Kvantová mechanika I: Domácí úkoly

Michal Grňo

5. února 2020

1 Cvičení 20. 11.

1.1 Zadání

Máme částici v potenciálu daném vztahem

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na).$$

Pro kladné energie je podle Blochova teorému vlnová funkce pro $na < x < (n+1)a$:

$$\psi_q(x) = \left(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}qna},$$

kde q je krystalová hybnost částice. Vztah energie a hybnosti je

$$\cos qa = \cos ka + \frac{K}{2k}\sin ka, \tag{1}$$

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2ME}, \qquad \left\lfloor \frac{ka}{\pi} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{qa}{\pi} \right\rfloor,$$

kde M je hmotnost částice.

Pro kladnou energii vykreslete grafy $E(q)$, $v_\mathrm{g}(q)$, $v_\mathrm{g}(E)$ pro $K = 10$ a $K = 1$. Vypočtěte normalizovanou vlnovou funkci odpovídající záporným energiím a vykreslete pro ni graf $E(q)$ pro $K = -10$ a $K = -1$.

1.2 Řešení pro $E > 0$

Implicitní vztah mezi q a E chceme nějak parametrizovat. Nejprve si zadefinujeme pomocnou funkci

$$\theta_K(t) = \cos(2\pi t) + \frac{aK}{4\pi t}\sin(2\pi t).$$

Je zřejmé, že se jedná o pravou stranu rovnice (1) po substituci $ka = 2\pi t$. Je snadné vyjádřit vztah mezi parametrem t a energií. V dalším budeme používat „redukovanou“ energii, vydělenou konstantami:

$$\tilde{E}(t) = \frac{E}{\mathrm{h}^2 M^{-1}} = \frac{t^2}{2a^2}, \qquad t(\tilde{E}) = a\sqrt{2\tilde{E}}.$$

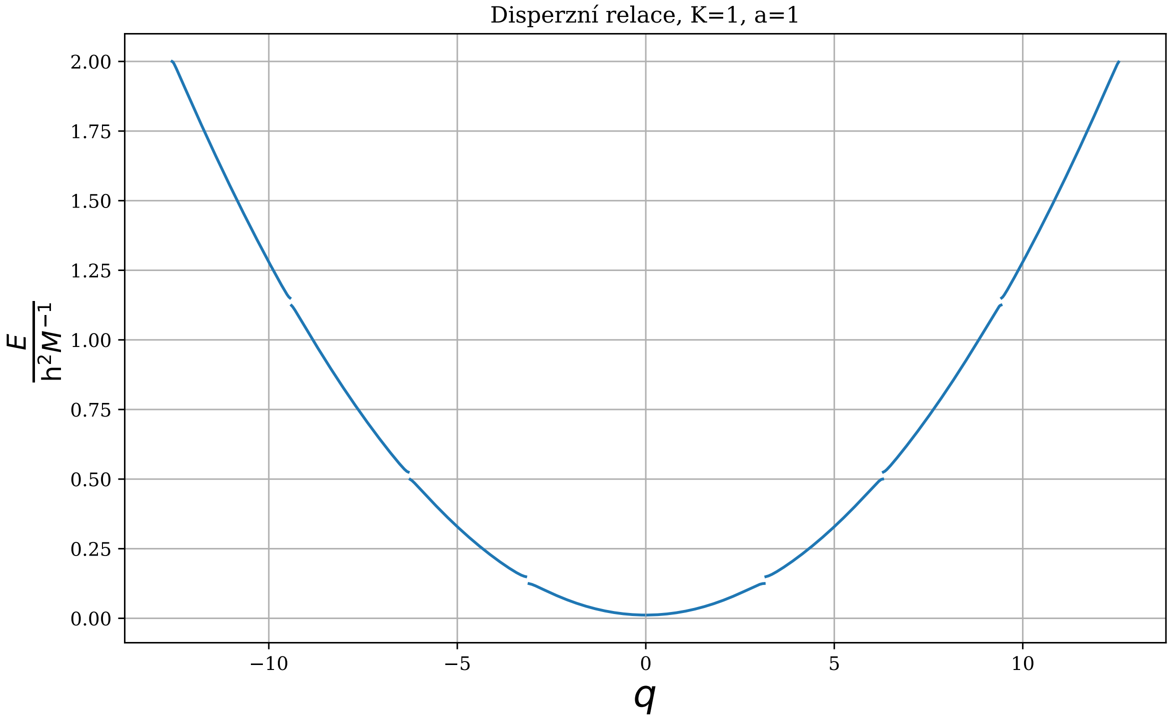
Nyní si vyjádříme q v závislosti na parametru. Je třeba věnovat pozornost správné volbě správné větve arccos, aby byla splněna podmínka $\lfloor ka/\pi \rfloor = \lfloor qa/\pi \rfloor$. Lze snadno ověřit, že následující vztah tuto podmínku splňuje:

