Física de Semiconductores

José Menéndez

Introducción

- Enviar un mail a jose.menendez@asu.edu

Propuesta

- Se me ha propuesto concentrar la teórica un día y la práctica el otro día.
- Teórica: martes 10:00-11:30   12:00-13:00
- Práctica: viernes 10:00-11:30   12:00-13:00

Secuencia

- **Martes semana *n***: teórica. Problemas subidos a la página web.
- **Viernes semana *n*+1**: entrega de tareas. Estudiantes presentan solución de los problemas en pizarra. Discusión abierta. Discusión de problemas numéricos.
- **Viernes semana 1**: introducción a Igor Pro. Si quieren licencia (gratis) enviar mail.

Evaluación

- Tarea semanal (60 %)
- Participación (viernes) (15%)
- Artículo en Wikipedia en español (15%)
- Estudiantes doctorado: escribir notas de clase a partir de las clases.

Review of Dirac notation

- Para divertirse, leer
- R. C. Henry, *Quantum mechanics made transparent*, Am. J. Phys. **58** (11), 1087 (1990)

Funciones de onda I

- Una partícula cuántica se describe por una función de onda que requerimos que sea normalizable

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi\left(x\right)\right|^2 dx < \infty$$

- $\left|\psi\left(x\right)\right|^2$ representa la densidad de probabilidad de que la partícula se encuentre entre x y $x + dx$

Funciones de onda II

- Matemáticamente, el conjunto de funciones complejas normalizables constituye un espacio vectorial complejo. Este es un ejemplo de un espacio de Hilbert de dimensión infinita.

x

Funciones de onda III

- Definimos

$$\phi\left(p\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dx e^{-ipx/\hbar}\psi\left(x\right)$$

- $\left|\phi\left(p\right)\right|^2$ representa la densidad de probabilidad de que la partícula tenga un *momentum* entre p y $p+dp$.

Funciones de onda IV

- Sabemos que (identidad de Parseval)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi\left(x\right)\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\phi\left(p\right)\right|^2 dp$$

- de manera que si $\left\{\psi\left(x\right)\right\}$forma un espacio de Hilbert de funciones normalizables, también lo hace$\left\{\phi\left(p\right)\right\}$.

Funciones de onda V

- Consideremos ahora el conjunto $\left\{u_n\left(x\right)\right\}$ de soluciones ortonormales de la ecuación

$$Hu_n\left(x\right) = E_n u_n\left(x\right)$$

- Cualquier función arbitraria puede escribirse

$$\psi\left(x\right) = \sum_n c_n u_n\left(x\right)$$

- con

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*\left(x\right)\psi\left(x\right)dx$$

Funciones de onda VI

- La secuencia $\left(c_1, c_2, \ldots\right)$ representa la función de onda en el "espacio de energía. Además, dado que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi\left(x\right)\right|^2 dx = \sum_n \left|c_n\right|^2$$

Si la función de onda está normalizada a uno, el coeficiente $\left|c_n\right|^2$ representa la probabilidad de que la partícula tenga energía E_n .

De modo que las secuencias $\left(c_1, c_2, \ldots\right)$ también forman un espacio de Hilbert.

Dirac kets I

- Para representar los estados cuánticos de manera "neutral" con respecto a las distintas representaciones, introducimos un nuevo espacio de Hilbert $\mathcal{E}$ en el cual los vectores se indican por

$$\left|\psi\right\rangle$$

- El hecho de que usemos el símbolo ψ no significa que privilegiemos la representación espacial.

Dirac kets II

- Como los kets son vectores de un espacio de Hilbert, pueden multiplicarse por números complejos:

$$\left|\psi\right\rangle \equiv \left|\psi\right\rangle c$$

- El conjunto de kets que se obtiene al multiplicar un ket dado por todos los números complejos es un subespacio del espacio de Hilbert y se llama rayo. Estrictamente, un estado cuántico está representado por rayos.

