ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΑ IV

ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΔΥΝΑΜΙΚΑ: ΤΟ ΘΕΩΡΗΜΑ FLOQUET-BLOCH

(Από το *Ηλεκτρονικό Συμπλήρωμα* του βιβλίου Στ. Τραχανάς, *Κβαντομηχανική* Ι, ΠΕΚ 2005)

Μαθηματική μελέτη του θεωρήματος του Bloch και της ταινιωτής δομής του ενεργειακού φάσματος για ένα τυχόν περιοδικό δυναμικό σε μία διάσταση

Όπως είδαμε στο κείμενο (σελ. 664), το θεώρημα του Bloch απορρέει αμέσως από τη βασική ιδιότητα των ιδιοσυναρτήσεων να αλλάζουν απλώς κατά έναν παράγοντα φάσης όταν μετατοπιζόμαστε κατά μία περίοδο a του πλέγματος ή ένα ακέραιο πολλαπλάσιό της. Ότι είναι δηλαδή

$$\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x), \qquad \psi(x+Na) = e^{iNka}\,\psi(x). \tag{1}$$

Αν δούμε το θέμα από καθαρά μαθηματική πλευρά, η ύπαρξη λύσεων που παραμένουν στον εαυτό τους –πολλαπλασιαζόμενες απλώς με έναν αριθμητικό συντελεστή– ύστερα από μια μετατόπιση κατά a (δηλαδή $x \to x+a$) είναι τελείως εύλογη, αφού η εξίσωση την οποία ικανοποιούν

$$\psi'' + \big(\epsilon - U(x)\big)\psi = 0 \tag{2}$$

παραμένει αναλλοίωτη σε αυτή την αλλαγή. (Δείξτε το.) Αυτό που πρέπει να διερευνηθεί λοιπόν από μαθηματικής πλευράς είναι η ύπαρξη λύσεων με τη γενική ιδιότητα

$$\psi(x+a) = \rho\,\psi(x), \tag{3}$$

όπου ρ ένας αριθμητικός συντελεστής για τον οποίο θα πρέπει να ερευνηθεί περαιτέρω αν έχει τη μορφή μιας καθαρής φάσης ($\rho = e^{i\theta} = e^{ika}$) –οπότε οι λύσεις της (3) θα είναι παντού πεπερασμένες (άρα φυσικά παραδεκτές)– ή θα είναι ένας *τυχόν μιγαδικός αριθμός*, οπότε οι λύσεις θα αποκλίνουν στο άπειρο είτε προς τη μία είτε προς την άλλη κατεύθυνση του άξονα x. Όπου οι τελευταίοι ισχυρισμοί απορρέουν αμέσως από τις αυτονόητες επεκτάσεις της (3) για μετατοπίσεις κατά ακέραια πολλαπλάσια του πλέγματος προς τη μία ή την άλλη κατεύθυνση. Δηλαδή τις σχέσεις

$$\psi(x+Na) = \rho^N\psi(x), \qquad \psi(x-Na) = \rho^{-N}\psi(x). \tag{4}$$

Από φυσικής πλευράς περιμένουμε, βεβαίως, ότι πεπερασμένες λύσεις –δηλαδή λύσεις με $|\rho| = 1$– θα υπάρχουν μόνο για ορισμένες *ζώνες τιμών* του ϵ, ενώ στην περιοχή των *χασμάτων* θα είναι $|\rho| \neq 1$ και οι αντίστοιχες λύσεις δεν θα είναι φυσικά παραδεκτές, αφού θα απειρίζονται για $x \to +\infty$ ή $x \to -\infty$.

Για τη μαθηματική διερεύνηση των παραπάνω, χρειαζόμαστε πρώτα μια βάση λύσεων της (2) και ως τέτοιες επιλέγουμε τις $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$, που προσδιορίζονται πλήρως από τις πρότυπες αρχικές συνθήκες

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= 1, \qquad \psi_1'(0) = 0 \qquad \text{(A)} \\ \psi_2(0) &= 0, \qquad \psi_2'(0) = 1 \qquad \text{(B)} \end{aligned} \tag{5}$$

Ύστερα από τα παραπάνω είστε πλέον έτοιμοι να αποδείξετε το παρακάτω θεώρημα (γνωστό ως *θεώρημα του Floquet*)

