Χτένα Dirac για απωστικό κι ελκτικό δυναμικό

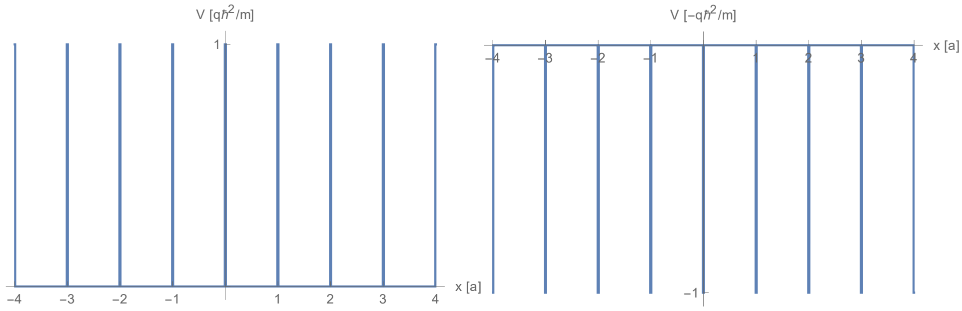
Κ. Φουτζόπουλος <kfoutzop@auth.gr>, Ιούνιος 2020

1 Εισαγωγή

Η χτένα Dirac ορίζεται από το περιοδικό δυναμικό

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

Για $\omega = q > 0$ είναι απωστικό ($V > 0$) ενω για $\omega = -q < 0$ είναι ελκτικό ($V < 0$).



Σχήμα 1. Γραφική αναπαράσταση του δυναμικού για (αριστερά) απωστικό και (δεξιά) ελκτικό.

Η εξίσωση Σρέντινγκερ είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

Για απωστικό δυναμικό είναι $E > 0$, ενω για ελκτικό είναι $E < 0$.

2 Απωστικό δυναμικό

2.1 Επιλέγοντας εκθετικές λύσεις

Οι λύσεις στη περιοχή $0 < x < a$ μπορούν να διαλεχθούν

$$u_1(x) = e^{ikx}, \quad u_2(x) = e^{-ikx}$$

Η γενική λύση μπορεί να γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός των λύσεων. Δηλαδή

$$\boxed{u(x) = Au_1(x) + Bu_2(x)}$$

Τότε, η γενική λύση στη περιοχή $0 < x < a$ γράφεται

$$u_{x<a}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Λόγο περιοδικότητας (θεωρία Floquet)

$$\boxed{u(x+\alpha) = \varkappa u(x) \Rightarrow u(x) = \varkappa u(x-a),\ \varkappa = e^{i\mu a}}$$

και η γενική λύση στη περιοχή $a<x<2a$ γράφεται

$$u_{x>a}(x)=\varkappa(Ae^{ik[x-\alpha]}+Be^{-ik[x-\alpha]})$$

Οι συνοριακές συνθήκες γράφονται

$$\boxed{\begin{array}{c} u(a^-)=u(a^+) \\ u'(a^-)+2\omega u(a)=u'(a^+) \end{array} \quad , a^{\pm}=a\pm\epsilon, \epsilon\rightarrow 0}$$

Αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες, με $\omega=q$

$$\begin{gathered} Ae^{ika}+Be^{-ika}=\varkappa(A+B) \\ -k\,(Ae^{ika}-Be^{-ika})+2iq\,(Ae^{ika}+Be^{-ika})=-k\varkappa\,(A-B) \end{gathered}$$

Το προηγούμενο σύστημα γράφεται

$$\left[\begin{array}{cc} e^{ika}-\varkappa & e^{-ika}-\varkappa \\ (-k+2iq)\,e^{ika}+k\varkappa & (k+2iq)\,e^{-ika}-k\varkappa \end{array}\right]\left[\begin{array}{c} A \\ B \end{array}\right]=\left[\begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array}\right]$$

