Symetrie fyzikálních systémů a její důsledky

Symetrie prostoročasu

homogenita času
homogenita prostoru
izotropnost prostoru

Klasická mechanika ... neexistuje mezní rychlost

Invarianty: časový interval $t_2 - t_1 = t_2' - t_1'$ ... ve vztaž. soustavách S, S'

prostorový interval $\left[(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2\right]^{1/2}$ = totéž s čárkami

pro současné události

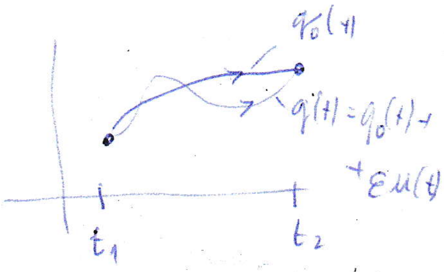
Variační princip

příklad z optiky – Fermatův princip.

Mechanika ... jednorozměrný pohyb ... stav $(q, \dot{q})$ .. zobec. souř., rychlost

$q = x$

$q = \varphi$



D_S ... definiční obor ... možné trajektorie $q(t)$
která je správná?

AKCE

$$S: D_S \ni q(t) \longrightarrow S[q] = \int_{t_1}^{t_2} L(t, q, \dot{q})\, dt \in \mathbb{R}$$

STACIONÁRNÍ BOD $\quad S[q(t)] - S[q_0(t)] \quad 0$ v první aproximaci

Rozvoj

$$S[q(t)] - S[q_0(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left[L(t, q_0 + \varepsilon u, \dot{q}_0 + \varepsilon \dot{u}) - L(t, q_0, \dot{q}_0)\right] dt =$$

$$= \underbrace{\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q}\varepsilon u + \frac{\partial L}{\partial \dot q}\varepsilon \dot u \right) dt}_{\varepsilon S_1} + \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial q^2}\varepsilon^2 u^2 + 2\frac{\partial^2 L}{\partial q \partial \dot q}\varepsilon^2 u \dot u + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot q^2}\varepsilon^2 \dot u^2\right) dt + \text{atd}$$

$S_1 = 0$ pro lib. $u(t)$!

$$S_1 = \int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q}u + \frac{\partial L}{\partial \dot q}\dot u\right)dt = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q} u\,dt + \underbrace{u\frac{\partial L}{\partial \dot q}\Big|_{t_1}^{t_2}}_{0} - \int_{t_1}^{t_2}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\cdot u\,dt =$$

↓ per partes

$$-\int_{t_1}^{t_2} u\left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right]dt = 0 \quad , u = \text{lib} \Rightarrow \boxed{\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q} = 0}$$

$$\frac{df(t,x)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x}\cdot\dot x$$

$\vec v \, \mathrm{grad} f$

CO JE TO FUNKCE L V MECHANICE?

volná částice, obecně $L = L(t, \vec r, \vec v)$

ale: homogenita času, prostoru a izotropie prost. $\Rightarrow L = L(v^2)$

$$L = L(\dot x^2 + \dot y^2 + \dot z^2) \qquad \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot x} = -\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial v^2}\cdot 2\dot x\right] = 0$$

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial v^2}\cdot 2\dot y\right] = 0$$

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial v^2}\, 2\dot z\right] = 0$$

$$\frac{d}{dt}\left[\vec v\cdot \frac{\partial L}{\partial v^2}\right] = 0 \; ; \; \boxed{\vec v\,\frac{\partial L}{\partial v^2} = \text{konst}}$$

Lépe: $\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot x}\right) = 0$ a cykl $\Rightarrow \frac{d}{dt}(\mathrm{grad}_v L) = 0$

$\Rightarrow \mathrm{grad}_{\vec v} L = \text{KONST} \Rightarrow \vec v = \text{konst}$ „zákon setrvačnosti"