ΘΕΩΡΗΜΑ ΤΟΥ FLOQUET: *Η εξίσωση* (2) *−με* $U(x+a) = U(x)$*− έχει λύσεις παντού πεπερασμένες μόνο για κείνες τις τιμές του* ϵ *για τις οποίες η συνάρτηση*

$$\Delta(\epsilon) = \psi_1(a,\epsilon) + \psi_2'(a,\epsilon) \tag{6}$$

είναι μικρότερη του δύο κατ' απόλυτη τιμή ($|\Delta| < 2$). *Αν είναι* $|\Delta| > 2$ *η* (2) *δεν διαθέτει πεπερασμένες λύσεις.*

Υποδείξεις: Γράψτε τις ζητούμενες λύσεις −δηλαδή εκείνες που θέλουμε να ικανοποιούν την (3)− υπό την (αυτονόητη) μορφή

$$\psi(x) = c_1\,\psi_1(x) + c_2\,\psi_2(x)$$

και ερευνήστε πότε υπάρχουν κατάλληλα c_1 και c_2 για να μπορεί να συμβαίνει αυτό. Καθ' οδόν θα χρειαστεί να γράψετε και τις «μετατοπισμένες» λύσεις $\psi_1(x+a)$ και $\psi_2(x+a)$ ως γραμμικούς συνδυασμούς των $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ και να υπολογίσετε τους συντελεστές του. Δείξτε ότι θα είναι

$$\begin{aligned} \psi_1(x+a) &= \psi_1(a)\psi_1(x) + \psi_1'(a)\psi_2(x) \\ \psi_2(x+a) &= \psi_2(a)\psi_1(x) + \psi_2'(a)\psi_2(x). \end{aligned} \tag{7}$$

Η βασική συνθήκη για το ρ, στην οποία θα καταλήξετε, έχει τη μορφή

$$\rho^2 - \Delta\rho + 1 = 0,$$

όπου Δ η έκφραση (6).

Λύση

Παίρνοντας ως πρότυπη βάση λύσεων εκείνες που ικανοποιούν τις (5), η γενική λύση της (2) θα γράφεται ως

$$\psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x), \tag{8}$$

και από αυτή τη γενική λύση απαιτούμε τώρα να ικανοποιεί τη συνθήκη (3). Έτσι, παίρνουμε

$$c_1\psi_1(x+a) + c_2\psi_2(x+a) = \rho\big(c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)\big). \tag{9}$$

Όμως αφού οι $\psi_1(x+a)$ και $\psi_2(x+a)$ είναι επίσης λύσεις της (2) −λόγω της συμμετρίας μετατόπισης κατά a− θα γράφονται και αυτές ως γραμμικοί συνδυασμοί των $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$, δηλαδή ως

$$\psi_1(x+a) = c_{11}\psi_1(x) + c_{12}\psi_2(x) \tag{10}$$

$$\psi_2(x+a) = c_{21}\psi_1(x) + c_{22}\psi_2(x). \tag{11}$$

Θέτοντας $x = 0$ στην (10) και στην παράγωγό της, παίρνουμε αμέσως

$$c_{11} = \psi_1(a), \qquad c_{12} = \psi_1'(a)$$

ενώ η ίδια διαδικασία για την (11) δίνει

$$c_{21} = \psi_2(a), \qquad c_{22} = \psi_2'(a),$$

οπότε οι (10) και (11) θα γράφονται ως

$$\psi_1(x + a) = \psi_1(a)\psi_1(x) + \psi_1'(a)\psi_2(x) \tag{12}$$

$$\psi_2(x + a) = \psi_2(a)\psi_1(x) + \psi_2'(a)\psi_2(x). \tag{13}$$

Εισάγοντας τώρα τις (12) και (13) στην (9), θα έχουμε

$$\begin{aligned} c_1\big(\psi_1(a)\psi_1(x) + \psi_1'(a)\psi_2(x)\big) + c_2\big(\psi_2(a)\psi_1(x) + \psi_2'(a)\psi_2(x)\big) \\ = \rho\big(c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)\big), \end{aligned}$$