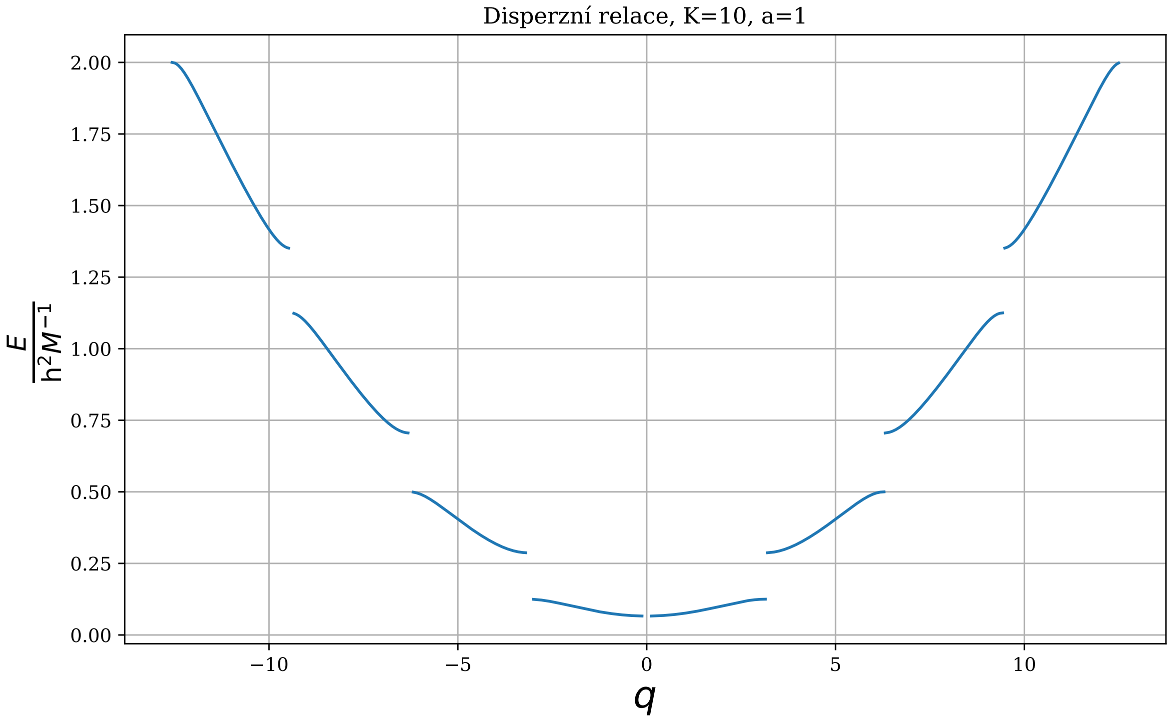
$$q_K(t) = \begin{cases} n \le t \le n + \frac{1}{2} : & \frac{1}{a}\left(2\pi n + \arccos\theta_K(t)\right) \\ n - \frac{1}{2} \le t \le n : & \frac{1}{a}\left(2\pi n - \arccos\theta_K(t)\right) \end{cases} \quad \text{pro nějaké } n \in \mathbb{Z}$$

Nyní máme hotovou parametrizaci $\varphi(t)$ grafu $\tilde{E}(q)$:

$$\varphi(t) = \begin{pmatrix} q_K(t) \\ \tilde{E}(t) \end{pmatrix},$$

a můžeme vykreslit grafy pro první čtyři energetické hladiny (tj. $t \in [-4, 4]$).