TVAR L pro volnou částici $\quad \vec v\,' = \vec v + \vec\varepsilon$ nezmění L

EXPERIMENT $\quad L \sim v^2$

$$L[(v+\varepsilon)^2] = L(v^2 + 2\vec v\vec\varepsilon + \vec\varepsilon^2)$$

$$= L(v^2) + \frac{\partial L}{\partial v^2}\vec v \cdot 2\vec\varepsilon$$

$\frac{df}{dt} \sim \vec v \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial v^2}$ konst

cyklické souřadnice
zákony zachování

ZZE:

def. $p = \frac{\partial L}{\partial \dot q}$ ... klas.: $L = \frac{1}{2} m (\dot x^2 + \dot y^2 + \dot z^2) - U(x,y,z)$

$\frac{\partial L}{\partial \dot x} = m \dot x \qquad \vec p = m \vec v$

$H = -L + p\dot q$

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{dL}{dt} + \frac{dp}{dt}\dot q + p\ddot q = -\frac{\partial L}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial q}\dot q - \frac{\partial L}{\partial \dot q}\ddot q + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\dot q + \frac{\partial L}{\partial \dot q}\ddot q$$

$$= -\frac{\partial L}{\partial t} - \underbrace{\left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot q}\right)\right]}_{0}\dot q = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

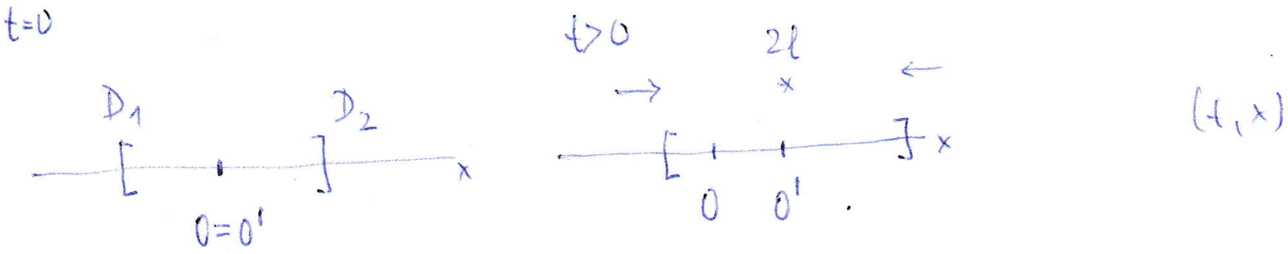
nezávisí-li L explicitně na čase, pak $H = \text{konst.}$

$L = \frac{1}{2}\tilde m \dot q^2 - U(q) \Rightarrow H = -\frac{1}{2}\tilde m \dot q^2 + U(q) + \tilde m \dot q^2 = \frac{1}{2}\tilde m \dot q^2 + U(q)$

celková energie

Existence mezní rychlosti

časový interval už není invariant



U_0 .. vyslání fotonu $\qquad U_0 \dots (0,0)_S \dots (0,0)_{S'}$

U_1 .. zachyt D_1 $\qquad U_1 \dots (t_1, x_1)_S \dots (t_1', -l)_{S'} \qquad t_1' = \frac{l}{c},\ t_2' = \frac{l}{c}$

U_2 .. zachyt D_2 $\qquad U_2 \dots (t_2, x_2)_S \dots (t_2', +l)_{S'} \qquad$ ale $t_1 < t_2$

Co je tedy invariant?

rozhodní rychlost světla. Ale co x, t ?

události se světlem:

$U_1 \dots (t_1, x_1, y_1, z_1)_S \dots (t_1', x_1', y_1', z_1')_{S'}$ ... vyslání } fotonu
$U_2 \dots (t_2, x_2, y_2, z_2)_S \dots (t_2', x_2', y_2', z_2')_{S'}$ ... záchyt

$$s_{12}^2 = \boxed{c^2}(t_2-t_1)^2 - \left[(x_2-x_1)^2 + (y_2-y_1)^2 + (z_2-z_1)^2\right] = 0$$

$$S \xrightarrow{\vec{V}} S' \xrightarrow{\vec{V}'} S''$$

totéž čárkovaně

$$s_{12}'^2 \quad \boxed{c^2}(t_2'-t_1')^2 - \left[(x_2'-x_1')^2 + (y_2'-y_1')^2 + (z_2'-z_1')^2\right] = 0$$

současně nabývají hodnoty 0 ve všech IVS $\Rightarrow$ lin. vztah mezi nimi

$$s_{12}^2 = K(V^2)\, s_{12}'^2 \qquad s_{12}'^2 = K((-V)^2)\, s_{12}^2 \Rightarrow K = 1$$

