ҚАТТЫ ДЕНЕЛЕРДІҢ АУМАҚТЫҚ ТЕОРИЯСЫ. "ҚАТТЫ ДЕНЕЛЕР ҮШІН ШРЕДИНГЕР ТЕҢДЕУІ."

Орындаған : Тұтқыш М
Тобы : 110-14
Қабылдаған: Налтаев А

Шредингер Эрвин (1887 – 1961) – австрийский физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. Основные работы в области статистической физики, квантовой теории, квантовой механики, общей теории относительности, биофизики.

Разработал теорию движения микрочастиц – волновую механику, построил квантовую теорию возмущений – приближенный метод в квантовой механике. За создание волновой механики удостоен Нобелевской премии.

Общее уравнение Шредингера

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x,y,z,t)\cdot\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$ оператор Лапласа;

$U(x,y,z,t)$ потенциальная функция частицы.

$\Psi(x,y,z,t)$ волновая функция частицы.

ШРЁДИНГЕР, ЭРВИН австрийский физик. Нобелевская премия по физике 1933 (с **П.Дираком**).

Барлық бөлшектердің стационар күйі Шредингер теңдеуімен сипатталады:

$$\widehat{H}\psi = E\psi$$

Бөлшек жүйесінің гамильтонианы:

$$\widehat{H} = \widehat{K} + U$$

Қарастырып отырған қатты дене үшін кинетикалық энергия операторы:

$$\widehat{K} = -(\sum_i \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \sum_k \frac{\hbar^2}{2M_k}\Delta_k)$$

Мұндағы $\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$ бөлшек үшін Лаплас операторы.

Қатты денені құрайтын бөлшек жиынтығының потенциалды энергиясы мынадай екі бөлшектердің өзара әсер энергиясынан шығады: электрондардың электрондармен, ядролардың ядоролармен және электрондардың ядролармен :

$$U = \frac{1}{2}\sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 |r_i - r_j|} + \frac{1}{2}\sum_k \sum_{L \neq k} \frac{Z_k Z_L e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 |R_k - R_L|} -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_i \sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 |r_i - R_k|}$$

Осылайша, Шредингер теңдеуін мына түрде жазамыз:

$$\left[-\left(\sum_i \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \sum_k \frac{\hbar^2}{2M_k}\Delta_k\right) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0\left|r_i - r_j\right|} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\sum_k\sum_{L\neq k}\frac{Z_k Z_L e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0\left|R_k - R_L\right|} - \frac{1}{2}\sum_i\sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0\left|r_i - R_k\right|}\right]\Psi = E\Psi$$

(7.7) теңдікке кіретін толқындық функция барлық бөлшектредің координаттарына байланысты, яғни

$$\Psi = \Psi\left(r_1, r_2, r_3, ..., r_n, R_1, R_2, ..., R_N\right) \qquad (7.8)$$

Ядролардың өзара әсерлесуінің потенциалды энергиясы кейбір тұрақтыға тең болады, яғни

$$\frac{1}{2}\sum_k\sum_{L\neq k}\frac{Z_k Z_L e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0\left|R_k - R_L\right|} = const. \qquad (7.9)$$

Энергияның бастапқы есептеуін таңдай отырып оны нөлге тең деп алуға болады. Осыны ескергенде Шредингер теңдеуі мына түрде жазылады:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \Delta_i + \frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0\left|r_i - r_j\right|} - \frac{1}{2}\sum_i\sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0\left|r_i - R_{0k}\right|}\right]\Psi_e = E_e\Psi_e \quad (7.10)$$

Уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{\hbar^2}(E-E_n)\psi=0$$

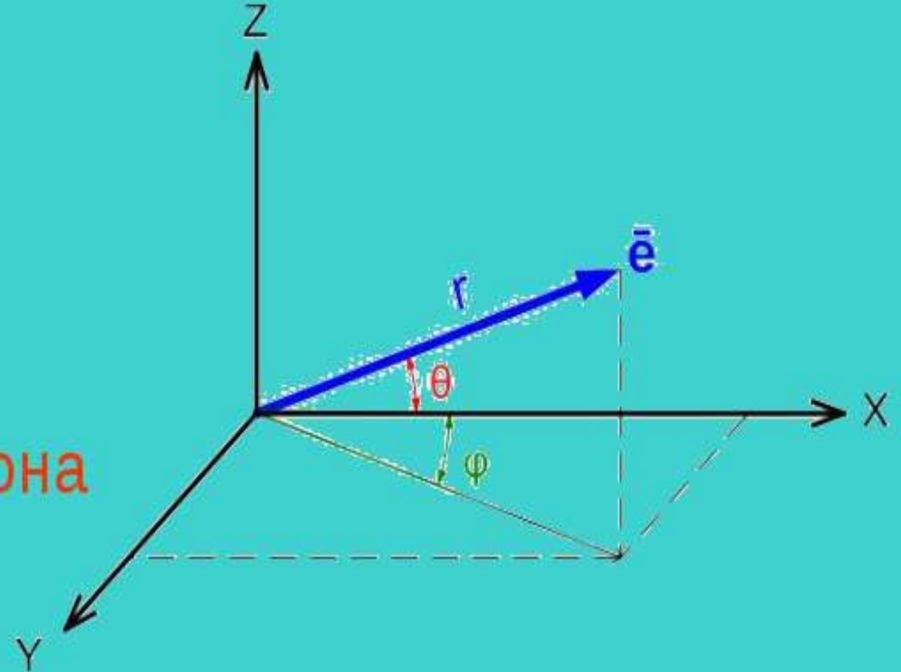
где:

x, y, z – расстояние,

$\hbar$ – постоянная Планка **(6,626×10^{-34} Дж·с);**

m – масса частицы, E и E_n полная и потенциальная энергия частицы

Квадрат модуля функции Ψ определяет вероятность нахождения электрона в пространстве в атоме.



ШРЕДИНГЕР ТЕҢДЕУІ.

Н. Бордың постулаттары қазіргі заманғы атом моделінің негізгі болып табылады. Шредингер теңдеулері және кванттық механика қазіргі кезге дейін қолданылатын атомның моделін құруға мүмкіндік жасады.Микробөлшектердің қасиеттеріндегі корпускалық-толқындық дуализм ($\lambda = \frac{h}{p}$ де-Бройль толқындары) және Гейзенбергтің анықталмағандық принципі ($\Delta x * \Delta p \geq h$) микроәлем нысаналарының қасиеттерін бейнелеуде ықтималдық тәсіл қажетекендігін, сонымен бірге микробөлшектің корпускалық және толқындық қасиеттері жайлы ақпаратты тасымалдаушы екенін және М. Борн бойынша ықтималдылық амплитудасы болып табылатын жаңа толқындық ψ (x, y, z) функциясын енгізу керектігін айқындады.

Бұл пси-функция үшін Шредингер өзінің әйгілі теңдеуін алды.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi$$

немесе

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\;}(E\text{-}U)\psi=0$$

ПСИ-ФУНКЦИЯНЫҢ МАҒЫНАСЫ ҚАНДАЙ?

- Борн бойынша пси-функцияның модулының квадраты dP ықтималдылықты анықтайды

$dP = |\psi^2|\ dV = \psi^* \psi dV,$

Ал,

$\int \psi * \psi dV = 1$ қалыптасу шарты деп аталады.

Шредингер теңдеуі $\nu < C$ жылдамдықпен қозғалатын және энергияның фиксацияланған мәндеріндегі күйлерінде болатын микробөлшектердің толқындық қасиеттерін бейнелей алады. Шредингер теңдеуі релятивистік емес кванттық механиканың негізгі теңдеуі болып табылады.

