

7 Potenciály s δ funkcemi I

7.1 Jednoduchá δ jáma nebo bariéra

Mějme potenciál ve tvaru jednoduché δ funkce $V(x) = c\delta(x)$, kde c je konstanta, jejíž velikost udává „sílu“ potenciálu. Pokud je $c < 0$, jedná se o jámu, v opačném případě o bariéru.

1. Napište Schrödingerovu rovnici pro částici o hmotnosti M pohybující se v tomto potenciálu a nalezněte podmínky, které musí splňovat vlnová funkce v bodě, ve kterém se nachází δ funkce.
2. Pro případ jámy $c < 0$ nalezněte všechny vázané stavy (tj. stavy se zápornou energií, existují-li) a příslušné normalizované vlastní funkce.
3. Nalezněte řešení s $E > 0$ (v této oblasti je spektrum spojité). Vypočítejte pravděpodobnost průchodu T a pravděpodobnost odrazu R na potenciálu a nakreslete graf $T = T(E)$, $R = R(E)$.
4. Vypočítejte fázové posunutí δ vlnové funkce a zakreslete funkci $\delta = \delta(E)$.

Řešení:

1. Schrödingerova rovnice pro vlnovou funkci $\psi(x)$ zní

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + c\delta(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (7.1.1)$$

Rovnici zintegrujeme v malém okolí $x = 0$, kde sedí δ funkce, čímž dostaneme

$$-\frac{\hbar^2}{2M} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] + c\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx, \quad (7.1.2)$$

kde $\psi'(x) \equiv d\psi(x)/dx$. Limita $\epsilon \rightarrow 0+$ dá²⁸

$$\boxed{\psi'(0+) - \psi'(0-) = K\psi(0)}, \quad (7.1.5)$$

kde jsme označili $\psi'(0\pm)$ limitu zleva ($-$), resp. zprava ($+$) v bodě $x = 0$ a

$$K = \frac{2Mc}{\hbar^2}. \quad (7.1.6)$$

Vlnová funkce v bodě δ funkce potenciálu musí být spojitá a její derivace má skok daný vzorcem (7.1.5).

²⁸ Rovnice (7.1.5) lze formálně přepsat pomocí logaritmické derivace

$$L(x) \equiv \frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = \frac{d}{dx} \ln \psi(x) \quad (7.1.3)$$

na tvar

$$L(0+) - L(0-) = K. \quad (7.1.4)$$

2. Vázaný stav hledáme pro energie $E < 0$. Pro $x \neq 0$ má Schrödingerova rovnice (7.1.1) tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \quad (7.1.7)$$

která má obecné řešení

$$\psi(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}, \quad (7.1.8)$$

kde A, B jsou konstanty a

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}} \quad (7.1.9)$$

Rozdělme řešení na dvě části: I ($x < 0$) a II ($x > 0$), viz obrázek 3

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}, & x < 0, \\ \psi_{\text{II}}(x) &= C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}, & x > 0. \end{aligned} \quad (7.1.10)$$

Aby byla vlnová funkce normovatelná, musí být $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$, takže

$$B = C = 0. \quad (7.1.11)$$

Sešívací podmínky [spojitost, skok v derivaci (7.1.5)] v bodě $x = 0$ dávají

$$\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0), \quad (7.1.12)$$

$$\psi'_{\text{II}}(0) - \psi'_{\text{I}}(0) = K\psi_{\text{I}}(0), \quad (7.1.13)$$

takže

$$A = D, \quad (7.1.14)$$

$$\kappa = -\frac{K}{2}. \quad (7.1.15)$$

Po dosazení (7.1.6) a (7.1.9) dostaneme

$$\boxed{E = -\frac{Mc^2}{2\hbar^2}}, \quad (7.1.16)$$

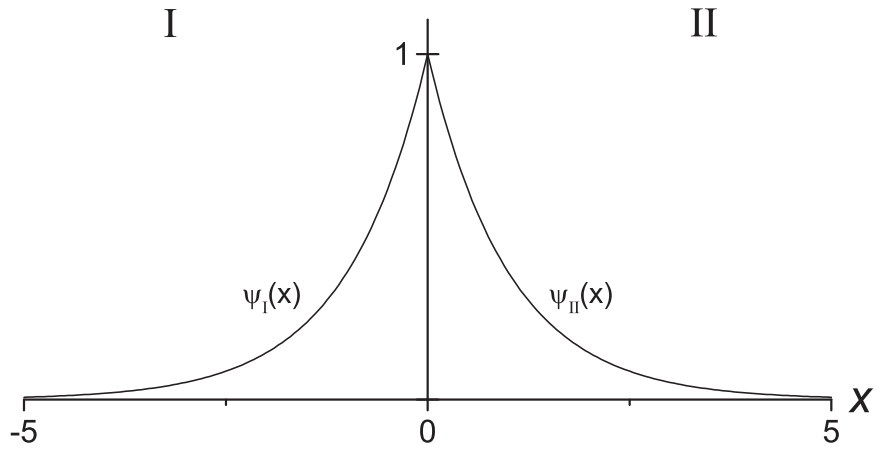
což je energie *jediného* vázaného stavu systému.