Dirac bras I

- Definimos ahora un operador

$$\left\langle \alpha \right| : \mathcal{E} \to \mathbb{C}$$

- llamado **bra**, con la propiedad lineal

$$\left\langle \alpha \right| \left(c_1 \left| \psi_1 \right\rangle + c_2 \left| \psi_2 \right\rangle \right) = c_1 \left\langle \alpha \right| \left(\left| \psi_1 \right\rangle \right) + c_2 \left\langle \alpha \right| \left(\left| \psi_2 \right\rangle \right)$$

- El número complejo que se obtiene aplicando un bra a un ket se indica como

$$\left\langle \alpha \right| \left(\left| \psi \right\rangle \right) \equiv \left\langle \alpha \middle| \psi \right\rangle$$

Dirac bras II

- Definimos las siguientes propiedades:

$$\Big(c\big\langle\alpha\big|\Big)\Big(\big|\psi\big\rangle\Big)=c\big\langle\alpha\big|\Big(\big|\psi\big\rangle\Big)$$

$$\Big(\big\langle\alpha_1\big|+\big\langle\alpha_2\big|\Big)\Big(\big|\psi\big\rangle\Big)=\big\langle\alpha_1\big|\Big(\big|\psi\big\rangle\Big)+\big\langle\alpha_2\big|\Big(\big|\psi\big\rangle\Big)$$

- De modo que el conjunto de bras también forma un espacio de Hilbert que llamamos el espacio **dual** $\mathcal{E}^*$.
- Notar que los bras como operadores son muy distintos a los operadores “convencionales” porque si bien actúan sobre kets, dan como resultado números, no otros kets.

Producto escalar

- Postulamos la existencia de un producto escalar $g:\mathcal{E}\times\mathcal{E}\rightarrow\mathbb{C}$ que cumple:

$$g\left(\left|\psi\right\rangle, c_1\left|\phi_1\right\rangle + c_2\left|\phi_2\right\rangle\right) = c_1 g\left(\left|\psi\right\rangle,\left|\phi_1\right\rangle\right) + c_2 g\left(\left|\psi\right\rangle,\left|\phi_2\right\rangle\right)$$

$$g\left(c_1\left|\psi_1\right\rangle + c_2\left|\psi_2\right\rangle,\left|\phi\right\rangle\right) = c_1^* g\left(\left|\psi_1\right\rangle,\left|\phi\right\rangle\right) + c_2^* g\left(\left|\psi_2\right\rangle,\left|\phi\right\rangle\right)$$

$$g\left(\left|\psi\right\rangle,\left|\phi\right\rangle\right) = g\left(\left|\phi\right\rangle,\left|\psi\right\rangle\right)^*$$

$$g\left(\left|\psi\right\rangle,\left|\psi\right\rangle\right) \geq 0$$

Correspondencia dual I

- Definimos el bra $\langle\psi|$ correspondiente al ket $|\psi\rangle$ como el bra que aplicado al ket $|\phi\rangle$ da como resultado

$$\langle\psi|\big(|\phi\rangle\big) = g\big(|\psi\rangle,|\phi\rangle\big)$$

- Decimos que $\langle\psi|$ es el adjunto o conjugado hermítico de $|\psi\rangle$, y lo indicamos como

$$\langle\psi| = \big(|\psi\rangle\big)^\dagger$$

Correspondencia dual II

- Podemos conjeturar que todo bra es el adjunto de algún ket, de modo que $\mathcal{E}^*$ tiene la misma dimensión que $\mathcal{E}$.
- Si lo anterior es cierto, podemos definir la operación inversa a la conjugación hermítica, la cual indicaremos con el mismo símbolo daga, de modo que

$$\left(\left|\psi\right\rangle\right)^{\dagger\dagger}=\left|\psi\right\rangle$$

Correspondencia dual III

- También tenemos

$$\left(c_1\left|\psi_1\right\rangle + c_2\left|\psi_2\right\rangle\right)^\dagger\left(\left|\phi\right\rangle\right) = g\left(c_1\left|\psi_1\right\rangle + c_2\left|\psi_2\right\rangle, \left|\phi\right\rangle\right)$$
$$= c_1^* g\left(\left|\psi_1\right\rangle, \left|\phi\right\rangle\right) + c_2^* g\left(\left|\psi_2\right\rangle, \left|\phi\right\rangle\right)$$

- o sea que la correspondencia dual es antilineal:

$$\left(c_1\left|\psi_1\right\rangle + c_2\left|\psi_2\right\rangle\right)^\dagger = c_1^*\left(\left|\psi_1\right\rangle\right)^\dagger + c_2^*\left(\left|\psi_2\right\rangle\right)^\dagger$$