απ' όπου −εξισώνοντας τους ολικούς συντελεστές των $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ στα δύο μέλη− παίρνουμε

$$\psi_1(a)c_1 + \psi_2(a)c_2 = \rho c_1$$

$$\psi_1'(a)c_1 + \psi_2'(a)c_2 = \rho c_2$$

ή, ισοδύναμα,

$$\begin{pmatrix} \psi_1(a) - \rho & \psi_2(a) \\ \psi_1'(a) & \psi_2'(a) - \rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

που είναι ένα γραμμικό και ομογενές σύστημα το οποίο θα έχει λύση διάφορη του μηδενός μόνον όταν

$$\det \begin{pmatrix} \psi_1(a) - \rho & \psi_2(a) \\ \psi_1'(a) & \psi_2'(a) - \rho \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \; \big(\psi_1(a) - \rho\big)\big(\psi_2'(a) - \rho\big) - \psi_2(a)\psi_1'(a) = 0$$

$$\Rightarrow \; \rho^2 - \big(\psi_1(a) + \psi_2'(a)\big)\rho + W(a) = 0, \tag{14}$$

όπου $W(a)$ η παράσταση

$$W(a) = \psi_1(a)\psi_2'(a) - \psi_2(a)\psi_1'(a), \tag{15}$$

δηλαδή η *Βρονσκιανή* των δύο ανεξάρτητων λύσεων $\psi_1(x)$ και $\psi_2(x)$ υπολογισμένη στο σημείο $x = a$. Όμως για μια εξίσωση της μορφής (2) η Βρονσκιανή

$W(x)$ δύο γραμμικά ανεξάρτητων λύσεών της θα είναι μια σταθερά(*) που η τιμή της θα είναι υποχρεωτικά μονάδα, λόγω των αρχικών συνθηκών (5).

Θέτοντας τώρα $\Delta = \psi_1(a) + \psi_2'(a)$, όπως υποδείχτηκε στην (6), η (14) γράφεται ως

$$\rho^2 - \Delta\rho + 1 = 0, \tag{16}$$

απ' όπου –κατά τα γνωστά από τη θεωρία του τριωνύμου– προκύπτουν αμέσως τα εξής:

i) Αν είναι $\Delta^2 - 4 < 0$, οι ρίζες της (16) θα είναι συζυγείς μιγαδικοί αριθμοί και επειδή θα είναι επίσης $\rho_1\rho_2 = 1$ θα έχουν υποχρεωτικά *μέτρο μονάδα* και επομένως οι λύσεις της (2) θα είναι παντού πεπερασμένες.
ii) Αν είναι $\Delta^2 - 4 \geqq 0$, οι ρίζες της (16) θα είναι *πραγματικές*, οπότε –λόγω και της $\rho_1\rho_2 = 1$– θα οδηγούν σε λύσεις της (2) που θα απειρίζονται προς τη μία ή την άλλη κατεύθυνση του άξονα x.

Δεδομένου τώρα ότι η ποσότητα $\Delta = \psi_1(a) + \psi_2'(a)$ θα είναι μια συνάρτηση, και της ιδιοτιμής ϵ που εμφανίζεται στην (2) –θα είναι δηλαδή $\Delta = \Delta(\epsilon)$– η παραπάνω συνθήκη, $\Delta^2 - 4 < 0$, για την ύπαρξη πεπερασμένων λύσεων θα γράφεται ως

$$\left|\Delta(\epsilon)\right| \leqq 2, \tag{17}$$

οπότε οι φυσικά παραδεκτές τιμές του ϵ θα είναι εκείνες για τις οποίες η γραφική παράσταση της συναρτήσεως $\Delta(\epsilon)$ θα κείται μεταξύ -1 και $+1$, όπως στο Σχήμα 1.

Περαιτέρω διερεύνηση της συνάρτησης $\Delta(\epsilon)$ μπορεί να γίνει μόνο για πολύ μεγάλα (θετικά ή αρνητικά) ϵ. Παραδείγματος χάριν, για $\epsilon = -\gamma^2$ με γ πολύ μεγάλο η (2) καταλήγει στην $\psi'' - \gamma^2\psi = 0$ και οι πρότυπες λύσεις ψ_1 και ψ_2 θα έχουν τότε τη μορφή