Zbývá nalézt normalizovanou vlnovou funkci:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^0 |\psi_{\text{I}}(x)|^2 dx + \int_0^{\infty} |\psi_{\text{II}}(x)|^2 dx \\ &= A^2 \left\{ \int_{-\infty}^0 e^{2\kappa x} dx + \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx \right\} \\ &= A^2 \left\{ \left[\frac{1}{2\kappa} e^{2\kappa x} \right]_{-\infty}^0 + \left[-\frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \right]_0^{\infty} \right\} = \frac{A^2}{\kappa}, \end{aligned} \quad (7.1.17)$$

takže

$$A = D = \sqrt{\kappa} = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} \quad (7.1.18)$$



Obrázek 3: Normalizovaná vlnová funkce vázaného stavu pro $M = \hbar = 1$, $c = -1$.

[za κ jsme dosadili z (7.1.15) a (7.1.6)] a normalizovaná vlnová funkce vázaného stavu (7.1.16) je tedy

$$\psi_{\text{I}}(x) = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} e^{\sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}}x}, \quad (7.1.19)$$

$$\psi_{\text{II}}(x) = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} e^{-\sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}}x}. \quad (7.1.20)$$

Znázorněna je na obrázku 3.

3. V kladných energiích má systém spojité spektrum. Analogicky s (7.1.10) lze obecnou vlnovou funkci psát ve tvaru

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \\ \psi_{\text{II}}(x) &= C e^{ikx} + D e^{-ikx}, \end{aligned} \quad (7.1.21)$$

kde

$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.1.22)$$

Nás zajímá pravděpodobnost průchodu a odrazu. Budeme tedy předpokládat, že k δ funkci přichází vlna zleva (člen úměrný A) a rozdělí se na odraženou vlnu (člen úměrný B) a prošlou vlnu (člen úměrný D). Zprava žádná vlna nepřichází, takže $D = 0$. Pravděpodobnost průchodu a odrazu pak bude

$$T = \left| \frac{B}{A} \right|^2, \quad R = \left| \frac{C}{A} \right|^2. \quad (7.1.23)$$

Vlnovou funkci (7.1.21) sešíváme v bodě $x = 0$, což dává podmínky

$$A + B = C, \quad (7.1.24)$$

$$ik(C + B - A) = KC. \quad (7.1.25)$$

Vyjádríme-li z první z nich B a dosadíme-li do druhé, dostaneme

$$C = \frac{A}{1 - \frac{K}{2ik}}. \quad (7.1.26)$$

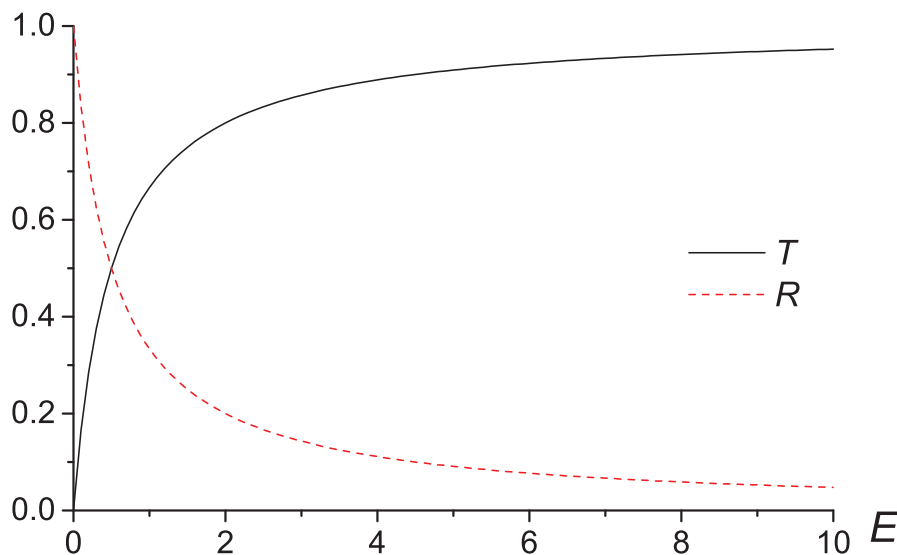
Pravděpodobnost průchodu je tedy

$$T = \frac{1}{1 - \frac{K}{2ik}} \frac{1}{1 + \frac{K}{2ik}} = \frac{1}{1 + \left(\frac{K}{2k}\right)^2} = \frac{1}{1 + \frac{Mc^2}{2\hbar^2 E}} \quad (7.1.27)$$

a analogicky pravděpodobnost odrazu

$$R = \frac{1}{1 + \left(\frac{2K}{k}\right)^2} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{Mc^2}}. \quad (7.1.28)$$

Platí, že $T + R = 1$. Všimněte si, že R ani T nezávisí na znaménku c , tj. pravděpodobnost průchodu a odrazu je stejná při dané energii pro δ jámu i pro δ bariéru.



