9 Hustota kvantových hladin

Hustota kvantových hladin $\rho(E)$ na energii E souvisí s objemem fázového prostoru

$$\boxed{\Omega(E) = \int \delta(E - H(\mathbf{x}, \mathbf{p}))\mathrm{d}^n\mathbf{x}\mathrm{d}^n\mathbf{p}} \tag{9.0.1}$$

($H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ je Hamiltonova funkce systému) vztahem

$$\boxed{\rho(E) = \frac{\Omega(E)}{h^n} = \frac{\Omega(E)}{(2\pi\hbar)^n}} \tag{9.0.2}$$

V jednorozměrném případě lze vztah přepsat na tvar, kde již neintegrujeme δ funkci. Využijeme toho, že pro δ funkci platí

$$\begin{gathered}\delta(f(x)) = \sum_{x_j} \frac{1}{|f'(x_j)|}\,\delta(x - x_j) \\ f(x_j) = 0 \quad (x_j \text{ jsou všechny jednoduché kořeny}).\end{gathered} \tag{9.0.3}$$

Rozepíšeme Hamiltonovy funkci pomocí potenciálu, který závisí jen na souřadnici

$$H(x,p) = \frac{1}{2m}p^2 + V(x).$$

Pak

$$\begin{aligned}\Omega(E) &= \int \delta(E - \frac{1}{2m}p^2 - V(x))\mathrm{d}x\mathrm{d}p = \\ &= \left| \begin{matrix} \delta(E - \frac{1}{2m}p^2 - V(x)) = \frac{m}{P(x)}\left[\delta(p - P(x)) + \delta(p + P(x))\right] \\ P(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \end{matrix} \right| = \\ &= 2m \int \frac{1}{\sqrt{2m(E - V(x))}}\mathrm{d}x = \\ &= \sqrt{2m} \int \frac{1}{\sqrt{E - V(x)}}\mathrm{d}x,\end{aligned} \tag{9.0.4}$$

kde se integruje přes veškerá dostupná x (například v případě systému se dvěma body obratu jsou integrační meze $\int_{x_{\min}}^{x_{\max}}$ řešením rovnice $V(x_{\min,\max}) = E$).

9.1 Hustota hladin jednorozměrného harmonického oscilátoru

Spočítejte hustotu hladin jednorozměrného harmonického oscilátoru.

Řešení:

Klasická Hamiltonova funkce harmonického oscilátoru je

$$H(x,p) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2.$$

Hustota kvantových hladin podle (9.0.1) je

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= \int \delta(E - \frac{1}{2m}p^2 - \frac{1}{2}kx^2)\mathrm{d}x\mathrm{d}p = \\
&= \begin{vmatrix} \pi = \sqrt{\frac{1}{2m}}\,p & \mathrm{d}p = \sqrt{2m}\mathrm{d}\pi \\ \xi = \sqrt{\frac{k}{2}}\,x & \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2}{k}}\mathrm{d}\xi \end{vmatrix} = \\
&= \sqrt{\frac{4m}{k}} \int \delta(E - \pi^2 - \xi^2)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\pi \\
&= \begin{vmatrix} \text{Polární souřadnice} \\ r^2 = \pi^2 + \xi^2 \\ \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\pi = r\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi \end{vmatrix} = \\
&= \frac{2}{\omega} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\infty} \delta(E - r^2)\, r\mathrm{d}r = \\
&= \left| \delta(E - r^2) = \tfrac{1}{2\sqrt{E}} \Big(\delta(r - \sqrt{E}) + \delta(r + \sqrt{E}) \Big) \right| = \\
&= \frac{2\pi}{\omega\sqrt{E}} \int_0^{\infty} \Big(\delta(r - \sqrt{E}) + \delta(r + \sqrt{E}) \Big)\ r\mathrm{d}r = \\
&= \frac{2\pi}{\omega}. \qquad (9.1.1)
\end{aligned}$$

Využili jsme vlastností δ funkce (9.0.3) a zavedli $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

Hustota kvantových hladin tedy je konstantní, nezávisí na energii:

$$\rho(E) = \frac{2\pi}{h\omega} = \frac{1}{\hbar\omega}$$

To je v souladu se skutečností a s dříve získaným výsledkem, že jednorozměrný harmonický oscilátor má ekvidistantní spektrum.

