

7 Potenciály s δ -funkcemi

7.1 Jednoduchá δ jáma nebo bariéra

Částice o hmotnosti M se nachází v potenciálu ve tvaru jednoduché δ funkce,

$$V(x) = c \delta(x), \quad (7.1.1)$$

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 tento model 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 pro $E > 0$ (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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + c \delta(x) \right] \psi(x) = E \psi(x). \quad (7.1.2)$$

Integrace v malém okolí $x = 0$, ve kterém sedí δ funkce, vede na vztah

$$-\frac{\hbar^2}{2M} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] + c\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx, \quad (7.1.3)$$

kde $\psi'(x) \equiv d\psi(x)/dx$. Limita $\epsilon \rightarrow 0+$ dá sešívací podmínku¹⁶

$$\boxed{\psi'(0+) - \psi'(0-) = K\psi(0)}, \quad (7.1.6)$$

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

$$K = \frac{2Mc}{\hbar^2}. \quad (7.1.7)$$

Vlnová funkce při průchodu δ funkcí potenciálu musí být spojitá a její derivace má skok daný vzorcem (7.1.6).

2. Vázaný stav se musí nacházet na energii $E < 0$. Pro $x \neq 0$ má Schrödingerova rovnice (7.1.2) tvar jako pro volnou částici

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (7.1.8)$$

a její obecné řešení je

$$\psi(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}, \quad (7.1.9)$$

¹⁶Rovnice (7.1.6) lze též formálně přepsat pomocí logaritmické derivace

$$L(x) \equiv \frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = \frac{d}{dx} \ln \psi(x) \quad (7.1.4)$$

na tvar

$$L(0+) - L(0-) = K. \quad (7.1.5)$$

kde $A, B \in \mathbb{C}$ jsou konstanty a

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.1.10)$$

Vlnová funkce v oblastech I (nalevo od δ funkce, $x < 0$) a II (napravo od δ funkce, $x > 0$), viz obrázek 5, je

$$\psi_I(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}, \quad x < 0, \quad (7.1.11a)$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}, \quad x > 0. \quad (7.1.11b)$$

Aby byla vlnová funkce normovatelná (kvadraticky integrovatelná), musí vymizet v nekonečnu, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$, z čehož plyne, že

$$B = C = 0. \quad (7.1.12)$$

Sešívací podmínky [spojitost, skok v derivaci (7.1.6)] v bodě $x = 0$ dávají

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad (7.1.13a)$$

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = K\psi_I(0), \quad (7.1.13b)$$

takže

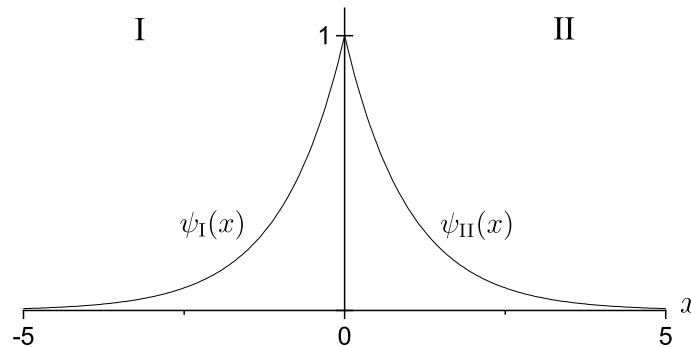
$$A = D, \quad (7.1.14a)$$

$$\kappa = -\frac{K}{2}. \quad (7.1.14b)$$

Dosazení (7.1.7) a (7.1.10) vede na kvantovací podmínku

$$E = -\frac{Mc^2}{2\hbar^2}, \quad (7.1.15)$$

kteřá udává energii *jediného* vázaného stavu systému.



Obrázek 5: Normalizovaná vlnová funkce vázaného stavu pro $M = \hbar = 1$, $c = -1$.

Zbývá nanormovat vlnovou funkci, tj. nalézt hodnotu parametru A :

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^0 |\psi_I(x)|^2 dx + \int_0^{\infty} |\psi_{II}(x)|^2 dx \\ &= |A|^2 \left\{ \int_{-\infty}^0 e^{2\kappa x} dx + \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx \right\} \\ &= |A|^2 \left\{ \left[\frac{1}{2\kappa} e^{2\kappa x} \right]_{-\infty}^0 + \left[-\frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \right]_0^{\infty} \right\} = \frac{|A|^2}{\kappa}, \end{aligned} \quad (7.1.16)$$

Při volbě nulové komplexní fáze normalizačního parametru je

$$A = D = \sqrt{\kappa} = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} \quad (7.1.17)$$

[veličina κ byla vyjádřena pomocí (7.1.14b) a (7.1.10)]. Normalizovaná vlnová funkce vázaného stavu (7.1.15) je tedy

$$\psi_{\text{I}}(x) = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} e^{-\frac{Mc}{\hbar^2}x}, \quad (7.1.18a)$$

$$\psi_{\text{II}}(x) = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} e^{\frac{Mc}{\hbar^2}x}, \quad (7.1.18b)$$

nebo souhrnně

$$\psi(x) = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} e^{-\frac{Mc}{\hbar^2}|x|}. \quad (7.1.19)$$

Její průběh je znázorněn na obrázku 5.

3. Jedná se o rozptylovou úlohu na 1D potenciálu. Částice přichází z oblasti, ve které je asymptoticky volná, do lokalizované interakční oblasti. Interakce způsobí, že se částice může s určitou nenulovou pravděpodobností odrazit. Pokud naopak projde, může se změnit její fáze. Tyto změny udávají měřitelné veličiny pravděpodobnost průchodu T , pravděpodobnost odrazu R a fázový posun δ .

V kladných energiích má systém spojité spektrum. V oblastech I a II je řešením Schödingerovy rovnice (7.1.11) se vlnová funkce vyjádří jako

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \\ \psi_{\text{II}}(x) &= C e^{ikx} + D e^{-ikx}, \end{aligned} \quad (7.1.20a)$$

kde

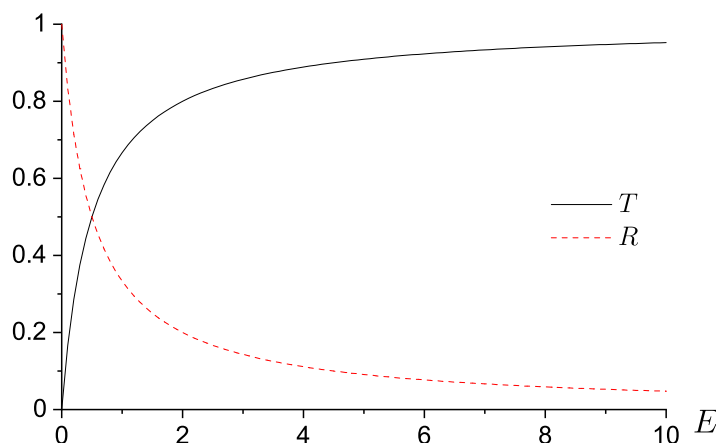
$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.1.21)$$

Pro určení pravděpodobností průchodu a odrazu se předpokládá, 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 $D = 0$. Hledané pravděpodobnosti se pak definují jako

$$R = |\mathfrak{R}|^2, \quad \mathfrak{R} = \frac{B}{A}, \quad (7.1.22a)$$

$$T = |\mathfrak{T}|^2, \quad \mathfrak{T} = \frac{C}{A} = |T| e^{i\delta}, \quad (7.1.22b)$$

kde \mathfrak{R} je amplituda odrazu, \mathfrak{T} je amplituda průchodu a δ je fázové posunutí.



Obrázek 6: Pravděpodobnost průchodu (černá čára) a odrazu (červená přerušovaná čára) pro potenciál tvořený jednou δ funkcí ($M = \hbar = c = 1$). Jejich součet je roven 1.

Sešívání vlnové funkce (7.1.20) v bodě $x = 0$ vede na podmínky

$$A + B = C, \quad (7.1.23a)$$

$$ik(C + B - A) = KC. \quad (7.1.23b)$$

Vyjádřením B z první podmínky a dosazením do druhé se dostane

$$C = \frac{A}{1 - \frac{K}{2ik}}. \quad (7.1.24)$$

Pravděpodobnost průchodu je tedy

$$T = \frac{1}{1 - \frac{K}{2ik}} \frac{1}{1 + \frac{K}{2ik}} = \frac{1}{1 + \left(\frac{K}{2k}\right)^2} = \frac{1}{1 + \frac{Mc^2}{2\hbar^2 E}} \quad (7.1.25)$$

a analogicky pravděpodobnost odrazu

$$R = \frac{1}{1 + \left(\frac{2K}{k}\right)^2} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{Mc^2}}. \quad (7.1.26)$$

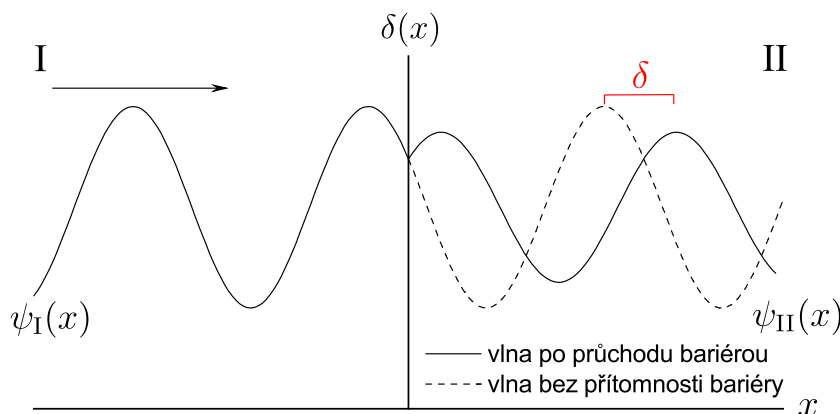
Platí, že $T + R = 1$. Obě pravděpodobnosti jsou zakresleny na obrázku 6.

Poznámka: Povšiměte si, že R ani T nezávisí na znaménku c , tj. pravděpodobnost průchodu a odrazu je při zadané energii stejná pro δ jámu i pro δ bariéru.

4. Fázové posunutí¹⁷ δ značí fázi, o kterou se posune rovinná vlna kvůli přítomnosti potenciálu oproti případu bez potenciálu. Situace je schematicky znázorněna na obrázku 7. Pro určení fázového posunutí se vyjde z definice (7.1.22b), což po dosazení dá

$$\delta = \arctan \frac{\text{Im } \mathfrak{T}}{\text{Re } \mathfrak{T}} = -\arctan \frac{K}{2k} = -\arctan c \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}}. \quad (7.1.27)$$

Energetická závislost fázového posunutí je zakreslena na obrázku 8.



