

Po dosadení vzťahu (21) do Blochovej funkcie

$$\psi_{nk_2}(x) = e^{ik_2x} u_{nk_2}(x)$$

dostaneme:

$$\psi_{nk_2}(x) = e^{ik_1x + im \frac{2\pi}{a} x} u_{nk_2}(x) \quad (22)$$

Pri zväčšení argumentu x o a sa lahko presvedčíme o tom, že funkcia (22) sa transformuje podobným spôsobom ako funkcia $\psi_{nk_1}(x)$. Z toho vyplýva, že funkcie ψ_{nk_2} a ψ_{nk_1} opisujú ten istý fyzikálny stav, a preto platí aj

$$E_n(k_1) = E_n(k_2) \quad (23)$$

ak sa k_2 líši od k_1 o celočíselný násobok $2\pi/a$. Elementárna funkcia, ktorá spĺňa vlastnosti (20) a (23) je funkcia $\cos ka$. Vo všeobecnosti môžeme teda písať:

$$E_n(k) = E_n(\cos ka)$$

Ak funkciu $E_n(\cos ka)$ rozložíme do radu podľa mocnín argumentu $\cos ka$ a obmedzíme sa na lineárny člen, dostaneme:

$$E_n(k) = a_n - b_n \cos ka \quad (24)$$

Znamienko mínus pred členom b_n vychádza z predpokladu, že funkcia $E_n(k)$ má pre $k = 0$ minimum. Na záver sa ešte dohodneme, že hodnoty argumentu k budeme uvažovať v intervale $(-\pi/a, +\pi/a)$, tak ako sa to bežne používa v literatúre.

18.6. Efektívna hmotnosť elektrónu. Elektrón v kryštáli vykonáva veľmi komplikovaný pohyb. Pre prenos náboja (vedenie prúdu) alebo energie (vedenie tepla) je potrebné lokálne kmity príp. cirkulácie (v trojrozmernom prípade) vylúčiť a uvažovať iba grupovú rýchlosť elektrónu. Grupová rýchlosť elektrónu je totožná s rýchlosťou pohybu ťažiska vlnovej funkcie. Aby sme získali vzorec pre grupovú rýchlosť elektrónu je nutné vychádzať z úplnej vlnovej funkcie, ktorá obsahuje aj časovú premennú. Tú získame postupom, ktorý je analogický postupu Schrödingera. Schrödinger, na základe predstáv L. de Broglieho o materiálnom vlnení v okolí hmotného bodu, dospel k nasledovnému vyjadreniu úplnej vlnovej funkcie voľného hmotného bodu (čl. 17.10)

$$\Psi = \psi(x) \cdot e^{-2\pi i \nu t} \quad (1)$$

ν môžeme vyjadriť pomocou energie hmotného bodu, ak použijeme vzorec (17.9.2), ktorý má tvar

$$\nu = \frac{mc^2}{h} = \frac{E}{h} \quad (2)$$

Dosadením vzorca (2) do funkcie (1) dostaneme:

$$\Psi = \psi(x) \cdot e^{[-2\pi i E t / \hbar]} \quad (3)$$

Ak platnosť takéhoto tvaru úplnej funkcie zovšeobecníme aj pre prípad silového poľa, ktoré explicitne nezávisí od času, tak úplná vlnová funkcia elektrónu pohybujúceho sa v kryštáli bude mať nasledovný tvar

$$\Psi_{nk} = e^{i(kx - 2\pi E_n(k)t/\hbar)} u_{nk}(x)$$

Ďalší postup bude podobný postupu, ktorý sme použili v čl. 10.5 s tým rozdielom, že nebudeme uvažovať superpozíciu iba dvoch vln, ale budeme uvažovať superpozíciu vln nachádzajúcich sa v úzkom intervale Δk v okolí hodnoty $k = k_0$. Výslednú vlnovú funkciu môžeme písať v tvare

$$\Psi = \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} e^{i(kx - 2\pi E_n(k)t/\hbar)} u_{nk}(x) \cdot dk \quad (4)$$

Pretože ide iba o veľmi úzky interval Δk , môžeme s dostatočnou presnosťou písať:

$$E_n(k) = E_n(k_0) + \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} (k - k_0) \quad (5)$$

a

$$u_{nk}(x) = u_{nk_0} + \frac{du_{nk_0}}{dk_0} (k - k_0) \quad (6)$$

Dosadením vzťahov (5) a (6) do integrálu (4) a po úprave dostaneme:

$$\Psi = \Psi_{nk_0}(x, t) \int_{-\frac{\Delta k}{2}}^{\frac{\Delta k}{2}} e^{i\left(x - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} t/\hbar\right)y} \left(1 + \frac{du_{nk_0}}{dk_0} y\right) \cdot dy \quad (7)$$

kde

$$\Psi_{nk_0}(x, t) = e^{i(k_0 x - 2\pi E_n(k_0)t/\hbar)} u_{nk_0}(x)$$

Integrovanie druhého člena v hranatej zátvorke môžeme voči prvému zanedbať, pretože ak obidva členy po integrovaní rozložíme do potenčného radu podľa mocnín Δk , prvý začína s prvou mocninou, kým druhý začína s druhou mocninou Δk . Po zanedbaní môžeme písať:

$$\Psi = \Psi_{nk_0}(x, t) \int_{-\frac{\Delta k}{2}}^{+\frac{\Delta k}{2}} e^{i\left(x - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} t/\hbar\right)y} \cdot dy =$$

$$= \Psi_{nk_0}(x, t) 2 \frac{\sin \left(x - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} \frac{t}{h} \right) \frac{\Delta y}{2}}{x - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} \frac{t}{h}} \quad (8)$$

