

Kapitola 2

Potenciál tvaru δ -funkce, Diracův hřeben

Cvičení 5. *Uvažujte částici v potenciálu tvaru*

$$V(x) = \alpha\delta(x).$$

1. *Napište příslušnou bezčasovou Schrödingerovu rovnici a nalezněte podmínky, které musí vlnová funkce splňovat.*
2. *Nalezněte vázané stavy a určete jejich energie.*
3. *Nalezněte rozptylové stavy a určete koeficienty odrazu $R(E)$ a průniku $T(E)$ potenciálem.*

Návod:

1. Bezčasová Schrödingerova rovnice má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\psi''(x) + \alpha\delta(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (2.1)$$

Rovnici zintegrujeme přes malý interval $(-\varepsilon, \varepsilon)$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}[\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)] - \alpha\psi(0) = E \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x)dx,$$

a provedeme limitu $\varepsilon \rightarrow 0^+$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}[\psi'(0^+) - \psi'(0^-)] + \alpha\psi(0) = 0.$$

Řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice (2.1) tedy bude spojitá funkce $\psi(x)$, jejíž derivace má v nule skok daný vztahem

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2M\alpha}{\hbar^2}\psi(0). \quad (2.2)$$

2. Hledáme kvadraticky integrabilní řešení rovnice (2.1). Pro $x \neq 0$ rovnice přejde na tvar

$$\psi''(x) = \kappa^2 \psi(x), \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}}.$$

Její obecné řešení je

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}.$$

Kvadraticky integrabilní řešení může existovat jen pro $\kappa \in \mathbb{R}$, tj. $E < 0$. V tom případě je $\kappa > 0$ a na záporné, resp. kladné poloose, má řešení tvar

$$\begin{aligned} x < 0 & : \psi_I(x) = Ae^{\kappa x}, \\ x > 0 & : \psi_{II}(x) = Be^{-\kappa x}. \end{aligned}$$

Ze spojitosti funkce v nule plyne rovnost $A = B$. Z podmínky na skok derivace v nule (2.2)

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = -2A\kappa = \frac{2M\alpha}{\hbar^2}A \quad \Rightarrow \quad \kappa = -\frac{M\alpha}{\hbar^2} > 0,$$

plyne, že vázaný stav existuje jen pro $\alpha < 0$, tj. pokud se jedná o potenciálovou jámu. Energie vázaného stavu je rovna

$$E_\alpha = -\frac{M\alpha^2}{2\hbar^2}.$$

Příslušná normovaná vlastní funkce je

$$\psi_\alpha(x) = \sqrt{-\frac{M\alpha}{\hbar^2}} e^{-\kappa|x|}.$$

Pro $\alpha > 0$ (potenciálová bariéra) existují jen rozptylové stavy.

3. Nezávisle na znaménku α patří energie $E > 0$ do spojitě části spektra. Rozptylové stavy lze zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} x < 0 & : \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \\ x > 0 & : \psi_{II}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \end{aligned}$$

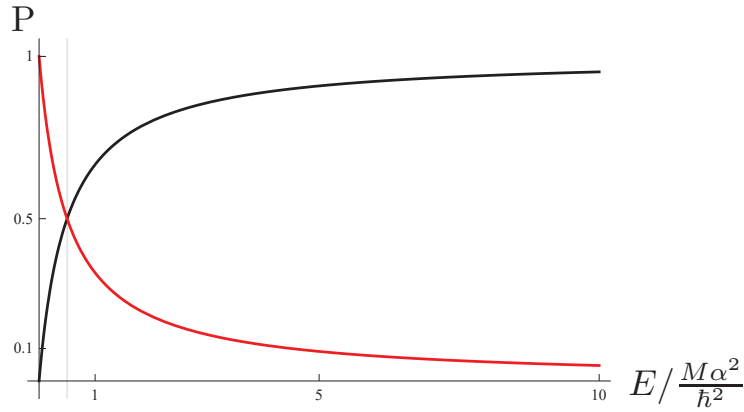
kde k je určeno energií

$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}.$$

Podmínky spojitosti funkce a skok derivace v nule dávají následující vztahy pro koeficienty A, B, C, D

$$A + B = C + D, \tag{2.3}$$

$$ik(C - D - A + B) = \frac{2M\alpha}{\hbar^2}(A + B). \tag{2.4}$$



Obrázek 2.1: Pravděpodobnosti průchodu (černě) a odrazu (červeně) v závislosti na energii dopadající částice.

