NALOGA: S povezavo med blochovim teoremom in prehodno matriko (ki naj bo rešeno v splošnem) določi možne rešitve za delec v periodičnem potencialu opisanem z delta funkcijo.

BLOCH-OV TEOREM: V periodičnem potencialu s periodo a lahko vedno najdemo tak q, da bo res:

$$\psi(x+a) = e^{iqa}\psi(x)\,. \tag{1}$$

Naš splošni potencial naj se glasi:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V(x-na)\,, \tag{2}$$

kjer je V(x) različen od 0 za $b_1 < x < b_2$ in $a - |b_i| > 0$, povsod drugod pa naj bo V(x) enak 0. Na kratko: hočem tak periodični potencial, da bo med dvema sosednjima periodama vsaj eno majhno območje kjer bo V(x)=0.

Tam, kjer je V(x)=0, naj se naša valovna funkcija glasi:

$$\psi(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}$$

in z uporabo (1):

$$A_n e^{ik(x+a)} + B_n e^{-ik(x+a)} = e^{iqa}(A_{n-1}e^{ikx} + B_{n-1}e^{-ikx})$$

dobimo naslednji dve zvezi:

$$A_n e^{ika} = A_{n-1}e^{iqa} \tag{3}$$
$$B_n e^{-ika} = B_{n-1}e^{iqa}\,. \tag{4}$$

Nov set enačb poiščemo s prehodno matriko:

$$\begin{bmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{bmatrix} = \underline{\underline{M}} \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix}, \tag{5}$$

kjer je $\underline{\underline{M}}$ prehodna matrika:

$$\underline{\underline{M}} = \begin{bmatrix} M_1 \, M_2 \\ M_3 \, M_4 \end{bmatrix}.$$

In zapišem zvezo med (3),(4),(5):

$$\begin{bmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{bmatrix} = \underline{\underline{M}} \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{i(k-q)x} & 0 \\ 0 & e^{-i(k+q)x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Iz druge enačbe sledi da je sistem rešlji, če je determinanta matrike

$$\begin{bmatrix} M_1 - e^{i(k-q)x} & M_2 \\ M_3 & M_4 - e^{-i(k+q)x} \end{bmatrix}$$

enaka 0.
Iz tega sledi enačba:

$$e^{-i2qa} - e^{-iqa}(M_1 e^{-ika} + M_4 e^{ika}) + \det(\underline{\underline{M}}) = 0\,. \tag{8}$$

Naša splošnost se tukaj konča, saj potrebujemo vrednosti prehodne matrike. V nadaljevanju bom uporabil periodični potencial:

$$\mathrm{V(x)}=V_0^{'} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na)\,.$$

Prehodno matriko za tak potencial že poznamo:

$$\underline{\underline{M}}(0) = \begin{bmatrix} 1-\dfrac{k_0}{2ik} & -\dfrac{k_0}{2ik} \\ \dfrac{k_0}{2ik} & 1+\dfrac{k_0}{2ik} \end{bmatrix}, \tag{9}$$

kjer je $k_0 = \dfrac{\hbar^2}{2m} V_0^{'}$

Nas pa zanima $\underline{\underline{M}}(na)$, zato moramo prenesti $\underline{\underline{M}}(0)$ v željeno točko:

$$\underline{\underline{M}}(na) = \underline{\underline{U}}^{-1}(k)\underline{\underline{M}}(0)\underline{\underline{U}}(k)\,,$$

kjer je

$$\underline{\underline{U}}(k) = \begin{bmatrix} e^{-ikna} & 0 \\ 0 & e^{ikna} \end{bmatrix}.$$

Ta sprememba naše prehodne matrike čisto nič ne prizadane, tako da gremo reševat enačbo (8) kar z matriko (9):

$$e^{-i2qa} - e^{-iqa}\left[\ (1-\frac{k_0}{2ik})e^{-ika} + (1+\frac{k_0}{2ik})e^{ika}\ \right] + 1 = 0\,. \tag{10}$$

Pomnožim enačbo (10) z e^{iqa}, da dobim v eksponentu (sinusu in kosinusu) enak argument ter dobim:

$$e^{-iqa} + e^{iqa} = \left[\ e^{-ika} + e^{ika} + \frac{k_0}{2ik}(e^{ika} - e^{-ika})\ \right]. \tag{11}$$

Uporabim identiteti:

$$e^{ix} + e^{-ix} = 2\cos(x)$$
$$e^{ix} - e^{-ix} = 2i\sin(x)$$

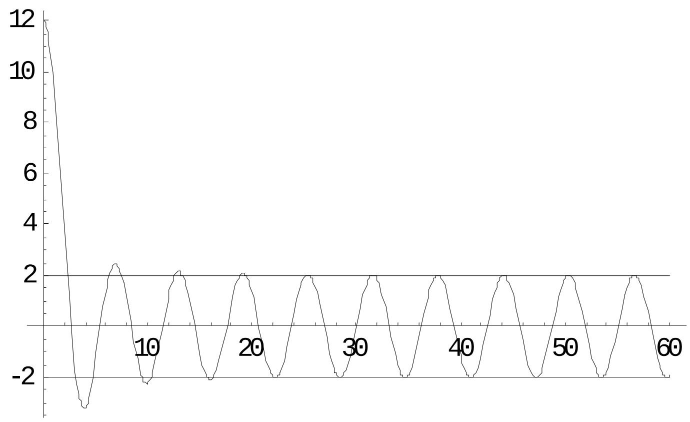
in enačbo (11) prepišem:

$$2\cos(qa) = \left[\ 2\cos(ka) + \frac{k_0}{k}\sin(ka)\ \right].$$

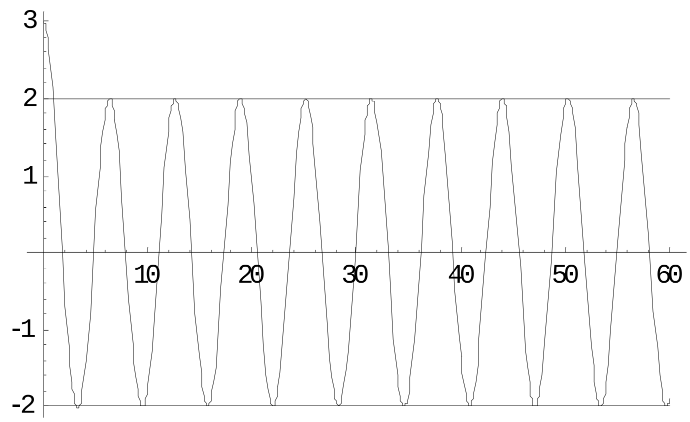
Od tod lahko izračunam parameter q. Poleg tega pa ta enačba skriva v sebi še naslednji premislek:
Leva stran enačbe (2cos(qa)) je omejena med –2 pa 2. Desna stran pa je odvisna od parametrov k ter k_0 in zato ni nujno omejena tako kot leva stran enačbe, iz česar sledijo za delec v periodičnem potencialu prepovedana območja.
Ali drugače: rišimo enačbo

$$f(k) = 2\cos(ka) + \frac{k_0}{k}\sin(ka)\,. \tag{12}$$

$k_0 a = 10$



$k_0 a = 1$



Le ta mora biti omejena med 2 ter –2. Za določen periodo a so mogoči samo določeni k-ji (in s tem samo določena energija; $E = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \frac{k^2}{2m}$). V periodičnem potencialu s periodo a ni mogoč delec s tako energijo, katere valovni vektor ne bi zadoščal enačbi (12).