Периодическое поле

Рассматр. одномерное движение частицы в периодическом поле $U(x)$.

$U(x-a) = U(x)$ a — период одномерного "кристалла" (решетки)

Сдвиг на $\forall$ целое число n периодов решетки переводит потенциал в себя $U(x-na) = U(x)$.

Нас интересует решение стационарного УШ в период. потенциале

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x)\,; \quad \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

гамильтониан.

Вспомним оператор конечного сдвига $\hat{U}_a = e^{-i\frac{\hat{p}a}{\hbar}}$ $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$

Коммутирует с $\hat{H}$ — гамильтонианом

$\Rightarrow$ можно выбрать общие собствен. функции операторов $\hat{H}$ и $\hat{U}_a$.

Как выглядят собств. функции и спектр $\hat{U}_a$?

$\hat{U}_a$ — унитарный, а не эрмитов оператор $\Rightarrow$ λ — комплекс. число.

$\hat{U}_a\psi(x) = \lambda\psi(x)$ $\hat{U}_a\psi(x) = \psi(x-a) = \lambda\psi(x)$

$$(\hat{U}_a)^n\psi(x) = \lambda^n\psi(x) \Rightarrow \left.\begin{aligned}\psi(x-na) &= \lambda^n\psi(x)\\ \psi(x) &= \lambda^n\psi(x+na)\end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \psi(x+na) = \frac{1}{\lambda^n}\psi(x)$$

$|\lambda| = 1$ иначе $\psi(x)$ — степенным образом растёт при $x \to +\infty$ или $x \to -\infty$

Тогда $\lambda = e^{i\varphi}$ где $-\pi < \varphi \le \pi$ — фаза

$\Rightarrow$ $\psi(x+a) = e^{i\varphi}\psi(x)$ ← совместная собств. функция $\hat{H}$ и $\hat{U}_a$

Теорема Блоха 1929 г. о решении стационарного У.Ш. в период. потенциале

$$\psi_q(x) = e^{iqx} u_q(x) \quad \leftarrow \text{Блоховская функция}$$

$u_q(x)$ — комплекснозначная периодическая функция $u_q(x+a) = u_q(x)$

q, $-\frac{\pi}{a} < q \le \frac{\pi}{a}$ — квазиволновой вектор, $\hbar q$ — квазиимпульс

$$\psi_q(x+a) = e^{iq(x+a)} u_q(x+a) = e^{iqa} \cdot e^{iqx} u_q(x) = e^{iqa}\psi_q(x)$$

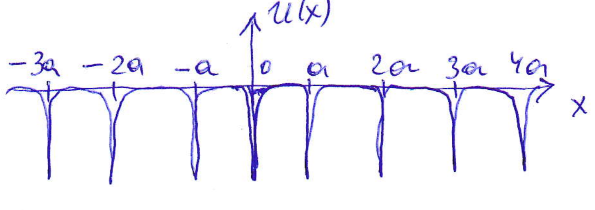
$\Rightarrow$ $\varphi = qa$ ← q параметризует фазу собственного значения оператора сдвига.

E_q и $\psi_q(x)$ — энергия и волновая функция зависят от q, параметра q.

$\Rightarrow$ Непрерывный спектр энергии в периодическом потенциале.

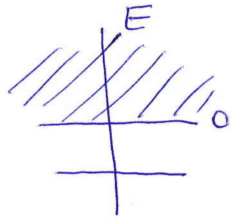
Пример

$$U(x) = -G\sum_{n=0,\pm1,\pm2\ldots}\delta(x-na)$$



← период. потенциал, составл. из δ-функций.

Вспомним задачу об одной δ-яме $\quad U(x) = -G\delta(x)$

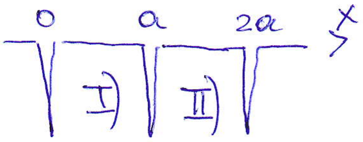


$\leftarrow$ непрер. спектр $E>0$ / $2^х$ кратно вырожден.

