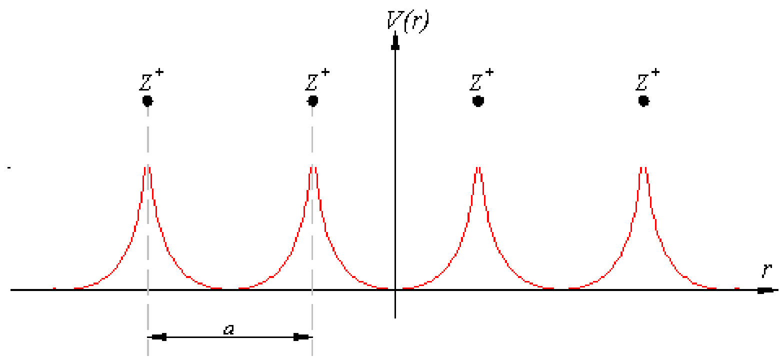
Семинар 20.03.2013

6 Задача Кронига-Пенни

Задача 6:

$$U(x) = \frac{\hbar^2}{m}\varkappa^2 \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \delta(x - na)$$



Вопрос: Какую систему может описывать этот потенциал?

Ответ: Это может являться кристаллом (так как имеет периодическую структуру).

Замечание: Задача из задания с помощью переобозначений сводится к этой.

Вопрос: Сколько связанных состояний?

Ответ: Так как пиков бесконечно много, то и связанных состояний тоже бесконечно много.

Вопрос: Как устроены уровни энергии в кристалле?

Ответ: В кристалле есть *разрешённые* и *запрещённые зоны.*

Запишем уравнение Шрёдингера для этого потенциала:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

Периодичность потенциала:

$$U(x + a) = U(x)$$

Так как наше уравнение второго порядка то для каждогшо уровня энергии есть два линейно независимых решения. Из без ограничения общности можно выбрать вещественными.

Пусть $\psi_1(x), \psi_2(x)$ — линейно независимые решения.

Тогда $\psi_1(x + a)$, $\psi_2(x + a)$ — тоже решения. Таким образом, эти решения можно записать в виде линейной комбинации:

$$\begin{cases} \psi_1(x + a) = a_{11}\psi_1(x) + a_{21}\psi_2(x), \\ \psi_2(x + a) = a_{12}\psi_1(x) + a_{22}\psi_2(x) \end{cases}$$

В матричном виде:

$$\Big(\psi_1(x+a), \psi_2(x+a)\Big) = \big(\psi_1(x), \psi_2(x)\big) \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}}_{A} \qquad (*)$$

Матрица A называется *матрицей трансляции.*

Утверждение 1:

$$\det A = 1$$

Лемма: Определитель Вронского любых двух решений $\psi_1(x), \psi_2(x)$, где

$$\psi''(x) - q(x)\psi(x) = 0, \qquad q(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x)),$$

равен константе.

Доказательство:

$$W(\psi_1(x), \psi_2(x)) = \begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \\ \psi_1'(x) & \psi_2'(x) \end{vmatrix} = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x)$$

Подставляя в исходное уравнение:

$$\begin{cases} \psi_1''(x) + q(x)\psi_1(x) = 0, \\ \psi_2''(x) + q(x)\psi_2(x) = 0, \end{cases}$$

Домножая первое на $\psi_2(x)$, второе на $\psi_1(x)$, вычитая, получаем:

$$\psi_1(x)\psi_2''(x) - \psi_2(x)\psi_1''(x) = \frac{d}{dx}\big(\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x)\big) = 0$$

Лемма доказана.

***

Теперь, используя лемму, докажем, что детерминант матрицы трансляций равен единице.

Дифференцируя $(*)$, получаем:

$$\Big(\psi_1'(x+a), \psi_2'(x+a)\Big) - \big(\psi_1'(x), \psi_2'(x)\big) \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}}_{A}$$

Соединяя это со $(*)$, получаем:

$$W(\psi_1(x+a), \psi_2(x+a)) = W(\psi_1(x), \psi_2(x)) \cdot \det A$$

Так как множитель равен константе, то он равен 1.