Από τη συνθήκη επιλυσιμότητας του ομογενούς συστήματος, συνεπάγεται

$$(e^{ika}-\varkappa)((k+2iq)\,e^{-ika}-k\varkappa)-(e^{-ika}-\varkappa)((-k+2iq)\,e^{ika}+k\varkappa)=0$$

Αναπτύσσοντας

$$1/2(1/\varkappa+\varkappa)=1/2(e^{-i\mu\alpha}+e^{i\mu a})=1/2(\,e^{ika}+e^{-ika})-i/2(q/k)\,(e^{ika}-e^{-ika})$$

και με χρήση των τριγονομετρικών ταυτοτήτων

$$\cos x=\frac{e^x+e^{-x}}{2}, \quad \sin x=\frac{e^x-e^{-x}}{2i}=-i\frac{e^x-e^{-x}}{2}$$

προκύπτει

$$\cos\mu a=\cos ka+\frac{q}{k}\sin ka, \quad q>0$$

2.2 Επιλέγοντας τριγωνομετρικές συναρτήσεις

Οι λύσεις στη περιοχή $0<x<a$ μπορούν να διαλεχθούν

$$u_1(x)=\cos kx, \quad u_2(x)=\sin kx$$

Τότε, η γενική λύση στη περιοχή $0<x<a$ γράφεται

$$u_{x<a}(x)=A\cos kx+B\sin kx$$

και η γενική λύση στη περιοχή $a<x<2a$ γράφεται

$$u_{x>a}(x)=\varkappa(A\cos k(x-a)+B\sin k(x-a))$$

Αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες, με $\omega=q$

$$\begin{gathered} A\cos ka+B\sin ka=\varkappa A \\ k(-A\sin ka+B\cos ka)+2q\,(\mathrm{A}\cos ka+B\sin ka)=k\varkappa B \end{gathered}$$

Το προηγούμενο σύστημα γράφεται

$$\begin{bmatrix} \cos ka - \varkappa & \sin ka \\ -k \sin ka + 2q \cos ka & k \cos ka + 2q \sin ka - k\varkappa \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Από τη συνθήκη επιλυσιμότητας του ομογενούς συστήματος, συνεπάγεται

$$(\cos ka - \varkappa)(k \cos ka + 2q \sin ka - k\varkappa) - \sin ka(-k \sin ka + 2q \cos ka) = 0$$

Αναπτύσσοντας

$$1/2\,(1/\varkappa + \varkappa) = \cos \mu a = \cos ka + (q/k) \sin ka$$

και άρα

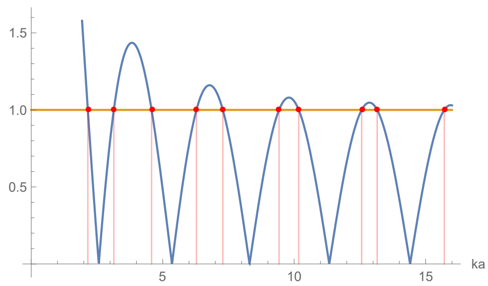
$$\cos \mu a = \cos ka + \frac{q}{k} \sin ka, \qquad q > 0$$

2.3 Αποτελέσματα

Οι ενεργειακές ζώνες τότε βρίσκονται

$$|\cos \mu a| = \left|\cos ka + \frac{q}{k} \sin ka\right| \leqslant 1, \qquad q > 0$$

Παρακάτω γίνεται γραφικά η επίλυση της ανισώτητας για $qa = 4$.

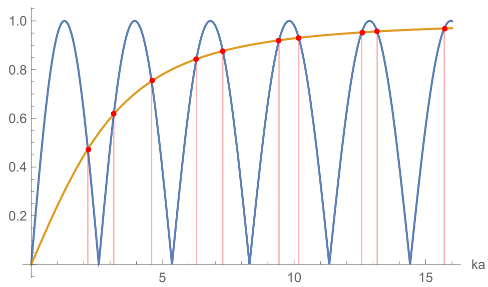


Σχήμα 2. Οι ενεργειακές ζώνες προκύπτουν από τα σημεία τομής των δυο καμπυλών.