Obrázek 7: Vlnová funkce pro výpočet fázového posunutí δ (červeně). Vlnová funkce za nepřítomnosti potenciálu $V(x) = c \delta(x)$ je znázorněna přerušovanou čarou.

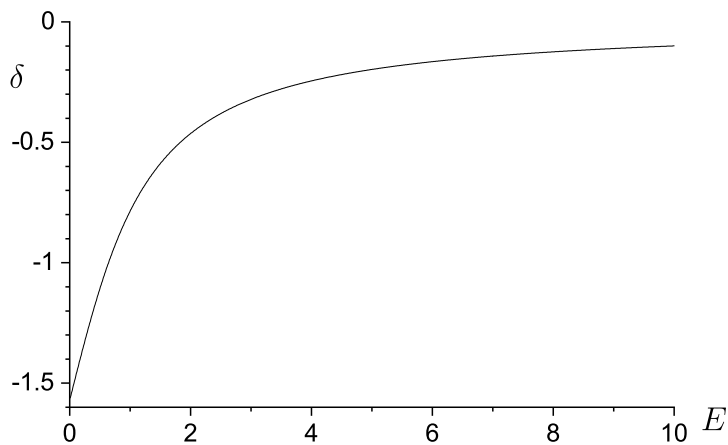
Poznámka: Potenciál ve tvaru δ funkce má simulovat velmi úzkou a hlubokou potenciálovou jámu, resp. bariéru. Jedná se vlastně o limitní případ konečné jámy (bariéry) šířky a a hloubky (výšky) v , kde $a \rightarrow 0$ a zároveň $va \equiv c = \text{const}$.

7.2 Dvě δ jámy nebo bariéry

Částice o hmotnosti M se pohybuje v potenciálu složeném ze dvou δ funkcí vzdálených od sebe o délku a ,

$$V(x) = c \left[\delta \left(x - \frac{a}{2} \right) + \delta \left(x + \frac{a}{2} \right) \right]. \quad (7.2.1)$$

¹⁷Držíme se zavedené notace, proto pro fázové posunutí i pro δ funkci se používá stejné, přestože kolizní označení.

Obrázek 8: Fázové posunutí pro jednu δ funkci ($M = \hbar = c = 1$).

1. Nalezněte rovnici pro vázané stavy systému ($E < 0, c < 0$) a vyřešte ji numericky. Porovnejte výsledné energetické spektrum s případem jedné jámy.
2. Pro $E > 0$ určete pravděpodobnost průchodu $T(E)$ a pravděpodobnost odrazu $R(E)$. Zakreslete $T(E)$ do grafu společně s pravděpodobností průchodu skrz jednu δ funkci.
3. Pro $E > 0$ určete fázové posunutí $\delta_{\pm}(E)$ zvlášť pro liché a zvlášť pro sudé vlnové funkce. Zakreslete obě fázová posunutí do grafu společně s fázovým posunutím pro jednu δ funkci.

Pro všechny číselné výpočty uvažujte $\hbar = M = |c| = a = 1$.

Řešení:

1. Jelikož Hamiltonián (7.2.1) komutuje s operátorem parity \hat{P} , tj. je symetrický vůči záměně $x \leftrightarrow -x$, $p \leftrightarrow -p$, vlnové funkce $\psi(x)$ musejí být sudé nebo liché,

$$\psi_{+}(x) = \psi_{+}(-x) : \quad \psi_{\text{II}}(x) = A_{+} \cosh \kappa_{+} x \quad (7.2.2a)$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = B_{+} e^{-\kappa_{+} x} = \psi_{\text{I}}(-x) \quad (7.2.2b)$$

$$\psi_{-}(x) = -\psi_{-}(-x) : \quad \psi_{\text{II}}(x) = A_{-} \sinh \kappa_{-} x \quad (7.2.2c)$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = B_{-} e^{-\kappa_{-} x} = -\psi_{\text{I}}(-x), \quad (7.2.2d)$$

kde κ_{\pm} jsou dána vztahem (7.1.10). Aplikace podmínky spojitosti v bodě $x = a/2$ a skoku v derivaci (7.1.6) vede pro sudé řešení na rovnice

$$\begin{aligned} A_{+} \cosh \kappa_{+} \frac{a}{2} &= B_{+} e^{-\kappa_{+} \frac{a}{2}} \\ -B_{+} \kappa_{+} e^{-\kappa_{+} \frac{a}{2}} - A_{+} \kappa_{+} \sinh \kappa_{+} \frac{a}{2} &= K B_{+} e^{-\kappa_{+} \frac{a}{2}}, \end{aligned} \quad (7.2.3a)$$

jejichž vydělením se obdrží kvantovací podmínka

$$\boxed{\kappa_{+} \tanh \kappa_{+} \frac{a}{2} = -(\kappa_{+} + K)}. \quad (7.2.4)$$

Pro lichá řešení stačí provést záměnu $\sinh x \leftrightarrow \cosh x$, což vede na rovnici

$$\boxed{\kappa_{-} \coth \kappa_{-} \frac{a}{2} = -(\kappa_{-} + K)}. \quad (7.2.5)$$

Po vyjádření hyperbolických funkcí pomocí exponenciál

$$\tanh x = \frac{1}{\coth x} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (7.2.6)$$

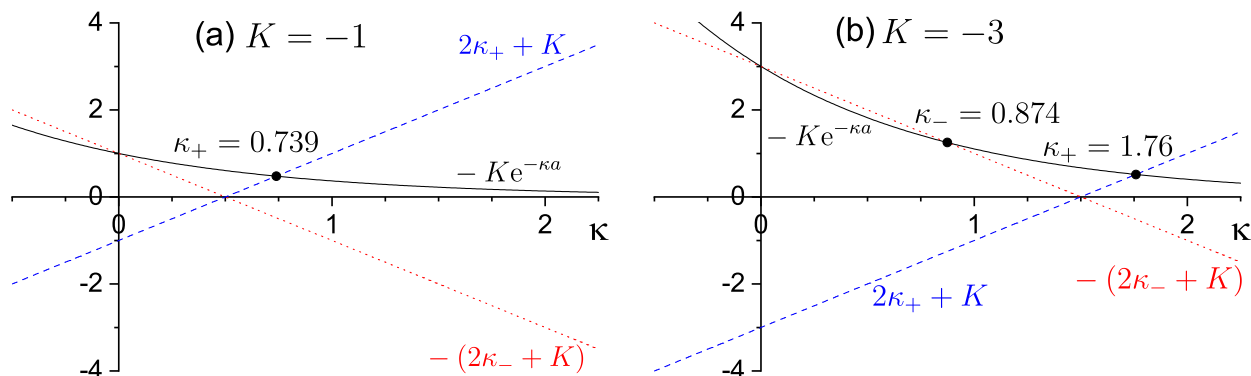
lze podmínky (7.2.4) a (7.2.5) kompaktně zapsat jedinou rovnicí

$$-K e^{-\kappa_{\pm} a} = \pm (2\kappa_{\pm} + K). \quad (7.2.7)$$

Řešením této rovnice je průsečík exponenciály $-K e^{-\kappa_{\pm} a}$ (pro vázané stavy je $K < 0$, takže exponenciála leží v horní polovině grafu) s přímkami $\pm(2\kappa_{\pm} + K)$. Zatímco sudé řešení existuje vždy, existence lichého řešení je podmíněna tím, že směrnice přímkou v bodě $\kappa_- = 0$ musí být větší než směrnice exponenciály v tomto bodě:

$$Ka < -2. \quad (7.2.8)$$

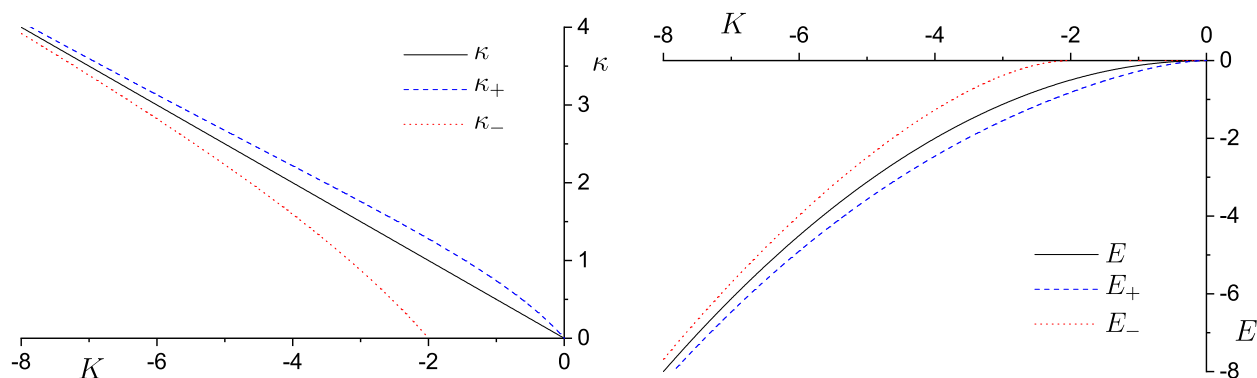
Obě situace jsou znázorněny na obrázku 9.



Obrázek 9: Numerické řešení rovnice (7.2.7) pro dvě hodnoty $K = -1$ a $K = -3$. V případě $K = -1$ existuje pouze sudé řešení s energií $E_+ = -0.273$ (liché řešení $E_- = 0$ vede na nenormalizovatelnou vlnovou funkci), v případě $K = -3$ existují dvě řešení $E_+ = -1.55$ a $E_- = -0.382$.

Řešení rovnic (7.2.7) lze explicitně vyjádřit pomocí Lambertových W funkcí¹⁸

$$\kappa_{\pm} = -\frac{K}{2} + \frac{1}{a} W\left(\mp \frac{Ka}{2} e^{\frac{Ka}{2}}\right). \quad (7.2.10)$$



Obrázek 10: Závislost spektra dvou δ jam κ_{\pm} a E_{\pm} na síle interakce K a srovnání s jednou jámou κ a E , viz (7.1.15) a (7.1.7).