Утверждение 2 (теорема Флоке): для периодического потенциала всегда можно выбрать такие линейные комбинации (не обязательно вещественные) φ_1, φ_2, такие, что

$$\begin{cases} \varphi_1(x+a) = \lambda_1\varphi_1(x), \\ \varphi_2(x+a) = \lambda_2\varphi_2(x) \end{cases} \qquad (**)$$

Речь идёт о том, что λ_1, λ_2 — собственные значения матрицы трансляции, мы хотим её диагонализовать.

Замечание: Диагонализация этой матрицы возможна, так как кратных корней нет.

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda \end{vmatrix} = (a_{11}-\lambda)(a_{22}-\lambda) - a_{12}a_{12} = 0$$

$$\lambda^2 - (\underbrace{a_{11}+a_{22}}_{\mathrm{tr}A=2\rho})\lambda + 1 = 0$$

Инварианты матрицы: определитель и след.

$$\det A = \begin{vmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{vmatrix} = 1$$

Вспомним, какие физические граничные условия накладываются на волновые функции. Покажем, что λ лежат на единичной окружности.

1. $$|\lambda_1| > 1, \quad \varphi_1(x+na) = \lambda_1^n \varphi_1(x),$$

   $\psi_1(x)$ неограниченно растёт при $x \to \infty$.

2. $$|\lambda_1| < 1,$$

   $\varphi_1(x)$ неограниченно растёт при $x \to -\infty$ Эти функции не являются нормируемыми даже в смысле плоских волн.

3. $$|\lambda_1| = 1$$

   В этом случае есть нормальная физическая трактовка. Собственные числа являются комплексно сопряжёнными.

Утверждение:

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iKa}, \quad \mathrm{Im}\, K = 0$$

Рассмотрим уравнение на собственные функции и собственные значения оператора трансляции:

$$\psi(x+a) = \hat{T}_a \varphi(x) = \lambda \psi(x)$$

1. $|\lambda| = 1$

2. $\lambda(a) \cdot \lambda(b) = \lambda(a+b)$

Из этих двух соображений следует, что

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iKa}$$

***

Резюме:

Для периодического потенциала было выяснено, что:

$$\psi(x + na) = e^{iKa\cdot n}\varphi(x)$$

Теорема Бл<u>о</u>ха: общее решение имеет вид

$$\varphi_K(x) = e^{iKx}u_K(x),$$

где $u(k)$ — *любая* периодическая функция, с периодом a.

$\varphi_K(x)$ называются *функциями Бл<u>о</u>ха.*

Замечание: Константа $K \in \mathbb{R}$ отчасти играет роль импульса в твёрдом теле, и называется *квазиимпульс.* Вообще говоря, это вектор (в нашем одномерном рассуждении это не проявилось), и определяет поведение функции при трансляциях.

Надо сказать, что это не обычный импульс. Он неоднозначно определён:

1. $e^{2\pi in} = 1$, $n = 0, \pm 1, \dots$

   Функции K, $K' = K + \dfrac{2\pi n}{a}$ являются квазиимпульсами.

2. $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$

3. K не является собственным значением оператора импульса $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$

Этот квазиимпульс связан через специальное уравнение (дисперсионное отношение) с энергией $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

В кристалле разрешённые зоны энергии: $K \in \mathbb{R}$.

***

Перед тем, как проводит расчёты, напомним, что была введена величина $\rho = \dfrac{1}{2}(a_{11} + a_{22})$. Поэтому

$$\rho = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) = \operatorname{Cos} Ka$$

Вернёмся к конкретному потенциалу, данному в условии.

План:

- Рассмотрим ячейку 1: $0 < x < a$, и соседнюю ячейку 2: $a < x < 2a$.