↑ symetrie prostoročasu

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$$ invariant

Symetrie v KM

Operátor symetrie hamiltoniánu komutují s hamiltoniánem:

$H\psi = E\psi \Rightarrow SH\psi = ES\psi \Rightarrow HS\psi = ES\psi \Rightarrow S\psi$ je vlastní stav příslušný téže energii

KRYSTALY

translační symetrie

reciproká mřížka $\qquad \vec{b}_{hkl} \perp (hkl)$

bodová symetrie

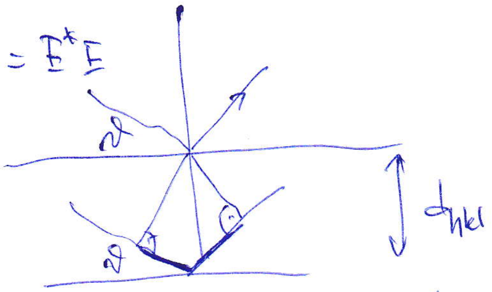
$$\vec{E} = E_0\, e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \qquad \sum_{n_i=0}^{N_i-1} \sum_{\alpha} f_{\alpha}\, e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})(\vec{R}_n + \vec{\rho}_{\alpha})}$$

$$= \dots \sim \prod_{i=1}^{3} \frac{\sin \frac{1}{2} N_i (\vec{k}' - \vec{k})\vec{a}_i}{\sin \frac{1}{2} (\vec{k}' - \vec{k})\vec{a}_i}$$

hl. max $(\vec{k}' - \vec{k})a_i = 2h_i\pi$

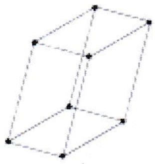
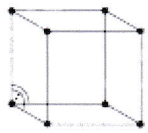
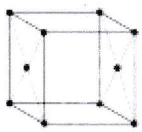
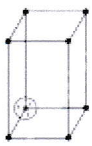
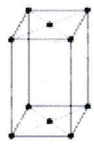
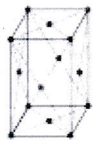
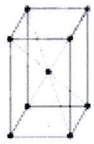
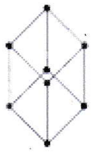
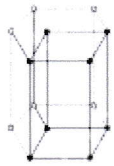
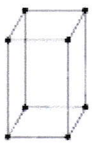
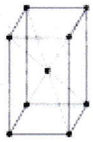
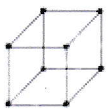
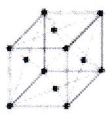
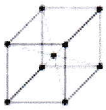
Laueovy rovnice

$I = E^* E$



dráhový rozdíl $\quad 2d_{hkl} \sin\vartheta = n\lambda$

Ewaldova konstrukce: $\qquad \vec{k}' - \vec{k} = \vec{b}_{hkl}$

Krystalografická soustava	Parametry	Primitivní (prostá)	Bazálně centrovaná	Plošně centrovaná	Objemově centrovaná
Trojklonná (Triklinická)	$a \neq b \neq c$ $\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$		—	—	—
Jednoklonná (Monoklinická)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma \neq 90^\circ$			—	—
Kosočtverečná (Rombická)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
Klencová (Romboedrická, trigonální)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$		—	—	—
Šesterečná (Hexagonální)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$		—	—	—
Čtverečná (Tetragonální)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		—	—	
Krychlová (Kubická)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		—		

Symetrie v pevných látkách

Reciproká mřížka ?

translační symetrie mřížky

$\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ $\quad n_i$ celá

$\langle \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \rangle$ … báze primitivní buňky

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad V(\vec{r}+\vec{R}_n) = V(\vec{r})$$