Η προηγούμενη σχέση μπορεί να ξαναγραφεί ως

$$|\cos(ka - \operatorname{atan} q/k)| \leqslant [1 + (q/k)^2]^{-1/2}$$

Αντίστοιχα, γίνεται γραφικά η επίλυση της ανισώτητας για $qa = 4$.



Σχήμα 3. Οι ενεργειακές ζώνες προκύπτουν από τα σημεία τομής των δυο καμπυλών.

Οι ζώνες σχηματικά είναι

Σχήμα 4. Οι ζώνες όπως προκύπτουν από τη γραφική επίλυση.

Παρατηρούμε πως με την αύξηση της ενέργεια οι ζώνες γίνονται ευρύτερες έτσι ώστε το φάσμα να πλησιάζει το συνεχές. Ωστόσο και σε υψηλές ενέργειες υπάρχουν απαγορευμένες ζώνες.

3 Ελκτικό δυναμικό

3.1 Επιλέγοντας εκθετικές λύσεις

Οι λύσεις στη περιοχή $0<x<a$ μπορούν να διαλεχθούν

$$u_1(x)=e^{kx}, \quad u_2(x)=e^{-kx}$$

Τότε, η γενική λύση στη περιοχή $0<x<a$ γράφεται

$$u_{x<a}(x)=Ae^{kx}+Be^{-kx}$$

και η γενική λύση στη περιοχή $a<x<2a$ γράφεται

$$u_{x>a}(x)=\varkappa(Ae^{k[x-\alpha]}+Be^{-k[x-\alpha]})$$

Αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες, με $\omega=-q$

$$\begin{gathered} Ae^{ka}+Be^{-ka}=\varkappa(A+B) \\ k\,(Ae^{ka}-Be^{-ka})-2q\,(Ae^{ka}+Be^{-ka})=k\varkappa\,(A-B) \end{gathered}$$

Το προηγούμενο σύστημα γράφεται

$$\left[\begin{array}{cc} e^{ka}-\varkappa & e^{-ka}-\varkappa \\ (k-2q)\,e^{ka}-k\varkappa & (-k-2q)\,e^{-ka}+k\varkappa \end{array}\right]\left[\begin{array}{c} A \\ B \end{array}\right]=\left[\begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array}\right]$$

Για να έχει λύσει το σύστημα πρέπει

$$(e^{ka}-\varkappa)((-k-2q)\,e^{-ka}+k\varkappa)-(e^{-ka}-\varkappa)((k-2q)\,e^{ka}-k\varkappa)=0$$

Αναπτύσσοντας

$$1/2\,(1/\varkappa+\varkappa)=\cos\mu a=1/2(\,e^{ka}+e^{-ka})-1/2(q/k)(\,e^{ka}-e^{-ka})$$

και με χρήση των υπερβολικών ταυτοτήτων

$$\cosh x=\frac{e^x+e^{-x}}{2}, \quad \sinh x=\frac{e^x-e^{-x}}{2}$$

προκύπτει

$$\cos\mu a=\cosh ka-\frac{q}{k}\sinh ka, \quad q>0$$

3.2 Επιλέγοντας υπερβολικές συναρτήσεις

Οι λύσεις στη περιοχή $0<x<a$ μπορούν να διαλεχθούν

$$u_1(x)=\cosh kx, \quad u_2(x)=\sinh kx$$

Τότε, η γενική λύση στη περιοχή $0<x<a$ γράφεται

$$u_{x<a}(x)=A\cosh kx+B\sinh kx$$

και η γενική λύση στη περιοχή $a<x<2a$ γράφεται

$$u_{x>a}(x)=\varkappa(A\cosh k(x-a)+B\sinh k(x-a))$$

Αντικαθιστώντας στις συνοριακές συνθήκες, με $\omega=-q$

$$A\cosh ka+B\sinh ka=\varkappa A$$
$$k(A\sinh ka+B\cosh ka)-2q\,(\mathrm{A}\cosh ka+B\sinh ka)=k\varkappa B$$