Producto escalar: nueva notación

- A partir de ahora utilizaremos la notación

$$g\left(\left|\psi\right\rangle,\left|\phi\right\rangle\right)=\left\langle\psi\right|\left(\left|\phi\right\rangle\right)=\left\langle\psi\middle|\phi\right\rangle$$

- para el producto escalar, de modo que podemos escribir las propiedades de este producto como

$$\left\langle\psi\middle|\phi\right\rangle=\left\langle\phi\middle|\psi\right\rangle^{*}$$

$$\left\langle\psi\middle|\psi\right\rangle\geq 0$$

Operadores

- Empezamos con operadores lineales

$$L : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}$$

que satisfacen

$$L\left(c_1\left|\psi_1\right\rangle + c_2\left|\psi_2\right\rangle\right) = c_1 L\left|\psi_1\right\rangle + c_2 L\left|\psi_2\right\rangle$$

- Definimos la multiplicación de operadores como

$$AB\left|\psi\right\rangle = A\left(B\left|\psi\right\rangle\right)$$

- Esta operación es obviamente asociativa pero no necesariamente conmutativa.

Operadores sobre bras I

- Hemos definido operadores que actúan sobre kets, pero podemos extender la definición para que los operadores actúen sobre bras. Escribimos el bra que se obtiene de aplicar el operador A al bra $\langle\psi|$ como

$$\langle\psi|A$$

Operadores sobre bras II

- Definimos este bra por su acción sobre un ket arbitrario como

$$\Big(\Big\langle\psi\Big|A\Big)\Big|\phi\Big\rangle=\Big\langle\psi\Big|\Big(A\Big|\phi\Big\rangle\Big)$$

- Como esta definición hace irrelevante el orden de los paréntesis, podemos escribir

$$\Big(\Big\langle\psi\Big|A\Big)\Big|\phi\Big\rangle=\Big\langle\psi\Big|\Big(A\Big|\phi\Big\rangle\Big)=\Big\langle\psi\Big|A\Big|\phi\Big\rangle$$

Producto exterior

- Si $\left|\alpha\right\rangle$ y $\left|\beta\right\rangle$ son kets, podemos definir un operador, representado por el símbolo $\left|\alpha\right\rangle\left\langle\beta\right|$,

que satisface

$$\Big(\left|\alpha\right\rangle\left\langle\beta\right|\Big)\left|\psi\right\rangle = \left|\alpha\right\rangle\left\langle\beta\middle|\psi\right\rangle$$

$$\left\langle\psi\right|\Big(\left|\alpha\right\rangle\left\langle\beta\right|\Big) = \left\langle\psi\middle|\alpha\right\rangle\left\langle\beta\right|$$

Bases

- Supongamos una base ortonormal discreta:

$$\langle n | m \rangle = \delta_{mn}$$

- Cualquier ket puede escribirse

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n |n\rangle c_n$$

- con $c_n = \langle n | \psi \rangle$, so that

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\psi\rangle$$

Resolución de la identidad

- De modo que el operador identidad puede escribirse

$$1 = \left(\sum_n \Big| n \Big\rangle \Big\langle n \Big| \right)$$

Operadores adjuntos

- Definimos $A^\dagger\left|\psi\right\rangle = \left(\left\langle\psi\right|A\right)^\dagger$, de lo cual se deducen las siguientes propiedades:

$$A^\dagger\left(c_1\left|\psi_1\right\rangle + c_2\left|\psi_2\right\rangle\right) = c_1A^\dagger\left|\psi_1\right\rangle + c_2A^\dagger\left|\psi_2\right\rangle$$

$$\left\langle\phi\right|A^\dagger\left|\psi\right\rangle = \left\langle\psi\right|A\left|\phi\right\rangle^*$$

$$A^{\dagger\dagger} = A$$

$$\left(c_1A_1 + c_2A_2\right)^\dagger\left|\psi\right\rangle = c_1^*A_1^+\left|\psi\right\rangle + c_2^*A_2^+\left|\psi\right\rangle$$

$$\left(AB\right)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$\left(\left|\alpha\right\rangle\left\langle\beta\right|\right)^\dagger = \left|\beta\right\rangle\left\langle\alpha\right|$$