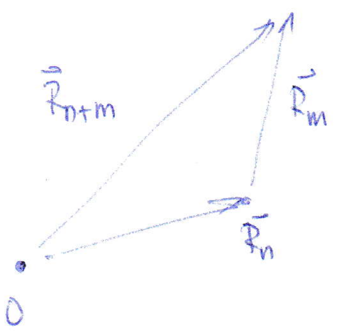
$\vec{r}$, $\vec{r}+\vec{R}_n$ nelze fyzikálně odlišit

$$|\psi(\vec{r}+\vec{R}_n)|^2 = |\psi(\vec{r})|$$

$\psi(\vec{r})$, $\psi(\vec{r}+\vec{R}_n)$ se liší jen fázovým faktorem Φ_n, $\quad |\Phi_n| = 1$

$\Phi_n = e^{i\varphi_n}$ komp. jedn.

$$\underline{\psi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\varphi_n}\psi(\vec{r})}$$



$\vec{R}_{n+m} = \vec{R}_n + \vec{R}_m$

$$\psi(\vec{r}+\vec{R}_{n+m}) = e^{i\varphi_{n+m}}\psi(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}+\vec{R}_{n+m}) = \psi(\vec{r}+\vec{R}_n+\vec{R}_m) = e^{i\varphi_m}\psi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\varphi_m}e^{i\varphi_n}\psi(\vec{r})$$

$$\underline{\varphi_{n+m} = \varphi_n + \varphi_m + 2k\pi}$$

vyzkoušejme $\quad \varphi_n = \vec{k}\vec{R}_n \quad \vec{k}$ nějaký vektor

$$\underline{\psi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\vec{k}\vec{R}_n}\psi(\vec{r})}$$ první Blochův teorém

Hledejme řešení Schröd. rovnice ve tvaru $\psi(\vec r) = e^{i\vec k \vec r}\, \underbrace{u(\vec r)}_{\text{zatím neznáme}}$

$$e^{i\vec k(\vec r + \vec R_n)}\, u(\vec r + \vec R_n) \overset{\text{úprava}}{=} e^{i\vec k \vec R_n}\, e^{i\vec k \vec r}\, u(\vec r + \vec R_n)$$

ale $\quad$ — " — $\quad = e^{i\vec k \vec R_n}\, \psi(\vec r) = e^{i\vec k \vec R_n}\, e^{i\vec k \vec r}\, u(\vec r)$

$$\underline{u(\vec r + \vec R_n) = u(\vec r)}$$ druhý Blochův teorém

Symetrie energie $\quad \vec E_m(\vec k + \vec b_g) = \vec E_m(\vec k) \longrightarrow$ pásová struktura p.l.

$$\vec b_g = g_1 \vec b_1 + g_2 \vec b_2 + g_3 \vec b_3$$

Symetrie geometrické ... $\underline{\text{krystaly}}$, $D = \varepsilon E \longrightarrow$ hlavní osy $\quad$ optické a elast. vlastnosti mechanické

Symetrie rozložení hustoty ... momenty setrvační · hlavní osy

Symetrické tenzory zdaj diagonalizovat

$$T_{ij} = C_{ijkl}\, \varepsilon_{kl}$$

$i \longleftrightarrow j$ symetrie τ (moment. rovnováha)

$k \longleftrightarrow l$ symetrie ε

$(ij) \longleftrightarrow (kl)$ energie pružná (kvadrat. forma).

$$\psi(\vec r+\vec R_n)=e^{i\vec k\vec R_n}\psi(\vec r)$$
$$\psi(\vec r)=e^{i\vec k\vec r}u(\vec r)$$
$$u(\vec r+\vec R_n)=u(\vec r)$$

BLOCHŮV TEORÉM

translační symetrie mřížky $\quad \vec R_n = n_1\vec a_1+n_2\vec a_2+n_3\vec a_3, \quad n_i\in \mathbb{Z}$

translace o $\vec R_n$ tvoří komutativní grupu $\quad (\vec a_1,\vec a_2,\vec a_3)$ ... báze primitivní buňky