S klesající hodnotou K (rostoucí silou δ funkcí v potenciálu) se řešení více a více přibližují k sobě. Pokud $Ka \ll 0$, jámy popsané δ funkcemi mezi sebou jen velmi slabě interagují a energie budou tudíž téměř degenerované (paritní dublety) a budou blízké energii jedné δ jámy (7.1.15) s dvojnásobnou silou. Závislost řešení $\kappa_{\pm}(K)$ a odpovídajících energií $E_{\pm}(K)$ je vykreslena na obrázku 10.

¹⁸Lambertovy W funkce jsou definovány jako řešení rovnice

$$y = x e^x. \quad (7.2.9)$$

V programu Mathematica se skrývají pod označením [ProductLog](#).

Normalizované vlnové funkce musejí splňovat normalizační podmínku

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{\pm}(x)|^2 dx = 2 \int_0^{\infty} |\psi_{\pm}(x)|^2 dx \quad (7.2.11)$$

(druhá rovnost platí díky sudosti / lichosti vlnových funkcí). Sudé vlnové funkce jsou tedy

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} &= \int_0^{\frac{a}{2}} A_+^2 \cosh^2 \kappa_+ x dx + \int_{\frac{a}{2}}^{\infty} B_+^2 e^{-2\kappa_+ x} dx \\ &= A_+^2 \left[\frac{x}{2} + \frac{\sinh 2\kappa_+ x}{4\kappa_+} \right]_0^{\frac{a}{2}} + B_+^2 \left[\frac{e^{-2\kappa_+ x}}{-2\kappa_+} \right]_{\frac{a}{2}}^{\infty} \\ &= \frac{A_+^2}{4\kappa_+} (\kappa_+ a + \sinh \kappa_+ a) + \frac{B_+^2}{2\kappa_+} e^{-\kappa_+ a} \\ &= \frac{A_+^2}{4\kappa_+} (\kappa_+ a + \sinh \kappa_+ a + 2 \cosh^2 \kappa_+ \frac{a}{2}) = \\ &= \frac{A_+^2}{4\kappa_+} (e^{\kappa_+ a} + \kappa_+ a + 1) \end{aligned} \quad (7.2.12)$$

(v průběhu odvození byla použita sešívací podmínka (7.2.3)), přičemž hodnoty parametrů A_+ a B_+ jsou

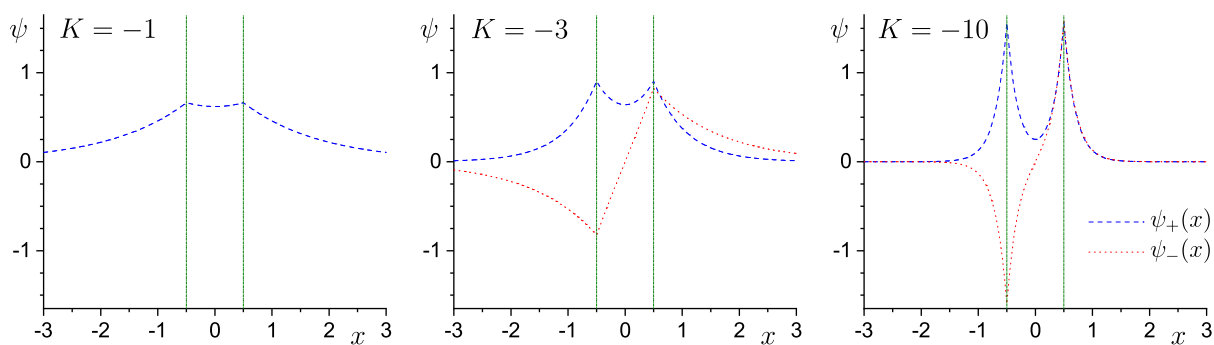
$$\begin{aligned} A_+ &= \sqrt{\frac{2\kappa_+}{e^{\kappa_+ a} + \kappa_+ a + 1}} = \sqrt{\frac{2(2\kappa_+ + K)}{a(2\kappa_+ + K) + 2}}, \\ B_+ &= \frac{e^{\kappa_+ a} + 1}{2} A_+ = \frac{\kappa_+}{2\kappa_+ + K} A_+, \end{aligned} \quad (7.2.13a)$$

kam se dosadilo z rovnice (7.1.10). Liché vlnové funkce mají hodnoty parametrů

$$\begin{aligned} A_- &= \sqrt{\frac{2\kappa_-}{e^{\kappa_- a} - \kappa_- a - 1}} = \sqrt{\frac{2(2\kappa_+ + K)}{a(2\kappa_+ + K) + 2}}, \\ B_- &= \frac{e^{\kappa_- a} - 1}{2} A_- = -\frac{\kappa_-}{2\kappa_+ + K} A_-. \end{aligned} \quad (7.2.14a)$$

Souhrnně lze tedy psát

$$A_{\pm} = \sqrt{\pm \frac{2(2\kappa_+ + K)}{a(2\kappa_+ + K) + 2}}, \quad B_{\pm} = \pm \frac{\kappa_-}{2\kappa_+ + K} A_{\pm}. \quad (7.2.15)$$



Obrázek 11: Normalizované vlnové funkce pro tři hodnoty K . Pro $K = -1$ existuje jen jeden vázaný stav (sudá vlnová funkce), pro ostatní hodnoty K existují dva vázané stavy: sudý $\psi_+(x)$ a lichý $\psi_-(x)$. Polohy δ funkcí jsou znázorněny svislými zelenými čerchovanými čarami.

Normalizované vlnové funkce pro tři různé hodnoty K jsou zobrazeny na obrázku 11.

2. Pro stanovení pravděpodobnosti průchodu a odrazu se v analogii s (7.1.20) opět vyjde z vlnové funkce ve tvaru (vlna přichází zleva)

$$\psi_{\text{I}}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (7.2.16a)$$

$$\psi_{\text{II}}(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}, \quad (7.2.16b)$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = F e^{ikx}, \quad (7.2.16c)$$

kde k je dáno vztahem (7.1.21). Pravděpodobnost průchodu a odrazu bude

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2, \quad R = \left| \frac{B}{A} \right|^2. \quad (7.2.17)$$

Podmínky spojitosti a skoku v derivaci vlnové funkce v bodě $x = -a/2$ vedou k rovnicím

$$A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} = C e^{-ik\frac{a}{2}} + D e^{-ik\frac{a}{2}} \quad (7.2.18a)$$

$$ik \left(C e^{-ik\frac{a}{2}} - D e^{ik\frac{a}{2}} - A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{+ik\frac{a}{2}} \right) = K \left(A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} \right). \quad (7.2.18b)$$

Z první rovnice vynásobené faktorem ik se vyjádří

$$C ik e^{-ik\frac{a}{2}} = ik \left(A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} - D e^{ik\frac{a}{2}} \right) \quad (7.2.19)$$

a tento výraz se dosadí do druhé rovnice, což po úpravách dá

$$ik \left(B e^{ik\frac{a}{2}} - D e^{ik\frac{a}{2}} \right) = \frac{K}{2} \left(A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} \right), \quad (7.2.20)$$

a tedy

$$D = \frac{iK}{2k} \left(A e^{-ika} + B \right) + B. \quad (7.2.21)$$

Zpětným dosazením do (7.2.19) se dostane

$$C = A - \frac{iK}{2k} \left(A + B e^{ika} \right). \quad (7.2.22)$$

Analogický postup se zopakuje v bodě $x = a/2$, případně stačí vzít výsledek (7.2.21) a (7.2.22) a provést záměnu $k \mapsto -k$, $A \mapsto F$, $B \mapsto 0$:

$$C = \frac{-K + 2ik}{2ik} F \quad D = -\frac{iK}{2k} F e^{ika}. \quad (7.2.23)$$

Zkombinování vztahů (7.2.21), (7.2.22) a (7.2.23) vede na soustavu dvou rovnic pro neznámé B a E :

$$\frac{iK}{2k} \left(A e^{-ika} + B \right) + B = -\frac{iK}{2k} F e^{ika}, \quad (7.2.24a)$$

$$A - \frac{iK}{2k} \left(A + B e^{-ika} \right) = \frac{-K + 2ik}{2ik} F. \quad (7.2.24b)$$

Bez újmy na obecnosti lze volit $A = 1$, čímž se vztahy pro pravděpodobnosti průchodu a odrazu zjednoduší na $T = |F|^2$ a $R = |B|^2$.

Řešení posledních dvou rovnic zní

$$F = \frac{4k^2}{K^2 e^{2ika} - (K - 2ik)^2}. \quad (7.2.25)$$

Po úpravách se získá finální výraz pro pravděpodobnost průchodu

$$\begin{aligned}
 T = FF^* &= \frac{4k^2}{K^2 e^{2ika} - (K - 2ik)^2} \frac{4k^2}{K^2 e^{-2ika} - (K + 2ik)^2} \\
 &= \frac{16k^4}{\underbrace{(K^2 + 4k^2)^2 + K^4 - K^2 [(K + 2ik)^2 e^{2ika} + (K - 2ik)^2 e^{-2ika}]}_{2\clubsuit = 2K^4 + 8K^2 k^2 + 16k^4}} \\
 &= \frac{16k^4}{2\clubsuit - K^2 [(K^2 - 4k^2) (e^{2ika} + e^{-2ika}) + 4iKk (e^{2ika} - e^{-2ika})]} \\
 &= \frac{16k^4}{2\clubsuit - K^2 [2(K^2 - 4k^2) \cos 2ka - 8Kk \sin 2ka]} \\
 &= \frac{8k^4}{\clubsuit - K^2 [(K^2 - 4k^2) (\cos^2 ka - \sin^2 ka) - 8Kk \sin ka \cos ka]} \\
 &= \frac{8k^4}{\clubsuit - K^4 \cos^2 ka + K^4 \sin^2 ka + 4K^2 k^2 \cos^2 ka - 4K^2 k^2 \sin^2 ka + 8K^3 k \sin ka \cos ka} \\
 &= \frac{4k^4 + 2K^4 \sin 2ka + 8K^2 k^2 \cos^2 ka + 8K^3 k \sin ka \cos ka}{4k^4} \\
 &= \frac{4k^4 + K^2 (K \sin ka + 2k \cos ka)^2}{1} \\
 &= \frac{1}{1 + \frac{K^2}{4k^2} (2 \cos ka + \frac{K}{k} \sin ka)^2}. \tag{7.2.26}
 \end{aligned}$$

Srovnání s pravděpodobností průchodu pro jednu δ funkci (7.1.25) ukazuje, že v případě dvou δ funkcí se T liší o modulační faktor v závorce ve jmenovateli. Ten způsobuje, že pro speciální hodnoty k dané rovnicí

$$2 \cos ka + \frac{K}{k} \sin ka = 0, \tag{7.2.27}$$

tj.