$$\psi_1(x) = \cosh\gamma x, \qquad \psi_2(x) = \frac{1}{\gamma}\sinh\gamma x,$$

οπότε για τη συνάρτηση $\Delta = \psi_1(a) + \psi_2'(a)$ θα έχουμε

$$\Delta = 2\cosh\gamma a$$

και θα είναι βεβαίως $\Delta > 2$. Άρα για μεγάλα αρνητικά ϵ θα ισχύει ότι $\Delta > 2$ και η ενεργειακή αυτή περιοχή θα είναι σίγουρα *απαγορευμένη*. Αντίθετα, για πολύ μεγάλα θετικά ϵ –οπότε $\epsilon = k^2$– οι πρότυπες λύσεις της εξίσωσης Schrödinger σε αυτή την περιοχή –δηλαδή της εξίσωσης $\psi'' + k^2\psi = 0$– θα είναι οι

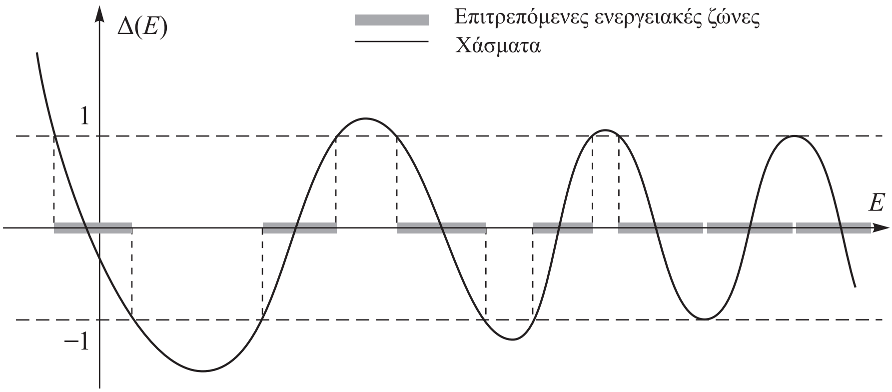
(*) Για μια τυχούσα γραμμική διαφορική εξίσωση της μορφής

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = 0$$

ισχύει ότι

$$W(x) = e^{-\int P(x)\,dx},$$

οπότε για $P(x) = 0$ όπως εδώ (εξ. (2)), θα είναι $W(x) =$σταθερά.



Σχημα 1: Η ταινιωτή δομή του ενεργειακού φάσματος είναι μια αναγκαστική συνέπεια της ανισότητας $\left|\Delta(\epsilon)\right| \leqq 2$, η οποία ορίζει τις επιτρεπόμενες ενέργειες σε ένα μονοδιάστατο περιοδικό δυναμικό $U(x)$.

$$\psi_1(x) = \cos kx, \qquad \psi_2(x) = \frac{1}{k}\sin kx$$

και επομένως

$$\Delta = 2\cos ka,$$

οπότε από κάποια ενέργεια και μετά θα είναι σίγουρα $|\Delta| \leqq 2$ και όλες οι λύσεις θα είναι φυσικά παραδεκτές απο κει και πέρα πλην, ενδεχομένως, εκείνων για τις οποίες είναι $\Delta(\epsilon) = \pm 2$. Στην πραγματικότητα, μια αυστηρότερη μελέτη των λύσεων στην περιοχή των μεγάλων θετικών ϵ δείχνει ότι γύρω από τις ενέργειες εκείνες για τις οποίες είναι $\Delta(\epsilon) = \pm 2$ δημιουργούνται πολύ στενά χάσματα που γίνονται ολοένα και στενότερα καθώς ανεβαίνουμε στο φάσμα. Με εξαίρεση μια πολύ ειδική κατηγορία δυναμικών, το τυχόν περιοδικό δυναμικό $V(x)$ έχει ένα άπειρο πλήθος ενεργειακών ζωνών και χασμάτων.(*)

Βλέπουμε λοιπόν ότι η ταινιωτή δομή του ενεργειακού φάσματος σε ένα μονοδιάστατο περιοδικό δυναμικό δεν συναρτάται με τη μέθοδο LCAO που χρησιμοποιήσαμε στο κείμενο για την προσεγγιστική κατασκευή των ιδιοσυναρτήσεων αλλά είναι μια αναγκαστική μαθηματική συνέπεια της ίδιας της εξίσωσης Schrödinger.

(*) Δείτε σχετικά το κλασικό βιβλίο, W. Magnus - S. Winkler, *Hills Equation*, Dover Publications, 1966.