Obrázek 4: Pravděpodobnost průchodu (černá čára) a odrazu (červená přerušovaná čára) pro jednu δ funkci ($M = \hbar = c = 1$).

Pravděpodobnosti jsou zakresleny na obrázku 4.

4. Fázové posunutí²⁹ δ , důležité např. v teorii rozptylu, značí fázi, o kterou se posune rovinná vlna kvůli přítomnosti potenciálu oproti případu bez potenciálu. Situace je schematicky znázorněna na obrázku 5. Pro jeho určení je výhodné uvažovat řešení Schrödingerovy rovnice (7.1.1) ve spojitě části spektra $E > 0$ ve tvaru

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= \alpha \cos\left(kx - \frac{\delta}{2}\right), \\ \psi_{\text{II}}(x) &= \alpha \cos\left(kx + \frac{\delta}{2}\right). \end{aligned} \quad (7.1.29)$$

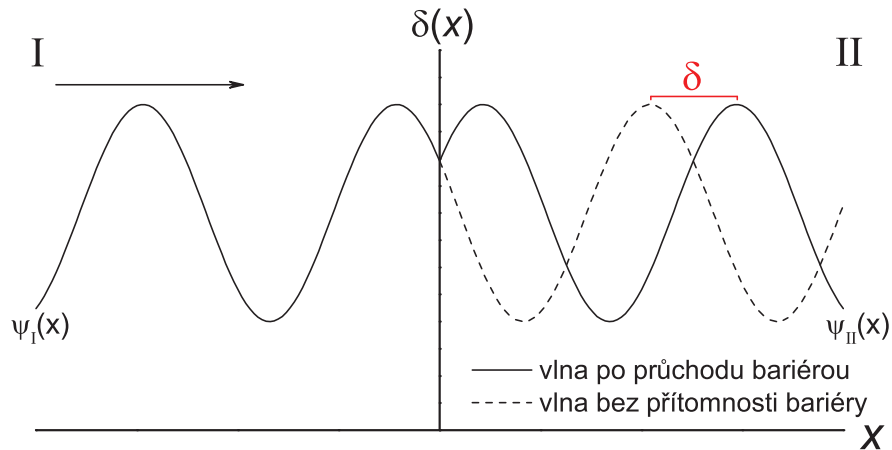
kde α je normalizační konstanta. Sešívací podmínka spojitosti je při dané volbě

²⁹ Držím se zavedené notace, proto pro fázové posunutí i pro δ funkci používám stejné označení.

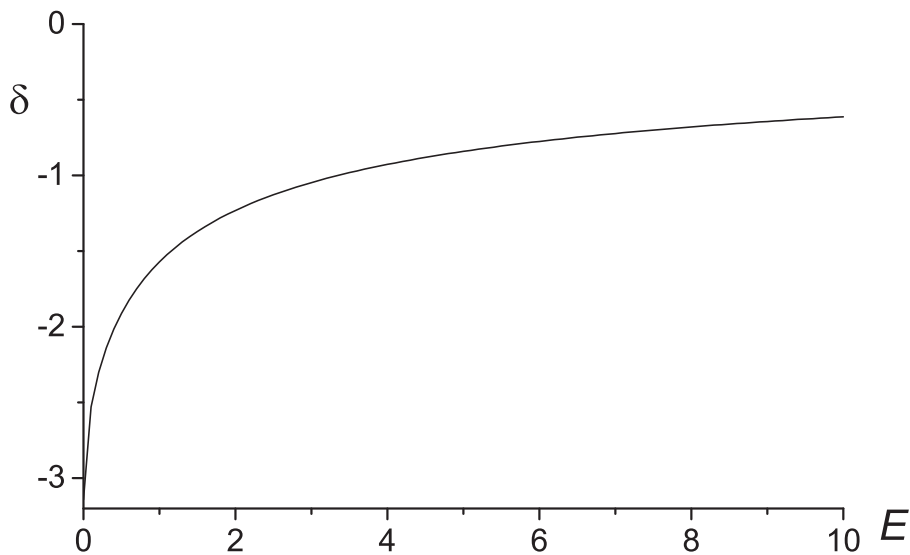
vlnové funkce splněna automaticky, podmínka (7.1.5) dá postupně

$$\begin{aligned}
 -4\alpha k \sin \frac{\delta}{2} &= 2\alpha K \cos \frac{\delta}{2} \\
 \tan \frac{\delta}{2} &= -\frac{K}{2k} \\
 \delta &= -2 \arctan \frac{K}{2k} = -2 \arctan c \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}}. \quad (7.1.30)
 \end{aligned}$$

Fázové posunutí je zakresleno na obrázku 6.



