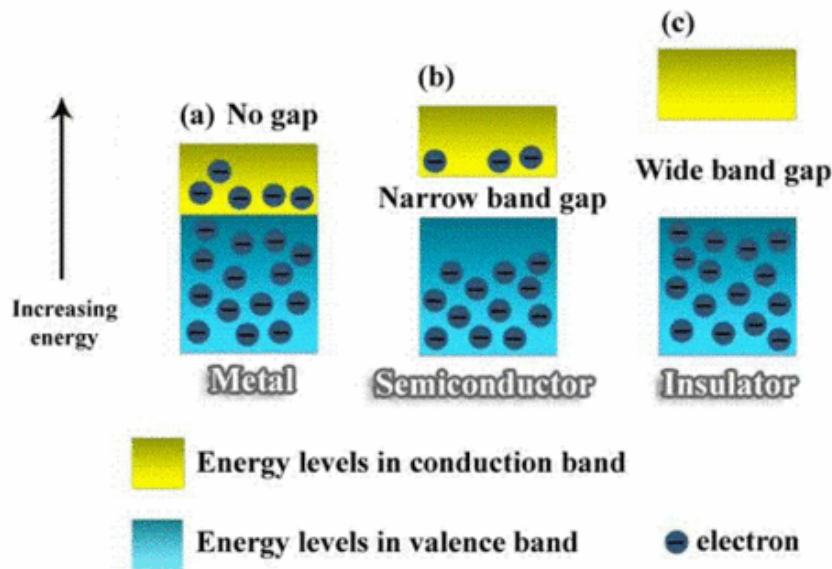
Nature Communications **6**, Article number: 8944 | doi:10.1038/ncomms9944

Received 17 September 2015 | Accepted 19 October 2015 | Published 20 November 2015

[Peotta& Törmä, Nature Communications](#)

Kaistarakenne

- Vaikuttaa materiaalin ominaisuuksiin
- Johde, eriste, puolijohde, lämmönjohtavuus...



Paulin kieltosääntö! Fermi-energian tärkeys...

Miksi timantit läpinäkyviä?

- Jc
er
- Jc
er
- Ep
ai
m



riittävää

lon

vaikuttaa
iden



Faint

Very Light

Light

Fancy Light

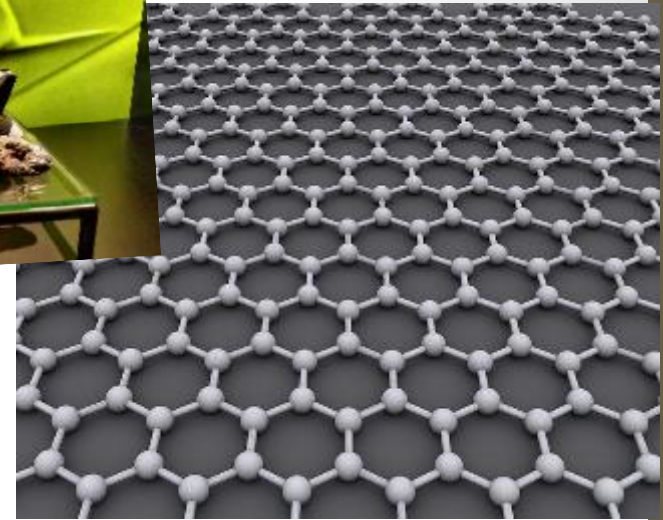
Fancy

Fancy Intense

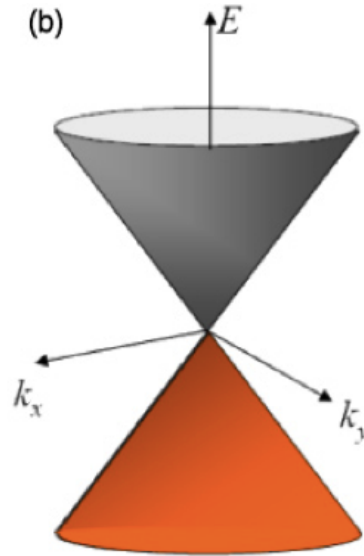
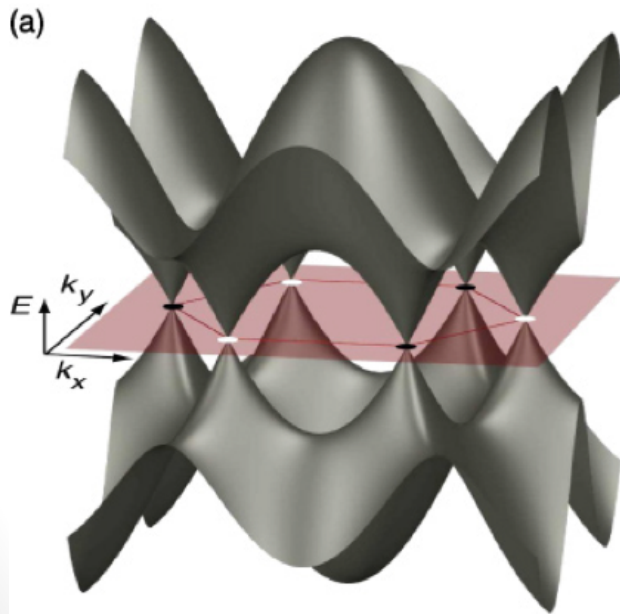
Fancy Vivid

Fancy Deep

Grafeeni



- Yksi kerros grafiittia: eli 2D rakenne
- Puolijohde vai metalli?



The Nobel Prize in Physics 2010
Andre Geim, Konstantin Novoselov

The Nobel Prize in Physics 2010

Nobel Prize Award Ceremony

Andre Geim

Konstantin Novoselov



Photo: U. Montan

Andre Geim



Photo: U. Montan

Konstantin Novoselov

The Nobel Prize in Physics 2010 was awarded jointly to Andre Geim and Konstantin Novoselov "for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene"

<https://en.wikipedia.org/wiki/Graphene>

Quo vadis kvanttimekkaanikko?

- Periodiset potentiaalit, kristallirakenteet
- Dimensioita enemmän kuin 1
- Kulmaliikemäärä ja spin
- Vedyn ominaistilat (liittyy edellisiin)
- Vuorovaikutukset hiukkasten välille
- Kvanttistatistiikka (monta hiukkasta): bosonit ja fermionit
- Materiaalin ominaisuudet (lämpökapasiteetti, johtavuus yms.) kvanttimekaniikasta?
- Toinen kvantisointi eli kenttien kvanttiteoria
- Kuinka kvantitetut kentät vuorovaikuttavat aineen kanssa? (spontaaniemissio mm.)
- Kvantti-informaatio, suprajohtavuus, topologiset materiaalit...



Kysymyksiä?

- Tänään keskusteltiin häiriöteoriasta kvanttimekaniikasta
- Viimeinen luento: kertausta, kysymyksiä...