$$\tan ka = -\frac{2k}{K} \tag{7.2.28}$$

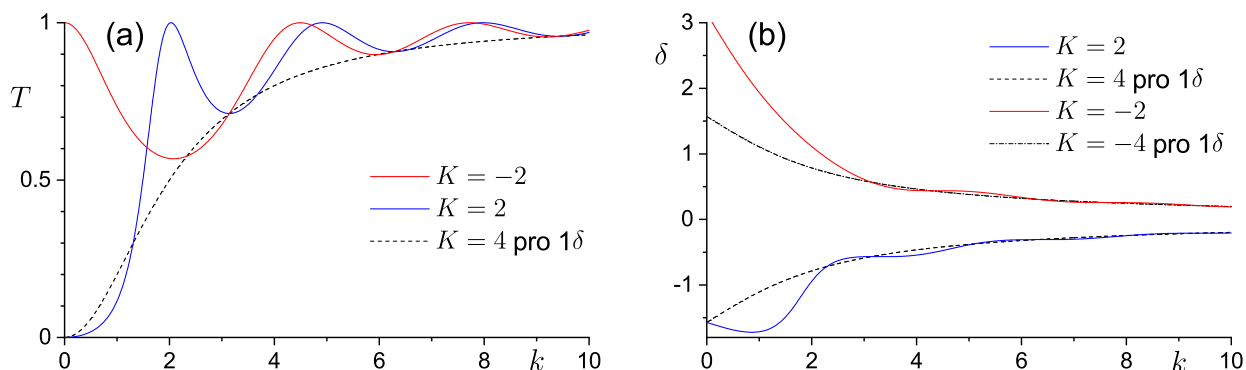
je pravděpodobnost průchodu $T = 1$ a pravděpodobnost odrazu $R = 0$. To je speciální případ tzv. *Ramsauerova-Townsendova efektu*, viz též [2], kapitola 4.10. Pravděpodobnost průchodu T je pro dvě hodnoty K zobrazena na obrázku 12 (a) a srovnána s případem pravděpodobnosti průchodu pro jednu δ funkci (7.1.25) s dvojnásobnou silou K (limitní případ $a \rightarrow 0$). Pravděpodobnost odrazu se dopočítá pomocí relace $R = 1 - T$.

3. Fázové posunutí se spočítá pomocí definičního vztahu (7.1.22b) z výrazu (7.2.25):

$$\begin{aligned}
 F &= \frac{4k^2}{K^2 (\cos 2ka + i \sin 2ka) - (K - 2ik)^2} \\
 &= \frac{4k^2}{K^2 (\cos 2ka - 1) + 4k^2 + iK(K \sin 2ka + 4k)} \\
 &= \frac{4k^2 [K^2 (\cos 2ka - 1) + 4k^2 - iK(K \sin 2ka + 4k)]}{[K^2 (\cos 2ka - 1) + 4k^2]^2 + K^2 (K \sin 2ka + 4k)^2}, \tag{7.2.29}
 \end{aligned}$$

$$\delta = -\arctan \frac{\sin 2ka + \frac{4k}{K}}{\cos 2ka - 1 + \frac{4k^2}{K^2}}. \tag{7.2.30}$$

Fázové posunutí je zobrazeno na obrázku 12 (b). Přitažlivý potenciál ($K < 0$) dává fázové posunutí záporné, odpuzivý potenciál ($K > 0$) kladné.



Obrázek 12: (a) Pravděpodobnost průchodu a (b) fázové posunutí δ pro potenciál dvou δ jam s $K = -2$ (červeně) a $K = 2$ (modře). Pro srovnání s případem jedné jámy síly $K = \pm 4$ slouží černá čárkovaná čára (v případě jedné jámy je pravděpodobnost průchodu stejná pro obě znaménka K).

7.3 Maticový formalismus

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

$$V(x) = \sum_{j=1}^n c_j \delta(x - x_j), \quad (7.3.1)$$

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 запиšte ve formě dvousložkového vektoru.
2. Nalezněte transformaci posunutí vlnové funkce o vzdálenost a a запиšte tuto transformaci ve formě matice.
3. Nalezněte transformaci vlnové funkce při průchodu δ funkcí v bodě x_j .
4. Nalezněte transformaci Ξ , která dává do vztahu vlnovou funkci před první jámou s vlnovou funkcí 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

$$\psi(x) = \underbrace{A_+ e^{ikx}}_{\psi_+(x)} + \underbrace{A_- e^{-ikx}}_{\psi_-(x)}, \quad (7.3.2)$$

kde $k = \sqrt{2ME/\hbar^2}$ [pro vázané stavy $E < 0$ je k ryze imaginární, nebo je možné přejít k veličině κ (7.1.10)]. Vlnová funkce se запиše v kompaktním tvaru dvousložkového vektoru

$$\Psi(x) \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix}. \quad (7.3.3)$$

2. Posunutá vlnová funkce je

$$\psi(x+a) = A_+ e^{ikx+ika} + A_- e^{-ikx-ika} = e^{+ika} \psi_+(x) + e^{-ika} \psi_-(x), \quad (7.3.4)$$

takže

$$\Psi(x+a) = \begin{pmatrix} e^{+ika} \psi_+(x) \\ e^{-ika} \psi_-(x) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{+ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix}}_{T(a)} \Psi(x). \quad (7.3.5)$$

3. Sešívací podmínka (7.1.6) pro vlnovou funkci (7.3.2) je lineární, a proto ji lze rovněž vyjádřit maticovou transformací vektoru $\Psi(x)$. Označí-li se vlnová funkce nalevo od j -té δ funkce jako $\Psi^{(L)}(x_j)$ a vlnová funkce napravo od δ funkce jako $\Psi^{(R)}(x_j)$, pak podmínka na spojitost a na skok v derivaci v bodě x_j zní

$$\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} = \psi_+^{(R)} + \psi_-^{(R)}, \quad (7.3.6a)$$

$$ik \left(\psi_+^{(R)} - \psi_-^{(R)} + \psi_+^{(L)} - \psi_-^{(L)} \right) = K_j \left(\psi_+^{(L,R)} + \psi_-^{(L,R)} \right). \quad (7.3.6b)$$

Z první rovnice plyne $\psi_-^{(R)} = \psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} - \psi_+^{(R)}$, což po dosazení do druhé rovnice dá

$$\psi_+^{(R)} = \frac{K_j}{2ik} \left(\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} \right) + \psi_+^{(L)} = \left(1 + \frac{K_j}{2ik} \right) \psi_+^{(L)} + \frac{K_j}{2ik} \psi_-^{(L)}, \quad (7.3.7a)$$

$$\psi_+^{(L)} = -\frac{K_j}{2ik} \left(\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} \right) + \psi_-^{(L)} = -\frac{K_j}{2ik} \psi_+^{(L)} + \left(1 - \frac{K_j}{2ik} \right) \psi_-^{(L)}. \quad (7.3.7b)$$

To je lineární transformace, kterou lze zapsat jako

$$\Psi^{(R)}(x_j) = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 + \frac{K_j}{2ik} & \frac{K_j}{2ik} \\ -\frac{K_j}{2ik} & 1 - \frac{K_j}{2ik} \end{pmatrix}}_{R(K_j)} \Psi^{(L)}(x_j). \quad (7.3.8)$$

4. Transformace Ξ je složením transformací posunutí mezi δ funkcemi T a transformací přechodu přes δ funkce R :

$$\Xi(x_n; x_1) = R(K_n)T(x_n - x_{n-1})R(K_{n-1}) \cdots R(K_2)T(x_2 - x_1)R(K_1). \quad (7.3.9)$$

5. Transformace (7.3.9) má pro dvě δ funkce tvar

$$\begin{aligned} \Xi(a) &= R(K)T(a)R(K) \\ &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{K}{2\pi k} & \frac{K}{2ik} \\ -\frac{K}{2ik} & 1 - \frac{K}{2ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{K}{2\pi k} & \frac{K}{2ik} \\ -\frac{K}{2ik} & 1 - \frac{K}{2ik} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{K}{2ik}\right)^2 e^{ika} - \left(\frac{K}{2ik}\right)^2 e^{-ika} & \frac{K}{2ik} \left[\left(1 + \frac{K}{2ik}\right) e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right) e^{-ika} \right] \\ -\frac{K}{2ik} \left[\left(1 + \frac{K}{2ik}\right) e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right) e^{-ika} \right] & -\left(\frac{K}{2ik}\right)^2 e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right)^2 e^{-ika} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.3.10)$$

Stav bude normalizovatelný, pokud $\psi_+^{(L)} = \psi_-^{(R)} = 0$, kde $\psi_+^{(L)}$ zde značí část vlnové funkce s kladným znaménkem nalevo před levou δ funkcí a $\psi_-^{(R)}$ část vlnové funkce napravo za pravou δ funkcí potenciálu.¹⁹ Jelikož $\Psi^{(R)} = \Xi\Psi^{(L)}$, platí

$$\psi_-^{(R)} = \Xi_{21}\psi_+^{(L)} + \Xi_{22}\psi_-^{(L)}, \quad (7.3.11)$$

a pokud se kvůli správnému asymptotickému chování má vynulovat $\psi_+^{(L)}$ a $\psi_-^{(R)}$, musí být $\Xi_{22} = 0$, neboli (po zavedení $k = i\kappa$)

$$-\left(\frac{K}{2k}\right)^2 e^{-\kappa a} + \left(1 + \frac{K}{2k}\right)^2 e^{\kappa a} = 0, \quad (7.3.12)$$

$$K^2 e^{-2\kappa a} = (K + 2k)^2, \quad (7.3.13a)$$

$$|K| e^{-\kappa a} = \pm (K + 2k). \quad (7.3.13b)$$

Rovnice je identická s rovnicemi (7.2.4) a (7.2.5). Jejím řešením bychom dostali energie vázaných stavů.

¹⁹Pro vázané stavy je $k = i\sqrt{-2ME/\hbar} = i\kappa$.