Jiný způsob řešení:

Využijeme relace (9.0.4). Body obratu jsou

$$x_{\min} = -\sqrt{\frac{2E}{k}} \qquad x_{\max} = \sqrt{\frac{2E}{k}},$$

takže

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= \sqrt{2m} \int_{-\sqrt{\frac{2E}{k}}}^{\sqrt{\frac{2E}{k}}} \frac{1}{\sqrt{E - \frac{1}{2}kx^2}} \mathrm{d}x = \\
&= \left| a = \sqrt{\tfrac{k}{2E}}\, x \quad \mathrm{d}a = \sqrt{\tfrac{k}{2E}}\mathrm{d}x \right| \\
&= \sqrt{\frac{4m}{k}} \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1 - a^2}} \mathrm{d}a = \\
&= \frac{2}{\omega} \left[\arcsin a\right]_{-1}^{1} = \\
&= \frac{2\pi}{\omega}.
\end{aligned}$$

To je ve shodě s řešením (9.1.1).

Jiný způsob řešení:

Využijeme vlastnosti

$$\delta(E - H(\mathbf{x}, \mathbf{p})) = \frac{\partial}{\partial E}\theta(E - H(\mathbf{x}, \mathbf{p}))$$

která po dosazení do vztahu (9.0.1) dá

$$\begin{aligned}\Omega(E) &= \frac{\partial}{\partial E}\int \theta(E - H(\mathbf{x}, \mathbf{p}))\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{p} = \\ &= \frac{\partial}{\partial E}\int_{H(\mathbf{x},\mathbf{p})<E} (E - H(\mathbf{x}, \mathbf{p}))\,\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{p}\end{aligned}$$

V našem případě $1D$ harmonického oscilátoru dává integrál povrch elipsy $S = \pi ab$ s poloosami

$$a = \sqrt{\frac{2E}{k}} \qquad b = \sqrt{2mE},$$

takže po dosazení

$$\Omega(E) = \frac{\partial}{\partial E}\left(\pi\sqrt{\frac{4m}{k}}\,E\right) = \frac{2\pi}{\omega},$$

což je opět ve shodě s (9.1.1).

Jiný způsob řešení:

Vyjdeme z Fourierovy transformace δ-funkce:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa x}\,\mathrm{d}\kappa$$

Po dosazení do vztahu (9.0.1) a pro náš jednorozměrný harmonický oscilátor dostáváme

$$\begin{aligned}\Omega(E) &= \frac{1}{2\pi}\iiint \mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa\left(E - \frac{1}{2m}p^2 - \frac{1}{2}kx^2\right)}\,\mathrm{d}\kappa\mathrm{d}x\mathrm{d}p = \\ &= \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa\frac{p^2}{2m}}\,\mathrm{d}p \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa\frac{kx^2}{2m}}\,\mathrm{d}x \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa E}\,\mathrm{d}k = \\ &= \frac{1}{2\pi}\int \left(\sqrt{\frac{2\pi m}{\mathrm{i}\kappa}}\right)\left(\sqrt{\frac{2\pi}{\mathrm{i}\kappa k}}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa E}\,\mathrm{d}\kappa = \\ &= \frac{1}{\omega}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa E}}{\mathrm{i}\kappa}\mathrm{d}\kappa = \\ &= \frac{2\pi}{\omega}.\end{aligned}$$

9.2 Obrácený oscilátor v jámě

Uvažujte jednorozměrný potenciál daný předpisem

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{2}kx^2 & -a \le x \le a \\ \infty & |x| > a \end{cases} \tag{9.2.1}$$

(obrácený harmonický oscilátor v nekonečně hluboké pravoúhlé jámě, viz obrázek 9.2(a)). Spočítejte hustotu kvantových hladin.

Řešení:

K řešení vyjdeme ze vztahu (9.0.4).