Obrázek 5: Vlnová funkce pro výpočet fázového posunutí δ (červeně). Vlnová funkce za nepřítomnosti potenciálu $V(x) = c\delta(x)$ je znázorněna přerušovanou čarou.



Obrázek 6: Fázové posunutí pro jednu δ funkci ($M = \hbar = c = 1$).

Poznámka:

Potenciál ve tvaru δ funkce má simulovat velmi úzkou a hlubokou potenciálovou jámu, resp. bariéru. Jedná se vlastně o limitní případ konečné jámy (bariéry) šířky a a hloubky (výšky) V , kde $a \rightarrow 0$ a zároveň $2Va \equiv c = \text{const}$.

7.2 Maticový formalismus

Částice hmotnosti M se pohybuje v jednorozměrném potenciálu složeném z n různě silných δ funkcí,

$$V(x) = \sum_{j=1}^n c_j \delta(x - x_j), \quad (7.2.1)$$

kde c_j jsou jejich „síly“ a $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jejich polohy.

1. Obecnou vlnovou funkci pro částici v bodě x zapište ve formě dvousložkového vektoru.
2. Nalezněte transformaci posunutí vlnové funkce o vzdálenost a a zapište tuto transformaci ve formě matice.
3. Nalezněte transformaci vlnové funkce při průchodu δ funkcí v bodě x_j .
4. Nalezněte transformaci $m\Xi$, která vztahuje mezi sebou vlnovou funkci před první jámou a po poslední jámě.
5. Pro případ dvou stejně silných jam vzdálených od sebe a najděte podmínku na to, aby vlnová funkce pro vázané stavy $E < 0$ byla normalizovatelná.

Řešení:

1. Až na jednotlivé body x_j se jedná o vlnovou funkci volné částice

$$\psi(x) = \underbrace{A_+ e^{ikx}}_{\psi_+(x)} + \underbrace{A_- e^{-ikx}}_{\psi_-(x)}, \quad (7.2.2)$$

kde $k = \sqrt{2ME/\hbar^2}$ (pro vázané stavy $E < 0$ je k ryze imaginární). Vlnovou funkci zapišeme do kompaktního tvaru

$$\Psi(x) \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix}. \quad (7.2.3)$$

2. Posunutá vlnová funkce je

$$\psi(x+a) = A_+ e^{ikx+ika} + A_- e^{-ikx-ika} = e^{+ika} \psi_+(x) + e^{-ika} \psi_-(x), \quad (7.2.4)$$

takže

$$\Psi(x+a) = \begin{pmatrix} e^{+ika} \psi_+(x) \\ e^{-ika} \psi_-(x) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{+ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix}}_{\mathbf{T}(a)} \Psi(x). \quad (7.2.5)$$

3. Sešívací podmínka (7.1.5) pro vlnovou funkci (7.2.2) je lineární ve vlnové funkci, a proto ji lze rovněž vyjádřit maticovou transformací vektoru $\Psi(x)$. Označme vlnovou funkci nalevo od j -té δ funkce $\Psi^{(L)}(x_j)$, vlnovou funkci napravo od δ funkce $\Psi^{(R)}(x_j)$. Pak podmínka na spojitost a na skok v derivaci dá v bodě x_j dá

$$\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} = \psi_+^{(R)} + \psi_-^{(R)} \quad (7.2.6)$$

$$ik \left(\psi_+^{(R)} - \psi_-^{(R)} - \psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} \right) = 2K_j \left(\psi_+^{(L,R)} + \psi_-^{(L,R)} \right). \quad (7.2.7)$$

Vyjádríme-li z první rovnice $\psi_+^{(R)} = \psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} - \psi_-^{(R)}$ a dosadíme do druhé, dostaneme

$$\psi_+^{(R)} = \frac{K_j}{2ik} (\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)}) + \psi_+^{(L)} = \left(1 + \frac{K_j}{2ik}\right) \psi_+^{(L)} + \frac{K_j}{2ik} \psi_-^{(L)}, \quad (7.2.8)$$

$$\psi_+^{(L)} = -\frac{K_j}{2ik} (\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)}) + \psi_-^{(L)} = \frac{K_j}{2ik} \psi_+^{(L)} + \left(1 - \frac{K_j}{2ik}\right) \psi_-^{(L)}, \quad (7.2.9)$$

takže lze psát

$$\Psi^{(R)}(x_j) = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 + \frac{K_j}{2ik} & \frac{K_j}{2ik} \\ -\frac{K_j}{2ik} & 1 - \frac{K_j}{2ik} \end{pmatrix}}_{R(K_j)} \Psi^{(L)}(x_j). \quad (7.2.10)$$

4. Transformace $m\Xi$ je složením transformací posunutí mezi δ funkcemi T a transformací přechodu přes δ funkce R :

$$\Xi = R(K_n)T(x_n - x_{n-1})R(K_{n-1}) \cdots R(K_2)T(x_2 - x_1)R(K_1). \quad (7.2.11)$$