1926 год

Австрия

Эрвин Шредингер

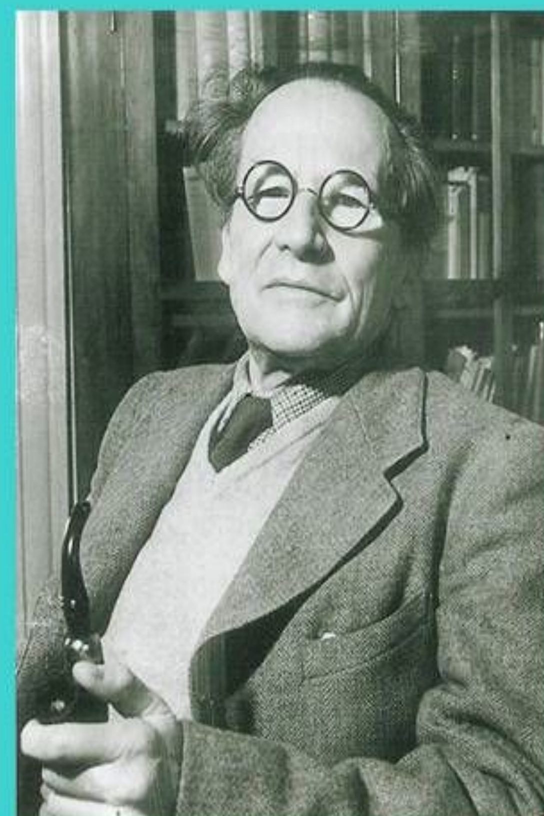
(1887-1961)

Лауреат

нобелевской премии

по физике

(1933)



Уравнение Шредингера

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{\hbar^2}(E-E_n)\psi=0$$

ЕРКІН БӨЛШЕКТІҢ ҚОЗҒАЛЫСЫ ҮШІН ШРЕДИНГЕР ТЕҢДЕУІ.

- Еркін қозғалыстағы бөлшектің бағыты х осіне бағыттас болсын. Сөйтіп осы стационар күйдегі бөлшне үшін Шредингердің теңдеуі:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar}E\Psi=0$$

Осы теңдеудің шешімі мынадай болады;

$$\Psi Be^{-i/\hbar(\sqrt{2mE}\;x}+Ce^{-i/\hbar(\sqrt{2mE}\;x}$$

Олай болса, Шредингердің жалпы түрдегі теңдеуінің шешуі мына түрде :

$$\Psi(x,y,z,\mathrm{t}) = Be^{-i[(\varepsilon/h)t-(\sqrt{2mE}/h)\;x]}+Ce^{-i[(\varepsilon/h)t-(\sqrt{2mE}/h)\;x]}$$

R_{0k} координаттары (7.10) теңдеуге айнымалы түрінде емес, параметр түрінде енеді. Оларды таңдау қатты дененің энегиясына E_e және толқындық функциясына ψ_e әсер етеді:

$$\Psi_e = \Psi_e(r_1, r_2, ..., r_n, R_{01}, R_{02}, ..., R_{0N}). \qquad (7.11)$$

Шредингер теңдеуін (7.10) айтарлықтай қысқартқанмен, оны шешу мүмкін емес. Сондықтан қосымша жуықтауларды қолданады. Олардың бірі валентті аппроксимация деп аталады. Атомның ішкі қабығындағы барлық электрондар ядромен бірге тыныштық күйдегі атомдық қалдықты құрайды деп есептеледі, яғни ионды, және (7.10) жылжымайтын иондардың қорытынды өрісінде қозғалатын валентті электрондар үшін жазылады. Бірақ бұл жағдайда да көп бөлшектердің есебінің шешімін табу керек болады, ал оны шешу мүмкін емес.

БІРЭЛЕКТРОНДЫ ЖУЫҚТАУ.

Көп электронды есеп бір электронды есепке келуі мүмкін. Негізінен бұл үшін Харти – Фок – тың әдісін қолданады. Оның негізгі идеясы (7.10) теңдеуіндегі $\frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{j\neq i}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0\left|r_i - r_j\right|}$ электрондардың өзара әсерлесуінің потенциалды энергиясын $\sum_i \tilde{U}_i(r_i)$ түрдегі потенциалды энегиямен алмастыру болып табылады. Бұл энергия барлық электрондары тәуелсіз қозғалатын эфекктивті өрісі бар і –ші электронның өзара әсер энергиясын көрсетеді. Бұл эффективті өріс барлық қалған электрондардың і –ші электронға әсерін сипаттайды.