Το προηγούμενο σύστημα γράφεται

$$\begin{bmatrix} \cosh ka-\varkappa & \sinh ka \\ k\sinh ka-2q\cosh ka & k\cosh ka-2q\sinh ka-k\varkappa \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Από τη συνθήκη επιλυσιμότητας του ομογενούς συστήματος, συνεπάγεται

$$(\cosh ka-\varkappa)(k\cosh ka-2q\sinh ka-k\varkappa)-\sinh ka(k\sinh ka-2q\cosh ka)=0$$

Αναπτύσσοντας

$$1/2\,((\cosh^2 ka-\sinh^2 ka)/\varkappa+\varkappa)=\cos\mu a=\cosh ka-(q/k)\sinh ka$$

και άρα

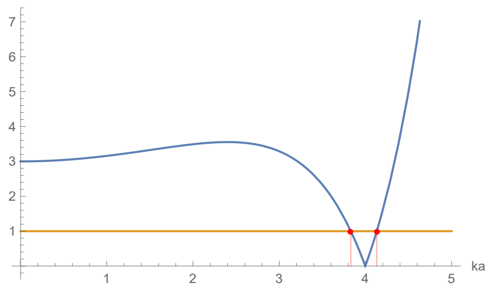
$$\cos\mu a=\cosh ka-\frac{q}{k}\sinh ka,\qquad q>0$$

3.3 Αποτελέσματα

Οι ενεργειακές ζώνες τότε βρίσκονται

$$|\cos\mu a|=\left|\cosh ka-\frac{q}{k}\sinh ka\right|\leqslant 1,\qquad q>0$$

Παρακάτω γίνεται γραφικά η επίλυση της ανισώτητας για $qa=4$.



Σχήμα 5. Οι ενεργειακές ζώνες προκύπτουν από τα σημεία τομής των δυο καμπυλών.

Παρατηρούμε πως δεν εμφανίζονται ζώνες όπως στη περίπτωση απωστικού δυναμικού αλλά υπάρχει μια μοναδική επιτρεπτή περιοχή.

3.4 Εμφάνιση συμμετρίας

Οι περιοχές για $\omega = q, E > 0$ καθορίζονται από τη σχέση

$$|\cos \mu a| = \left|\cos ka + \frac{q}{k}\sin ka\right| \leqslant 1$$

Για $\omega = -q, E < 0$ γίνεται ο μετασχηματισμός $q \to -q$ και $k \to ik$.

$$\left|\cos ka + \frac{q}{k}\sin ka\right| \leqslant 1 \to \left|\cos ika - \frac{q}{ik}\sin ika\right| \leqslant 1$$

Είναι

$$\cos ix = 0.5\,(\exp(i^2x) + \exp(-i^2x)) = \cosh x$$

$$\sin ix = -i\,0.5\,(\exp(i^2x) - \exp(-i^2x)) = -i\,(-\sinh x) = i \sinh x$$

Οπότε

$$\left|\cos ika - \frac{q}{ik}\sin ika\right| \leqslant 1 \Rightarrow \left|\cosh ka - \frac{q}{k}\sinh ka\right| \leqslant 1$$

Προκύπτει έτσι η σχέση που βρέθηκε κάνοντας τη πλήρη ανάλυση.

Βιβλιογραφία

[1] N. Βλάχος. *Σημειώσεις για το μάθημα "Υπολογιστική Κβαντομηχανική"*.
[2] S. Flugge. *Practical Quantum Mechanics*. Springer, 1999.
[3] D.J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Prentice Hall, 2005.