Disperzní relace, K=1, a=1
2.00
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−10
−5
0
5
10
q


Disperzní relace, K=10, a=1
2.00
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−10
−5
0
5
10
q

Pro vypočtení derivace využijeme implicitní funkci. Vztah $\tilde{E}(q)$ vyjádřený jako implicitní funkce má tvar:

$$\Phi_K(q, \tilde{E}) = \cos qa - \theta_K(t(\tilde{E})).$$

Derivace $\tilde{E}$ je potom

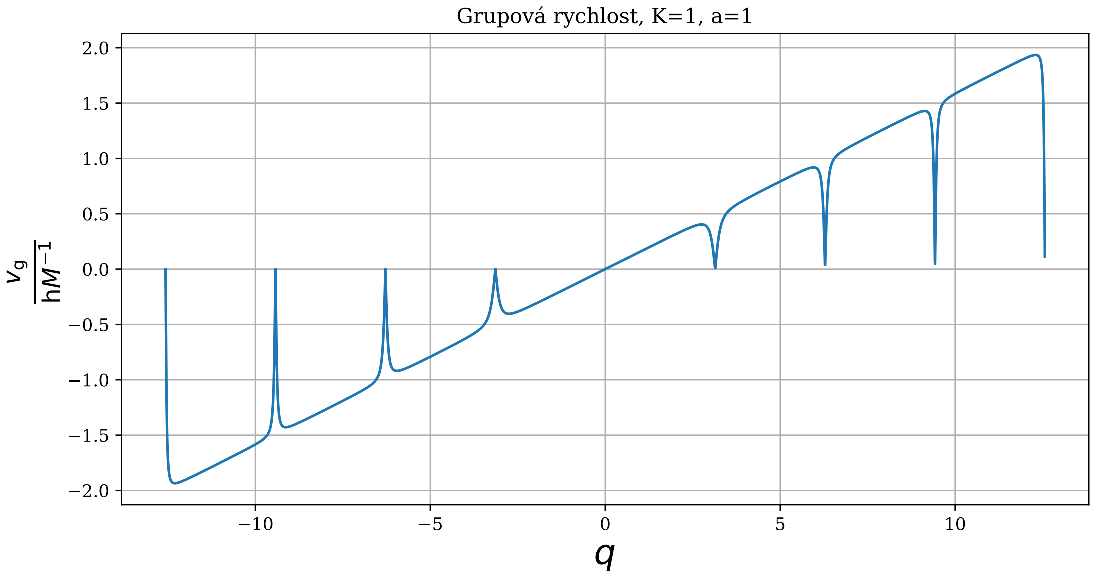
$$\frac{\mathrm{d}\tilde{E}}{\mathrm{d}q}(q(t)) = -\frac{\frac{\partial \Phi}{\partial q}(q(t), \tilde{E}(t))}{\frac{\partial \Phi}{\partial q}(q(t), \tilde{E}(t))} = -\frac{a \sin aq(t)}{\theta_K'(t)\, t'(\tilde{E}(t))} = \frac{4\pi a^2 t^3 \sin\big(aq(t)\big)}{-2\pi K a t \cos(2\pi a t) + K \sin(2\pi a t) + 8\pi^2 a^2 t^2 \sin(2\pi a t)}.$$