Na funkciu Ψ sa môžeme pozerat ako na funkciu $\Psi_{nk_0}(x, t)$, ktorá lokálne osciluje a je modulovaná funkciou

$$\frac{\sin \left(x - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} \frac{t}{h} \right) \frac{\Delta y}{2}}{x - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} \frac{t}{h}} = \frac{\Delta y}{2} \frac{\sin \alpha}{\alpha} \quad (9)$$

kde

$$\left(x - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} \frac{t}{h} \right) \frac{\Delta y}{2} = \alpha$$

Priebeh funkcie $\frac{\sin \alpha}{\alpha}$ je znázornený na obr. 18.3. Z obrázku je vidieť, že funkcia $\frac{\sin \alpha}{\alpha}$ má maximum pre $\alpha = 0$. Na základe tohto poznatku vykonajme nasledovnú úvahu. Nech funkcia (9) má v čase t_1 maximum v bode x_1 . Potom platí:

$$x_1 - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} \frac{t_1}{h} = 0 \quad (10)$$

V čase t_2 bude mať maximum v bode x_2 . Analogicky musí platiť:

$$x_2 - 2\pi \frac{dE_n(k_0)}{dk_0} \frac{t_2}{h} = 0 \quad (11)$$

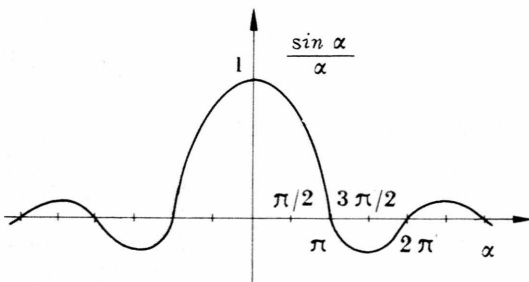
Odčítaním rovníc (10) a (11) a po úprave dostaneme:

$$\frac{x_1 - x_2}{t_1 - t_2} = \frac{2\pi}{h} \frac{dE_n(k_0)}{dk_0}$$

Limitným prechodom, keď $t_2 \rightarrow t_1$, dostaneme rýchlosť pohybu maxima funkcie Ψ , čo je v tomto prípade totožné aj s rýchlosťou ťažiska vlnovej funkcie Ψ . Takto sme dospeli k vzorcu pre grupovú rýchlosť elektrónu v kryštáli ktorého tvar je:

$$v_n = \frac{2\pi}{h} \frac{dE_n(k)}{dk} \quad (12)$$

Ak sa elektrón nachádza v určitom vonkajšom poli vzhľadom na pole kryštálu, tak je urýchľovaný týmto poľom, a jeho zrýchlenie dostaneme



Obr. 18.3.

deriváciou vzorca (12) podľa času. Po vykonaní tejto operácie dostaneme:

$$a_n = \frac{dv_n}{dt} = \frac{2\pi}{h} \frac{d}{dk} \frac{dE_n(k)}{dt}$$

$\frac{dE_n(k)}{dt}$ znamená výkon dodaný elektrónu silovým poľom. Namiesto $\frac{dE_n(k)}{dt}$ môžeme písať $v_n F$, kde F je vonkajšia sila účinkujúca na elektrón. Opätovným použitím vzorca (12) dostaneme:

$$a_n = \frac{2\pi}{h} \frac{d}{dk} v_n F = \frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E_n(k)}{dk^2} F$$

odkiaľ vyplýva:

$$F = \frac{1}{\frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E_n(k)}{dk^2}} a_n \quad (13)$$

Vzorec (13) môžeme interpretovať ako *Newtonov zákon sily*, ak $\frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E_n(k)}{dk^2}$ budeme uvažovať ako recipročnú efektívnu hmotnosť elektrónu v kryštáli. Získali sme dôležitý poznatok, ktorý znie:

Elektrón v kryštáli sa správa voči pôsobeniu vonkajších síl ako častica s efektívnou hmotnosťou

$$m^* = \frac{1}{\frac{4\pi^2}{h^2} \frac{d^2 E_n(k)}{dk^2}} \quad (14)$$

V trojrozmernom kryštáli efektívna hmotnosť elektrónu je tenzorovou veličinou, lebo musí v sebe charakterizovať anizotropné vlastnosti poľa kryštálu.

18.7. Periodické hraničné podmienky. Doteraz sme uvažovali nekonečne dlhý kryštál. V skutočnosti máme do činenia s konečným kryštálom. Uvažujeme kryštál, ktorý má $N + 1$ atómov a dĺžku $L = Na$. Ak takéto kryštály pospájame za sebou, dostaneme nekonečne dlhý kryštál, ktorého vlastnosti sa budú po dĺžkach L opakovať. Všetky výsledky, ku ktorým sme doteraz dospeli, zostanú platné, ak vlnová funkcia $\psi(x)$ bude periodická funkcia s periódou L . Toto tvrdenie vedie k nasledujúcej hraničnej podmienke

$$\psi_{nk}(x) = \psi_{nk}(x + L)$$

alebo

$$e^{ikx} u_{nk}(x) = e^{ikx} \cdot e^{ikNa} u_{nk}(x + L)$$

odkiaľ

$$1 = e^{ikNa}$$