Осындай өріс табылды деп есептеп, (7.10) теңдігін мына түрде жазамыз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \Delta_i + \sum_i \tilde{U}_i(r_i) + \sum_i \tilde{U}_i(r_i)\right]\Psi_e = E_e\Psi_e \qquad (7.12)$$

немесе

$$\left\{\sum_i\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \tilde{U}_i(r_i) + U_i(r_i)\right]\right\}\Psi_e = E_e\Psi_e \qquad (7.13)$$

Мұндағы, $U_i(r_i)$ і –ші электронның потенциалды энергиясы (барлық ядролардың өрісіндегі $-\frac{1}{2}\sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 |r_i - R_{ok}|}$). (7.13) – тегі қосынды астында і –ші электронның гамильтонианы тұр $\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \tilde{U}_i(r_i)$ (7.14). Осылайша, Шредингер теңдеуі былай жазылады:

$$\hat{H}\Psi_e = \left(\sum_i \hat{H}_i\right)\Psi_e = E_e\Psi_e \qquad (7.15)$$

Енді гамильтониан электрондардың өзара әсер энергиясына ие болмағандықтан және жеке электрондардың гамильтониан қосындысын сипаттайтындықтан, (7.15) теңдігінің шешімі бір электронды функциялардың туындысы болады:

$$\Psi_e(r_1, r_2, \ldots) = \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)\ldots = \prod \Psi_i(r_i) \qquad (7.16)$$

Әр $\psi_i(r_i)$ функциясы бір электронды Шредингер теңдігін қанағаттандырады

$$\hat{H}_i\Psi_i = E_i\Psi_i \qquad (7.17)$$

бұл жердегі і –ші электронның басқалармен өзара әсері потенциалмен $\tilde{U}_i(r_i)$ сипатталады.

Осылайша эффективті өрісті енгізу көп электронды теңдеуді бір электронды теңдеуге келтіруге мүмкіндік береді. Және де жүйенің энергиясы мынадай болады:

$$E_e = \sum_i E_i \qquad (7.18)$$

Антисимметриялық толқындық функцияны Слэтер анықтауышы түрінде жазады:

$$\Psi_e(q_1, q_2, ..., q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(q_1) & \Psi_1(q_2) & .... & \Psi_1(q_N) \\ \Psi_2(q_1) & \Psi_2(q_2) & .... & \Psi_2(q_N) \\ .... & .... & .... & .... \\ \Psi_N(q_1) & \Psi_N(q_2) & .... & \Psi_N(q_N) \end{vmatrix} \qquad (7.19)$$

(7.19) функциясының антисимметриялық қасиеттері анықтауыш қасиеттерінен шығады.

Енді эффективті өрісті $\tilde{U}_i(r_i)$ таңдау сұрағына қайта ораламыз. Бұл өрісті барлық қалған электрондардың әр электронына келетін орташа әсерді сипаттайтындай етіп таңдау керек. $\tilde{U}_i(r_i)$ анықтау үшін толқындық функцияларды $\psi_i(r_i)$ білу керек. Ал оны тек $\tilde{U}_i(r_i)$ білген кезде ғана табуға болады. Осылайша есептеу өзара келіскен болуы керек. Сондықтан эффективті өрісті көп жағдайда өзара келіскен деп атайды

Кристалдағы электронның потенциалды энергиясын V(r) деп белгілейміз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(r)\right]\Psi(r)=E\Psi(r) \qquad (7.21)$$

Кристалдағы атомдар кеңістікте қатаң периодты түрде орналасқандықтан, кристалдың толық потенциалы V(r) үш өлшемді преиодтылыққа ие болу керек. Периодты потенциалдың V(r) нақты түрі белгісіз, алайда кейбір диэлектриктер мен металдар үшін V(r) мәні сенімді шығады. Қуанышқа орай, теорияның фундаментальді нәтижелерін алу үшін V(r) потенциалының нақты түрін алмауға да болады екен. Тек V(r) потенциалды функция болып табылатынын білсе болды екен. Оның периоды кристалды тордың периодымен сәйкес келеді.

БЛОХ ФУНКЦИЯСЫ.