Uvažujme nyní rozptyl částice s energií E nalétávající na potenciál tvaru δ -funkce zleva. Na záporné poloose bude jak dopadající tak odražená vlna (s amplitudami A , resp. B), na kladné poloose jen prošlá vlna (s amplitudou C), tj. $D = 0$. Koeficienty odrazu a průniku pak jsou

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2, \quad T = \left| \frac{C}{A} \right|^2. \quad (2.5)$$

Řešením soustavy rovnic (2.3), (2.4) dostaneme

$$C = \frac{A}{1 - \frac{M\alpha}{ikh^2}}, \quad B = -\frac{A}{1 - \frac{ikh^2}{M\alpha}}.$$

Dosazením do (2.5) nalezneme závislost koeficientů průniku a odrazu na energii dopadající částice

$$T(E) = \left| \frac{1}{1 - \frac{M\alpha}{ikh^2}} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{M\alpha^2}{2\hbar^2 E}},$$

$$R(E) = \left| \frac{1}{1 - \frac{ikh^2}{M\alpha}} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{M\alpha^2}}.$$

Výsledek nezávisí na znaménku α , tj. pravděpodobnost odrazu (nebo průchodu) je stejná pro potenciálovou bariéru i jámu. Evidentně platí rovnost $T + R = 1$. Pro ilustraci je závislost pravděpodobností na energii znázorněna na obrázku 2.1.

Cvičení 6. Uvažujte částici v periodickém potenciálu (tzv. Diracův hřeben)

$$V(x) = \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad \alpha > 0,$$

kde a je mřížková konstanta. Nalezněte tvar energetického spektra.

Návod: Hledáme řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\psi''(x) - \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)\psi(x) = E\psi(x). \quad (2.6)$$

Díky periodicitě potenciálu lze vlnovou funkci hledat ve tvaru Blochovy vlny

$$\psi_q(x) = e^{iqx}u_q(x), \quad (2.7)$$

kde $u_q(x)$ je periodická funkce s periodou a . Pro Blochovu vlnu platí

$$\psi_q(x - a) = e^{iq(x-a)}u_q(x - a) = e^{-iqa}e^{iqx}u_q(x) = e^{-iqa}\psi_q(x). \quad (2.8)$$

Díky tomu stačí najít řešení na intervalu $(0, a)$, na interval $(-a, 0)$ ho převést vztahem (2.8), a funkce v nule spojitě navázat se skokem v derivaci daným rovnicí (2.2).

Na intervalu $(0, a)$ je potenciál nulový a rovnice (2.6) se zredukuje na

$$\psi_q''(x) = -k^2\psi_q(x),$$

kde k závisí na energii následujícím způsobem

$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (2.9)$$

Řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice je funkce

$$x \in (0, a) : \psi_q(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (2.10)$$

Funkci posuneme do intervalu $(-a, 0)$ vztahem (2.8)

$$\psi_q(x - a) = e^{-iqa}(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}),$$

tj. po přeznačení $x - a \rightarrow x$ dostaneme

$$x \in (-a, 0) : \psi_q(x) = e^{-iqa} [Ae^{ik(x+a)} + Be^{-ik(x+a)}].$$

Z navazovacích podmínek v nule dostaneme soustavu rovnic

$$A + B = Ae^{i(k-q)a} + Be^{-i(k+q)a}, \quad (2.11)$$

$$ik(A - B) - ike^{-iqa}(Ae^{ika} - Be^{-ika}) = \frac{2M\alpha}{\hbar^2}(A + B), \quad (2.12)$$

kterou lze zapsat v maticovém tvaru

$$U \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0, \quad U = \begin{pmatrix} 1 - e^{i(k-q)a} & 1 - e^{-i(k+q)a} \\ ik(1 - e^{i(k-q)a}) - \frac{2M\alpha}{\hbar^2} & -ik(1 - e^{-i(k+q)a}) - \frac{2M\alpha}{\hbar^2} \end{pmatrix}.$$

