

ДИНАМІКА ХВИЛЬОВОГО ПАКЕТУ У ПСЕВДОСПІН-1
СИСТЕМАХ

Вінницький національний технічний університет

Анотація

Досліджується поширення хвильового пакету у псевдоспін-1 системі, реальним прикладом якої можуть бути двомірні решітки Ліба або дісе-решітки. В довгохвильовому наближенні їх спектр визначається власними значеннями гамільтоніану Дірака. Розглядається загальний випадок, коли трикомпонентний хвильовий пакет генерується у кожній із трьох підграток. Розв'язанням нестационарного рівняння Шредінгера встановлено, що хвильовий пакет поширюється у вигляді суперпозиції плоских хвиль. Знайдено амплітуди цих хвиль, які виражаються в термінах Фур'є-компонент пакету в початковий момент часу.

Ключові слова: хвильовий пакет, псевдоспін-1 системи, гамільтоніан Дірака, нестационарне рівняння Шредінгера.

Abstract

We study the propagation of a wave packet in a pseudospin-1 system, a real example of which can be demonstrated by two-dimensional Lieb lattices or Dice lattices. In the long-wave approximation, their spectrum is determined in terms of the Dirac Hamiltonian eigenvalues. Here the general case when a three-component wave packet is generated in each of the three sublattices has been considered. By solving the non-stationary Schrödinger equation, it was established that the wave packet propagates as a superposition of plane waves. The amplitudes of these waves were found, and have been expressed in analytic form as Fourier components of the packet at the initial time moment.

Keywords: wave packet, pseudospin-1 system, Dirac Hamiltonian, non-stationary Schrödinger equation.

Вступ

Загально визнано, що бурхливий розвиток досліджень псевдо спінових систем був ініційований таким фундаментальним фактом як відкриття графену[1], що в силу новизни, специфіки його електрофізичних та механічних властивостей стало трендовим для багатьох напрямків у фізиці конденсованого стану. Визначальною особливістю доміную для псевдоспінових систем є спірна структура хвильових функцій. Для графену і графено подібних матеріалів хвильова функція є двохкомпонентною, що відповідає псевдоспіну $\frac{1}{2}$. Одним із багато обіцяючих щодо наукових і практичних результатів напрямків досліджень стало вивчення природних або штучно створених матеріалів зі структурою хвильових функцій властивою спіну 1, які і названі як псевдоспін 1 системи. Детальний огляд технологій синтезу, моделей і властивостей псевдоспін-1 систем представлений в багатьох роботах, наприклад [2-4].

В силу різноманіття фізичних властивостей будь-яких об'єктів, у тому числі і псевдоспін-1 систем, складно виділити проблему, яка б мала пріоритетний характер. Проте, одна з них, а саме поширення хвильових пакетів, ще не знайшла достатнього відображення в літературі. Тут запропонована спроба хоча б часткового заповнення цієї прогалини, що і є метою даної роботи.

1. Модель псевдоспін -1 системи у довгохвильовому наближенні

Відомо [2-8], що псевдоспін-1 системи реалізуються в решітках Ліба, дісе, причому вихідним у теоретичному описі є наближення сильного зв'язку. Якщо розглядаються перескоки лише між найближчими сусідами, які належать різним із трьох підграток, то у довгохвильовій апроксимації оператор енергії зводиться до гамільтоніану Дірака для без масових ферміонів, який у представленні плоских хвиль має такий вигляд [7,8]:

$$\hat{H}(\vec{k}) = \frac{v_F \hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & k_- & 0 \\ k_+ & 0 & k_- \\ 0 & k_+ & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Тут v_F – фермієвська швидкість електронів або фазова швидкість ЕМ хвиль в особливій точці, $k^\pm = k_x \pm ik_y$, а в нижче записаних формулах

$$\varepsilon^\pm(\vec{k}) = \frac{\hbar v_F}{\sqrt{2}}(k_x \pm ik_y) \quad (2)$$

Рівняння Шредінгера зводиться до такої форми

$$\hat{H}(\vec{k})\vec{X} = E\vec{X} \quad (3)$$

і має наступні, встановлені багатьма авторами [2,3], власні значення

$$E_1(\vec{k}) = v_F \hbar \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = v_F \hbar k \equiv \varepsilon(\vec{k}); \quad E_2 = 0; \quad E_3(\vec{k}) = -\varepsilon(\vec{k}) \quad (4)$$

і власні вектори

$$\vec{X}^1(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon^-(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} \\ 1 \\ \frac{\varepsilon^+(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} \end{pmatrix}, \quad \vec{X}^2(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{\varepsilon^-(\vec{k})}{\varepsilon^+(\vec{k})} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{X}^3(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{\varepsilon^-(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} \\ 1 \\ -\frac{\varepsilon^+(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} \end{pmatrix}; \quad (5)$$

У відповідності зі співвідношеннями (4) в околі особливих точок, якими є вершини зони Бріллюєна, закон дисперсії є лінійним і крім цього, існує бездисперсійна плоска зона, що є визначальним для даної моделі псевдоспіні системи.

2. Еволюція хвильового пакету з часом

Розглядається хвильовий пакет, який описується трикомпонентним спінором першого рангу вектор-функцією

$$\vec{F}^T(\vec{r}) = [F_1(\vec{r}), F_2(\vec{r}), F_3(\vec{r})] \quad (6)$$

де символом $(\dots)^T$ позначається транспонування вектора чи матриці, а нижні індекси вказують на підгратку, в якій генерований хвильовий пакет.

Динаміка хвильового пакету описується нестационарним рівнянням Шредінгера

$$i\hbar \partial_t \vec{\Psi}(\vec{r}, t) = \hat{H} \vec{\Psi}(\vec{r}, t) \quad (7)$$

для якого функція (6) є початковою умовою.