Operadores hermíticos

- Un operador es hermítico o autoadjunto si satisface:

$$A = A^{\dagger}$$

- lo cual implica

$$\left\langle \phi \middle| A \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| A \middle| \phi \right\rangle^{*}$$

Operadores unitarios

- Un operador es unitario si satisface:

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1$$

- lo cual implica

$$U^{-1} = U^\dagger$$

Autovalores y auto-kets

- Sea A un operador que actúa sobre $\mathcal{E}$. Si existe un ket $\left|u\right\rangle$ que no sea zero tal que
$$A\left|u\right\rangle = a\left|u\right\rangle$$
- decimos que $\left|u\right\rangle$ es un autoket de A y que a es un autovalor por derecha. De la misma manera, si existe un bra que no sea zero tal que
$$\left\langle u\right|A = b\left\langle u\right|$$
- decimos que $\left\langle u\right|$ es un autobra y b un autovalor por izquierda.

Operadores hermíticos I

- Supongamos que A es hermítico.

$$A\left|u\right\rangle = a\left|u\right\rangle$$

$$\left\langle u\right|A\left|u\right\rangle = a\left\langle u\middle|u\right\rangle$$

$$\left\langle u\right|A\left|u\right\rangle^{*} = a^{*}\left\langle u\middle|u\right\rangle$$

$$\left\langle u\right|A^{\dagger}\left|u\right\rangle = \left\langle u\right|A\left|u\right\rangle = a^{*}\left\langle u\middle|u\right\rangle$$

- Esto significa

$$\left(a - a^{*}\right)\left\langle u\middle|u\right\rangle = 0 \Rightarrow a = a^{*}$$

Operadores hermíticos II

- Tambien:

$$A^{\dagger}\left|\psi\right\rangle = \left(\left\langle\psi\right|A\right)^{\dagger}$$

$$A\left|\psi\right\rangle = \left(\left\langle\psi\right|A\right)^{\dagger}$$

$$a\left|\psi\right\rangle = \left(\left\langle\psi\right|A\right)^{\dagger}$$

$$a\left\langle\psi\right| = \left\langle\psi\right|A$$

- de modo que autovalores por derecha e izquierda son iguales.

Ortogonalidad de autovectores

- Sea $A\left|u\right\rangle = a\left|u\right\rangle$ y $A\left|u'\right\rangle = a'\left|u'\right\rangle$
- Entonces

$$\left\langle u'\right|A\left|u\right\rangle = a\left\langle u'\middle|u\right\rangle$$

$$\left\langle u\right|A\left|u'\right\rangle = a'\left\langle u\middle|u'\right\rangle$$

$$\left\langle u\right|A\left|u'\right\rangle^{*} = \left\langle u'\right|A^{\dagger}\left|u\right\rangle = \left\langle u'\right|A\left|u\right\rangle = a'\left\langle u'\middle|u\right\rangle$$

- Esto implica $\left(a - a'\right)\left\langle u'\middle|u\right\rangle = 0$

Notación matricial

- Sea $Hu = Eu$ y $\left\{ \left| k \right\rangle \right\}$ una base ortonormal. Entonces

$$\sum_{\ell} H \left| \ell \right\rangle \left\langle \ell \middle| u \right\rangle = E \left| u \right\rangle$$

$$\sum_{\ell} \left\langle k \middle| H \middle| \ell \right\rangle \left\langle \ell \middle| u \right\rangle = E \left\langle k \middle| u \right\rangle$$

$$\sum_{\ell} H_{kl} u_{l} = E u_{k}$$

Operador de posición I

- Indicamos como $\hat{x}$ el operador posición y como x sus autovalores. Si $f_{x_0}(x)$ es una autofunción de este operador con autovalor x_0:

$$\hat{x}f_{x_0}(x) = xf_{x_0}(x) = x_0 f_{x_0}(x)$$

$$(x - x_0) f_{x_0}(x) = 0$$

- Podemos escribir entonces

$$f_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$$

Operador de posición II

- In ket language, we can write the state corresponding to $f_{x_0}\left(x\right)$ as

$$f_{x_0}\left(x\right) \to \left|x_0\right\rangle$$

- La ortogonalidad de los autoestados de posición sigue de las propiedades de la función delta:

$$\left\langle x_0 \middle| x_1 \right\rangle = \int dx \delta\left(x - x_0\right) \delta\left(x - x_1\right) = \delta\left(x_0 - x_1\right)$$