Netriviální řešení existuje pokud je matice soustavy singulární, tj.

$$\det U = 0 = 2ie^{-iaq} \left(2k \cos(ak) + \frac{2M\alpha}{\hbar^2} \sin(ak) - 2k \cos(aq) \right).$$

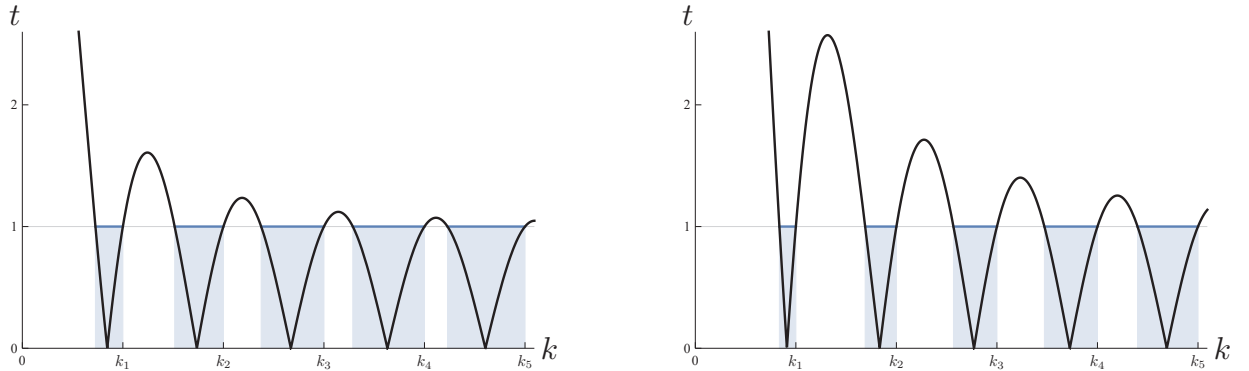
To je ekvivalentní podmínce

$$\cos(aq) = \cos(ak) + \frac{M\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ak), \quad (2.13)$$

která určuje možné energie částice v Diracově hřebenu. Aby tato rovnice měla řešení, musí být pravá strana v absolutní hodnotě menší nebo rovna jedné

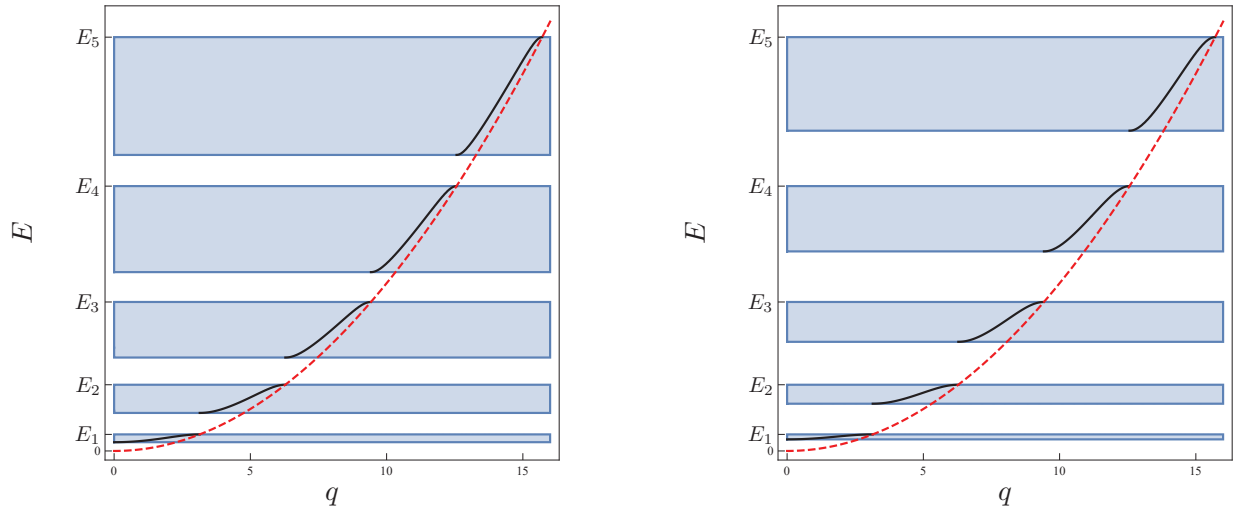
$$t = \left| \cos(ak) + \frac{M\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ak) \right| \leq 1. \quad (2.14)$$

Průběh funkce t v závislosti na k je znázorněn na obrázku 2.2 pro dvě různé hodnoty α (ve všech obrázcích uvažujeme $M = \hbar = a = 1$). Obecně lze vypočítat následující vlastnosti funkce t :



Obrázek 2.2: Průběh funkce (2.14) v závislosti na k pro $\alpha = 5$ (vlevo) a $\alpha = 10$ (vpravo). Modře jsou vyznačeny pásy, kde je podmínka $t \leq 1$ splněna. Horní mez pásu je na fixních bodech $k_n = \frac{n\pi}{a}$.

- Pro $\alpha = 0$, tj. volnou částici, platí vždy $t \leq 1$
- Pro $\alpha > 0$ se střídají zakázané ($t > 1$) a povolené pásy ($t \leq 1$)
- Pro $k = 0$ je $t = \left| 1 + \frac{aM\alpha}{\hbar^2} \right| > 1$, tj. nula leží v zakázaném pásu
- Horní meze pásů se nachází na hodnotách $k_n = \frac{n\pi}{a}$ nezávisle na α
- S rostoucím α se pásy zužují, v limitě $\alpha \rightarrow +\infty$ přejdou v jednotlivé body k_n



Obrázek 2.3: Černá čára vyznačuje energie v závislosti na q pro $\alpha = 5$ (vlevo) a $\alpha = 10$ (vpravo). Modře jsou vyznačeny povolené energetické pásy. Červená čárkovaná čára odpovídá energii volné částice ($\alpha = 0$), kdy $k = q$ a tedy $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2M}$.

Dosazením (2.9) do rovnice (2.13) dostaneme implicitní vztah pro energii (tj. disperzní relace)

$$\cos(aq) = \cos\left(a\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}\right) + \frac{M\alpha}{\hbar^2\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}} \sin\left(a\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}\right). \quad (2.15)$$

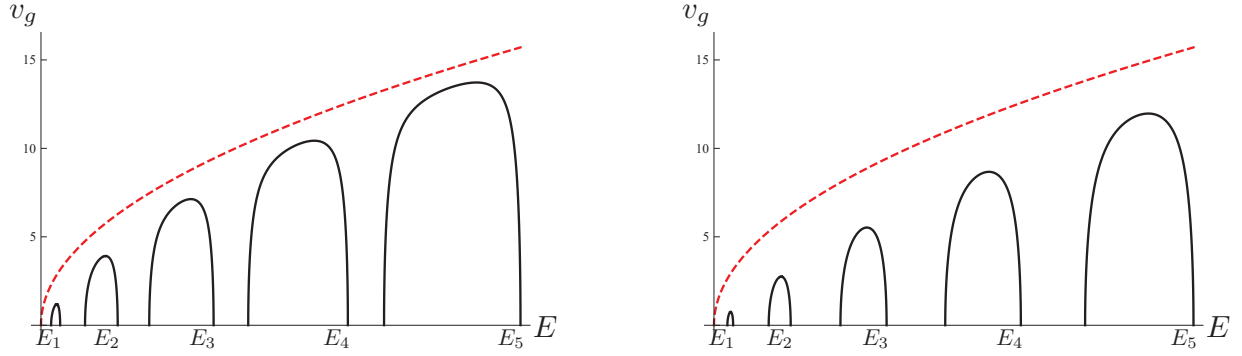
Vidíme, že obdobné závěry jako pro k platí i pro energii:

- Pro $\alpha = 0$ je jsou povolené všechny energie $E \geq 0$
- Pro $\alpha > 0$ se střídají zakázané a povolené energetické pásy
- Horní meze pásů jsou na hodnotách $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2Ma^2}$, které odpovídají energiím částice v nekonečné potenciálové jámě šířky a
- S rostoucím α se pásy zužují, v limitě $\alpha \rightarrow +\infty$ bude energetické spektrum diskrétní a tvořeno vlastními čísly E_n

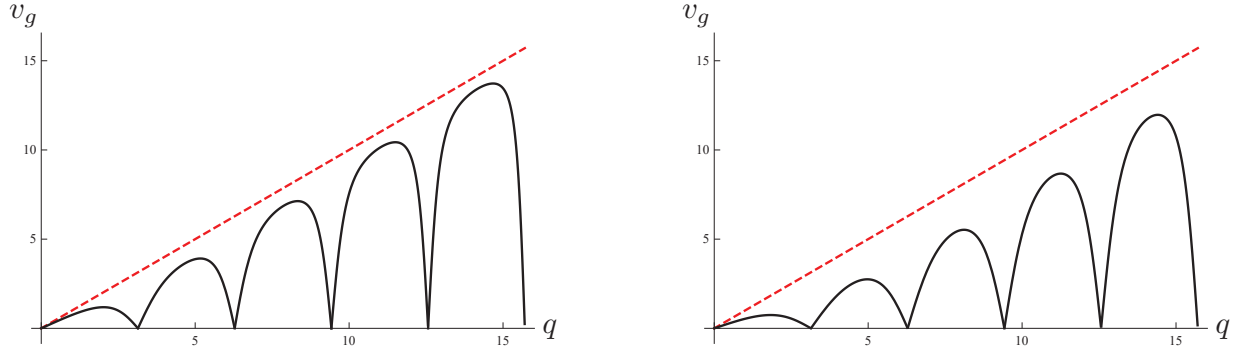
Pro ilustraci je na obrázku 2.3 znázorněna energie v závislosti na q pro dvě různé hodnoty α . Poznamenejme, že pokud pro dané k je q řešením rovnice (2.13), pak je řešením i $q + \frac{2\pi n}{a}$, $n \in \mathbb{Z}$. V obrázku je použita konvence, kdy každé hodnotě $k \in \langle \frac{\pi n}{a}, \frac{\pi(n+1)}{a} \rangle$ přiřadíme q tak, že spadá do stejného intervalu. Tím je pro každé k hodnota q určena jednoznačně, a $E(q)$ je rovněž jednoznačně definovaná funkce.

Z disperzních relací (2.15) můžeme určit grupovou rychlost

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dq},$$



Obrázek 2.4: Grupová rychlost v_g v závislosti na energii E pro $\alpha = 5$ (vlevo) a $\alpha = 10$ (vpravo). Červená čárkovaná čára odpovídá grupové rychlosti volné částice ($\alpha = 0$), kdy $v_g = \sqrt{2E}$.



Obrázek 2.5: Grupová rychlost v_g v závislosti na kvazihybnosti q pro $\alpha = 5$ (vlevo) a $\alpha = 10$ (vpravo). Červená čárkovaná čára odpovídá grupové rychlosti volné částice ($\alpha = 0$), kdy $v_g = \frac{\hbar q}{M}$.

pomocí derivace implicitní funkce. Grupová rychlost v závislosti na energii je znázorněna na obrázku 2.4, resp. v závislosti na q je na obrázku 2.5. Z grafů je vidět, že grupová rychlost pro E , resp. q , blízké krajům pásu klesá k nule.