7.4 Periodická δ funkce (Diracův hřeben)

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

$$V(x) = c \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad (7.4.1)$$

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

Hledejte vlnovou funkci ve tvaru Blochovy vlny

$$\psi_q(x) = e^{iqx} u_q(x), \quad (7.4.2)$$

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

$$u_q(x) = u_q(x + a) \quad (7.4.3)$$

a q je kvazihybnost (mřížková hybnost).²⁰

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. Pro dvě hodnoty $K = 1$ a $K = 10$ vypočítejte a zakreslete do grafu disperzní relaci $E(q)$ pro nejnižší čtyři energetické pásy. Uvažujte následující konvenci: pokud $\pi n \leq ka \leq \pi(n+1)$, pak $\pi n \leq qa \leq \pi(n+1)$, $n \in \mathbb{N}$.
3. Vypočítejte grupovou rychlost

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial q} \quad (7.4.4)$$

a zakreslete její závislost na q a na E pro dvě hodnoty parametru $K = 1$, $K = 10$ a nejnižší čtyři energetické pásy. Srovnajte s rychlostí volné částice.

4. Nalezněte parametry A , B vlnové funkce. Vlnovou funkci normalizujte na vzdálenosti mezi dvěma delta funkcemi:

$$\int_0^a |\psi_q(x)|^2 dx = 1. \quad (7.4.5)$$

5. Najděte řešení Schrödingerovy rovnice pro případ $K < 0$ (v tomto případě může být energie i záporná). Podobně jako v 2. bodě zakreslete disperzní relaci $E(q)$ pro $K = -1$ a $K = -10$.

Pro všechny numerické výpočty předpokládejte $a = M = \hbar = 1$.

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 pravoúhlé bariéry o konečné šířce b a výšce V_0 , vzdálené od sebe o mřížkovou konstantu $a > b$, se nazývá *Kronigův-Penneyův potenciál* [9]. V limitě

$$b \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty, bV_0 = c = \text{const} \quad (7.4.6)$$

přejde Kronigův-Penneyův potenciál na Diracův hřeben.

²⁰Někdy se též nazývá *Floquetův exponent*.

Řešení:

1. Vlnová funkce na intervalu $x \in (0; a)$ odpovídá vlnové funkci volné částice

$$\psi_q^{(0;a)}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k \equiv \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.4.7)$$

Vyjádřená v Blochově formě podle (7.4.2) zní

$$\psi_q^{(0;a)}(x) = e^{iqx} \underbrace{\left(A e^{-iqx} e^{ikx} + B e^{-iqx} e^{-ikx} \right)}_{u_q(x)}. \quad (7.4.8)$$

Podle Blochova teorému (7.4.3) lze využít **periodicity** funkce $u_q(x)$ a posunout vlnovou funkci na interval $x \in (-a; 0)$,²¹

$$\begin{aligned} \psi_q^{(-a;0)}(x) &= e^{iqx} u_q(x+a) \\ &= e^{iqx} \left[A e^{-iq(x+a)} e^{ik(x+a)} + B e^{-iq(x+a)} e^{-ik(x+a)} \right] \\ &= e^{-iqa} \left[A e^{ik(x+a)} + B e^{-ik(x+a)} \right]. \end{aligned} \quad (7.4.10)$$

Nyní se aplikují **sešívací podmínky** pro δ funkci [spojitost + skok v derivaci (7.1.6)] v bodě $x = 0$:

$$A + B = e^{-iqa} \left[A e^{ika} + B e^{-ika} \right], \quad (7.4.11a)$$

$$ik(A - B) - ik e^{-iqa} \left(A e^{ika} - B e^{-ika} \right) = K(A + B), \quad (7.4.11b)$$

kde $K = 2Mc/\hbar^2$, viz výraz (7.1.7). Toto je homogenní soustava dvou rovnic pro dvě neznámé A, B ,

$$M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0, \quad M = \begin{pmatrix} 1 - e^{-iqa} e^{ika} & 1 - e^{-iqa} e^{-ika} \\ 1 - e^{-iqa} e^{ika} - \frac{K}{ik} & -1 + e^{-iqa} e^{-ika} - \frac{K}{ik} \end{pmatrix}, \quad (7.4.12)$$

která má řešení, pokud

$$\begin{aligned} 0 = \det M &= \left(1 - e^{-iqa} e^{ika} \right) \left(-1 + e^{-iqa} e^{-ika} - \frac{K}{ik} \right) \\ &\quad - \left(1 - e^{-iqa} e^{-ika} \right) \left(1 - e^{-iqa} e^{ika} - \frac{K}{ik} \right) \\ &= -1 + e^{-iqa} e^{ika} + e^{-iqa} e^{-ika} - e^{-2iqa} - \frac{K}{ik} + \frac{K}{ik} e^{-iqa} e^{-ika} \\ &\quad - 1 + e^{-iqa} e^{-ika} + e^{-iqa} e^{ika} - e^{-2iqa} + \frac{K}{ik} - \frac{K}{ik} e^{-iqa} e^{ika} \\ &= -2 + 2e^{-iqa} \underbrace{\left(e^{ika} + e^{-ika} \right)}_{2 \cos ka} - 2e^{-2iqa} + \frac{K}{ik} e^{-iqa} \underbrace{\left(e^{ika} - e^{-ika} \right)}_{2i \sin ka}. \end{aligned} \quad (7.4.13)$$

Vynásobením výrazem e^{iqa} vede na

$$-2e^{iqa} + 4 \cos ka - 2e^{-iqa} + \frac{2K}{k} \sin ka = 0 \quad (7.4.14)$$

$$\boxed{\cos qa = \cos ka + \frac{K}{2k} \sin ka}, \quad (7.4.15)$$

což je rovnice pro povolené energie (kvantovací podmínka). Tato rovnice je splněna, pokud

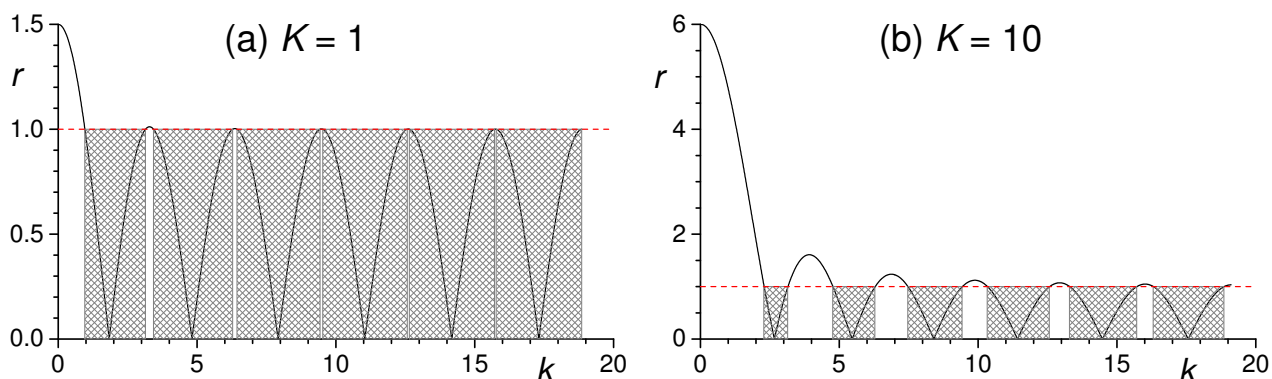
$$r \equiv \left| \cos ka + \frac{K}{2k} \sin ka \right| \leq 1. \quad (7.4.16)$$

Veličina r je pro dvě hodnoty K zakreslena na obrázku 13. Několik pozorování:

²¹Zapůsobíme-li na Blochovu vlnu (7.4.2) operátorem posunutí $\hat{T}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}}$, který byl zaveden vztahem (1.5.1), dostaneme

$$\hat{T}(a) \psi_q(x) = \psi_q(x-a) = e^{iq(x-a)} u_q(x-a) = e^{iq(x-a)} u_q(x) = e^{-iqa} \psi_q(x). \quad (7.4.9)$$

Vlnová funkce ve tvaru Blochovy vlny je tedy vlastní funkcí operátoru posunutí $\hat{T}(a)$ s vlastní hodnotou e^{-iqa} .



Obrázek 13: Funkce r (černá čára) pro dvě hodnoty parametru K a mřížkovou konstantu $a = 1$. Pásky, v nichž je splněna podmínka (7.4.16) jsou vyznačeny šrafováním.

- Pro $K \neq 0$ má energetické spektrum *pásovou strukturu*: povolené pásy $r \leq 1$ střídají zakázané pásy $r > 1$, viz obrázek 13.
- Hodnota funkce r pro $k = 0$ je

$$r_0 = \left| 1 + \frac{Ka}{2} \right|, \quad (7.4.17)$$

tj. pokud $K > 0$ nebo $K < -\frac{4}{a}$, je na nulové energii vždy zakázaný pás.

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

$$ka = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (7.4.18)$$

Pásky lze tedy 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 $K \rightarrow \infty$ se spektrum redukuje na čárové spektrum (7.4.18), tj.

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ma^2} n^2, \quad (7.4.19)$$

což odpovídá spektru nekonečně hluboké jednorozměrné pravoúhlé jámy šířky a .

2. Pokud rovnici (7.4.15) pro hodnotu ka splňuje nějaké qa , pak ji stejně dobře splňuje $qa + 2\pi m$, kde $m \in \mathbb{Z}$, přičemž vlnová funkce zůstane stejná. Jedna možná konvence znázornění výsledků tedy spočívá v tom, že se ke každé hodnotě $\pi n \leq ka \leq \pi(n+1)$ přidruží qa tak, aby leželo v intervalu $\pi m \leq qa \leq \pi(m+1)$ pro $n = m$, tj.

$$\pi n \leq ka \leq \pi(n+1), \quad (7.4.20a)$$

$$\pi n \leq qa \leq \pi(n+1), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (7.4.20b)$$

Tímto způsobem je docíleno jednoznačného přiřazení $k \leftrightarrow q$.