Функции Блоха

- Ф. Блох (1928) предположил, что потенциал *V*(r) состоит из
  - периодического потенциала атомов без колебаний (фононов)
  - потенциала всех внешних электронов. Предполагается, что он тоже периодический и таким образом грубо учитывает *электрон-электронное взаимодействие*
- Для *одномерной* решетки с периодом a (потенциал $V(x) = V(x+a)$) наложим циклическое граничное условие типа Борна-Кармана, состоящее в том, что *волновая функция повторяется* через *N* атомов

$$\boxed{\psi(x) = \psi(x+Na)}$$

Феликс Блох

Эдвард Парселл

В 1946 году Феликс Блох из Стенфордского университета и Эдвард Парселл из Гарвардского университета независимо друг от друга открыли явление ядерного магнитного резонанса. В 1952 году оба они были удостоены Нобелевской премии по физике «за развитие новых методов для точных ядерных магнитных измерений и связанные с этим открытия».

БЛОХ ФУНКЦИЯСЫ.

Ф.Блох тор периодына ие периодты потенциалы бар бір электронды Шредингер теңдеуінің шешімі болып табылатын толқындық функция тор периодтылығымен бірге кейбір функциямен модулирленген жазық толқын түрінде болатындығын дәлелдеді, яғни

$$\Psi_k(r) = U_k(r)e^{ikr} \qquad (7.22)$$

Мұндағы, $U_k(r)$- k толқындық векторына тәуелді, тор периодына тең кейбір периодты функция.

Кристалдағы электронның потенциалды энергиясының периодтылық шартын жазамыз:

$$V(r) = V(r+n) \qquad (7.23)$$

мұндағы

$$n = n_1 a + n_2 b + n_3 c \qquad (7.24)$$

Трансляциялы симметрия шартынан электронның $\Psi(r)$ толқындық функциясы $\Psi(r+n)$ толқындық функциядан кейбір тұрақты көбейткішпен ажыратылады, яғни

$$\Psi(r+n) = C\Psi(r) \qquad (7.25)$$

Нормировка шарты бойынша $|C|^2 = 1$ болады. (7.26)

(7.26) шартын қанағаттандыруға болады, егер мынаны қойсақ $C = e^{ikn}$ (7.27) . Шынында да, $|C|^2 = |e^{ikn}|^2 = |\cos kn + i\sin kn|^2 = \cos^2 kn + \sin^2 kn = 1$. (7.27) өрнегіндегі k кристалдағы электронның кванттты күйін сипаттайтын толқындық вектор болып табылады.

Экспонента дәрежесінің көрсеткіші өлшемі жоқ шама болу керектігі анық. n ұзындықтың өлшемі болғандықтан, k ұзындыққа қарсы өлшемге ие, яғни см$^{-1}$. k векторының модулін толқындық сан деп атайды. Оның физикалық мағынасы - 2π аралығында орналасқан толқын ұзындығының саны:

$$|k| = k = 2\pi/\lambda \qquad (7.28)$$

(7.27) ескеріп, (7.25) – ті мына түрде жазамыз:

$$\Psi(r+n) = e^{ikn}\Psi(r) \qquad (7.29)$$

немесе

$$\Psi(r) = e^{-ikn}\Psi(r+n) = U_k(r)e^{ikr} \qquad (7.30)$$

Мұнда $U_k(r)$ ретінде мына функция белгіленген

$$U_k(r) = e^{-ikr(r+n)}\Psi(r+n) \qquad (7.31)$$

тор периодымен периодты болады. (7.29) бен (7.31) – ден мынаны аламыз:

$$U_k(r+n') = e^{-ik(r+n+n')}\Psi(r+n+n') = e^{-ik(r+n+n')}e^{ikn'}\Psi(r+n) = e^{-ik(r+n)}\Psi(r+n) = U_k$$

Осылайша, шынынды да, кристалдағы электронның толқындық функциясы жүгіру толқыны L^{ikr} жүгіру толқыны ретінде сипатталады. Ол тор периодына ие және k толқындық векторынан тәуелді $U_k(r)$ периодты функциямен модулирленген. (7.22) өрнегімен анықталатын $\Psi_k(r)$ функциясы Блох функциясы деген атқа ие болды.

k толқындық векторынан электрон энергиясы да тәуелді. Бұл E(k) тәуелділігінің нақты шешімі Шредингер теңдеуін шешу арқылы табуға болады

$$\hat{H}\Psi_k(r) = E(k)\Psi_k(r) \qquad (7.32)$$

E(k) тәуелділігін табу қатты дене физикасының ең маңызды есептерінің бірі болып табылады.