Na závěr ještě určíme vlnové funkce pro dané k a q . Na intervalu $(0, a)$ má tvar (2.10). Díky Blochově teorému ji můžeme na intervalu $(na, (n+1)a)$ zapsat způsobem

$$x \in (na, (n+1)a) : \psi_q(x) = e^{iqna}(Ae^{ik(x-na)} + Be^{-ik(x-na)}).$$

Zbývá určit koeficienty A , B , které jsou dané soustavou rovnic (2.11), (2.12). Z rovnice (2.11) vyjádříme A pomocí B

$$A = B \frac{\sin\left(\frac{1}{2}a(k+q)\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}a(k-q)\right)} e^{-iak}. \quad (2.16)$$

Budeme uvažovat dodatečnou normalizační podmínku mezi dvěma δ -funkcemi (ψ_q není kvadraticky integrabilní na $\mathbb{R}$, je to zobecněná vlastní funkce příslušející bodu ze spojitého

spektra)

$$\int_0^a |\psi_q(x)|^2 dx = 1. \quad (2.17)$$

Normalizační podmínka vede na rovnici

$$a(|A|^2 + |B|^2) + \frac{\sin(ak)}{k} (\overline{AB}e^{-iak} + A\overline{B}e^{iak}) = 1.$$

Dosadíme za A ze vztahu (2.16), $\frac{\sin(ak)}{k}$ nahradíme pomocí (2.13) a po řadě algebraických úprav dostaneme

$$2a|B|^2 \frac{1 - \cos(ak) \cos(aq) + \frac{4M\alpha}{ah^2} (\cos(aq) - \cos(ak))^2}{1 - \cos(a(k - q))} = 1.$$

Analogicky můžeme získat i vztah pro $|A|^2$

$$2a|A|^2 \frac{1 - \cos(ak) \cos(aq) + \frac{4M\alpha}{ah^2} (\cos(aq) - \cos(ak))^2}{1 - \cos(a(k + q))} = 1.$$