Druhá běžně používaná konvence omezuje hodnotu q na tzv. 1. Brillouinovu zónu, což je množina nejmenších q takových, že dávají v daném pásu n jednoznačně vlnovou funkci. Pro jednorozměrnou mřížku je 1. Brillouinova zóna interval

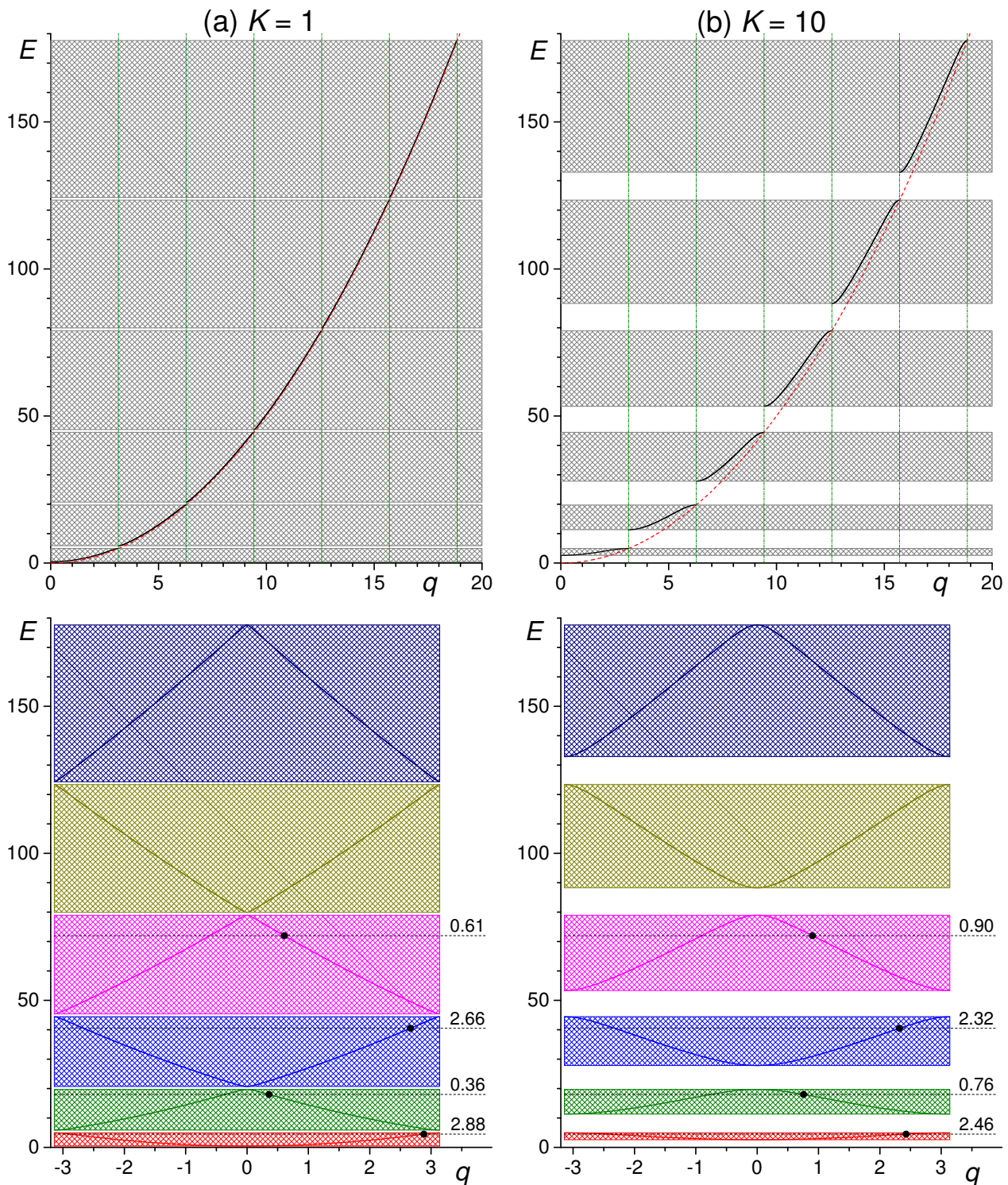
$$qa \in [-\pi, \pi]. \quad (7.4.21)$$

Disperzní relace $E = E(q)$ v obou konvencích je zobrazena na obrázku 14.

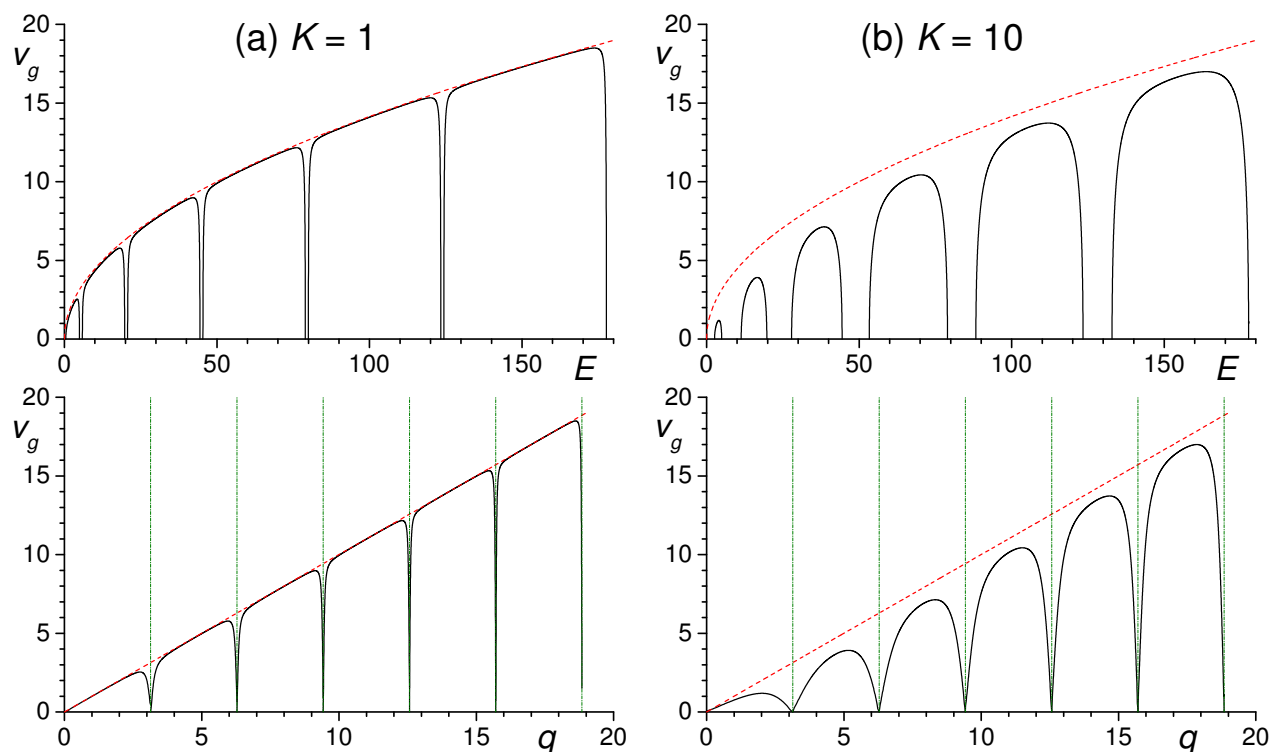
Poznámka: V 1. Brillouinově zóně musí mít Schrödingerova rovnice dvě lineárně nezávislá řešení. Druhé řešení získáme komplexním sdružením $\psi_q(x) \mapsto \psi_q^*(x) = \psi_{-q}(x)$. Tato vlnová funkce odpovídá opačné hodnotě kvazimomentu.

3. Grupová rychlost je zakreslena na obrázku 15. Pro q v blízkosti hranice pásu klesá rychlost k nule.
4. Ze sešívací podmínky na spojitost vlnové funkce (7.4.11) plyne

$$A [1 - e^{-iqa} e^{ika}] = -B [1 - e^{-iqa} e^{-ika}], \quad (7.4.22)$$



Obrázek 14: 1. řádek: Disperzní relace v konvenci (7.4.20) 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 (7.4.18). Šrafováním jsou znázorněny povolené pásy. 2. řádek: Disperzní relace pro 1. Brillouinovu zónu (7.4.21). Jednotlivé pásy jsou znázorněny odlišnými barvami. Černými čárkovanými čarami jsou vyznačeny energie a vypsány hodnoty kvazihybnosti q pro obrázek 16.



Obrázek 15: Grupová rychlost (7.4.4) v závislosti na energii (1. řádek) a na kvazihybnosti (2. řádek). Ve 2. řádku jsou hranice pášů $q = \pi n$ znázorněny svislými zelenými čerchovanými čarami. Červená čárkovaná čára odpovídá rychlosti pro volnou částici $E = \hbar q/M$.

což dává vztah mezi konstantami A a B :

$$A = -B \frac{1 - e^{-iqa} e^{-ika}}{1 - e^{-iqa} e^{ika}} = B \frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q-k)a} e^{-ika}, \quad (7.4.23a)$$

$$B = -A \frac{1 - e^{-iqa} e^{ika}}{1 - e^{-iqa} e^{-ika}} = B \frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q+k)a} e^{ika}. \quad (7.4.23b)$$

Integrace vlnové funkce na intervalu $[0, a]$ (7.4.5) dá podmínku

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^a (A e^{ikx} + B e^{-ikx}) (A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}) dx \\ &= \int_0^a (|A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ikx} + A^* B e^{-2ikx}) dx \\ &= (|A|^2 + |B|^2) a + \frac{1}{2ik} [AB^* (e^{2ika} - 1) + A^* B (1 - e^{-2ika})]. \end{aligned} \quad (7.4.24)$$