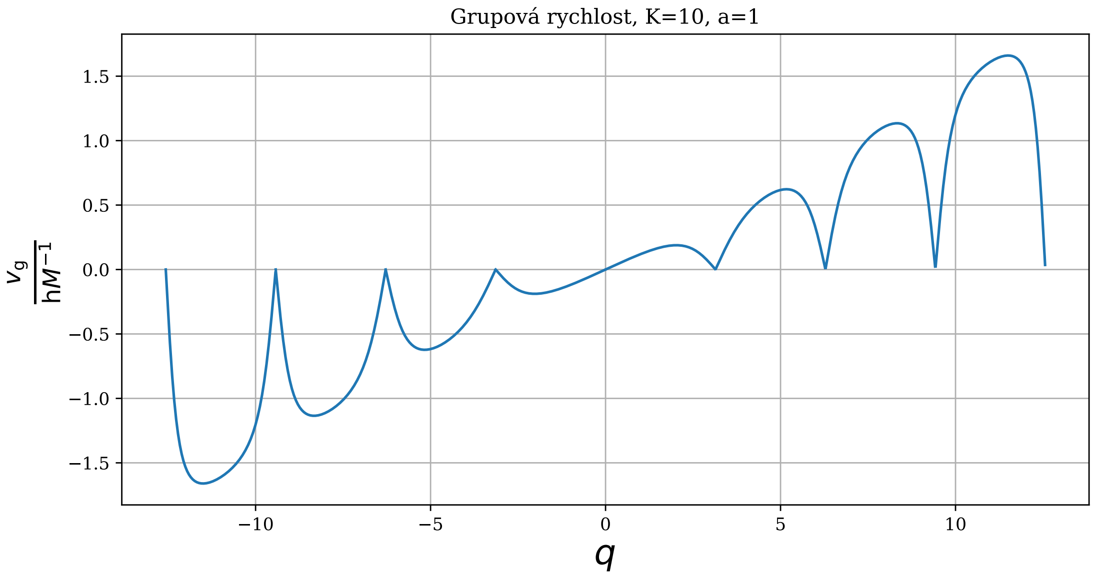
Pro grupovou rychlost v_{g} platí:

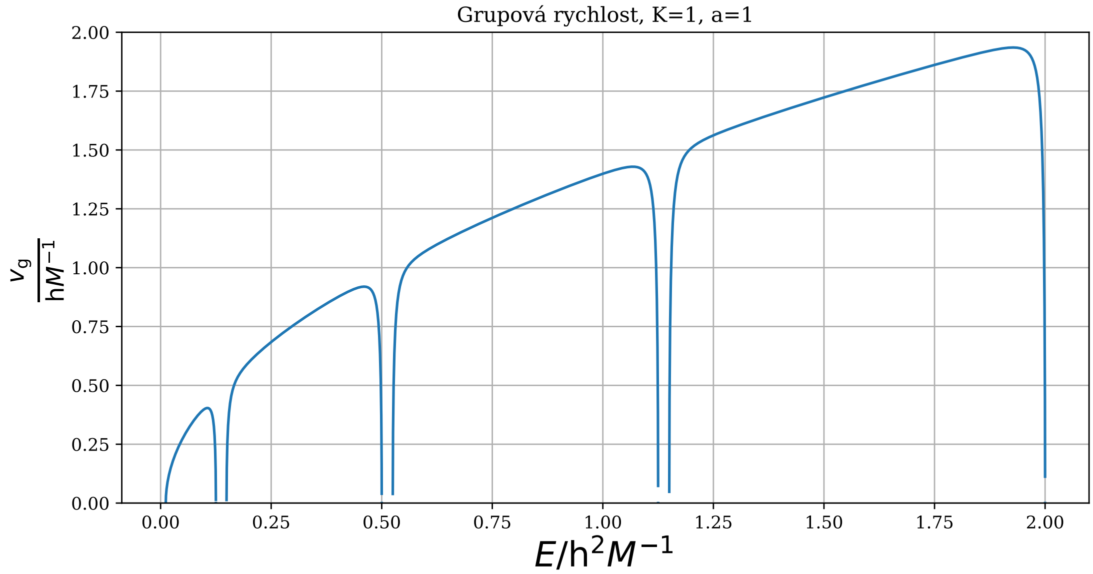
$$v_{\mathrm{g}}(q) = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}q} = 2\pi \frac{\mathrm{h}}{M}\frac{\mathrm{d}\tilde{E}}{\mathrm{d}q}$$