5. Transformace (7.2.11) má pro dvě δ funkce tvar

$$\begin{aligned} \Xi &= R(K)T(a)R(K) \\ &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{K}{2\pi k} & \frac{K}{2ik} \\ -\frac{K}{2ik} & 1 - \frac{K}{2ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{K}{2\pi k} & \frac{K}{2ik} \\ -\frac{K}{2ik} & 1 - \frac{K}{2ik} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{K}{2ik}\right)^2 e^{ika} - \left(\frac{K}{2ik}\right)^2 e^{-ika} & \frac{K}{2ik} \left[\left(1 + \frac{K}{2ik}\right) e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right) e^{-ika}\right] \\ -\frac{K}{2ik} \left[\left(1 + \frac{K}{2ik}\right) e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right) e^{-ika}\right] & -\left(\frac{K}{2ik}\right)^2 e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right)^2 e^{-ika} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.2.12)$$

Stav bude normalizovatelný, pokud $\psi_+^{(L)} = \psi_-^{(R)}$ (tentokrát máme na mysli vlnové funkce před první a za druhou potenciálovou δ funkcí). Jelikož $\Psi^{(R)} = \Xi\Psi^{(L)}$, platí

$$\psi_-^{(R)} = \Xi_{21}\psi_+^{(L)} + \Xi_{22}\psi_-^{(L)}, \quad (7.2.13)$$

a pokud vynulujeme $\psi_-^{(L)}$, dostáváme podmínku na vynulování $\psi_+^{(R)}$ ve tvaru $\Xi_{22} = 0$, neboli (po zavedení $k = i\kappa$)

$$-\left(\frac{K}{2\kappa}\right)^2 e^{-\kappa a} + \left(1 + \frac{K}{2\kappa}\right)^2 e^{\kappa a} = 0, \quad (7.2.14)$$

$$K^2 e^{-2\kappa a} = (K + 2\kappa)^2. \quad (7.2.15)$$

Řešením této rovnice bychom dostali vázané stavy.

8 Potenciály s δ funkcemi II

8.1 Periodická δ funkce (Diracův hřeben)

Částice o hmotnosti M se pohybuje v jednorozměrné mřížce popsané periodickým potenciálem

$$V(x) = c \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad (8.1.1)$$

kde a je vzdálenost mezi sousedními δ funkcemi (mřížková konstanta).

Hledejte vlnovou funkci ve tvaru Blochovy vlny

$$\psi_q(x) = e^{iqx} u_q(x), \quad (8.1.2)$$

kde funkce $u_q(x)$ je periodická s periodou a :

$$u_q(x) = u_q(x + a). \quad (8.1.3)$$

1. Aplikujte sešívací podmínky pro navazování vlnové funkce na δ funkci a nalezněte energetické spektrum pro $c > 0$, $E > 0$. Diskutujte jeho vlastnosti a závislost na parametru c .
2. Nalezněte a zakreslete disperzní relaci $E = E(q)$ a grupovou rychlost

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial q}. \quad (8.1.4)$$

Poznámka: Diracův hřeben je triviální jednorozměrný model, na kterém lze studovat základní vlastnosti pohybu elektronů v pevné látce (pásová struktura, disperzní relace). Obecnější jednorozměrný potenciál, který místo opakujících se δ funkcí uvažuje pravouhlé bariéry o konečné šířce b , vzdálené od sebe o mřížkovou konstantu $a > b$, se nazývá *Kronigův-Penneyův potenciál* [8].

Řešení:

1. Vlnovou funkci na intervalu $x \in [0; a]$ hledáme ve tvaru

$$\psi_q^{[0;a]}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k \equiv \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (8.1.5)$$

Posuneme ji nyní na interval $x \in (-a, 0)$ pomocí vyjádření Blochovy vlny³⁰ (8.1.2)

$$\psi_q^{(-a;0)}(x - a) = e^{-iqa} [A e^{ikx} + B e^{-ikx}], \quad (8.1.7)$$

tj. (po přeznačení $x \mapsto x + a$)

$$\psi_q^{[-a;0]}(x) = e^{-iqa} [A e^{ik(x+a)} + B e^{-ik(x+a)}], \quad (8.1.8)$$

³⁰ Lze nahlédnout například z vlastností operátoru posunutí $\hat{T}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}}$ zavedeného vztahem (1.5.1):

$$\hat{T}(a)\psi_q(x) = \psi_q(x - a) = e^{iq(x-a)} u_q(x - a) = e^{iq(x-a)} u_q(x) = e^{-iqa} \psi_q(x), \quad (8.1.6)$$

takže vlastní hodnoty operátoru posunutí $\hat{T}(a)$ jsou e^{-iqa} .

