

## DOMÁCE ÚLOHY 02

Teória kondenzovaných látok  
UFV/TKL1/99 prednášajúci Martin Gmitra  
Zimný semester 2024, miestnosť KNKTFA

1. Očakávaná hodnota rýchlosti Blochovho stavu,  $\psi_{nk}(x) = u_{nk}(x)\exp(ikx)$ , ktorý rieši problém vlastných hodnôt, Schrödingerovú rovnicu,  $H\psi_{nk}(x) = \varepsilon_{nk}\psi_{nk}(x)$ , je daná vzťahom

$$v_{nk} = \frac{1}{i\hbar} \int dx \psi_{nk}^*(x)[x, H]\psi_{nk}(x) = \frac{\partial \varepsilon_{nk}}{\partial \hbar k}$$

a) [3 body] využitím skutočnosti, že  $\psi_{nk}$  je vlastným stavom  $H$  a že  $H$  je hermitovský operátor, môžeme napísať

$$v_{nk} = \frac{1}{i\hbar} \int dx \psi_{nk}^*(x)(xH - Hx)\psi_{nk}(x) = \frac{1}{i\hbar} \varepsilon_{nk} \int dx \psi_{nk}^* x \psi_{nk} - \frac{1}{i\hbar} \varepsilon_{nk} \int dx \psi_{nk}^* x \psi_{nk} = 0$$

Rýchlosť je vo všeobecnosti nenulová. V čom je problém vo vyššie uvedenom odvodení?

b) [1 bod] Použitím Blochovho stavu  $\psi_{nk}(x) = u_{nk}(x)\exp(ikx)$  a Schrödingerovej rovnice pre periodický potenciál  $U(x)$  ukážte, že problém vlastných hodnôt môže byť prepísaný do tvaru

$$H(k)u_{nk}(x) = \varepsilon_{nk}u_{nk}(x) \text{ kde } H(k) = \frac{\hbar^2}{2m}(-i\nabla + k)^2 + U(x).$$

2. Uvažujte systém voľných elektrónov na monoatomárnej štvorcovej (dvojrôzmernej) mriežke s mriežkovými vektormi  $\mathbf{a}_1 = a\hat{x}$ ,  $\mathbf{a}_2 = a\hat{y}$  pozdĺž čiar s vysokou symetriou spajajúcich body v reciprokom priestore

$$\Gamma = (0, 0), \mathbf{X} = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{2}, 0 \right) \text{ and } \mathbf{M} = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right).$$

a) [4 body] Vypočítajte pásovu štruktúru pomocou počítačového prostredia alebo napíšte počítačový program pre každý vektor  $k$  pozdĺž čiar s vysokou symetriou použijúc

$\varepsilon_{n,\mathbf{k}}^0 = \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} + \mathbf{G}_n)^2$ , kde  $\mathbf{G}_n = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2$ ,  $m_1$  a  $m_2$  sú celé čísla. Pri výpočtoch použite recipročné mriežkové vektory, ktoré spĺňajú podmienku  $|\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^0| < \varepsilon_{\text{cutoff}}$ , kde maximálna hodnota pre redukovanú energiu  $\varepsilon_{n,\mathbf{k}}$  vyjadrenú v relatívnych jednotkách

$\varepsilon_{n,\mathbf{k}} = \varepsilon_{n,\mathbf{k}} / \left( \frac{\hbar^2}{2ma^2} \right)$  je menšia ako 100.

b) [1 bod] Identifikujte degeneráciu pásov (napíšte čísla, stupeň degenerácie do obrázka).

c) [1 bod] Odvodte výraz pre Fermiho vlnový vektor a Fermiho energiu.

d) [2 extra body] Nakreslite Fermiho kontúry (Fermiho plochy) pre prípad s jedným a dvoma vodivostnými elektrónmi.

3. [2 extra body] Použitím Greenovho teorému pre periodické funkcie (pozri Appendix I v knihe Ashcroft a Mermin) s dokážte, že

$$\int dx u_{nk}^*(x) H(k) \frac{\partial u_{nk}(x)}{\partial k} = N \int_{\text{cell}} dx u_{nk}^*(x) H(k) \frac{\partial u_{nk}(x)}{\partial k} = \varepsilon_{nk} \int dx u_{nk}^*(x) \frac{\partial u_{nk}(x)}{\partial k}$$

kde  $N$  je celkový počet jednotkových buniek.

4. [4 extra body] Zovšeobecnite dôkaz a vypočítajte maticový element operátora rýchlosti

$$v_{n,n'}(k) = \frac{1}{i\hbar} \int dx \psi_{nk}^*(x)[x, H]\psi_{n'k}(x) = \frac{\partial \varepsilon_{nk}}{\partial \hbar k} \delta_{n,n'} + \frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k})A_{n,n'}(k)$$

kde nediagonálne elementy sú dané  $A_{n,n'}(k) = i \int dx u_{nk}^*(x) \frac{\partial u_{n'k}(x)}{\partial k} = i \langle u_{nk} | \nabla u_{n'k} \rangle$ .

Diagonálne elementy  $A_{n,n}(k) = i \langle u_{nk} | \nabla u_{nk} \rangle$  neprispievajú k Blochovej rýchlosti a nazývajú sa Berryho konektivita, ktorá prispieva k anomálnej rýchlosti keď Blochovské elektróny sú vystavené vplyvu vonkajších polí.

5. [2 extra body] Dokážte Hellmannov-Feynmanov teorém, ktorý hovorí, že

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle n(\lambda) | \frac{\partial H(\lambda)}{\partial \lambda} | n(\lambda) \rangle$$

Využite skutočnosť, že norma vlastnej funkcie je jednotka a  $(\partial/\partial \lambda) \langle n(\lambda) | n(\lambda) \rangle = 0$ .

**DOMÁCE ÚLOHY 02**  
Teória kondenzovaných látok  
UFV/TKL1/99 prednášajúci Martin Gmitra  
Zimný semester 2024, miestnosť KNKTFA