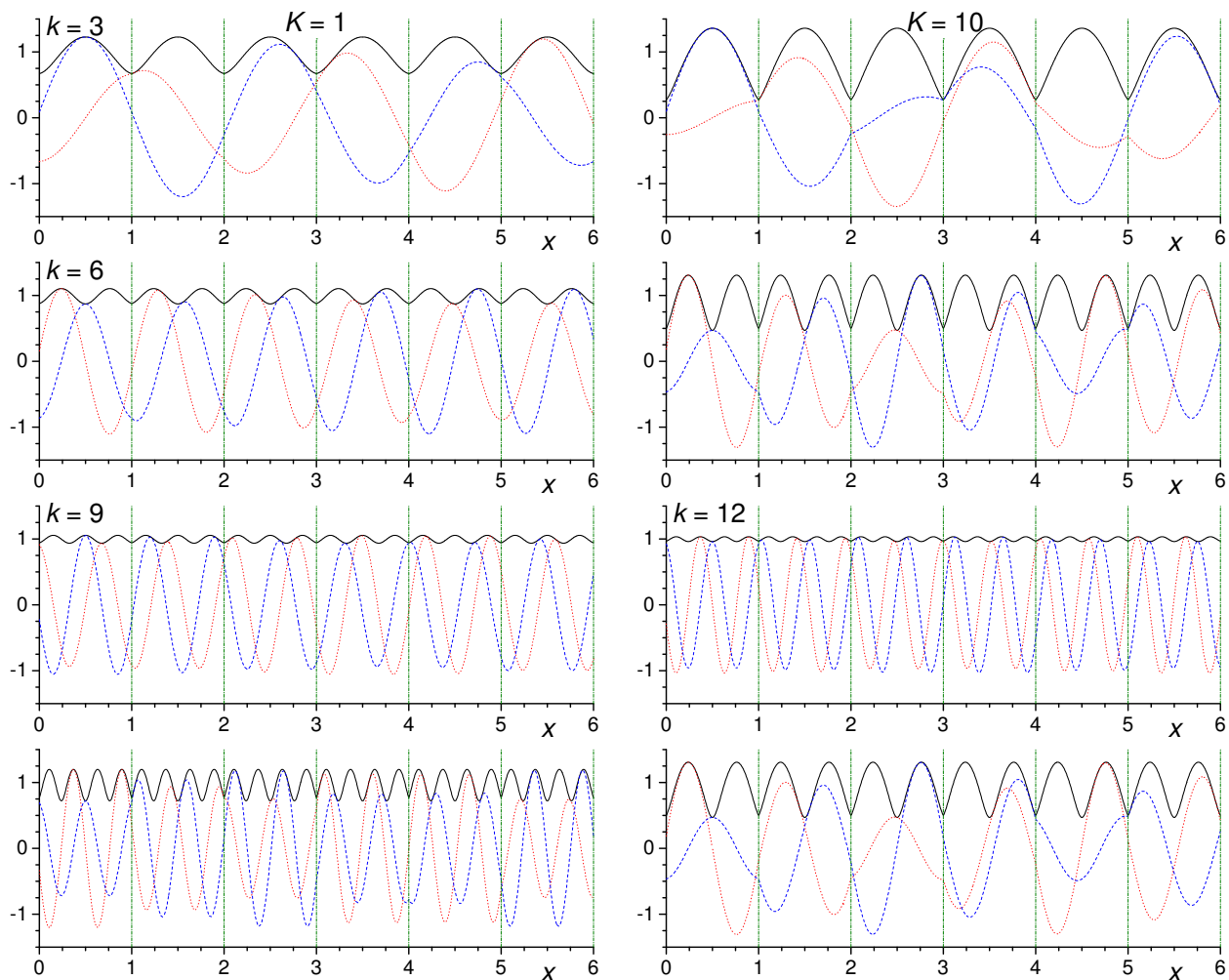
Spojení posledních dvou vztahů vede k výrazům

$$\begin{aligned} 1 &= a |B|^2 \left\{ 1 + \left[\frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q-k)a} \right]^2 + \frac{2 \sin ka}{ka} \frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q-k)a} \right\} \\ &= 2a |B|^2 \frac{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{ka} (\cos qa - \cos ka)^2}{1 - \cos(q-k)a}, \end{aligned} \quad (7.4.25)$$

kde bylo využito vztahu (7.4.15) a první dva členy byly upraveny podle vzorců pro goniomet-

rické funkce:

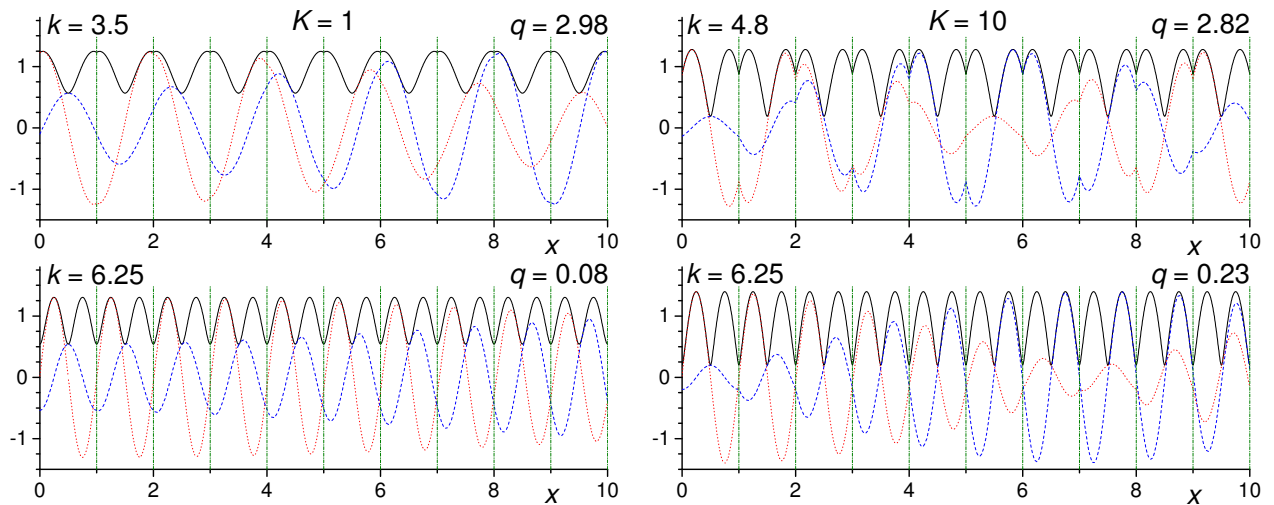
$$\begin{aligned}
 1 + \left[\frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q-k)a} \right]^2 &= 1 + \left[\frac{-2 \sin \frac{q-k}{2} a \sin \frac{q+k}{2} a}{2 \sin^2 \frac{q-k}{2} a} \right]^2 \\
 &= \frac{\sin^2 \frac{q-k}{2} a + \sin^2 \frac{q+k}{2} a}{\sin^2 \frac{q-k}{2} a} \\
 &= \frac{1 - \cos(q-k)a + 1 - \cos(q+k)a}{1 - \cos(q-k)a} \\
 &= \frac{2 - 2 \cos qa \cos ka}{1 - \cos(q-k)a}. \tag{7.4.26}
 \end{aligned}$$



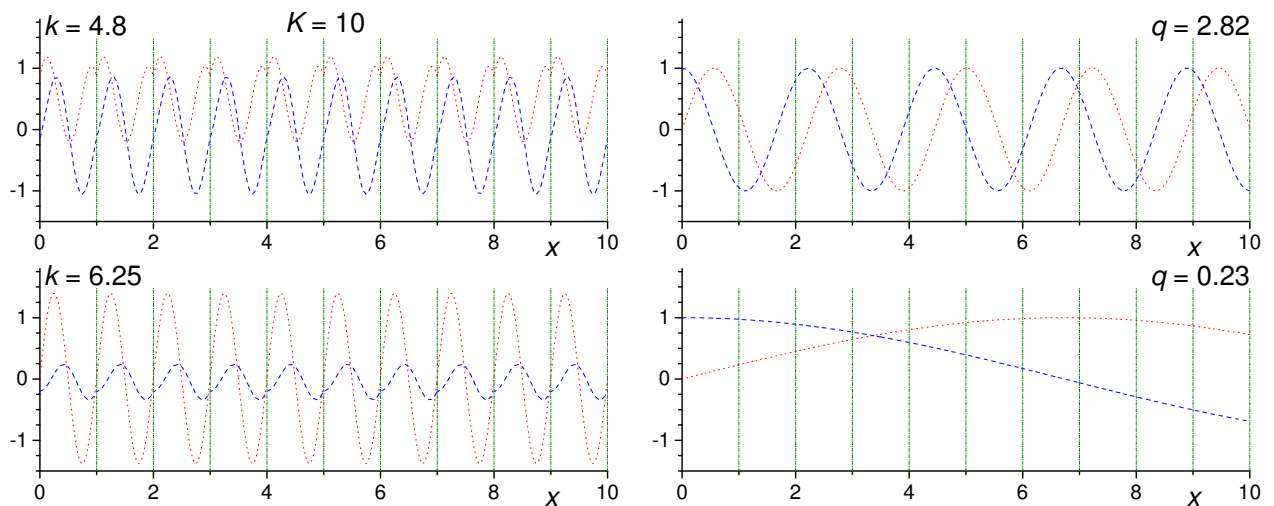
Obrázek 16: Vlnové funkce $\psi_q(x)$ normalizované na intervalu $(0, a)$ pro $a = 1$, dvě hodnoty K a nejnižší čtyři povolené pásy. Hodnoty $q > 0$ leží v 1. Brillouinově zóně. Modrá čárkovaná čára – reálná část, červená tečkovaná čára – imaginární část, černá čára – absolutní hodnota. Zelené čerchované čáry odpovídají místům, v nichž leží δ -funkce potenciálu. Odpovídající energie a hodnoty kvazihybnosti q jsou vyznačeny v obrázku 14.

Podobně lze vyjádřit

$$1 = 2a |A|^2 \frac{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}{1 - \cos(q+k)a}, \tag{7.4.27}$$



Obrázek 17: Totéž jako v obrázku 16, jen pro vlnové funkce z krajů 2. pásu.

Obrázek 18: Periodická část vlnové funkce $u_q(x)$ (vlevo) a Blochova vlna e^{iqx} (vpravo). Modrá čárkovaná čára – reálná část, červená tečkovaná čára – imaginární část. Pronásobení sloupců mezi sebou dá vlnové funkce z pravého sloupce obrázku 17.

takže normalizační konstanty jsou

$$A = s \sqrt{\frac{1}{2a} \frac{1 - \cos(q+k)a}{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}} e^{-i\frac{ka}{2}}, \quad (7.4.28a)$$

$$B = \sqrt{\frac{1}{2a} \frac{1 - \cos(q-k)a}{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}} e^{i\frac{ka}{2}}, \quad (7.4.28b)$$

$$s = \text{sign}(\cos qa - \cos ka) \quad (7.4.28c)$$

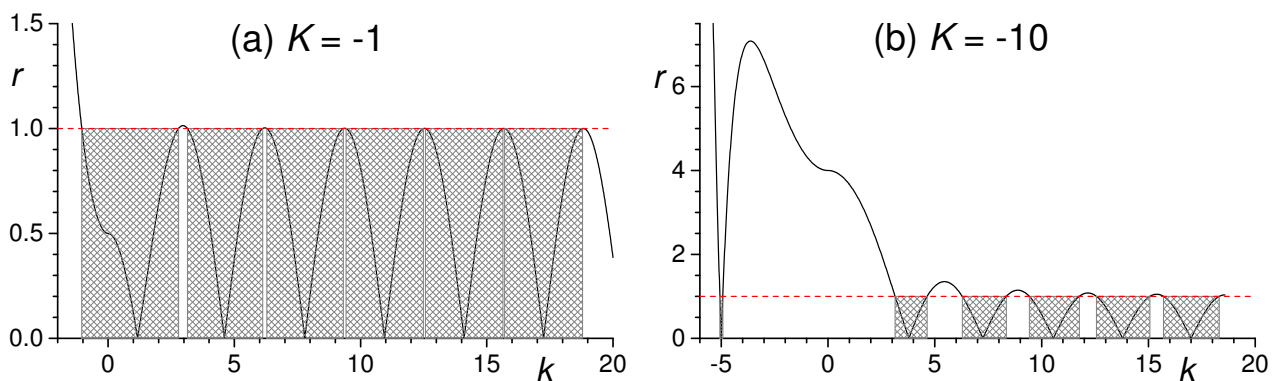
(komplexní fáze se rozdělila stejným dílem mezi A a B; je nutné udržet znaménko mezi A a B). Získaný výsledek je v souladu s rovnicí (9) článku [9].