Función de onda

- Podemos escribir

$$\psi(x_0) = \int dx \psi(x) \delta(x - x_0) = \int dx f_{x_0}^* \psi(x) = \langle x_0 | \psi \rangle$$

- o sea que $\psi(x_0) = \int dx \delta(x - x_0) \psi(x)$ puede escribirse

$$\langle x_0 | \psi \rangle = \int dx \langle x | x_0 \rangle \langle x | \psi \rangle = \int dx \langle x_0 | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow 1 = \int dx |x\rangle\langle x|$$

Momentum operator

- El operador de momentum $\hat{p}$ satisface

$$\hat{p}u_p = -i\hbar\frac{du_p}{dx} = pu_p\left(x\right)$$

- La solución de esta ecuación se puede escribir

$$u_p\left(x\right) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

- De modo que

$$\left\langle p_0 \middle| p_1 \right\rangle = \int dx\, u_{p_0}^*\left(x\right)u_{p_1}\left(x\right) = \int \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{i\left(p_1 - p_0\right)x/\hbar} = \delta\left(p_0 - p_1\right)$$

Función de onda en momentum space I

- Podemos escribir cualquier función

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi(p)\, u_p(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \phi(p)$$

- Esto es una trans. de Fourier, o sea

$$\phi(p) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) = \int dx\, u_p^*(x)\, \psi(x) = \langle p | \psi \rangle$$

Función de onda en momentum space I

- Podemos escribir también $u_p(x) = \langle x | p \rangle$
- Con lo cual $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi(p) u_p(x)$ puede escribirse

$$\langle x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle p | \psi \rangle \langle x | p \rangle$$

- Lo cual implica

$$\Rightarrow 1 = \int dp | p \rangle \langle p |$$

Operadores de proyeccion

- Un operador de proyección satisface
- Entonces $P\left|p\right\rangle = p\left|p\right\rangle$

$$P^2\left|p\right\rangle = P\left|p\right\rangle = p^2\left|p\right\rangle$$

- Lo cual implica $p^2 = p$, o sea $\begin{cases} p=0 \\ p=1 \end{cases}$

Direct sum

- Supongamos que $\mathcal{E}_1$ y $\mathcal{E}_2$ son subespacios de $\mathcal{E}$
- La suma directa de $\mathcal{E}_1$ y $\mathcal{E}_2$ se define como

$$\mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2 = \left\{ \left|\psi_1\right\rangle + \left|\psi_2\right\rangle \text{ such that } \left|\psi_1\right\rangle \in \mathcal{E}_1, \left|\psi_2\right\rangle \in \mathcal{E}_2 \right\}$$

- Supongamos ahora

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2 \oplus \ldots \oplus \mathcal{E}_N$$

- y que $\left|nr\right\rangle$ es una base en el subespacio $\mathcal{E}_n$

Projection operator I

- Definimos el operador de proyección P_n como

$$P_n = \sum_r \left| nr \right\rangle \left\langle nr \right|$$

- Entonces

$$\left\langle \psi \right| P = \sum_r \left\langle \psi \middle| nr \right\rangle \left\langle nr \right| = \sum_r \left\langle nr \middle| \psi \right\rangle^* \left\langle nr \right|$$

$$P \left| \psi \right\rangle = \sum_r \left| nr \right\rangle \left\langle nr \middle| \psi \right\rangle = \left(\left\langle \psi \right| P \right)^\dagger$$

- De modo que

$$P^\dagger = P$$

Projection operator II

- Calculemos P_n^2

$$
\begin{aligned}
P_n^2 &= \sum_{rr'} \left| nr \right\rangle \left\langle nr \middle| nr' \right\rangle \left\langle nr' \right| \\
&= \sum_{rr'} \delta_{rr'} \left| nr \right\rangle \left\langle nr' \right| \\
&= \sum_{r} \left| nr \right\rangle \left\langle nr \right| = P_n
\end{aligned}
$$

Autovalores del operador de proyección

- Supongamos $P|p\rangle = p|p\rangle$
- Entonces, como $P^2 = P$, $p^2 = p \Rightarrow \begin{cases} p = 0 \\ p = 1 \end{cases}$