a aplikujeme sešivací podmínky [spojitost, skok v derivaci (7.1.5)] v bodě $x = 0$:

$$A + B = e^{-iqa} [A e^{ika} + B e^{-ika}] , \quad (8.1.9)$$

$$ik(A - B) - ik e^{-iqa} (A e^{ika} + B e^{-ika}) = K(A + B) , \quad (8.1.10)$$

kde $K = 2Mc/\hbar^2$, viz výraz (7.1.6). Dostáváme tedy homogenní soustavu dvou rovnic pro dvě neznámé A, B

$$\mathbf{M} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0, \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 - e^{-iqa} e^{ika} & 1 - e^{-iqa} e^{-ika} \\ 1 - e^{-iqa} e^{ika} - \frac{K}{ik} & -1 + e^{-iqa} e^{-ika} - \frac{K}{ik} \end{pmatrix} , \quad (8.1.11)$$

která má řešení, pokud

$$\begin{aligned} 0 = \det \mathbf{M} &= (1 - e^{-iqa} e^{ika}) \left(-1 + e^{-iqa} e^{-ika} - \frac{K}{ik} \right) \\ &\quad + (1 - e^{-iqa} e^{-ika}) \left(-1 + e^{-iqa} e^{ika} + \frac{K}{ik} \right) \\ &= -1 + e^{-iqa} e^{ika} + e^{-iqa} e^{-ika} - e^{-2iqa} - \frac{K}{ik} + \frac{K}{ik} e^{-iqa} e^{-ika} \\ &\quad - 1 + e^{-iqa} e^{-ika} + e^{-iqa} e^{ika} - e^{-2iqa} + \frac{K}{ik} - \frac{K}{ik} e^{-iqa} e^{ika} \\ &= -2 + 2 e^{-iqa} \underbrace{(e^{ika} + e^{-ika})}_{2 \cos ka} - 2 e^{-2iqa} + \frac{K}{ik} e^{-iqa} \underbrace{(e^{ika} - e^{-ika})}_{2i \sin ka} \end{aligned}$$

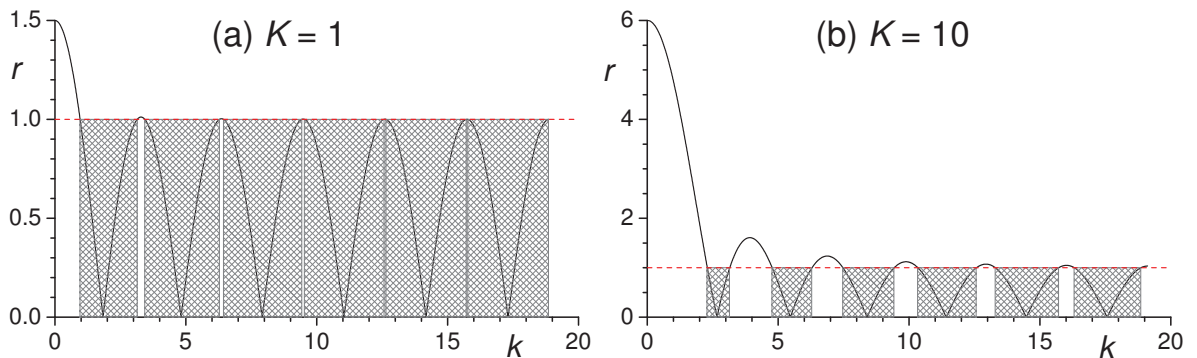
a po vynásobení e^{iqa} dostaneme

$$-2 e^{iqa} + 4 \cos ka - 2 e^{-iqa} + \frac{2K}{k} \sin ka = 0$$

$$\boxed{\cos qa = \cos ka + \frac{K}{2k} \sin ka} . \quad (8.1.12)$$

Tato rovnice je splněna, pokud

$$r \equiv \left| \cos ka + \frac{K}{2k} \sin ka \right| \leq 1 . \quad (8.1.13)$$



Obrázek 7: Funkce r (černá čára) pro dvě hodnoty parametru K a mřížkovou konstantu $a = 1$. Pásky, v nichž je splněna podmínka (8.1.13) jsou vyznačeny šrafováním.

Veličina r je pro dvě hodnoty K zakreslena na obrázku 7. Několik pozorování:

- Pro $K \neq 0$ dostáváme *pásovou strukturu*: povolené pásy $r \leq 1$ střídají zakázané pásy $r > 1$, viz obrázek 7.
- Hodnota funkce r pro $k = 0$ je

$$r_0 = \left| 1 + \frac{Ka}{2} \right|, \quad (8.1.14)$$

tj. pokud $K > 0$ nebo $K < -\frac{4}{a}$, dostáváme pro nulovou energii vždy zakázaný pás.

- Pro $K > 0$ je horní hranice povoleného pásu je vždy na hodnotě

$$ka = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (8.1.15)$$

Pásy tedy můžeme indexovat číslem n .

- Pokud $K = 0$, jsou povolené všechny energie $E > 0$. Řešení odpovídá pohybu volné částice.
- S rostoucí hodnotou K se pásy zužují a pro $K \rightarrow \infty$ dostáváme čárové spektrum (8.1.15), tj.