Перетворення Фур'є за формулою:

$$f(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\vec{k}\vec{r}} f(\vec{k}, t) d\vec{k} \quad (8)$$

приводить до такої краєвої задачі:

$$\begin{cases} i\hbar \partial_t \vec{\Psi}(\vec{k}, t) = \hat{H}(\vec{k}) \vec{\Psi}(\vec{k}, t) \\ \vec{\Psi}(\vec{k}, 0) = \vec{F}(\vec{k}) \end{cases} \quad (9)$$

Оскільки власні вектори оператора $\hat{H}(\vec{k})$ відомі (формули (5)) і утворюють повну ортонормовану систему, то розв'язок задачі (9) можна знайти розкладом вектор-функції $\vec{\Psi}(\vec{k}, t)$ по базису, утвореному вказаними векторами, що приводить до співвідношення:

$$\vec{\Psi}(\vec{k}, t) = \sum_{\alpha=1}^3 C_{\alpha}(\vec{k}, t) \vec{X}^{\alpha}(\vec{k}). \quad (10)$$

Підстановка (10) в (9) з врахуванням ортонормованості базису дає для коефіцієнтів $C_{\alpha}(\vec{k}, t)$ рівняння

$$i\hbar \partial_t C_{\alpha}(\vec{k}, t) = E_{\alpha}(\vec{k}) C_{\alpha}(\vec{k}, t) \quad (11)$$

розв'язок якого має вигляд

$$C_{\alpha}(k,t) = C_{\alpha}(\vec{k},0)e^{-itE_{\alpha}(\vec{k})/\hbar} \equiv C_{\alpha}(\vec{k},0)e^{-i\omega_{\alpha}(\vec{k})t} \quad (12)$$

Значення $C_{\alpha}(\vec{k},0)$ в початковий момент часу встановлюється розкладом другого із співвідношень

(4) по власних векторах $\vec{X}^{\alpha}(\vec{k})$, що після проектування на базисні вектори дає

$$C_{\alpha}(\vec{k},0) = \sum_{n=1}^3 (X_n^{\alpha})^*(\vec{k}) F_n(\vec{k}) \quad (13)$$

Поєднання (13), (12), (10) з врахуванням (8) приводить до основного результату даної роботи, який описує еволюцію хвильового пакету загальної аналітичної форми з часом і має наступний вигляд:

$$\Psi_n(\vec{r},t) \equiv F_n(\vec{r},t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=1, \alpha=1}^{m=3, \alpha=3} \int e^{i[\vec{k}\vec{r} - \omega_{\alpha}(\vec{k})t]} X_m^{*\alpha}(\vec{k}) F_m(\vec{k}) X_n^{\alpha}(\vec{k}) d\vec{k} \quad (14)$$

3. Аналіз результатів. Висновки

У відповідності зі співвідношенням (14) хвильовий пакет поширюється у вигляді суперпозиції плоских хвиль з амплітудами

$$X_m^{*\alpha}(\vec{k}) F_m(\vec{k}) X_n^{\alpha}(\vec{k}) \quad (15)$$

Обчислення амплітуд вимагає конкретизації форми хвильового пакету, яка задається функціями (6). Аналітичні результати можна отримати для дельта-подібної та ізотропної його форми. Проте, деякі висновки мають загальний характер. Зокрема, навіть якщо хвильовий пакет створений лише в одній підгратці, то згідно із (14) він буде охоплювати дві інші підгратки. Формула (14) містить складання хвиль, які відповідають кожній із трьох енергетичних зон. Оскільки одна з них, а саме плоска без дисперсійна зона описує стани з енергією $E = 0$, то відповідні складові хвильового пакету залишаються стаціонарними в часі.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. K.S.Novoselov, A.K.Geim, A.A.Firsov, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme, Nature, 438, 197-200, 2005
2. T.O. Wehling, A.M.Black-Schaffer, and A.V.Balatsky, Dirac materials, arXiv:1405.5774v1 [cond-mat.mtrl-sci], 22 May, 2014, 77pp
3. V.Jakubsky and K.Zelaya, "Lieb lattices and pseudospin-1 dynamics under barrier-and well-like electrostatic interactions", Physica E 152, 115738(2023)
4. S.Xing et al., "Theory, properties and engineering of 2D magnetic materials" Progress in Material Science, 132, 101036, (2023)
5. Taie, H. Ozawa, T. Ishinose et al., Coherent driving and freezing of bosonic matter wave in an optical Lieb lattice, Science Advances, vol. 1, no 10, article no 041410, 2010
6. A.Fang, Z.Q.Zhang, Steven G.Louie, and C.T.Chan, Pseudospin-1 Physics of Photonic Crystals, AAAS Research Volume, 2019, Article ID 3054062, 15 pages, <https://doi.org/10.34133/2019/3054062>
7. C.Tassi and D. Bercioux, "Implementation and characterization of the dice lattice in the electron quantum simulator", arXiv:2403.06040v1 [cond-mat.mes-hall], 9 Mar 2024
8. V.Jakubsky and K.Zelaya, "Reflectionless pseudospin-1 Dirac systems via Darboux transformation and flat band solutions", arXiv:2307.02112v1 [quant-ph] 5 Jul 2023

Володимир Бурдейний, кандидат фізико-математичних наук, доцент, професор кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця. brdnvldmr@ukr.net

Віктор Дзісь, кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедр загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця.

Volodymyr Burdeyny, PhD in Physics and Mathematics, associated professor of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, brdnvldmr@ukr.net

Victor Dzys, PhD in Technical Sciences, associated professor of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia,