در نهایت به این دو معادله می‌رسیم:

$$\langle 1|H|1\rangle \psi_1 + \langle 1|H|2\rangle \psi_2 = E\psi_1$$

$$\langle 2|H|1\rangle \psi_1 + \langle 2|H|2\rangle \psi_2 = E\psi_2$$

$\Big\downarrow$ بازنویسی

$$\varepsilon_0 \psi_1 + \gamma \psi_2 = E\psi_1$$

$$\gamma \psi_1 + \varepsilon_0 \psi_2 = E\psi_2$$

$$\longrightarrow \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & \gamma \\ \gamma & \varepsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

مثبت است.

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{1s} - \varepsilon_{cp}$$

γ مقداری منفی است.

$$\Big\downarrow$$

ماتریس هامیلتونی $\mathcal{H}\psi = E\psi$

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & \gamma \\ \gamma & \varepsilon_0 \end{pmatrix}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

حل ماتریس :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 & \gamma \\ \gamma & \varepsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\det \begin{pmatrix} \varepsilon_0 - E & \gamma \\ \gamma & \varepsilon_0 - E \end{pmatrix} = 0 \Longrightarrow (\varepsilon_0 - E)^2 - \gamma^2 = 0$$

دو حل دارد

$$E_{bond} = \varepsilon_0 + \gamma \qquad \psi_{bond} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$E_{anti} = \varepsilon_0 - \gamma \qquad \psi_{anti} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\text{تکلیف : توابع موج } \psi_{bond} \text{ و } \psi_{anti} \text{ را بدست آورید.}}$$

استفاده از توابع بلوخ و شرط تناوب برای نشان دادن کوانتیده بودن k و بدست آوردن $a_{k,n}$

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l}\, |\vec{R}_l\rangle$$

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l}\, e^{-ikx}\, \chi_\nu(x - R_l)$$

$$u_k(x+a) = \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l}\, e^{-ika}\, e^{-ikx}\, \chi_\nu(x + a - R_l) \qquad \chi_\nu(x-(R_l-a))$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N_n}} \sum_{l=1}^{N_n} a_{k,l}\, e^{-ika}\, e^{-ikx}\, \chi_\nu(x - R_{l-1}) \equiv u_k(x)$$

$$a_{k,l} = a_{k,l-1}\, e^{ika} = a_{k,l-2}\, e^{ik2a} \;\vdots\; = a_{k,0}\, e^{ikla}$$

$$a_{k,l}\, e^{-ika} = a_{k,l-1}$$

$$\downarrow$$

$$a_{k,l} = a_{k,0}\, e^{ikla}$$

$$a_{k,0}\, e^{ikla}\, e^{-ika} = a_{k,0}\, e^{ik(l-1)a} \quad ✓$$

- شرط مرزی تناوبی :

$$a_{k,n+N_n} = a_{k,n}$$

$$a_{k,0}\, e^{ik(n+N_n)a} = a_{k,0}\, e^{ikna} \Rightarrow e^{ikN_n a} = 1$$

$$k N_n a = 2\pi m \to \boxed{k = \frac{2\pi m}{N_n a}}$$

صحیح

- بهنجارش تابع موج $\psi_k \longleftarrow a_{k,0} = 1$

$$a_{k,n} = e^{ikR_n} = e^{ikna}$$

تکلیف :
با استفاده از شرط بهنجارش
نشان دهید : $a_{k,0} = 1$