$\leftarrow$ одно состояние дискретного спектра с отрицат. энергией $\quad E_0 = -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m}$, где $\varkappa_0 = \frac{mG}{\hbar^2}$

$$\psi_0(x) = \sqrt{\varkappa_0}\, e^{-\varkappa_0 |x|}$$

Ищем решения для потенциала $U(x) = -G\sum_n \delta(x-na)$ при отрицательн. энергиях $E<0$. $\quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}$



I) $0<x<a \quad \psi_{I}(x) = e^{\varkappa x} + Ae^{-\varkappa x}$

II) $a<x<2a \quad \psi_{II}(x+a) = e^{iqa}\psi_{I}(x) = e^{iqa}\left(e^{\varkappa x} + Ae^{-\varkappa x}\right)$

$x \in [0,a]$

Пишем условия сшивки при $x=a$

$$\begin{cases} e^{\varkappa a} + Ae^{-\varkappa a} = e^{iqa}(1+A) & \leftarrow \text{непрерывн. } \psi \\ \varkappa e^{iqa}(1-A) - \varkappa\left(e^{\varkappa a} - Ae^{-\varkappa a}\right) = -2\varkappa_0\left(e^{\varkappa a} + Ae^{-\varkappa a}\right) & \leftarrow \text{условие на } \Delta\psi' \end{cases}$$

$(\Delta\psi' = -2\varkappa_0\psi)$

Подставляя A из одного уравнения в другое находим условие

$$\boxed{\cos qa = \operatorname{ch}\varkappa a - \frac{\varkappa_0}{\varkappa}\operatorname{sh}\varkappa a}$$

$\leftarrow$ определяет закон дисперсии E_q

При положительных энергиях $E>0$, $\varkappa = ik$ где $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\operatorname{ch}\varkappa a \to \operatorname{ch}(ika) = \cos ka$

$\operatorname{sh}\varkappa a \to \operatorname{sh}(ika) = i\sin ka$

модель Кронига–Пенни

$$\Rightarrow \boxed{\cos qa = \cos ka - \frac{\varkappa_0}{k}\sin ka}$$

Если вместо ям – барьеры $\quad U(x) = +G\sum_n \delta(x-na) \Rightarrow G \to -G$, $\varkappa_0 \to -\varkappa_0$

$$\boxed{\cos qa = \cos ka + \frac{\varkappa_0}{k}\sin ka}$$

$\leftarrow$ определяет спектр энергий в модели Кронига–Пенни

Решение при $E<0$

$$\cos qa = \operatorname{ch}\varkappa a - \frac{\varkappa_0 a}{\varkappa a}\operatorname{sh}\varkappa a$$

Получим приближ. ответ если $\varkappa_0 a \gg 1$ $\Rightarrow$

$\varkappa = \varkappa_0 + \Delta$, причём $\Delta \ll \varkappa_0$ и $\varkappa a \gg 1$ — узкая зона "вокруг" уровня энергии в одной δ-яме

$$\cos qa \approx \frac{e^{\varkappa a}}{2}\left(\frac{\varkappa-\varkappa_0}{\varkappa}\right)$$

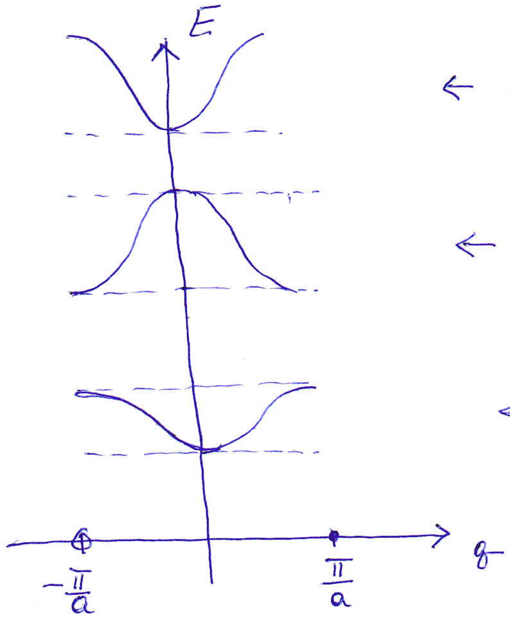
$$\varkappa \approx \varkappa_0\left(1+2e^{-\varkappa_0 a}\cos qa\right) \qquad E \approx -\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m} \approx -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m}\left(1+4e^{-\varkappa_0 a}\cos qa\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m} - \frac{2\hbar^2\varkappa_0^2 e^{-\varkappa_0 a}}{m}\cos qa$$

При $E>0$

уравнение $\cos qa = \cos ka - \frac{\varkappa_0 a}{ka}\sin ka$

имеет бесконечную серию различных решений $\Rightarrow$ разрешённых зон, которые следуют/чередуются с запрещёнными зонами



$\leftarrow E_3(q)$ — ... в третьей зоне.

$\leftarrow E_2(q)$ — закон дисперсии во второй зоне

$\leftarrow E_1(q)$ — закон дисперсии в первой разреш. зоне

$E_s(q), \psi_{q,s}(x)$; $s = 1, 2, 3 \ldots$ — нумерует разрешённые зоны.