Блох функциясын қарастырған кезде енгізілген k толқындық векторы кристалдың периодты өрісіндегі электрон қозғалысы жайындағы есепте еркін электрондар қозғалысын қарастыратын есептегідей рөл ойнайды. Массасы m электронның еркін қозғалыс күйі энергия E және импульспен p сипатталады. Және де

$$E = p^2/(2m) \qquad (7.33)$$

Бұл электронға ұзындығы

$$\lambda = h/p = h/(m\upsilon) \qquad (7.34)$$

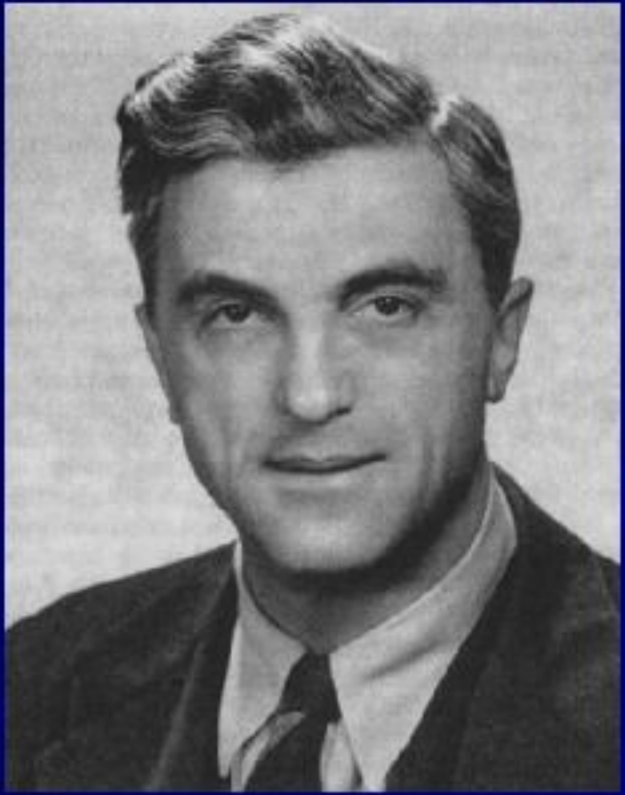
де Бройль толқыны сәйкес келеді. Мұндағы, υ - электрон жылдамдығы. $|k| = 2\pi/\lambda$ екендігін ескеріп, (7.34) – ті мына түрде қайта жазамыз

$$p = \hbar k \qquad (7.35)$$

мұндағы $\hbar = h/2\pi$. Бұл жерден толқындық вектор электрон импульсына пропорционалды екені көрініп тұр.

Лауреаты Нобелевских премий

за открытие ЯМР



Феликс Блох

Эдвард Перселл

Nobel Foundation

Назад к содержанию

Еркін электрон энергиясы k қатынасымен байланысты

$$E = \hbar k^2 / (2m) \qquad (7.36)$$

Егер электронға ешқандай күш әсер етпесе, онда оның энергиясы тұрақты болып қалады (E(k)=const). Бұл k – ның өзгермейтіндігін және импульс p тұрақты болатынын көрсетеді. Негізінен, осы энергия мен импульстің сақталу заңы болып табылады.

Бірақ, Блох функциясына кіретін (7.22) кристалдағы электронға арналып енгізілген k толқындық векторын қолданып, импульсқа аналогты, бірақ уақыт бойынша өзгермейтін сипаттама енгізуге болады:

$$P = \hbar k \qquad (7.37)$$

(7.37) – дегі ћk шамасының шын импульстан өзгешелігі мен сәйкестігін ерекшелеу үшін, бұл шаманы электронның квазиимпульсі деп атайды.