- Напишем 2 линейно независимых решения для ячейки 1
- При помощи матрицы сдвигов перенесём решение в ячейку 2
- Сошьём решения при $x = a$.
- Из условий сшивки получаем два соотношения, для двух функций. Из четырёх соотношений получаем матрицу A.

Выберем решения (пусть нас не волнует, что они не нормируемые).

Ячейка 1:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = \operatorname{Cos} kx, \\ \psi_2(x) = \operatorname{Sin} kx \end{cases}$$

Ячейка 2:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = a_{11} \operatorname{Cos} k(x-a) + a_{21} \operatorname{Sin} k(x-a), \\ \psi_2(x) = a_{12} \operatorname{Cos} k(x-a) + a_{22} \operatorname{Sin} k(x-a) \end{cases}$$

Условия сшивки: конечный разрыв производной и непрерывность:

$$\begin{cases} \psi(a+0) = \psi(a-0), \\ \psi'(a+0) - \psi'(a-0) = 2\varkappa_0 \psi(a) \end{cases}$$

Внимательный наблюдатель может заметить, что во втором соотношении не такой знак, как в предыдущих задачах на конечный разрыв. В предыдущих задачах мы рассматривали ямы, а здесь — пики.

$$\begin{cases} a_{11} = \operatorname{Cos} ka, \\ a_{12} = \operatorname{Sin} ka \end{cases}$$

Производим дифференцирование для второго соотношения:

Ячейка 1:

$$\begin{cases} \psi_1'(x) = -k \operatorname{Sin} kx, \\ \psi_2'(x) = k \operatorname{Cos} kx, \end{cases}$$

Ячейка 2:

$$\begin{cases} \psi_1'(x) = -k a_{11} \operatorname{Sin} k(x-a) + k a_{21} \operatorname{Cos} k(x-a), \\ \psi_2'(x) = -k a_{12} \operatorname{Sin} k(x-a) + k a_{22} \operatorname{Cos} k(x-a) \end{cases}$$

Сшивая условия, получаем:

$$\begin{cases} k a_{21} + k \operatorname{Sin} ka = 2\varkappa_0 \operatorname{Cos} ka, \\ k a_{22} - k \operatorname{Cos} ka = 2\varkappa_0 \operatorname{Sin} ka, \end{cases}$$

откуда

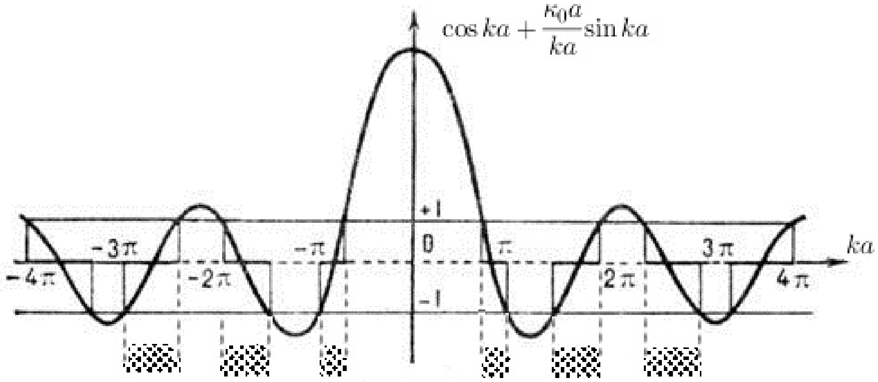
$$\begin{cases} a_{21} = -\operatorname{Sin} ka + \dfrac{2\varkappa_0}{k} \operatorname{Cos} ka, \\ a_{22} = \operatorname{Cos} ka + \dfrac{2\varkappa_0}{k} \operatorname{Sin} ka, \end{cases}$$

Находим след:

$$\underline{\rho = \frac{1}{2}(a_{11} + a_{22}) = \operatorname{Cos} ka + \frac{\varkappa_0}{k} \operatorname{Sin} ka}$$