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ma^2}, \quad (8.1.16)$$

což je spektrum nekonečně hluboké jednorozměrné pravoúhlé jámy šířky a .

2. Pokud rovnici (8.1.12) pro hodnotu ka splňuje nějaké qa , pak ji stejně dobře splňuje $qa + 2\pi n$, kde $n \in \mathbb{Z}$, přičemž vlnová funkce zůstane stejná. Můžeme tedy přijmout konvenci, že ke každé hodnotě $\pi n \leq ka \leq \pi(n+1)$ přidružíme qa tak, aby bylo v intervalu $\pi n \leq qa \leq \pi(n+1)$, tj.

$$\begin{aligned} \pi n &\leq ka \leq \pi(n+1), \\ \pi n &\leq qa \leq \pi(n+1), \quad n \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (8.1.17)$$

Tímto způsobem docílíme toho, že pro každou hodnotu k dostaneme jedinečnou hodnotu q .

V druhé běžně používané konvence bereme hodnotu q z tzv. *1. Brillouinovy zóny*, což je množina nejmenších q takových, že dávají v daném pásu n jednoznačně vlnovou funkci. Pro jednorozměrnou mřížku je 1. Brillouinova zóna interval

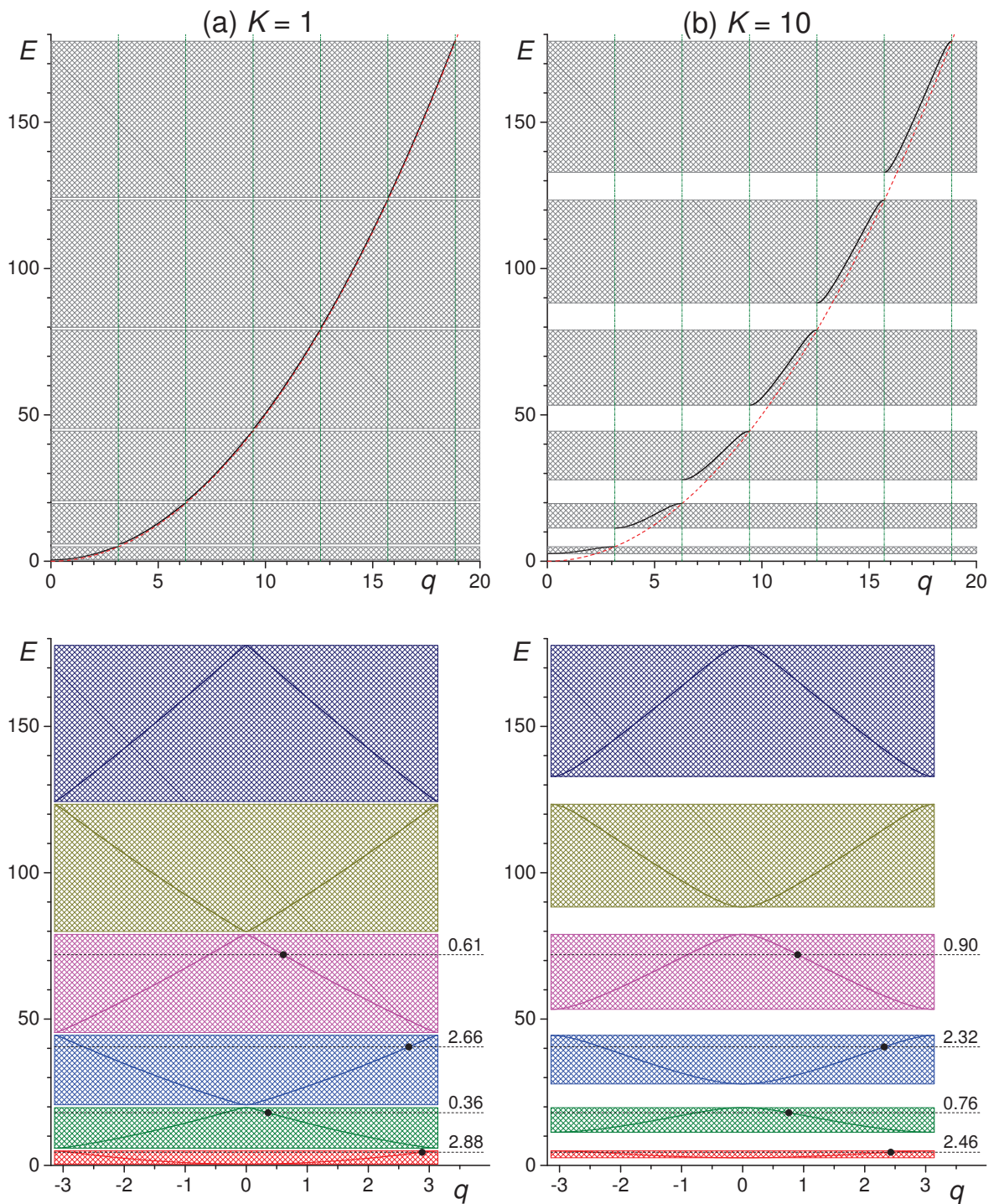
$$qa \in [-\pi, \pi]. \quad (8.1.18)$$

Disperzní relace $E = E(q)$ v obou konvencích je zobrazena na obrázku 8.

