ΜΙΚΡΗ ΕΙΣΑΓΩΓΗ

$|\psi\rangle$ ket

κομψός συμβολισμός

$\langle\phi|$ bra

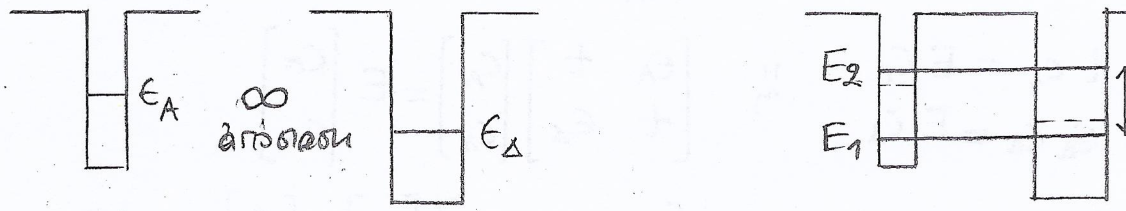
π.χ. $\langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r})$ $\langle\psi|\vec{r}\rangle = \psi(\vec{r})^*$

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int d^3r\, \phi(\vec{r})^* \psi(\vec{r})$$

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \int d^3r\, \phi(\vec{r})^* A(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla})\, \psi(\vec{r})$$

# ΔΙΣΤΑΘΜΙΚΟ ΣΥΣΤΗΜΑ από δύο ΜΟΝΟΣΤΑΘΜΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ






νέες στάθμες συζευγμένων φρεάτων

$\hat{H}_{0A} = \hat{T} + \hat{U}_A$ $\quad$ $\hat{H}_{0\Delta} = \hat{T} + \hat{U}_\Delta$ $\quad$ $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta$

$\hat{H}_{0A}|\psi_A\rangle = \epsilon_A|\psi_A\rangle$ $\quad$ $\hat{H}_{0\Delta}|\psi_\Delta\rangle = \epsilon_\Delta|\psi_\Delta\rangle$ $\quad$ έστω $|\psi\rangle = c_A|\psi_A\rangle + c_\Delta|\psi_\Delta\rangle$

$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ $\Rightarrow$

έστω κανονικοποιημένη $\quad$ έστω κανονικοποιημένη

απομονωμένα φρέατα $\quad$ συζευγμένα φρέατα

$$\left(\hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta\right)\left(c_A|\psi_A\rangle + c_\Delta|\psi_\Delta\rangle\right) = E\left(c_A|\psi_A\rangle + c_\Delta|\psi_\Delta\rangle\right)$$

• επί $\langle\psi_A|$

$$c_A \underbrace{\langle\psi_A|\hat{T}+\hat{U}_A|\psi_A\rangle}_{\epsilon_A} + c_A \underbrace{\langle\psi_A|\hat{U}_\Delta|\psi_A\rangle}_{S_{A\Delta}\ \text{μικρό}} + c_\Delta \underbrace{\langle\psi_A|\hat{T}+\hat{U}_A+\hat{U}_\Delta|\psi_\Delta\rangle}_{t_{A\Delta}}$$

$$= c_A E \underbrace{\langle\psi_A|\psi_A\rangle}_{1} + c_\Delta E \underbrace{\langle\psi_A|\psi_\Delta\rangle}_{r_{A\Delta}\ \text{κάπως μικρό}} \Rightarrow$$

$t_{A\Delta}$: ολοκλήρωμα μεταπηδήσεως (hopping integral)

Σ1 $\boxed{c_A\epsilon_A + c_A S_{A\Delta} + c_\Delta t_{A\Delta} = c_A E + c_\Delta E r_{A\Delta}}$ ή απλούστερα

Σ3 $\boxed{c_A\epsilon_A + c_\Delta t_{A\Delta} = c_A E + c_\Delta E r_{A\Delta}}$ ή ακόμα απλούστερα

Σ5 $\boxed{c_A\epsilon_A + c_\Delta t_{A\Delta} = c_A E}$

• επί $\langle\psi_\Delta|$

$$c_A \underbrace{\langle\psi_\Delta|\hat{T}+\hat{U}_A+\hat{U}_\Delta|\psi_A\rangle}_{t_{\Delta A}} + c_\Delta \underbrace{\langle\psi_\Delta|\hat{T}+\hat{U}_\Delta|\psi_\Delta\rangle}_{\epsilon_\Delta} + c_\Delta \underbrace{\langle\psi_\Delta|\hat{U}_A|\psi_\Delta\rangle}_{S_{\Delta A}\ \text{μικρ}}$$

$$= E c_A \underbrace{\langle\psi_\Delta|\psi_A\rangle}_{r_{\Delta A}\ \text{κάπως μικρό}} + E c_\Delta \underbrace{\langle\psi_\Delta|\psi_\Delta\rangle}_{1} \Rightarrow$$

Σ2 $\boxed{c_A t_{\Delta A} + c_\Delta\epsilon_\Delta + c_\Delta S_{\Delta A} = E c_A r_{\Delta A} + E c_\Delta}$ ή απλούστερα

Σ4 $\boxed{c_A t_{\Delta A} + c_\Delta\epsilon_\Delta = E c_A r_{\Delta A} + E c_\Delta}$ ή ακόμα απλούστερα

Σ6 $\boxed{c_A t_{\Delta A} + c_\Delta\epsilon_\Delta = E c_\Delta}$

Σ5Σ6

$$c_A \epsilon_A + c_\Delta t_{A\Delta} = c_A E$$
$$c_A t_{\Delta A} + c_\Delta \epsilon_\Delta = c_\Delta E$$

$t_{\Delta A} = t_{A\Delta}^{*}$ κι άν είναι πραγματικά

$t_{\Delta A} = t_{A\Delta} := t$

$$\epsilon_A c_A + t\, c_\Delta = E\, c_A$$
$$t\, c_A + \epsilon_\Delta c_\Delta = E\, c_\Delta$$

ή $\begin{bmatrix} \epsilon_A & t \\ t & \epsilon_\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix}$

ή $\begin{bmatrix} \epsilon_A - E & t \\ t & \epsilon_\Delta - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

ιδιοτιμές $\det = 0 \Rightarrow (\epsilon_A - E)(\epsilon_\Delta - E) - t^2 = 0 \Rightarrow E^2 - (\epsilon_A + \epsilon_\Delta)E + \epsilon_A \epsilon_\Delta - t^2 =$