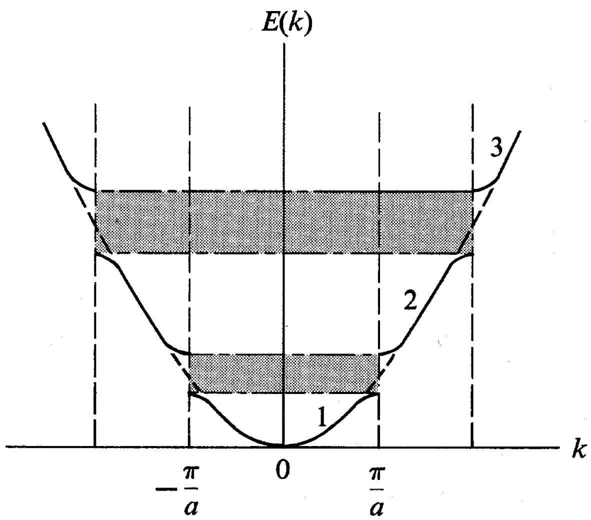
Кроме того, получаем дисперсионное соотношение:

$$\underline{\operatorname{Cos} Ka = \operatorname{Cos} ka + \frac{\varkappa_0}{k} \operatorname{Sin} ka,} \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$



Если $K \in \mathbb{R}$, то соответствующие зоны энергии разрешённые. В противном случае частица в кристалле распространяться не может.

На следующем рисунке изображена *дисперсионная кривая* $E(K)$:



1 зона Бриллюэна: $-\pi < ka < \pi$.

2 зона Бриллюэна: $-2\pi < ka < -\pi$ (левая), $\pi < ka < 2\pi$ (правая).

Заштрихованы соответственно 1 запрещённая зона, 2 запрещённая зона, и так далее.

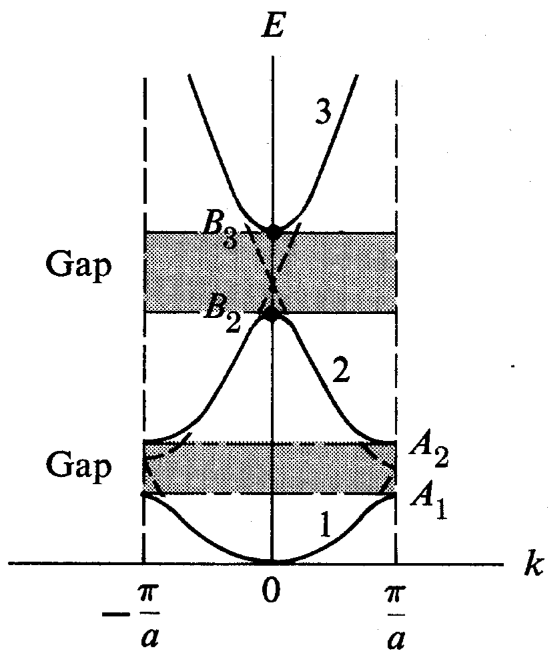
1. E такова, что $\rho < 1$,

$$|\operatorname{Cos} ka| < 1 \to K \in \mathbb{R}, \quad |\lambda| = 1$$

2. E такова, что $\rho > 1$,
$$|\operatorname{Cos} ka| > 1 \rightarrow K \in \mathbb{C}.$$
Поскольку кристалл *безграничный*, то такие состояния существовать не могут

3. Граница запрещённой зоны: $|\rho| = 1$.
$$|\operatorname{Cos} Ka| = 1, \quad Ka = \pi m$$
Последнее называется условием полного внутреннего отражения (условие Брегга-Вульфа)

Замечание: Иногда рисуют *приведённую дисперсионную кривую.*



Источники вдохновения: http://web.mit.edu/course/6/6.732/www/new_part1.pdf
http://sibsauktf.ru/courses/foet/Foet_2.htm
http://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_physics/3649/КРОНИГА