Stacionární Schrödingerova rovnice (neuvažujeme spin) pro jeden elektron

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec r)+V(\vec r)\psi(\vec r)=E\psi(\vec r)$$

periodicita potenciální energie $\quad V(\vec r)=V(\vec r+\vec R_n), \ \vec R_n$ lib.

body $\vec r$, $\vec r+\vec R_n$ se nedají „fyzikálně" odlišit => hustota pravděpodobnosti výskytu el. je v nich stejná,

$$|\psi(\vec r+\vec R_n)|^2=|\psi(\vec r)|^2 \Rightarrow \psi(\vec r) \text{ a } \psi(\vec r+\vec R_n)$$

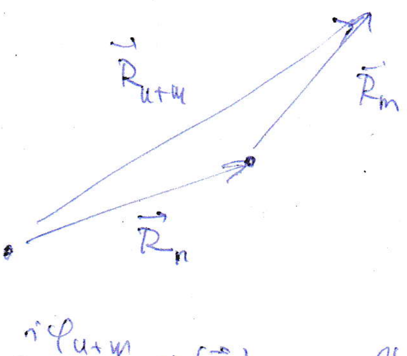
se liší jen fázovým faktorem, jehož modul je 1, tj

$$\psi(\vec r+\vec R_n)=\Phi_n\psi(\vec r), \quad |\Phi_n|^2=1$$

=> Φ_n je komplexní jednotka $\Phi_n=e^{i\varphi_n}$.

Otázka: Co je to φ_n?

Uvažme:



$$\vec R_{n+m}=\vec R_n+\vec R_m$$

$$\psi(\vec r+\vec R_{n+m})=e^{i\varphi_{n+m}}\psi(\vec r), \qquad \psi(\vec r+\vec R_m)=e^{i\varphi_m}\psi(\vec r)$$
$$\psi(\vec r+\vec R_n)=e^{i\varphi_n}\psi(\vec r)$$

$\Uparrow$

$$\psi(\vec r+\vec R_m+\vec R_n)=e^{i\varphi_n}\psi(\vec r+\vec R_m)=e^{i\varphi_n}e^{i\varphi_m}\psi(\vec r) \Rightarrow e^{i\varphi_{n+m}}=e^{i(\varphi_n+\varphi_m)} \Rightarrow$$

$\varphi_{n+m} = \varphi_n + \varphi_m + 2l\pi \qquad l \in Z \Rightarrow \varphi$, zobrazení $n \to \varphi_n$ je lineární

vyzkoušejme $\varphi_n = \vec{k}\vec{R}_n$ $\quad \vec{k}$ ... zatím nějaký vektor

$$\boxed{\psi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\vec{k}\vec{R}_n}\psi(\vec{r})}$$ první Blochův teorém

Je-li $\psi(\vec{r})$ řešení S.R., je také $\psi(\vec{r}+\vec{R}_n)$ řešením

Hledejme řešení S.R ve tvaru $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}u(\vec{r})$, kde funkci $u(\vec{r})$ zatím neznáme. Pak $\psi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\vec{k}(\vec{r}+\vec{R}_n)}u(\vec{r}+\vec{R}_n)$

z prvního Blochova teorému plyne

$$e^{i\vec{k}(\vec{r}+\vec{R}_n)}u(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\vec{k}\vec{R}_n}\cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}u(\vec{r}) \Rightarrow$$

$$\boxed{u(\vec{r}+R_n) = u(\vec{r})}$$

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}u(\vec{r}),\quad u(\vec{r}+\vec{R}_n) = u(\vec{r})}$$ druhý Blochův teorém

Vlnový vektor $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ ... tři kvantová čísla

zbývající kvant. čísla ozn. souhrnně λ

$$\psi_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}),\quad E_{\vec{k},\lambda} = E_\lambda(\vec{k})$$

Reciproká mřížka

$(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ ... báze prim. buňky přímé mřížky
$(\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3)$ ... ... reciproké ...