$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ $\qquad$ $\hat{H}$ и E — вещественны $\Rightarrow$ если $\psi_{q,s}(x)$ — стацион. состоян. с энергией $E_s(q)$ $\Rightarrow$

компл. сопряж. вол. функция $\psi' = \psi^*_{q,s}(x)$ — удовл. стацион. УШ. с энергией $E_s(q)$

Но $\left(\psi_{q,s}(x)\right)^* = \left(e^{iqx} u_{q,s}(x)\right)^* = e^{-iqx} u^*_{q,s}(x)$ — является функцией с квазиволновым ~~вектором~~ числом $-q$ $\Longrightarrow$

имеется 2^x кратное вырождение в каждой разрешенной зоне.

$$\boxed{E_s(q) = E_s(-q)}$$

Приближённый закон дисперсии в окрестности нижнего/верхнего края зоны (эффективная масса)

Зона $s=1$ имеет $\min E_1(q)$ при $q=0$. $\Longrightarrow$

$$E_1(q) \underset{q\to 0}{\approx} E_1(q=0) + \frac{1}{2} q^2 E_1''(q=0) \equiv E_1(q=0) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_*} + O(q^3)$$

выглядит как $\frac{p^2}{2m_*}$ — нерелятив. закон дисперсии с массой — m_*

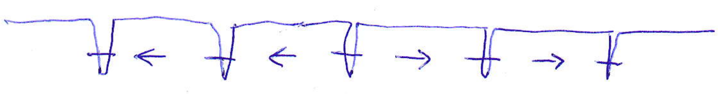
Эффективная масса $m_* = \dfrac{\hbar^2}{E_1''(q=0)}$

В нашем примере, ~~...~~ для первой зоны (с отрицательными энергиями) имеем

$$E_1(q) = -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m} - 2\frac{\hbar^2\varkappa_0^2 e^{-\varkappa_0 a}}{m}\cos qa \underset{q\to 0}{\approx} -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m} - \frac{2\hbar^2\varkappa_0^2}{m}e^{-\varkappa_0 a} + \frac{2\hbar^2\varkappa_0^2 e^{-\varkappa_0 a}}{m}\frac{(qa)^2}{2}$$

$$\Longrightarrow m_* = \frac{m e^{\varkappa_0 a}}{2(\varkappa_0 a)^2} \gg m$$ поскольку у нас $\varkappa_0 a \gg 1$.

Частица туннелирует /медленно из состояния локализованного в одной яме в состояние — локализованное в соседней яме



Приближение сильной связи

(на нашем примере потенциала $U(x) = -G\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta(x-na)$)

$$\psi_n(x) \equiv \sqrt{\varkappa_0}\, e^{-\varkappa_0|x-na|}$$

← точное решение у.ш. для потенциала $U_n(x) \equiv -G\delta(x-na)$ одной ямы в точке $x = na$

$$\varkappa_0 = \frac{mG}{\hbar^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_n''(x) + U_n(x)\psi_n(x) = E_0\psi_n(x)$$, где $E_0 = -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m}$

Нам нужно решение уравнения в поле период. потенциала $U(x)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \left(\sum_n U_n(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Попробуем искать решение в виде

$$\psi(x) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} C_m \psi_m(x)$$

$$\Rightarrow \sum_m C_m \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_m''(x) + U_m(x)\psi_m(x)\right)}_{=E_0\psi_m(x)} + \sum_m \sum_{n\neq m} \overset{C_m}{\vee} U_n(x)\psi_m(x) = \sum_m C_m \psi_m(x)\cdot E$$

$$\Rightarrow \sum_m\sum_{n\neq m} U_n(x)\psi_m(x)C_m = (E-E_0)\sum_m C_m\psi_m(x)$$

↑ Домножим на $\psi_{m'}(x)$ и проинтегрируем: $\int_{-\infty}^{+\infty}dx$

$$\int dx\, \psi_m(x)\psi_{m'}(x) = \varkappa_0\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varkappa_0|x-ma|} e^{-\varkappa_0|x-m'a|}dx = \left[1+\varkappa_0 a|m-m'|\right]\cdot e^{-\varkappa_0 a|m-m'|}$$

↑ интеграл перекрытия волновых функций $\equiv I_{m,m'}$

$I_{m,m'} \approx \delta_{m,m'}$ — пренебрегли величинами $\sim e^{-\varkappa_0 a}, e^{-2\varkappa_0 a}$ и т.д.

