

DOMÁCE ÚLOHY 03
 Teória kondenzovaných látok
 UFV/TKL1/99 prednášajúci Martin Gmitra
 Zimný semester 2024, miestnosť KNKTFA

- [2 body] Odvodte hustotu stavov pre plyn voľných elektrónov v jednej, dvoch a troch rozmeroch.
- [3 body] Fermiho polomer alebo Fermiho vlnový vektor Fermiho sféry pre model voľných elektrónov pre jednoduchú kubickú mriežku s mriežkovou konštantou a je

$$k_F = \left(\frac{\pi}{a}\right) \left(\frac{3z}{\pi}\right)^{1/3}. \text{ Nájďte Fermiho vlnový vektor pre}$$

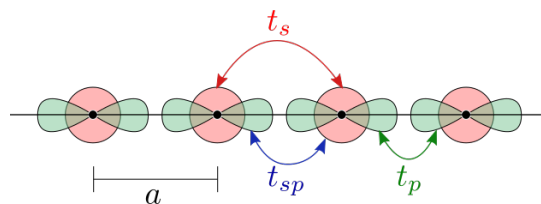
- priestorovo centrovanej kubický kryštál
 - plošne centrovanej kubický kryštál
 - hexagonálnu štruktúru s tesným usporiadaním
- [1 bod] Pre model tesnej väzby Blochov stav aproximujeme v tvare

$$\varphi_{\mathbf{k}li}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}'} \phi_l(\mathbf{r} - \mathbf{t}_i - \mathbf{R}')$$

ukážte, že

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}mj} | \hat{H} | \varphi_{\mathbf{k}li} \rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{t}_j) | \hat{H} | \phi_l(\mathbf{r} - \mathbf{t}_i - \mathbf{R}) \rangle$$

- [2 body] Vypočítajte hustotu stavov $g(\epsilon)$ pre jednorozmernú lineárnu mriežku s disperziou $\epsilon(k) = \epsilon_0 + 2t \cos(ka)$, kde a mriežková konštantá, t je parameter preskoku a ϵ_0 is the on-site orbital energy. Otestujte, že výsledok v tvare $\int g(\epsilon) d\epsilon = 1$ zodpovedá jednému elektrónu na uzol.
- Uvažujte jednorozmernú lineárnu reťazku s jedným atómom a s dvoma orbitálmi, s a p orbitálmi, a s preskovými integrálmi t_s , t_p a t_{sp} medzi najbližšími susednými $s - s$ orbitálmi, $p - p$ orbitálmi a $s - p$ orbitálmi, ako znázorňuje obrázok nižšie. Pre s a p orbitály uvažujte energie na uzloch ϵ_s a ϵ_p .



- [2 body] Vypočítajte elektrónovú disperziu energie v prvej Brillouinovej zóne.
 - [1 extra bod] Nakreslite pásy pre $\epsilon_s = -2$, $\epsilon_p = 0.5$, $t_s = -0.8$, $t_p = 1.0$, a $t_{sp} = 0$.
 - [1 extra bod] Nakreslite pásy ako v úlohe b) ale pre $t_{sp} = 0.2$ a diskutujte rozdiel.
- Uvažujte štvorcovú mriežku s mriežkovými vektormi $\mathbf{a}_1 = a\hat{x}$, $\mathbf{a}_2 = a\hat{y}$, a dvoma atómami s -orbitálmi v jednotkovej bunke dané sprievodičmi $\mathbf{t}_1 = (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/4$ a $\mathbf{t}_2 = 3(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/4$.
 - [4 extra body] Vypočítajte v aproximácii tesnej väzby disperzie energie uvažujúc $\epsilon_s = 0$, ortogonálnu bázu (bez overlapov) a preskovým integrálom t len medzi najbližšími susedmi.
 - [2 extra body] Nakreslite disperziu medzi bodmi $\mathbf{X} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, 0\right)$, $\mathbf{\Gamma} = (0, 0)$, a

$$\mathbf{M} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$
 - [2 extra points] Vypočítajte rýchlosti Blochových elektrónov.

DOMÁCE ÚLOHY 03
Teória kondenzovaných látok
UFV/TKL1/99 prednášajúci Martin Gmitra
Zimný semester 2024, miestnosť KNKTFA

