

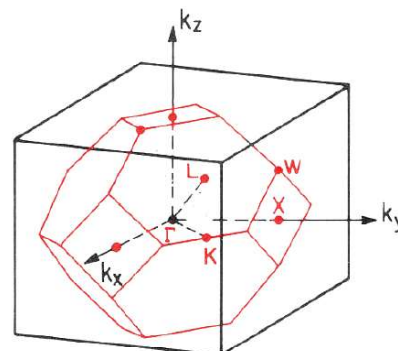
Podstawy fizyki fazy skondensowanej II, ZMiN III rok, ćwiczenia

Zadania na ćwiczenia 27 marca 2019. Michał Rams

14. Strefy Brillouina sieci fcc i bcc oraz rozmiar kuli Fermiego

Proszę znaleźć (np. Kittel) jak wygląda pierwsza strefa Brillouina dla sieci regularnej fcc, oraz dla sieci regularnej bcc. Pierwsza strefa Brillouina to komórka prymitywna Wignera-Seitza w sieci odwrotnej. Jakiej ma rozmiar wyrażony przez stałą kubickiej (centrowanej) sieci rzeczywistej a ?

Rozważmy metal o strukturze sieci rzeczywistej fcc, w którym każdy atom daje α elektronów. Czy cała kula Fermiego mieści się w pierwszej strefie Brillouina? Sprawdź dla $\alpha = 1$ oraz $\alpha = 2$. W tym celu trzeba porównać promień kuli Fermiego z odległością ΓL .



15. strefy Brillouina

Jaka jest 1BZ (pierwsza strefa Brillouina) i 2BZ dla sieci trójkątnej (dwuwymiarowa sieć złożona z trójkątów równobocznych). Jaka jest 1BZ dla sieci typu plaster miodu.

16. Przybliżenie pustej sieci na przykładzie płaszczyzn miedziowo tlenowych w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych

Proszę wytłumaczyć czemu zależności dyspersyjne $\mathcal{E}(\vec{k})$ dla swobodnych elektronów w dwuwymiarowej, kwadratowej sieci wyglądają jak na rysunku obok. Proszę podać wartość \mathcal{E}_0 i np. wzory opisujące przebieg gałęzi dyspersji na odcinku XM.

Wskazówki: I strefa Brillouina jest kwadratem, punkt Γ jest w środku, punkt M w rogu, punkt X na środku ściany tego kwadratu. Wykres pokazuje zależność możliwych energii elektronów mających k gdzieś na odcinkach ΓX , XM oraz $M\Gamma$. Wszystkie zaznaczone wartości energii $\mathcal{E}(k)$ są takie jak dla elektronów swobodnych, tylko wektor k przesuwany jest o różne wektory sieci odwrotnej. Przesunięcia te oznaczone są na wykresie jako np -10 , co oznacza przesunięcie $\delta k_x = -1\frac{\pi}{a}$ i $\delta k_y = 0\frac{\pi}{a}$.

(Rysunek pochodzi z książki C. Poole *et al.*, Superconductivity, Fig. 8.4)

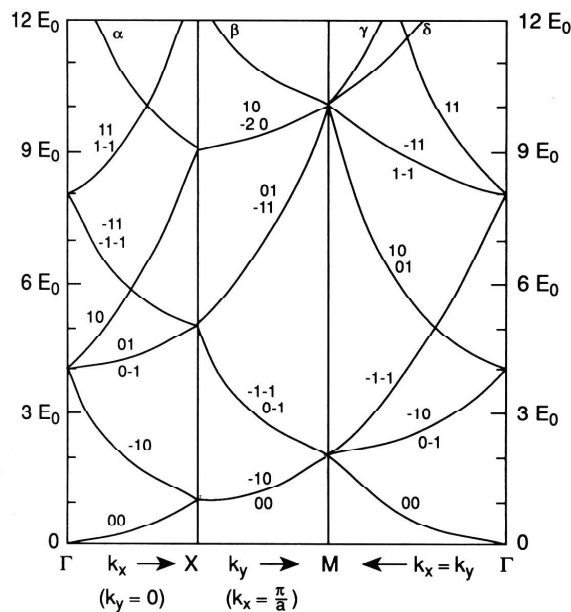


Figure 8.4 Energy bands for the free-electron approximation on a square lattice. The energies are plotted along the three principal directions $\Gamma \rightarrow X$, $X \rightarrow M$ and $M \rightarrow \Gamma$ defined in Fig. 8.3, and the levels are labeled with their (n_x, n_y) values from Eq. (8.7). We see from the figure that the lowest energy band (0,0) is doubly degenerate from X to M . Problem 5 asks for the identity of the four bands labeled α , β , γ , and δ at the top of the figure.