Нам также нужен, при $n \neq m$

$$J_{m',n,m} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; \psi_{m'}(x)\, U_n(x)\, \psi_m(x) =$$

$$= \varkappa_0 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\varkappa_0 |x-m'a|} \left(-G\delta(x-na)\right) e^{-\varkappa_0 |x-ma|} dx =$$

$$= -G\varkappa_0 e^{-\varkappa_0 |(n-m')|a} e^{-\varkappa_0 |n-m|a}$$

Оставим наименее подавленные величины $J_{m',n,m}$

$$m = n+1 \;, \quad m' = n \qquad J_{n,n,n+1} = -G\varkappa_0 e^{-\varkappa_0 a}$$

$$m = n-1 \;, \quad m' = n \qquad J_{n,n,n-1} = -G\varkappa_0 e^{-\varkappa_0 a}$$

$$\gamma \equiv G\varkappa_0 e^{-\varkappa_0 a} = \frac{\hbar^2 \varkappa_0^2}{m} e^{-\varkappa_0 a}$$ – параметр перескока на соседний узел.

$$\Rightarrow \quad \sum_n \left(C_{n+1} + C_{n-1} \right) \cdot (-\gamma) = \sum_n C_n (E - E_0)$$

Система линейных уравнений $\Updownarrow$

$$-\gamma \left(C_{n+1} + C_{n-1} \right) = (E - E_0) C_n$$

Ищем решение в виде $C_n = C \cdot e^{iqan}$ (в духе теоремы Блоха)

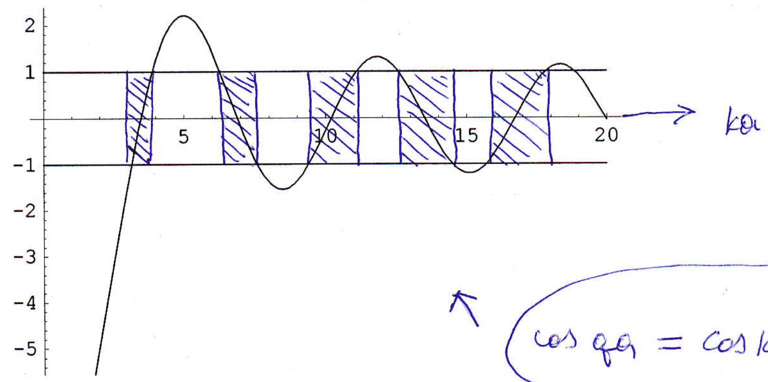
$$-\gamma \left(e^{iqa} + e^{-iqa} \right) = (E - E_0)$$ – закон дисперсии

$$E = E_0 - 2\gamma \cos qa$$ ← разрешенная зона (узкая) ширины $\Delta E = 4\gamma$

$$E = E_0 - 2\frac{\hbar^2 \varkappa_0^2}{m} \cos qa$$ ← чуч и $\cos qa$ совпал с разложением точного решения.

$\varkappa_0 a = 10$

In[10]:= `Plot[{Cos[u] - 10. / u Sin[u], 1, -1}, {u, 0, 20}]`



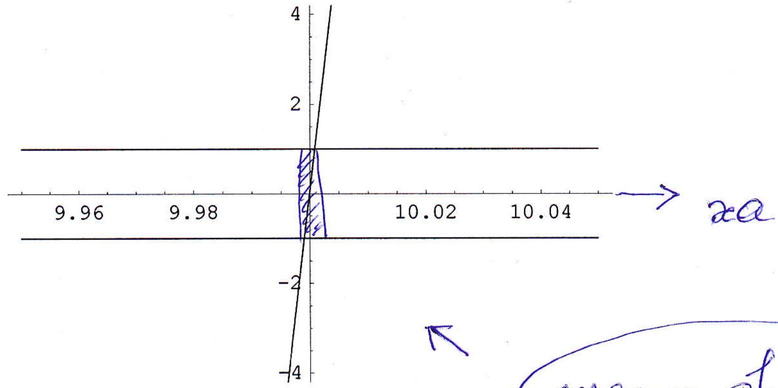
$E > 0$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

$$\cos qa = \cos ka - \frac{\varkappa_0 a}{ka} \sin ka$$

Out[10]= - Graphics -

In[18]:= `Plot[{(Exp[u] + Exp[-u]) / 2 - 10. / u (Exp[u] - Exp[-u]) / 2, 1, -1}, {u, 9.95, 10.05}]`



$E < 0$

$$\varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}$$

$$\cos qa = \operatorname{ch} \varkappa a - \frac{\varkappa_0 a}{ka} \operatorname{sh} \varkappa a$$

Out[18]= - Graphics -

$$\cos ka - \frac{\varkappa_0 a}{ka} \sin ka = \sqrt{1 + \frac{(\varkappa_0 a)^2}{(ka)^2}} \cos\left(ka + \operatorname{arctg}\left(\frac{\varkappa_0 a}{ka}\right)\right)$$

$1 - \varkappa_0 a$

при $k \to 0$.