Осылайша, P квазиимпульске кристалды тордың гамильтонианымен коммутация жасайтын $\hat{P}$ деген оператор сәкес келу керек:

$$\hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P} = 0 \qquad (7.38)$$

Сәйкесінше, электрон тордың периодты өрісінде қозғалған кезде, $\hat{P}$ және $\hat{H}$ операторларының өзіндік функциялары бірдей болуы керек, ал олардың өзіндік мәндері арасында анықталған функциональді байланыс болуы керек:

$$E = E(P) \qquad (7.39)$$

Бұл электрон энергиясы квазиимпульстің функциясы болу керектігін көрсетеді.

$\hat{P}$ операторы импульс операторының кәдімгі түрін $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ қабылдай алмайтындығы белгілі. Себебі, ол $\hat{H} = -[\hbar/(2m)]\Delta + V(r)$ торлы гамильтонианмен коммутация жасамайды:

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}\hat{H} - \hat{H}\hat{p}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[i\hbar\nabla\left(\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 - V\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)i\hbar\nabla\right] = -(\nabla V) \quad (7.40)$$

Екінші жағынан, квазиимпульс операторы $\hat{P}$ мен импульс операторы $\hat{p}$ арасында байланыс болу керектігі анық. Тордың потенциалды энергисы тұрақты бір шама болсын делік, яғни $\nabla V \to 0$. Бұл жағдайда квазиимпульс, сәкесінше, импульске айналады.

Квазиимпульс операторын мына түрде алайық

$$\hat{P} = -i\hbar\Delta + i\hbar\hat{g}(r) \qquad (7.41)$$

мұндағы $\hat{g}(r)$ - $\hat{H}$ және $\hat{P}$ коммутациясын қамтамасыз ететін оператор. Яғни, $\nabla V \to 0$ болғанда $\hat{g}(r) \to 0$ болатыны белгілі.

$\hat{g}(r)$ операторын табу үшін мына өрнекті жазамыз:

$$\hat{P}\Psi^k(r) = P\Psi^k(r) \qquad (7.42)$$

оған (7.41) түрдегі $\hat{P}$ қоямыз, ал толқындық функцияны Блох функциясы түрінде жазамыз:

$$\begin{aligned} \hat{P}\Psi_k(r) &= -i\hbar ik\Psi_k(r) + e^{ikr}\left(-i\hbar\nabla U_k(r)\right) + i\hbar\hat{g}\Psi_k(r) = \\ &= \hbar k\Psi_k(r) + i\hbar\left[\hat{g} - \nabla\ln U_k(r)\right]\Psi_k(r) = P\Psi_k(r) \end{aligned} \qquad (7.43)$$

Бұл жерден мынаны жазуға болады:

$$\hat{P} = \hbar k; \hat{g} = \nabla\ln U_k(r) \qquad (7.44)$$

Егер $\nabla V(r) \to 0$, онда Блох функциясындағы $U_k(r)$ кейбір тұрақтыға ұмтылады. Бұл жағдайда $\hat{g} \to 0$ және квазиимпульс оңай кәдімгі импульске айналады.

Бұны көрсету үшін, тордың периодты өрісінде қозғалатын электронның толқындық функциясына қолданылатын, трансляциялы шартты қарастырамыз (7.29):

$$\Psi(r+n) = e^{ikn}\Psi(r)$$

Егер k толқындық векторды k+2πH векторға айналдырса

бұл шарт бұзылмайды. Мұндағы, $H=ha^{*}+kb^{*}+lc^{*}$ - кері тордың векторы.

Шынында да, $e^{i(k+2\pi H)n} = e^{i(kn)}e^{i2\pi(Hn)} = e^{ikn}$ (7.45)

Басқа сөзбен айтқанда, кристалдағы толқындық функция да, электрон энергиясы да периоды 2πH толқындық вертордың k периодты функциясы болып табылады (немесе периоды 2πħH квазиимпульстің P):

$$E(k)=E(k+2\pi H) \qquad (7.46)$$

$$E(P)=E(P+2\pi\hbar H) \qquad (7.47)$$

НАЗАРЛАРЫҢЫЗҒА РАХМЕТ!!!