Podstawy fizyki fazy skondensowanej II, ZMiN III rok, ćwiczenia

Zadania na ćwiczenia 3 kwietnia 2019. Michał Rams

17. Twierdzenie Blocha

Znajdź na wikipedii dowód tego twierdzenia, krótszy niż był na wykładzie. Dobra jest wersja angielska https://en.wikipedia.org/wiki/Bloch_wave

18. Metoda Ritza

Jednym ze sposobów przybliżonego rozwiązywania równania Schrödingera jest metoda wariacyjna, która mówi, że dla dowolnej próbnej funkcji falowej $|\Psi\rangle$ wartość średnia \mathcal{E} hamiltonianu jest większa lub równa od energii stanu podstawowego \mathcal{E}_0

$$\mathcal{E} = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq \mathcal{E}_0.$$

Dzielenie przez $\langle \Psi | \Psi \rangle$ ma uniezależnić wynik od normalizacji $|\Psi\rangle$. Optymalizując funkcję $|\Psi\rangle$ można szukać dobrych przybliżeń \mathcal{E}_0 . Odmianą metody wariacyjnej jest metoda Ritza, w której funkcja próbna $|\Psi\rangle$ jest kombinacją liniową innych, ustalonych funkcji $|\phi_n\rangle$ z dowolnymi współczynnikami α_n :

$$|\Psi\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle. \quad (1)$$

Pokaż, że szukanie minimum \mathcal{E} ze względu na współczynniki α_n (wszystkie) prowadzi do równania

$$\sum_m H_{nm} \alpha_m = \mathcal{E} \alpha_n, \quad \text{gdzie} \quad H_{nm} = \langle \phi_n | \mathcal{H} | \phi_m \rangle. \quad (2)$$

Dla uproszczenia załóż, że $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$.

Wskazówka: https://en.wikipedia.org/wiki/Ritz_method

Podstawy fizyki fazy skondensowanej II, ZMiN III rok, ćwiczenia

Zadania na ćwiczenia 10 kwietnia 2019. Michał Rams

19. Pasma elektronowe dla słabego potencjału

Elektrony o masie m poruszają się w jednym wymiarze, w periodycznym potencjale o okresie a :

$$V(x) = V_0 \cos(2\pi x/a).$$

Przy jakich założeniach może być zastosowany model prawie swobodnych elektronów? Zakładając, że warunki te są spełnione, narysuj trzy najniższe pasma energetyczne w pierwszej strefie Brillouina. Wylicz (z dokładnością do liniowego wyrazu w V_0) wartość przerwy energetycznej dla punktu $k = \pi/a$ (pomiędzy pierwszym i drugim pasmem) oraz dla $k = 0$ (pomiędzy drugim i trzecim pasmem). Można to policzyć na kilka sposobów:

- jako

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{E} &= \langle\psi_+|H|\psi_+\rangle - \langle\psi_-|H|\psi_-\rangle \\ &= \langle\psi_+|V|\psi_+\rangle - \langle\psi_-|V|\psi_-\rangle,\end{aligned}$$

gdzie funkcje ψ_+ oraz ψ_- są kombinacjami liniowymi fal płaskich (c jest normalizacją)

$$\psi_{\pm} = c \exp(i\frac{\pi x}{a}) \pm c \exp(-i\frac{\pi x}{a})$$

Czemu postać funkcji ψ_{\pm} jest akurat taka? (Patrz podręcznik Ashcroft-Mermin lub Kittel)

- licząc współczynniki rozwinięcia potencjału $V(x)$ na szereg Fouriera

$$V_G = \frac{1}{a} \int_0^a V(x) \exp(-iGx) dx$$

- Wyniki można sprawdzić numerycznie np. korzystając ze strony <http://lamp.tu-graz.ac.at/~hadley/ss1/bloch/bloch.php>

Ewentualne pytania do dyskusji: dlaczego gęstość stanów wyliczona numerycznie ma osobliwości?

Dobry to prób potencjał: $-1/(\text{abs}(x/a-0.5)+0.01)$

20. Własności funkcji falowej w przybliżeniu ciasnego wiązania

Pokazać, że kombinacja liniowa orbitali atomowych

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \exp(i\vec{k}\vec{R})\varphi(\vec{r} - \vec{R})$$

jest stanem Blocha, tzn. że po przedstawieniu jej w postaci

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

funkcja $u(\vec{r})$ jest okresowa. Suma przebiega przez wszystkie wektory sieci rzeczywistej \vec{R} , a $\varphi(\vec{r} - \vec{R})$ jest orbitalem atomowym wokół węzła sieci \vec{R} .