Vlnová funkce normalizovaná na interval $(0, a)$ je tedy

$$\psi_q(x) = \frac{e^{iqna}}{\sqrt{2a}} \frac{1}{\sqrt{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}} \quad (7.4.29)$$

$$* \left[s \sqrt{1 - \cos(q+k)a} e^{ik(x-na-\frac{a}{2})} + \sqrt{1 - \cos(q-k)a} e^{-ik(x-na-\frac{a}{2})} \right].$$

Několik příkladů vlnových funkcí je na obrázcích 16 a 17. Vlnová funkce rozložená na periodickou část a Blochovu vlnu je na obrázku 18. Je vidět, že pro slabou interakci a střed pásu je pravděpodobnost nalezení částice prakticky konstantní (obrázek 16, 1. sloupec, 3.–5. řádek). Naopak na krajích pásu nebo pro silnější interakci hustota pravděpodobnosti více osciluje (obrázek 16, 2. sloupec, a obrázek 17).



Obrázek 19: Funkce r (černá čára) pro dvě záporné hodnoty parametru K a mřížkovou konstantu $a = 1$. Pásky, v nichž lze vyřešit rovnici (7.4.15) (pro $E < 0$) a (7.4.31) (pro $E > 0$) jsou vyznačeny šrafováním.

5. V souladu s případem izolovaných δ jam (viz příklady 7.1 a 7.2) se označí

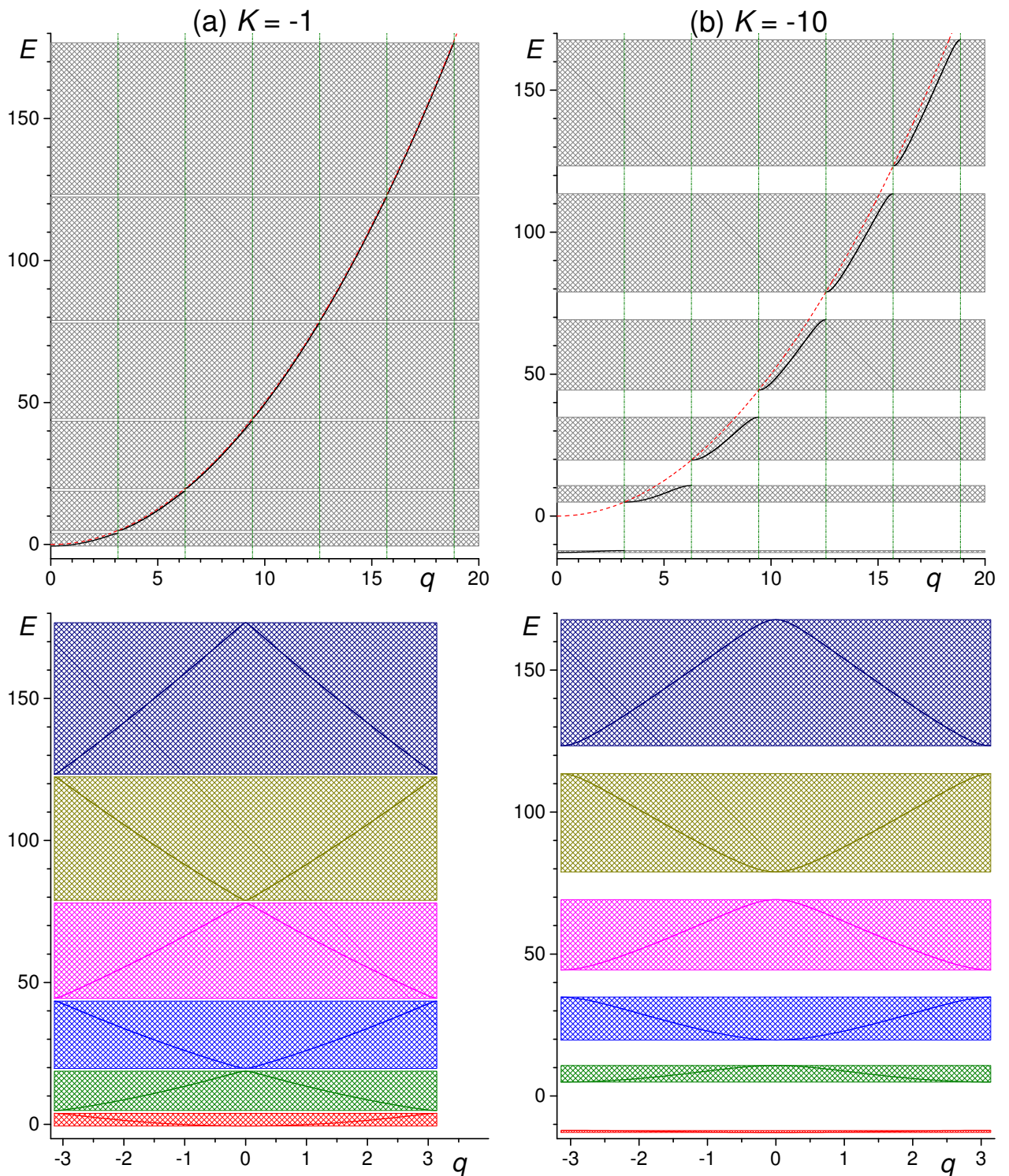
$$\kappa = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.4.30)$$

Formálně tedy platí $k = i\kappa$, čehož lze využít v rovnici (7.4.15) a dojít k podmínce

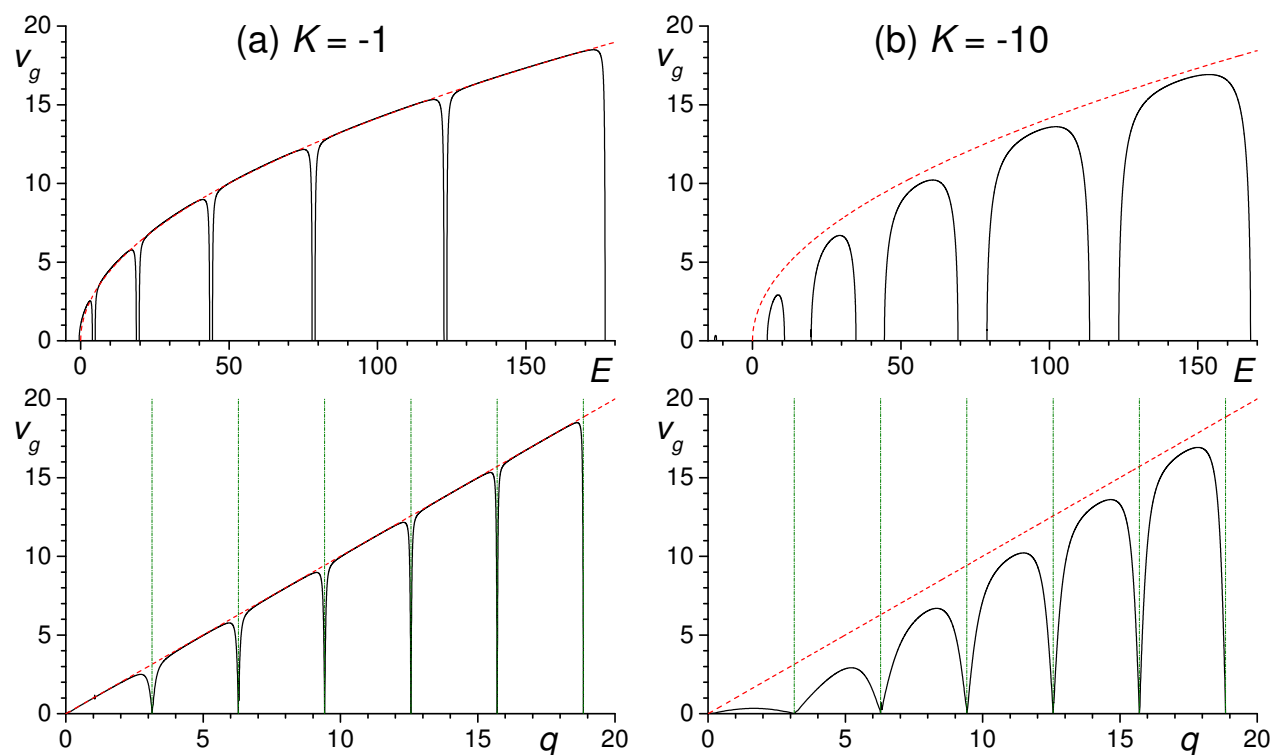
$$\cos qa = \cosh \kappa a + \frac{K}{2\kappa} \sinh \kappa a. \quad (7.4.31)$$

Pro $K \in (-\frac{4}{a}, 0)$ leží nulová energie v nejnižším pásu. Pokud $K < -\frac{4}{a}$, první povolený pás se nachází na energii $E < 0$ a na energii $E = 0$ je zakázaný pás.

V analogii s obrázky 14–15 je na obrázcích 20–21 zobrazen průběh veličiny r , disperzní relace $E(q)$ v konvenci (7.4.20) a v 1. Brillouinově zóně a grupová rychlost pro dvě záporné hodnoty síly interakce K .



Obrázek 20: 1. řádek: Disperzní relace v konvenci (7.4.20) 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 (7.4.18). Šrafováním jsou znázorněny povolené pásy. 2. řádek: Disperzní relace pro 1. Brillouinovu zónu (7.4.21). Jednotlivé pásy jsou znázorněny odlišnými barvami.



Obrázek 21: Grupová rychlost (7.4.4) v závislosti na energii (1. řádek) a na kvazihybnosti (2. řádek). Ve 2. řádku jsou hranice pášů $q = \pi n$ znázorněny svislými zelenými čerchovanými čarami. Červená čárkovaná čára odpovídá rychlosti pro volnou částici $E = \hbar q / M$.