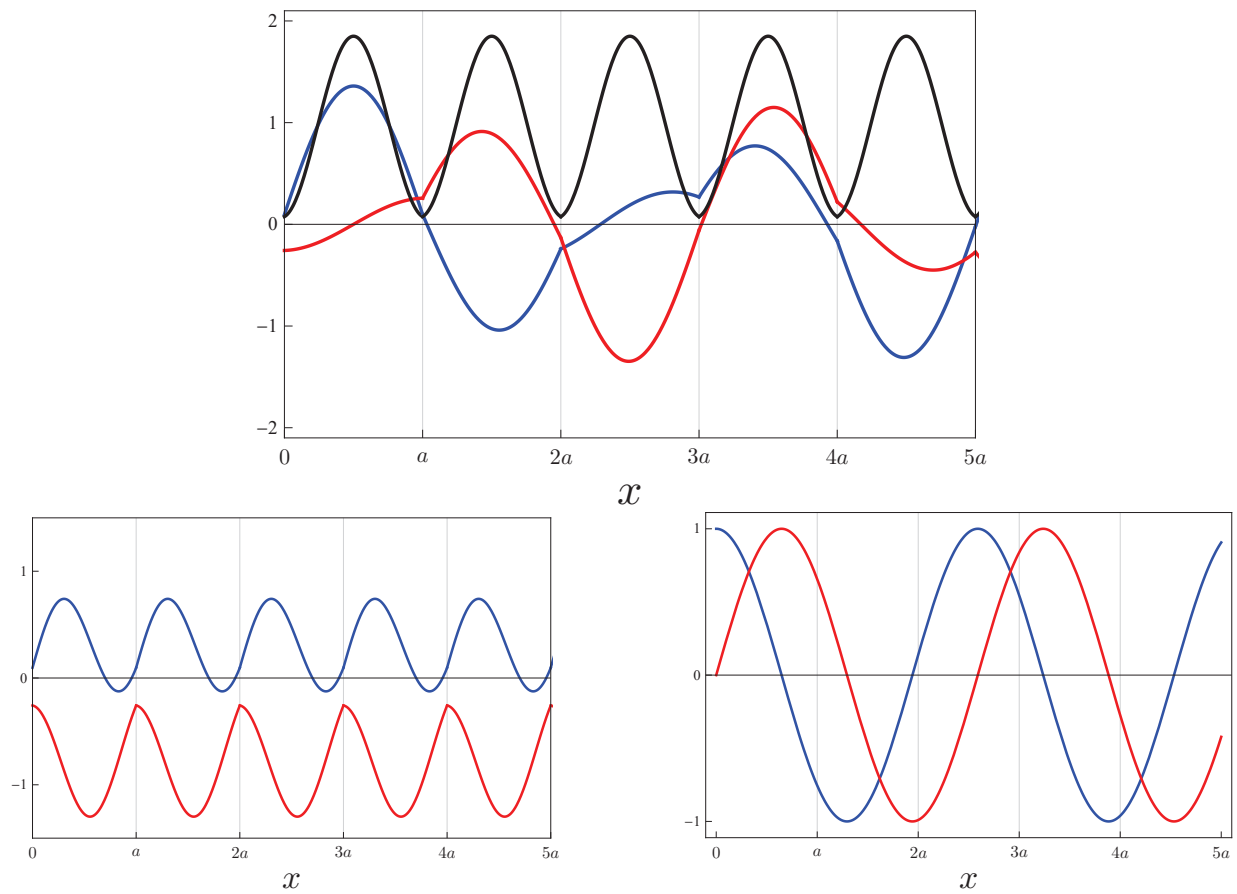
Z těchto dvou rovnic pak můžeme vyjádřit A a B ve tvaru

$$\begin{aligned} B &= C \sqrt{1 - \cos(a(k - q))} e^{-i\frac{ak}{2}}, \\ A &= s C \sqrt{1 - \cos(a(k + q))} e^{i\frac{ak}{2}}, \\ C &= \frac{1}{\sqrt{2a} \sqrt{1 - \cos(ak) \cos(aq) + \frac{4M\alpha}{ah^2} (\cos(aq) - \cos(ak))^2}}, \\ s &= \text{sgn}[\cos(aq) - \cos(ak)]. \end{aligned}$$

Vlnová funkce na intervalu $(na, (n + 1)a)$ normalizovaná na jednu periodu je tedy rovna

$$\psi_q(x) = C e^{iqna} \left(s \sqrt{1 - \cos(a(k + q))} e^{ik(x - (n - \frac{1}{2})a)} + \sqrt{1 - \cos(a(k - q))} e^{-ik(x - (n - \frac{1}{2})a)} \right)$$

Pro ilustraci je na obrázku 2.6 vlnová funkce pro $\alpha = 5$, $k = 3$ (odpovídající $q = 2.426$) a její rozklad na periodickou funkci $u_q(x)$ a rovinnou vlnu e^{iqx} .



Obrázek 2.6: Vlnová funkce pro $\alpha = 5$, $k = 3$ (odpovídající $q = 2.426$) a její rozklad na periodickou funkci $u_q(x)$ a rovinnou vlnu e^{iqx} . Reálná část je vyznačena modře, imaginární část červeně. Nahoře je zobrazena celá vlnová funkce $\psi_q(x)$, černě je vyznačena hustota pravděpodobnosti nalezení částice. Vlnová funkce sice není periodická, ale hustota pravděpodobnosti ano, protože $|\psi_q(x)|^2 = |u_q(x)|^2$. Dole je zobrazena periodická funkce $u_q(x)$ (vlevo) a rovinná vlna e^{iqx} (vpravo).