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_0}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \text{ a cykl.} \qquad V_0 = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$$

jak se na ni přijde:
1) difrakce ... ni jsme měli
2) Bornovy - Kármánovy podmínky (konečný krystal) N_i ... počet buněk ve směru $\vec{a}_i$

$$\psi_{\vec{k},\lambda}(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = e^{i\vec{k} N_i \vec{a}_i} \psi_{\vec{k},\lambda}(\vec{r})$$

Okrajové podmínky: požadujeme $\psi_{\vec{k},\lambda}(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi_{\vec{k},\lambda}(\vec{r})$

$$\Rightarrow \quad e^{i\vec{k} N_i \vec{a}_i} = 1 \quad \Rightarrow N_i \vec{k}\vec{a}_i = 2l_i\pi \quad , l \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 b_2 + k_3 b_3 \Rightarrow \quad N_i (k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 b_3) \vec{a}_i = 2\pi l_i$$

$$i=1 \qquad k_1 N_1 \cdot 2\pi = 2\pi l_1 \Rightarrow k_1 = \frac{l_1}{N_1} \text{ a cykl.}$$

kvantování k

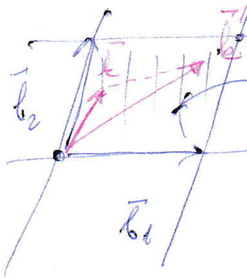
Co se stane při záměně $\vec{k} \to \vec{k} + \vec{b}_g$

Platí $e^{i\vec{b}_g \vec{R}_m} = e^{2\pi i \cdot \text{celé č.}} = 1$

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}_m) = e^{i\vec{k}\vec{R}_m} \psi(\vec{r}) = e^{i(\vec{k} + \vec{b}_g)\vec{R}_m} \psi(\vec{r}), \text{ neboť } e^{i\vec{b}_g \vec{R}_m} =$$

$\Rightarrow$ vektory $\vec{k}$, $\vec{k} + \vec{b}_g$ jsou ekvivalentní $\Rightarrow$ stačilo by brát $\vec{k}$ jen z primitivní buňky reciproké mřížky, ale to nemusí mít bodovou symetrii mřížky. Proto konstruujeme Brillouinovy zóny.

Konstrukce Brillouinovy zóny

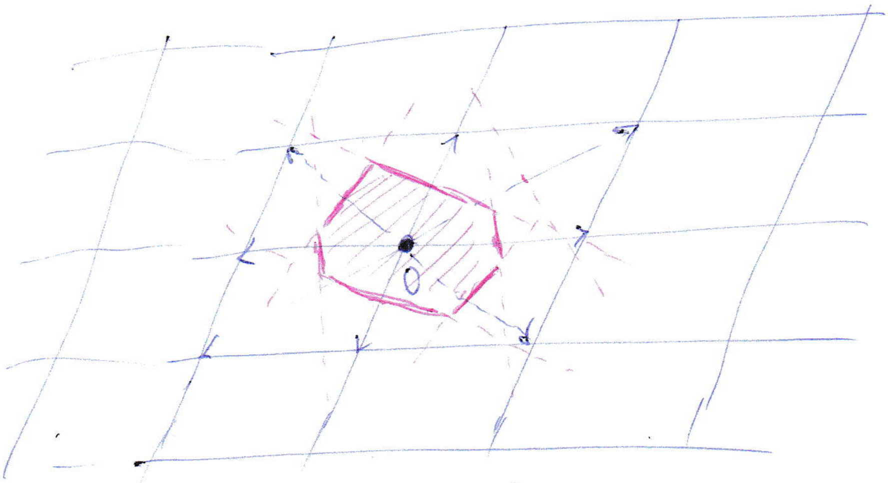


odtud k_j do bodu $\vec k$, ale (stačilo)

buňka nemá bod. symetrii mřížky

Požadujeme $\vec k', \vec k$ uvnitř prim. b.