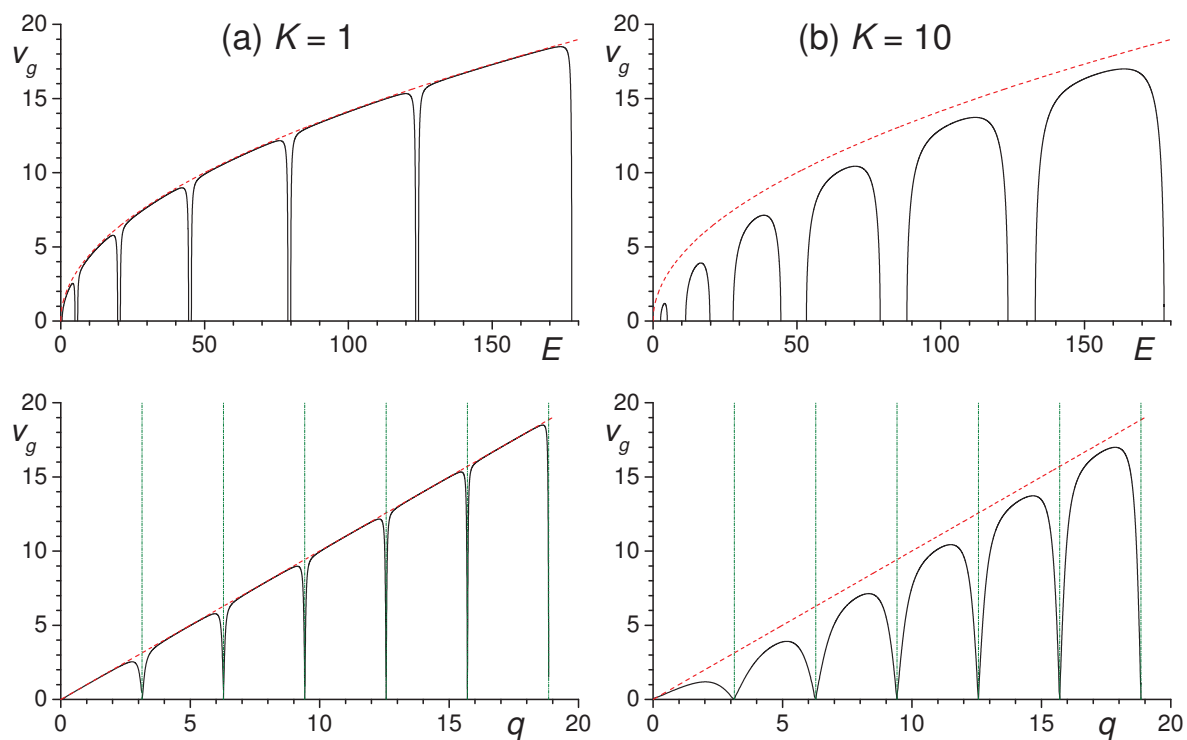
Grupová rychlost je zakreslena na obrázku 9. Pro q v blízkosti hranice pásu klesá rychlost k nule.

Poznámka:

V 1. Brillouinově zóně musí mít Schrödingerova rovnice dvě lineárně nezávislá řešení. Druhé řešení získáme komplexním sdružením $\psi_q(x) \mapsto \psi_q^*(x) = \psi_{-q}(x)$. Tato vlnová funkce odpovídá opačné hodnotě kvazihybnosti.



Obrázek 8: 1. řádek: Disperzní relace v konvenci (8.1.17) pro dvě hodnoty K (černá čára). Červená čárkovaná čára odpovídá disperzní relaci pro volnou částici $E = \hbar^2 q^2 / (2M)$. Svislé zelené čerchované čáry vyznačují horní hranice pásů (8.1.15). Šrafováním jsou znázorněny povolené pásy. 2. řádek: Disperzní relace pro 1. Brillouinovu zónu (8.1.18). Jednotlivé pásy jsou znázorněny odlišnými barvami. Černými čárkovanými čarami jsou vyznačeny energie a vypsány hodnoty kvazihybnosti q pro obrázek ??.



Obrázek 9: Grupová rychlost (8.1.4) v závislosti na energii (1. řádek) a na kvazihyb-
nosti (2. řádek). Ve 2. řádku jsou hranice pásů $q = \pi n$ znázorněny svislými zelenými
čerkovanými čarami. Červená čárkovaná čára odpovídá rychlosti pro volnou částici
 $E = \hbar q/M$.