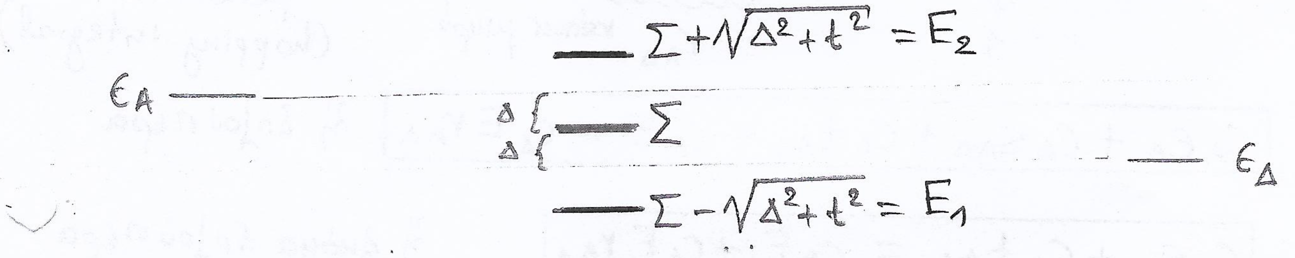
$\Delta' = (\epsilon_A + \epsilon_\Delta)^2 - 4(\epsilon_A \epsilon_\Delta - t^2) = (\epsilon_A - \epsilon_\Delta)^2 + 4t^2$

$$E_{2,1} = \frac{\epsilon_A + \epsilon_\Delta \pm \sqrt{(\epsilon_A - \epsilon_\Delta)^2 + 4t^2}}{2} \Rightarrow E_{2,1} = \frac{\epsilon_A + \epsilon_\Delta}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_A - \epsilon_\Delta}{2}\right)^2 + t^2}$$

$E_{2,1} = \Sigma \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2}$

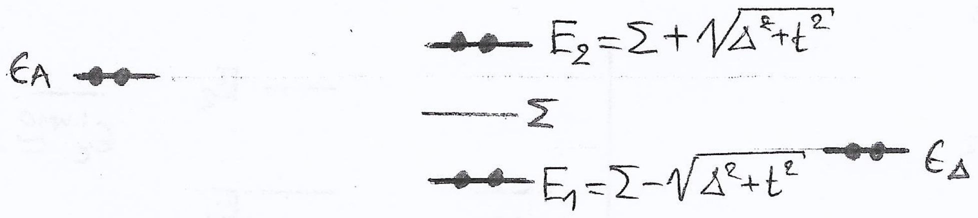
$\Sigma = \dfrac{\epsilon_A + \epsilon_\Delta}{2}$ ημιάθροισμα

$\Delta = \dfrac{\epsilon_A - \epsilon_\Delta}{2}$ ημιδιαφορά

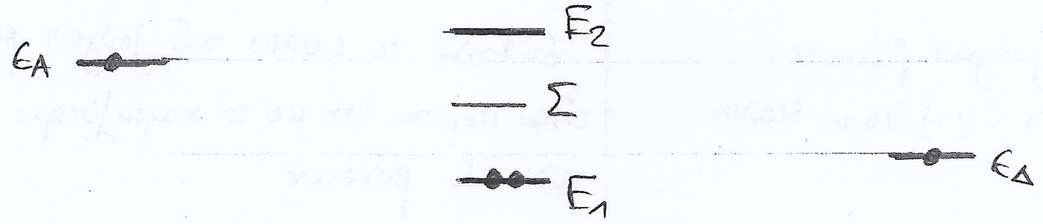



εύρος $= E_2 - E_1 = 2\sqrt{\Delta^2 + t^2}$

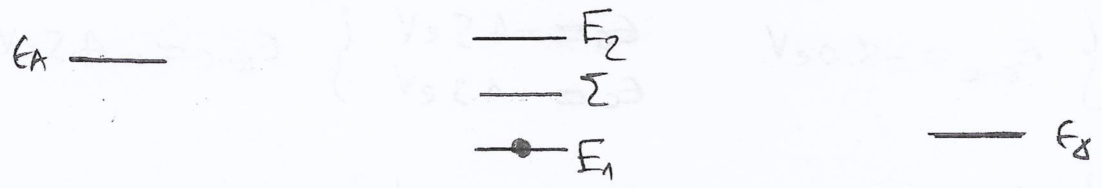
Έστω ότι τα απομονωμένα είχαν από δύο ηλεκτρόνια



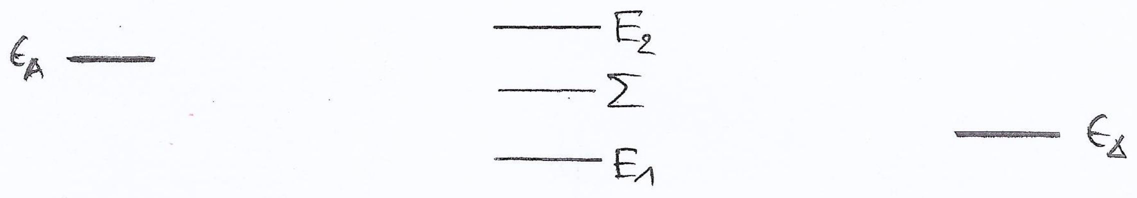

Έστω ότι τα απομονωμένα είχαν από ένα ηλεκτρόνιο




Έστω ότι έχουμε ένα μόνο ηλεκτρόνιο στο ΔΣ




Έστω ότι τα απομονωμένα ήταν άδεια



Αν $t \to 0$ ή πολύ μικρό $\Rightarrow$ $E_{2,1} \approx \frac{\epsilon_A+\epsilon_\Delta}{2} \pm \left|\frac{\epsilon_A-\epsilon_\Delta}{2}\right| = \begin{cases}\epsilon_A \\ \epsilon_\Delta\end{cases}$

όπως μεταξύ βάσεων στο ζεύγος βάσεων ($t \sim 0.01$ eV)

$\epsilon_G^{HOMO} \simeq -8.0\,eV$ — $E_2$

$E_1$ — $\epsilon_C^{HOMO} \simeq -8.8\,eV$

$\Rightarrow E_{G-C}^{HOMO} \simeq -8.0\,eV$

δηλαδή το HOMO του ζεύγους βάσεων είναι περίπου ίσο με το υψηλότερο HOMO των δύο βάσεων

— $E_2$ $\quad$ $\epsilon_C^{LUMO} \simeq -4.3$

$\epsilon_G^{LUMO} \simeq -4.5\,eV$ $\quad$ — $E_1$

$\Rightarrow E_{G-C}^{LUMO} \simeq -4.5\,eV$

δηλαδή το LUMO του ζεύγους βάσεων είναι περίπου ίσο με το χαμηλότερο LUMO των δύο βάσεων

| HOMO (eV) | | LUMO (eV) | |
|---|---|---|---|
| $\epsilon_G = -8.0\,eV$, $\epsilon_C = -8.8\,eV$ | $\epsilon_{G-C} \simeq -8.0\,eV$ | $\epsilon_G = -4.5\,eV$, $\epsilon_C = -4.3\,eV$ | $\epsilon_{G-C} \simeq -4.5\,eV$ |
| $\epsilon_A = -8.3\,eV$, $\epsilon_T = -9.0\,eV$ | $\epsilon_{A-T} \simeq -8.3\,eV$ | $\epsilon_A = -4.4\,eV$, $\epsilon_T = -4.9\,eV$ | $\epsilon_{A-T} \simeq -4.9\,eV$ |

• για $E_1 = \Sigma - \sqrt{\Delta^2+t^2}$ (κάτω στάθμη) Ιδιοανύσματα

$$\begin{bmatrix}\epsilon_A & t\\ t & \epsilon_\Delta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_A\\ c_\Delta\end{bmatrix} = \left(\Sigma-\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)\begin{bmatrix}c_A\\ c_\Delta\end{bmatrix}$$

$$\left.\begin{aligned}&\epsilon_A c_A + t c_\Delta = \left(\Sigma-\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)c_A \Rightarrow t c_\Delta = \left(-\Delta-\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)c_A\\ &t c_A + \epsilon_\Delta c_\Delta = \left(\Sigma-\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)c_\Delta \Rightarrow t c_A = \left(\Delta-\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)c_\Delta\end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

① $c_\Delta = -\dfrac{(\Delta+\sqrt{\Delta^2+t^2})}{t}\,\dfrac{(\Delta-\sqrt{\Delta^2+t^2})}{t}\,c_\Delta \Rightarrow c_\Delta = c_\Delta$ όμοιως $c_A = c_A$

② $c_\Delta = -\dfrac{(\Delta+\sqrt{\Delta^2+t^2})}{t}\,c_A$

$$\vec{V}_1 = c_A\begin{bmatrix}1\\ -\dfrac{\Delta+\sqrt{\Delta^2+t^2}}{t}\end{bmatrix}$$

$$|\vec{V}_1|^2 = 1 \Rightarrow |c_A|^2\left\{1^2 + \frac{(\Delta+\sqrt{\Delta^2+t^2})^2}{t^2}\right\} = 1$$

$$\Rightarrow |c_A|^2\,\frac{t^2+\Delta^2+\Delta^2+t^2+2\Delta\sqrt{\Delta^2+t^2}}{t^2} = 1$$

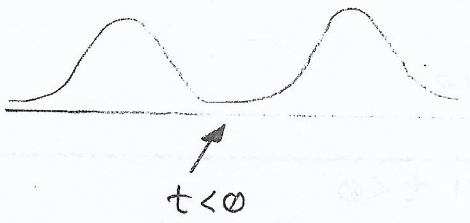
$$\Rightarrow |c_A|^2 = \frac{t^2}{2t^2+2\Delta^2+2\Delta\sqrt{\Delta^2+t^2}}$$

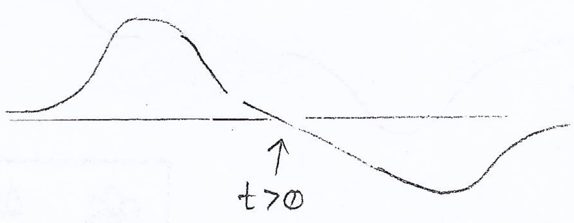
$\Rightarrow$ π.χ. $c_A = \ldots$

---

* Αν $\Delta = 0 \Rightarrow |c_A|^2 = \dfrac{1}{2} \Rightarrow$ π.χ. $c_A = \dfrac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \vec{V}_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -\dfrac{|t|}{t}\end{bmatrix}$

αν $t<0 \Rightarrow \vec{V}_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ αν $t>0 \Rightarrow \vec{V}_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}$




Όμως, η κάτω στάθμη δεν έχει κόμβο, άρα θα πρέπει $t<0$.

• για $E_2 = \Sigma + \sqrt{\Delta^2+t^2}$ (άνω στάθμη)

$$\begin{bmatrix}\epsilon_A & t\\ t & \epsilon_\Delta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_A\\ c_\Delta\end{bmatrix} = \left(\Sigma+\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)\begin{bmatrix}c_A\\ c_\Delta\end{bmatrix}$$

$$\left.\begin{aligned}\epsilon_A c_A + t c_\Delta &= \left(\Sigma+\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)c_A \Rightarrow t c_\Delta = \left(-\Delta+\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)c_A\\ t c_A + \epsilon_\Delta c_\Delta &= \left(\Sigma+\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)c_\Delta \Rightarrow t c_A = \left(\Delta+\sqrt{\Delta^2+t^2}\right)c_\Delta\end{aligned}\right\}\Rightarrow$$

(1) $c_\Delta = \dfrac{(\sqrt{\Delta^2+t^2}-\Delta)}{t}\,\dfrac{(\sqrt{\Delta^2+t^2}+\Delta)}{t}\,c_\Delta \Rightarrow c_\Delta = c_\Delta$ ομοίως $c_A = c_A$

(2) $c_\Delta = \dfrac{(\sqrt{\Delta^2+t^2}-\Delta)}{t}\,c_A$

$$\vec{V}_2 = c_A\begin{bmatrix}1\\ \dfrac{\sqrt{\Delta^2+t^2}-\Delta}{t}\end{bmatrix}$$

$$|\vec{V}_2|^2 = 1 \Rightarrow |c_A|^2\left\{1^2 + \frac{(\sqrt{\Delta^2+t^2}-\Delta)^2}{t^2}\right\} = 1$$

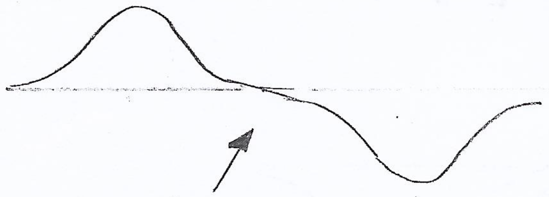
$$\Rightarrow |c_A|^2\left\{\frac{t^2+\Delta^2+t^2+\Delta^2-2\Delta\sqrt{\Delta^2+t^2}}{t^2}\right\} = 1$$

$$\Rightarrow |c_A|^2 = \frac{t^2}{2t^2+2\Delta^2-2\Delta\sqrt{\Delta^2+t^2}}$$

$\Rightarrow$ π.χ. $c_A = \dots$

* Αν $\Delta = 0 \Rightarrow |c_A|^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow$ π.χ. $c_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \vec{V}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ \frac{|t|}{t}\end{bmatrix}$

αν $t<0 \Rightarrow \vec{V}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}$ αν $t>0 \Rightarrow \vec{V}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$



$t<0$

$\uparrow t>0$

Όμως, η άνω στάθμη έχει ένα κόμβο, άρα $t<0$.

ΑΡΑ ΠΡΕΠΕΙ $t<0$
από τους κόμβους των ιδιοανυσμάτων

Επίσης το $t = \langle \psi_A | \hat{H} | \psi_\Delta \rangle$ πρέπει να εκφράζει την έλξη των φρεάτων, τα οποία θα φτιάξουν το συζευγμένο φρέαρ.

$\Rightarrow t<0$

* ΕΙΔΙΚΟΤΕΡΑ για $\epsilon_A = \epsilon_\Delta = \epsilon$

Ιδιοτιμές

$$\left.\begin{array}{l} \Delta = \dfrac{\epsilon_A - \epsilon_\Delta}{2} = 0 \qquad \Sigma = \dfrac{\epsilon_A + \epsilon_\Delta}{2} = \epsilon \end{array}\right\} E_{2,1} = \epsilon \pm |t|$$

εύρος $= E_2 - E_1 = 2|t|$

$\epsilon$ —— $\qquad$ —— $E_2 = \epsilon + |t|$ $\qquad$ —— $\epsilon$

$\qquad\qquad$ —— $E_1 = \epsilon - |t|$

Ιδιοανύσματα ... επανάληψη... είπωθηκαν προ ολίγου

• για $E_1 = \epsilon - |t|$ (κάτω στάθμη)

$$\begin{bmatrix} \epsilon & t \\ t & \epsilon \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = (\epsilon - |t|)\begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} \Rightarrow \left.\begin{array}{l} \cancel{\epsilon c_A} + t c_\Delta = \cancel{\epsilon c_A} - |t| c_A \Rightarrow c_\Delta = -\dfrac{|t|}{t} c_A \\ t c_A + \cancel{\epsilon c_\Delta} = \cancel{\epsilon c_\Delta} - |t| c_\Delta \Rightarrow c_A = -\dfrac{|t|}{t} c_\Delta \\ \dfrac{|t|}{t} = \dfrac{t}{|t|} \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow c_\Delta = -\frac{|t|}{t} c_A \Rightarrow V_1 = \begin{bmatrix} c \\ -\dfrac{|t|}{t} c \end{bmatrix} \qquad |\vec{V}_1|^2 = 1 \Rightarrow |c|^2 + |c|^2 = 1 \Rightarrow |c|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\text{π.χ. } c = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \vec{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -\dfrac{|t|}{t} \end{bmatrix}$$

$$\text{αν } t > 0 \Rightarrow \vec{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \qquad \text{αν } t < 0 \Rightarrow \vec{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

κόμβος

χωρίς κόμβο

Άρα $t < 0$

• για $E_2 = \epsilon + |t|$ (άνω στάθμη)

$$\begin{bmatrix} \epsilon & t \\ t & \epsilon \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = (\epsilon + |t|)\begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} \Rightarrow \left.\begin{array}{l} \cancel{\epsilon c_A} + t c_\Delta = \cancel{\epsilon c_A} + |t| c_A \Rightarrow c_\Delta = \dfrac{|t|}{t} c_A \\ t c_A + \cancel{\epsilon c_\Delta} = \cancel{\epsilon c_\Delta} + |t| c_\Delta \Rightarrow c_A = \dfrac{|t|}{t} c_\Delta \\ \dfrac{|t|}{t} = \dfrac{t}{|t|} \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow c_\Delta = \frac{|t|}{t} c_A \Rightarrow \vec{V}_2 = \begin{bmatrix} c \\ \dfrac{|t|}{t} c \end{bmatrix} \qquad |\vec{V}_2|^2 = 1 \Rightarrow |c|^2 + |c|^2 = 1 \Rightarrow |c|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\text{π.χ. } c = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \vec{V}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ \dfrac{|t|}{t} \end{bmatrix}$$

$$\text{αν } t > 0 \Rightarrow \vec{V}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \text{αν } t < 0 \Rightarrow \vec{V}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

χωρίς κόμβο

κόμβος

Άρα $t < 0$

Σ3Σ4

$$c_A \epsilon_A + c_\Delta t_{A\Delta} = c_A E + c_\Delta E r_{A\Delta}$$
$$c_A t_{\Delta A} + c_\Delta \epsilon_\Delta = E c_A r_{\Delta A} + E c_\Delta$$

$t_{\Delta A} = t_{A\Delta}^*$ , $r_{\Delta A} = r_{A\Delta}^*$ — άν είναι πραγματικά — $t_{\Delta A} = t_{A\Delta} := t$ , $r_{\Delta A} = r_{A\Delta} := r$

$$c_A \epsilon_A + c_\Delta t = c_A E + c_\Delta E r$$
$$c_A t + c_\Delta \epsilon_\Delta = E c_A r + E c_\Delta$$

$$\begin{bmatrix} \epsilon_A - E & t - Er \\ t - Er & \epsilon_\Delta - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

ιδιοτιμές $\det = 0 \Rightarrow (\epsilon_A - E)(\epsilon_\Delta - E) - (t - Er)^2 = 0$ — ιδιοανύσματα ...

$$\underline{E^2} - \underline{(\epsilon_A + \epsilon_\Delta)E} + \epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2 - \underline{E^2 r^2} + \underline{2Etr} = 0$$

$$(1-r^2)E^2 - (\epsilon_A + \epsilon_\Delta - 2tr)E + \epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2 = 0$$

$$\Delta' = (\epsilon_A + \epsilon_\Delta - 2tr)^2 - 4(1-r^2)(\epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2) \quad \text{κλπ...}$$

ΕΙΔΙΚΟΤΕΡΑ για $\epsilon_A = \epsilon_\Delta = \epsilon$

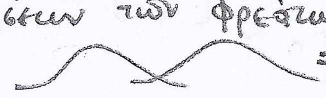
ιδιοτιμές

$$(\epsilon - E)^2 - (t - Er)^2 = 0$$
$$(\epsilon - E + t - Er)(\epsilon - E - t + Er) = 0$$
$$\epsilon + t = E(1+r) \quad \text{ή} \quad \epsilon - t = E(1-r)$$
$$E = \frac{\epsilon + t}{1+r} \quad \text{ή} \quad E = \frac{\epsilon - t}{1-r}$$

άν $t < 0$, $\underline{r > 0}$ $\quad E_2 = \dfrac{\epsilon - t}{1 - r}$ (άνω) $\quad E_1 = \dfrac{\epsilon + t}{1 + r}$ (κάτω)

$r = \langle \psi_A | \psi_\Delta \rangle$

Επικάλυψη των θεμελιωδών κυματο-συναρτήσεων των φρεάτων:

π.χ.  $\Rightarrow r > 0$

$$\begin{bmatrix} \epsilon - E & t - Er \\ t - Er & \epsilon - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\det = 0 \Rightarrow (\epsilon - E)^2 - (t - Er)^2 = 0$$

ιδιοανύσματα $\longrightarrow$ ΕΠΟΜΕΝΗ ΣΕΛΙΔΑ

$$\begin{bmatrix} \epsilon - E & t - Er \\ t - Er & \epsilon - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \begin{aligned} (\epsilon - E) c_A + (t - Er) c_\Delta = 0 \\ (t - Er) c_A + (\epsilon - E) c_\Delta = 0 \end{aligned}$$

- $E = E_1 = \dfrac{\epsilon + t}{1 + r}$

$$\left(\epsilon - \frac{\epsilon + t}{1+r}\right) c_A + \left(t - \frac{\epsilon + t}{1+r} r\right) c_\Delta = 0 \Rightarrow \frac{\cancel{\epsilon} + \epsilon r - \cancel{\epsilon} - t}{1+r} c_A + \frac{t + \cancel{tr} - \epsilon r - \cancel{tr}}{1+r} c_\Delta = 0$$

$$\left(t - \frac{\epsilon + t}{1+r} r\right) c_A + \left(\epsilon - \frac{\epsilon + t}{1+r}\right) c_\Delta = 0 \Rightarrow \frac{t + \cancel{tr} - \epsilon r - \cancel{tr}}{1+r} c_A + \frac{\cancel{\epsilon} + \epsilon r - \cancel{\epsilon} - t}{1+r} c_\Delta = 0$$

$$\left.\begin{aligned} (\epsilon r - t) c_A + (t - \epsilon r) c_\Delta = 0 \quad &\Rightarrow c_\Delta = c_A \\ (t - \epsilon r) c_A + (\epsilon r - t) c_\Delta = 0 \quad &\Rightarrow c_\Delta = c_A \end{aligned}\right\} \Rightarrow c_\Delta = c_A = c$$

$$\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix} \qquad |\vec{v}_1|^2 = 1 \Rightarrow 2|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ π.χ. } \vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

0 κόμβοι

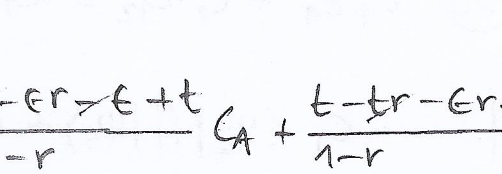
- $E = E_2 = \dfrac{\epsilon - t}{1 - r}$

$$\left(\epsilon - \frac{\epsilon - t}{1-r}\right) c_A + \left(t - \frac{\epsilon - t}{1-r} r\right) c_\Delta = 0 \Rightarrow \frac{\cancel{\epsilon} - \epsilon r - \cancel{\epsilon} + t}{1-r} c_A + \frac{t - \cancel{tr} - \epsilon r + \cancel{tr}}{1-r} c_\Delta = 0$$

$$\left(t - \frac{\epsilon - t}{1-r} r\right) c_A + \left(\epsilon - \frac{\epsilon - t}{1-r}\right) c_\Delta = 0 \Rightarrow \frac{t - \cancel{tr} - \epsilon r + \cancel{tr}}{1-r} c_A + \frac{\cancel{\epsilon} - \epsilon r - \cancel{\epsilon} + t}{1-r} c_\Delta = 0$$

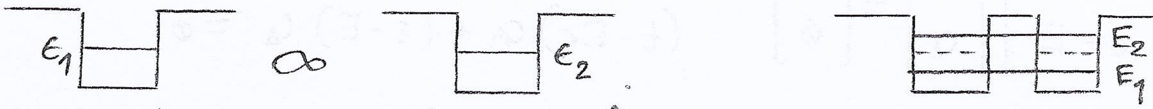
$$\left.\begin{aligned} (t - \epsilon r) c_A + (t - \epsilon r) c_\Delta = 0 \\ (t - \epsilon r) c_A + (t - \epsilon r) c_\Delta = 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow c_\Delta = -c_A = -c$$

$$\vec{v}_2 = \begin{bmatrix} c \\ -c \end{bmatrix} \qquad |\vec{v}_2|^2 = 1 \Rightarrow 2|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ π.χ. } \vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$



1 κόμβος

$N=2$ I




$\hat{H}_1 = \hat{T} + \hat{U}_1$ $\qquad$ $\hat{H}_2 = \hat{T} + \hat{U}_2$ $\qquad$ $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$

$\hat{H}_1|\psi_1\rangle = \epsilon_1|\psi_1\rangle$ $\qquad$ $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$\hat{H} = T + \hat{U}_1 + \hat{U}_2$

$$\hat{H}\left(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle\right) = E\left(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle\right)$$

• $\langle\psi_1|$ $\qquad c_1\langle\psi_1|\hat{H}|\psi_1\rangle + c_2\langle\psi_1|\hat{H}|\psi_2\rangle = c_1 E\langle\psi_1|\psi_1\rangle + c_2 E\langle\psi_1|\psi_2\rangle$

$$c_1\langle\psi_1|\hat{T}+\hat{U}_1|\psi_1\rangle + \underbrace{c_1\langle\psi_1|\hat{U}_2|\psi_1\rangle}_{S_{12}\ \text{μικρό}} + c_2\underbrace{\langle\psi_1|\hat{H}|\psi_2\rangle}_{t_{12}} = c_1 E\langle\psi_1|\psi_1\rangle + c_2 E\underbrace{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}_{r_{12}\ \text{κάπως μικρό}}$$

$$c_1\varepsilon_1 + c_1 S_{12} + c_2 t_{12} = c_1 E\cdot 1 + c_2 E\, r_{12}$$

στην απλούστερη περίπτωση

(Σ5) $\quad c_1\varepsilon_1 + c_2 t_{12} = c_1 E$

• $\langle\psi_2|$ $\qquad c_1\langle\psi_2|\hat{H}|\psi_1\rangle + c_2\langle\psi_2|\hat{H}|\psi_2\rangle = c_1 E\langle\psi_2|\psi_1\rangle + c_2 E\langle\psi_2|\psi_2\rangle$

$$c_1\underbrace{\langle\psi_2|\hat{H}|\psi_1\rangle}_{t_{21}} + c_2\langle\psi_2|\hat{T}+\hat{U}_2|\psi_2\rangle + \underbrace{c_2\langle\psi_2|\hat{U}_1|\psi_2\rangle}_{S_{21}\ \text{μικρό}} = c_1 E\underbrace{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}_{r_{21}\ \text{κάπως μικρό}} + c_2 E\langle\psi_2|\psi_2\rangle$$

$$c_1 t_{21} + c_2\varepsilon_2 + c_2 S_{21} = c_1 E\, r_{21} + c_2 E$$

στην απλούστερη περίπτωση

(Σ6) $\quad c_1 t_{21} + c_2\varepsilon_2 = c_2 E$

$t_{12}^* = t_{21}$ κ για πραγματικά $\quad t_{12} = t_{21} := t$ $\qquad$ $t<0$ από τους κόμβους των ιδιοσυναρτήσεων και επειδή έκφραση σε σχέση των φρεατίων

ας θέσουμε και $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 := \varepsilon$

$$\begin{aligned} c_1\varepsilon + c_2 t &= E c_1 \\ c_1 t + c_2\varepsilon &= E c_2 \end{aligned} \quad \text{ή} \quad \begin{bmatrix}\varepsilon & t\\ t & \varepsilon\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\end{bmatrix} = E\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\end{bmatrix} \quad \text{ή} \quad \begin{bmatrix}\varepsilon - E & t\\ t & \varepsilon - E\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

$\det = 0 \Rightarrow$

$$(\varepsilon-E)^2-t^2=0 \Rightarrow (\varepsilon-E-t)(\varepsilon-E+t)=0 \Rightarrow E_{1,2}=\varepsilon \pm t$$ II

$E_2=\varepsilon-t$

$E_1=\varepsilon+t$

εύρος $=2|t|$

N=3

$$c_1\varepsilon+c_2t=Ec_1$$
$$c_1t+c_2\varepsilon+c_3t=Ec_2$$
$$c_2t+c_3\varepsilon=Ec_3$$

ή $\begin{bmatrix}\varepsilon & t & 0\\ t & \varepsilon & t\\ 0 & t & \varepsilon\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{bmatrix}=E\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{bmatrix}$ ή $\begin{bmatrix}\varepsilon-E & t & 0\\ t & \varepsilon-E & t\\ 0 & t & \varepsilon-E\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$

det = 0

$$(\varepsilon-E)\left[(\varepsilon-E)^2-t^2\right]-t^2(\varepsilon-E)=0 \Rightarrow (\varepsilon-E)^3-2t^2(\varepsilon-E)=0 \Rightarrow$$

$$(\varepsilon-E)=0 \Rightarrow E=\varepsilon$$

ή

$$(\varepsilon-E)^2-2t^2=0 \Rightarrow (\varepsilon-E-\sqrt{2}t)(\varepsilon-E+\sqrt{2}t)=0 \Rightarrow E=\varepsilon\pm\sqrt{2}t$$

$E_3=\varepsilon-\sqrt{2}t$

$E_2=\varepsilon$

$E_1=\varepsilon+\sqrt{2}t$

εύρος $=2\sqrt{2}|t|\simeq 2.83|t|$

N=4

$$c_1\varepsilon+c_2t=Ec_1$$
$$c_1t+c_2\varepsilon+c_3t=Ec_2$$
$$c_2t+c_3\varepsilon+c_4t=Ec_3$$
$$c_3t+c_4\varepsilon=Ec_4$$

ή $\begin{bmatrix}\varepsilon & t & 0 & 0\\ t & \varepsilon & t & 0\\ 0 & t & \varepsilon & t\\ 0 & 0 & t & \varepsilon\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\\c_4\end{bmatrix}=E\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\\c_4\end{bmatrix}$ ή $\begin{bmatrix}\varepsilon-E & t & 0 & 0\\ t & \varepsilon-E & t & 0\\ 0 & t & \varepsilon-E & t\\ 0 & 0 & t & \varepsilon-E\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_1\\c_2\\c_3\\c_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\end{bmatrix}$

det = 0 $\Rightarrow$

$$E_{1,4}=\varepsilon\pm\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}}\,t$$

$$E_{2,3}=\varepsilon\pm\sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}}\,t$$

$E_4=\varepsilon-\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}}\,t$

$E_3=\varepsilon-\sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}}\,t$

$E_2=\varepsilon+\sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}}\,t$

$E_1=\varepsilon+\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}}\,t$

εύρος $=2\sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}}\,|t|$

$\simeq 3.24|t|$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & t \\ t & \varepsilon \end{bmatrix} \quad N=2$$

Στην πραγματικότητα, για $N=2$, $\nexists$ κυκλικό.

III

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & t & t \\ t & \varepsilon & t \\ t & t & \varepsilon \end{bmatrix} \quad N=3$$

Στο κυκλικό ο καθένας αλληλεπιδρά με δύο, ενώ στο μη κυκλικό τα ακραία αλληλεπιδρούν με έναν μόνο.

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & t & 0 & t \\ t & \varepsilon & t & 0 \\ 0 & t & \varepsilon & t \\ t & 0 & t & \varepsilon \end{bmatrix} \quad N=4$$

Γενικός τύπος $E(k) = \varepsilon + 2t\cos(ka)$ (κυκλικό)

$ka = \dfrac{2\pi m}{N}$, $m \in \mathbb{Z}$

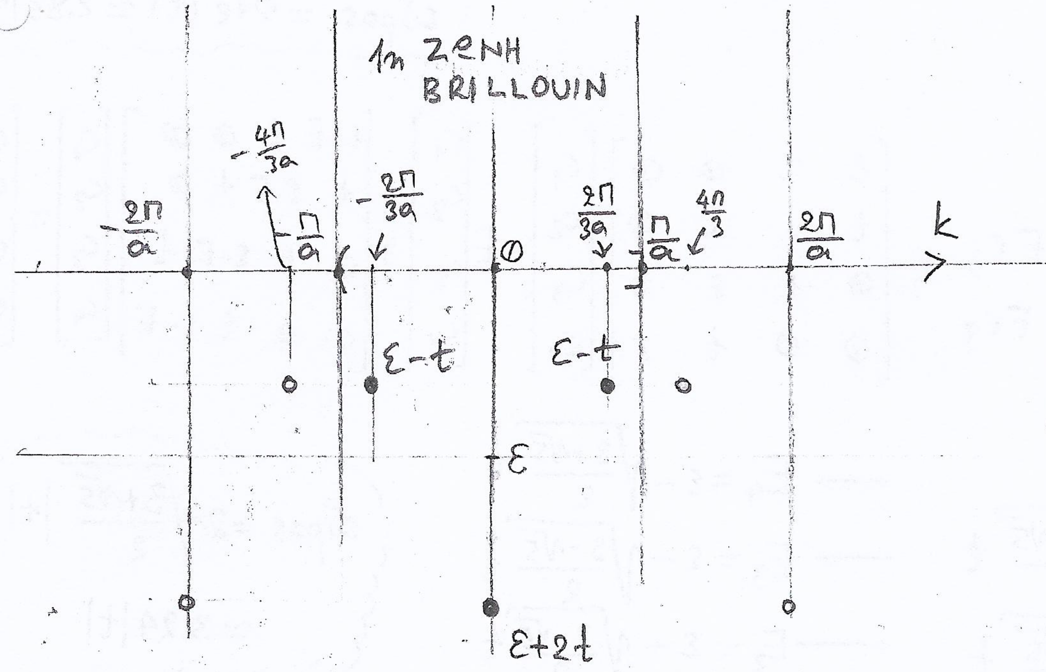
για $N \to \infty$

$\varepsilon + 2t \leq E(k) \leq \varepsilon - 2t$

εύρος $= 4|t|$

$N=3$ $\quad ka = \dfrac{2\pi m}{3}$

| $m$ | $-3$ | $-2$ | $-1$ | $0$ | $1$ | $2$ | $3$ | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $ka$ | $-2\pi$ | $-\frac{4\pi}{3}$ | $-\frac{2\pi}{3}$ | $0$ | $\frac{2\pi}{3}$ | $\frac{4\pi}{3}$ | $2\pi$ | |
| $E$ | $\varepsilon+2t$ | $\varepsilon-t$ | $\varepsilon-t$ | $\varepsilon+2t$ | $\varepsilon-t$ | $\varepsilon-t$ | $\varepsilon+2t$ | ... |




εύρος $= 3|t|$

$\boxed{N=3}$ με άλλο τρόπο

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & t & t \\ t & \varepsilon & t \\ t & t & \varepsilon \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = E\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} \quad \text{ή} \quad \begin{bmatrix} \varepsilon-E & t & t \\ t & \varepsilon-E & t \\ t & t & \varepsilon-E \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\det = 0$$

$$(\varepsilon-E)\left[(\varepsilon-E)^2-t^2\right] - t\left[t(\varepsilon-E)-t^2\right] + t\left[t^2 - t(\varepsilon-E)\right] = 0$$

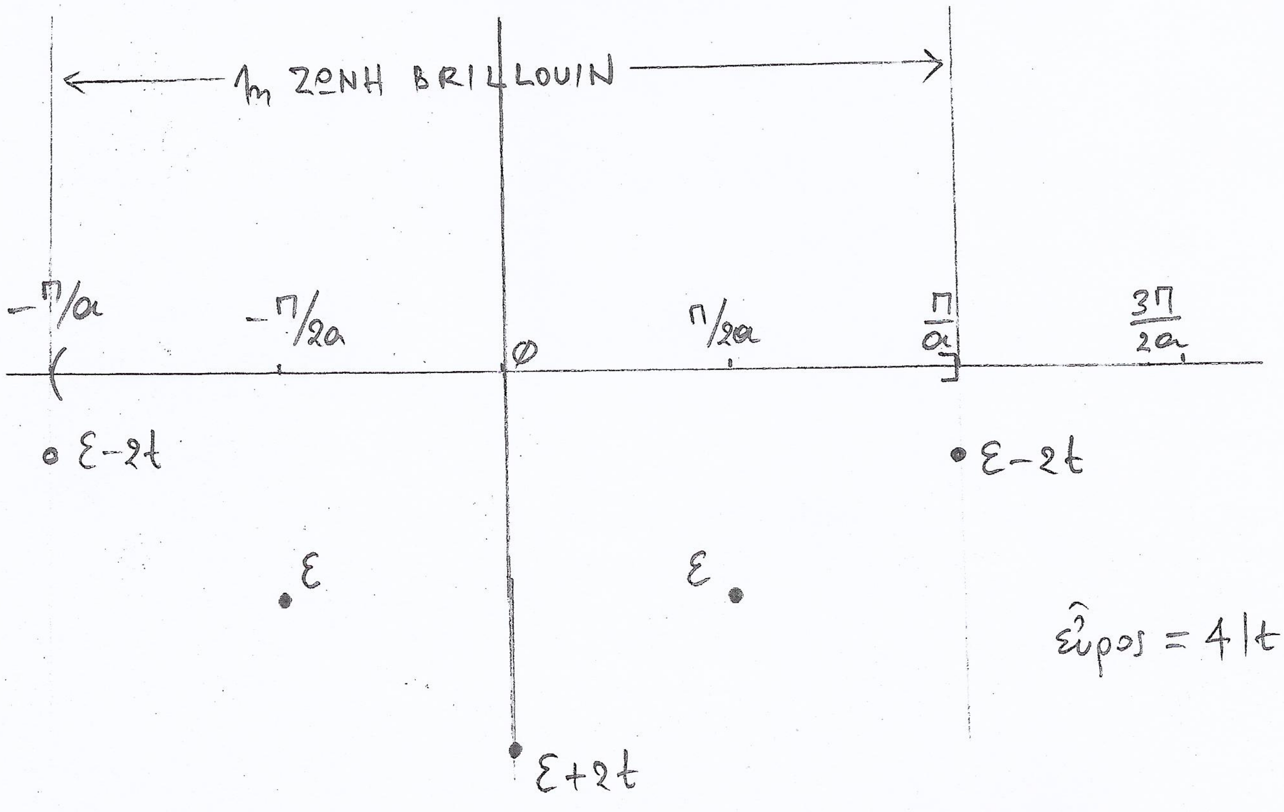
$$(\varepsilon-E)^3 - t^2(\varepsilon-E) - t^2(\varepsilon-E) + t^3 + t^3 - t^2(\varepsilon-E) = 0$$

$$(\varepsilon-E)^3 - 3t^2(\varepsilon-E) + 2t^3 = 0$$

ας διαπιστωθεί ότι οι $E = \varepsilon+2t$ $\quad E = \varepsilon - t$ (δις) είναι λύσεις

$\boxed{N=4}$ $\quad ka = \frac{2\pi m}{4} = \frac{\pi m}{2}, \; m \in \mathbb{Z}$

| m | −2 | −1 | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| ka | $-\pi$ | $-\frac{\pi}{2}$ | 0 | $\frac{\pi}{2}$ | $\pi$ | $\frac{3\pi}{2}$ | $2\pi$ | $\frac{5\pi}{2}$ |
| E | $\varepsilon-2t$ | $\varepsilon$ | $\varepsilon+2t$ | $\varepsilon$ | $\varepsilon-2t$ | $\varepsilon$ | $\varepsilon+2t$ | $\varepsilon$ |



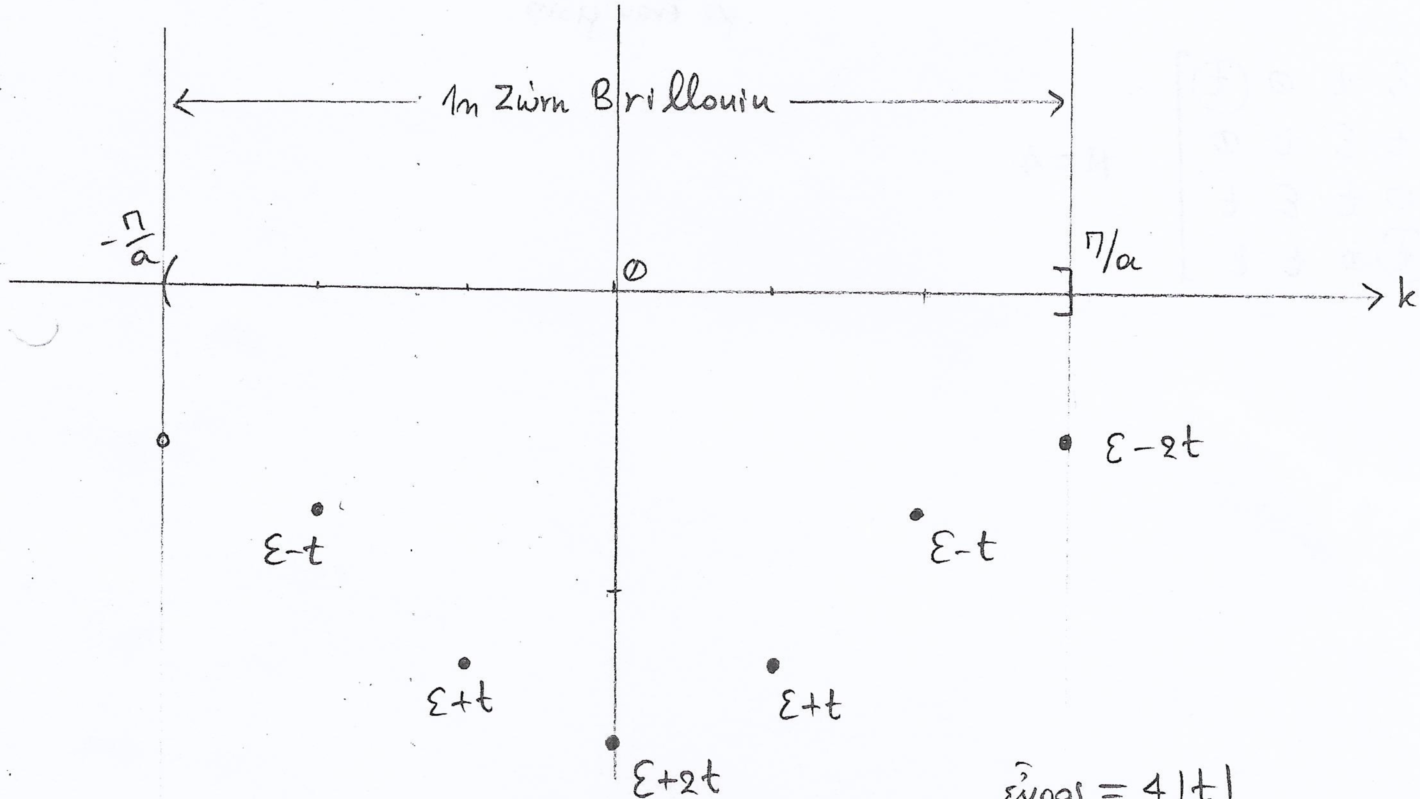

εύρος $= 4|t|$

$N=5$ $\quad ka = \frac{2\pi m}{5}$

| $m$ | $-3$ | $-2$ | $-1$ | $0$ | $1$ | $2$ | $3$ | $4$ | $5$ | $6$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $ka$ | | | | $0$ | $\frac{2\pi}{5}$ | | | | | |
| $E$ | | | | $\varepsilon+2t$ | | | | | | |

$\boxed{N=6}$ $ka = \frac{2\pi m}{6} = \frac{\pi m}{3}$

| $m$ | $-3$ | $-2$ | $-1$ | $0$ | $1$ | $2$ | $3$ | $4$ | $5$ | $6$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $ka$ | $-\pi$ | $-\frac{2\pi}{3}$ | $-\pi/3$ | $0$ | $\pi/3$ | $2\pi/3$ | $\pi$ | $4\pi/3$ | $5\pi/3$ | $2\pi$ |
| $E$ | $\varepsilon-2t$ | $\varepsilon-t$ | $\varepsilon+t$ | $\varepsilon+2t$ | $\varepsilon+t$ | $\varepsilon-t$ | $\varepsilon-2t$ | $\varepsilon-t$ | $\varepsilon+t$ | $\varepsilon+2t$ |




εύρος $= 4|t|$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & t \\ t & \varepsilon \end{bmatrix} \qquad N=2$$

Στην πραγματικότητα, για $N=2$, $\not\exists$ κυκλικό.

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & t & t \\ t & \varepsilon & t \\ t & t & \varepsilon \end{bmatrix} \qquad N=3$$

Στο κυκλικό ο καθένας αλληλεπιδρά με δύο, ενώ στο μη κυκλικό τα ακραία αλληλεπιδρούν με έναν μόνο.

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & t & 0 & t \\ t & \varepsilon & t & 0 \\ 0 & t & \varepsilon & t \\ t & 0 & t & \varepsilon \end{bmatrix} \qquad N=4$$