rec. mříž; půlíme b_j a děláme kolmé roviny.
min. oblast = první BZ



$$\vec k = k_1 \vec b_1 + k_2 \vec b_2 + k_3 \vec b_3$$

$$\vec k \vec a_1 = 2\pi k_1, \quad \vec k \vec a_2 = 2\pi k_2, \quad \vec k \vec a_3 = 2\pi k_3 \qquad -\frac{1}{2} \le k_i < \frac{1}{2}$$

$$-\pi \le \vec k a_i < \pi$$

Kvantování díky KB podmínkám $k_j = \frac{l_j}{N_j}$ $\forall j$. $\quad -\frac{1}{2} \le \frac{l_j}{N_j} < \frac{1}{2}$

předp. N_j sudé

$$l_j = -\frac{N_j}{2}, -\frac{N_j}{2}+1, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, \frac{N_j}{2}-1$$

; Počet bodů $\vec k$ .. $N_1 N_2 N_3$

hustota bodů $\vec k$ .. $\frac{N_1 N_2 N_3}{\text{objem buňky}} = \frac{N_1 N_2 N_3}{|\vec b_1(\vec b_2 \times \vec b_3)|} = \frac{N_1 N_2 N_3 V_0}{8\pi^3}$

Řešení Schrödingerovy rovnice

Uděláme jen pro jednu dimenzi $\psi = \psi(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad \psi = \psi_{k,\lambda}$$

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x), \quad u(x+na) = u(x)$$

$$\psi'(x) = ik\,e^{ikx}u(x) + e^{ikx}u'(x)$$

$$\psi''(x) = -k^2 e^{ikx}u(x) + ik\,e^{ikx}u'(x) + ik\,e^{ikx}u'(x) + e^{ikx}u''(x)$$
$$= e^{ikx}\left[u''(x) + 2iku'(x) - k^2u(x)\right]$$

Rovnice pro $u(x)$

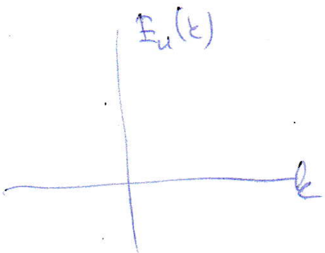
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[u''(x) + 2iku'(x) - k^2u(x)\right] + V(x)u(x) = Eu(x)$$

Pro $\forall\, k \in BZ$ $\left(BZ = \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)\right)$ E ... diskrétní spektrum
$\lambda = n$, spin, ...

číslujem $E_n(k)$, $\psi_{n,k}(x)$, $u_{n,k}(x)$

ekvivalence $\vec{k}$ a $\vec{k} + \vec{b}_g$ $\Rightarrow$ $\boxed{E_n(\vec{k} + \vec{b}_g) = E_n(\vec{k})}$

~~[illegible]~~ V Schröd. rovnici provedeme $k \to \frac{2\pi l}{a} + k$



$E_n(k)$ ... disperzní závislost
$\downarrow$
pás

Symetrie $\quad E(\hat{g}\vec{k}) = E(\vec{k}) \quad$ $\hat{g}$ bodová symetrie

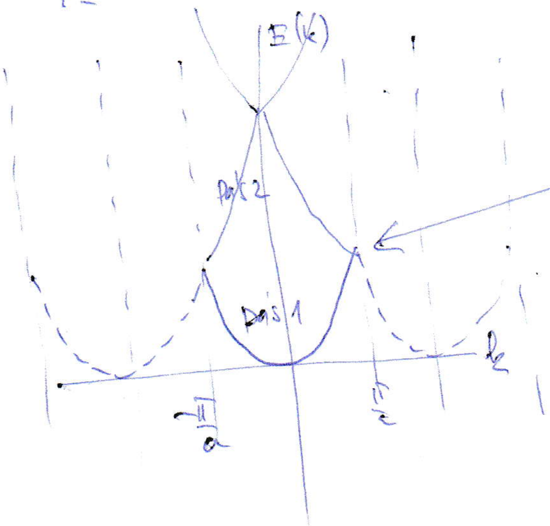
$E(-\vec{k}) = E(\vec{k}) \quad$ je-li inverzní symetrie

Volné elektrony

bereme $V(x) \to 0$ ale zachováme periodicitu $\Rightarrow$ platí všechny dosud získané výsledky

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) \Rightarrow \psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

$$\psi_\pm = e^{\pm ikx} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



téměř volné
zde zakázaný pás