1. $E < 0$

   V tomto případě dostáváme (potenciál je sudý, počítáme jen v oblasti $x > 0$ a výsledek zdvojnásobíme):

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= 2\sqrt{2m}\int_{\sqrt{\frac{2|E|}{k}}}^{a} \frac{1}{\sqrt{-|E| + \frac{1}{2}kx^2}}\mathrm{d}x = \\
&= 2\sqrt{\frac{2m}{|E|}}\int_{\sqrt{\frac{2|E|}{k}}}^{a} \frac{1}{\sqrt{\frac{k}{2|E|}x^2 - 1}}\mathrm{d}x = \\
&= \left| b = \sqrt{\tfrac{k}{2|E|}}\,x \quad \mathrm{d}x = \sqrt{\tfrac{2|E|}{k}}\mathrm{d}b \right| = \\
&= \frac{4}{\omega}\int_{1}^{\sqrt{\frac{k}{2|E|}}\,a} \frac{1}{\sqrt{b^2 - 1}}\mathrm{d}b = \\
&= \left| b = \cosh z \quad \mathrm{d}b = \sinh z\mathrm{d}z \right| = \\
&= \frac{4}{\omega}\int_{0}^{\operatorname{arccosh}\left(\sqrt{\frac{k}{2|E|}}\,a\right)} \frac{\sinh z}{\sqrt{\cosh^2 z - 1}}\mathrm{d}z = \\
&= \frac{4}{\omega}\operatorname{arccosh}\left(\sqrt{\frac{k}{2\,|E|}}\,a\right),
\end{aligned}$$

   kde $-\frac{1}{2}ka^2 \leq E \leq 0$.

   Hustota hladin je tedy

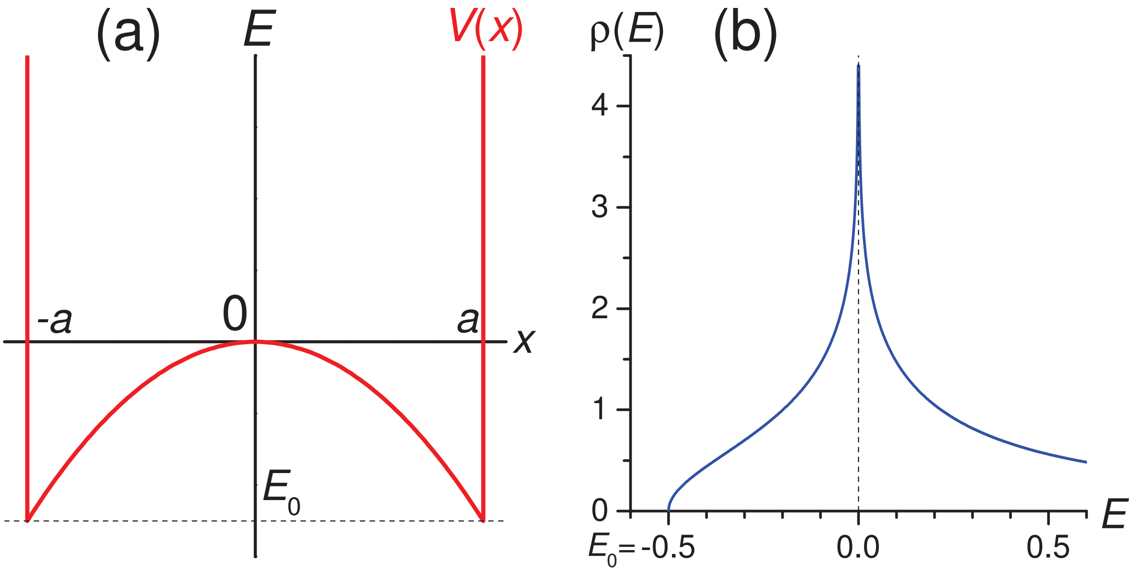
$$\rho(E) = \frac{2}{\pi\hbar\omega}\operatorname{arccosh}\left(\sqrt{\frac{k}{2\,|E|}}\,a\right).$$

2. $E > 0$

   Podobným postupem jako v případě záporné energie dostaneme

$$\rho(E) = \frac{2}{\pi\hbar\omega}\operatorname{arcsinh}\left(\sqrt{\frac{k}{2\,|E|}}\,a\right).$$

Výsledná hustota hladin je znázorněna na obrázku 9.2(b). Je vidět, že pro $E = 0$ hustota diverguje. To souvisí s tím, že v klasickém případě je bod obratu při této energii v bodě $x = 0$ patologický, $V''(x = 0) = 0$, a patologická je i jediná možná trajektorie při této energii. Částice na této trajektorii dostihne bod $x = 0$ až v nekonečném čase.



Obrázek 8: (a) Schéma potenciálu (9.2.1). (b) Hustota kvantových hladin při volbě $a = \hbar = m = k = 1$.