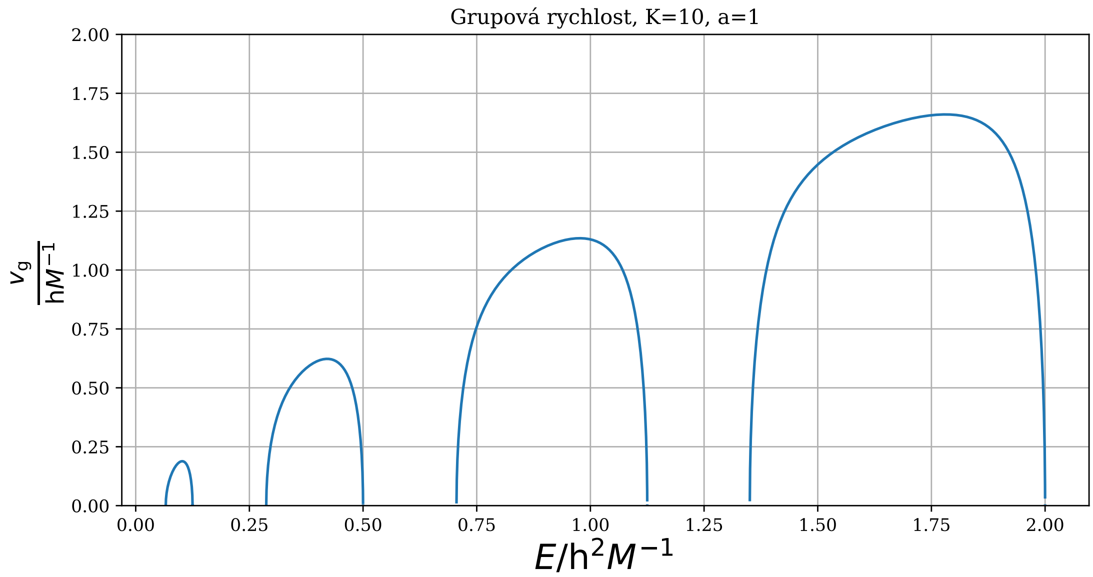
Veličinu $\tilde{v}_{\mathrm{g}}$ (opět podělenou konstantami) tedy můžeme v závislosti na q, resp. E parametrizovat:

$$\phi_q(t) = \begin{pmatrix} q_K(t) \\ 2\pi \frac{\mathrm{d}\tilde{E}}{\mathrm{d}q}(q(t)) \end{pmatrix}, \qquad \phi_E(t) = \begin{pmatrix} \tilde{E}(t) \\ 2\pi \frac{\mathrm{d}\tilde{E}}{\mathrm{d}q}(q(t)) \end{pmatrix}.$$









1.3 Řešení pro $E < 0$

Pro záporné energie máme podle Blochova teorému:

$$\psi_I = \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}\left(A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}\mathrm{e}^{kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}\mathrm{e}^{-kx}\right),$$
$$\psi_{II} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qa}\left(A\mathrm{e}^{k(x+a)} + B\mathrm{e}^{-k(x+a)}\right).$$

Aplikujeme-li nyní slepovací podmínky, získáme:

$$\psi_{II}(0-) = \psi I(0+)$$
$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qa}\left(A\mathrm{e}^{ka} + B\mathrm{e}^{-ka}\right) = A + B$$

$$\psi'_{II}(0-) - \psi'_I(0+) = -K(A+B)$$
$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qa}\left(Ak\mathrm{e}^{ka} - B\mathrm{e}^{-ka}\right) - kA + kB = -K(A+B)$$

Získáme tedy lineární soustavu dvou rovnic, po převedení do maticové podoby:

$$\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qa+ka} - 1 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qa-ka} - 1 \\ k\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qa+ka} - 1\right) + K & -k\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qa-ka} - 1\right) + K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \tag{2}$$

Podmínka nulovosti determinantu vede na rovnici

$$\cos qa = \cosh ak + \frac{K}{2k}\sinh ak$$

Parametrizace bude zjevně téměř stejná, jako pro případ $E > 0$, jenom pomocnou funkci $\theta_K(t)$ si předefinujeme:

$$\theta_K(t) = \cosh(2\pi t) + \frac{K}{2k}\sinh(2\pi t).$$

Nakonec ještě normalizujeme vlnovou funkci:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x = \int_0^a \left(A\mathrm{e}^{2kx} + 2AB + B\mathrm{e}^{-2kx}\right)\,\mathrm{d}x = \left[\frac{A}{2k}\mathrm{e}^{2kx} + 2ABx - \frac{B}{2k}\mathrm{e}^{-2kx}\right]_0^a$$
$$= \frac{A}{2k}\left(\mathrm{e}^{2ka} - 1\right) + 2aAB + \frac{B}{2k}\left(1 - \mathrm{e}^{-2ka}\right) = 1$$

Tato rovnice společně s (2) stačí k určení koeficientů A, B pro konkrétní hodnoty q, K, a.