# DOMÁCE ÚLOHY 04

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

1. [1 *point*] Ukážte, že maticový element operátora hybnosti $\mathbf{p}$ v báze Blochových stavov je $\mathbf{p}_{nn'} = \hbar\mathbf{k}\delta_{nn'} + \mathbf{p}^u_{nn'}$, kde $\mathbf{p}^u_{nn'} = \langle u_n| - i\hbar\nabla|u_{n'}\rangle$.

2. [1 *point*] Ukážte, že $\langle u_{n,\mathbf{k}_0}|H'|u_{n,\mathbf{k}_0}\rangle = 0$ pre $\mathbf{k}_0 = 0$, kde perturbácia $H' = \dfrac{\hbar}{m}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k}_0)$ a $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ je periodická časť Blochovej funkcie.

3. [*2 points*] Vieme, že Schrödingerová rovnica pre periodický potentiál $U(\mathbf{r})$ môže byť napísanáv tvare $H(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ kde $H(\mathbf{k}) = \dfrac{\hbar^2}{2m}(-i\nabla+\mathbf{k})^2 + U(\mathbf{r})$. Predpokladajme, že poznáte energie Blochových stavov v bode $\mathbf{k} = 0$, ktoré sú riešením $H(0)u_{n0}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n0}u_{n0}(\mathbf{r})$. Keďže $u_{n0}(\mathbf{r})$ tvorí úplnu bázu funkcií periodických s mriežkou, môžeme rozvinúť $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{nn'}(\mathbf{k})u_{n'0}(\mathbf{r})$. Formulujte problém vlastných hodnôt pre koeficienty $c_{nn'}(\mathbf{k})$, tak že nájdete maticové elementy Hamiltoniánu $H(\mathbf{k})_{nn'} = \langle u_{n0}|H(\mathbf{k})|u_{n'0}\rangle$.

4. [*1 point*] Vypočítajte efektívnu hmotnosť pre 1D lineárnu retiazku s jedným orbitálom v elementárnej bunke a nájdite *k*-vektory v prvej Brillouinovej zóne pre ktoré je inverzna effectívna hmotnosť nulová. Aká je efektívna hmotnosť pre izolované atómy?

5. [*1 point*] Ukážte, že $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \exp(-\mathbf{r}_0\cdot\nabla)f(\mathbf{r})$. *Pomôcka*: použite Taylorov rozvoj funkcie $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ okolo $\mathbf{r}_0$.

6. [*2 points*] Uvažujte 1D kryštál s mriežkovou konštantou $a$ a disperznou reláciou $\epsilon(k) = \dfrac{\hbar^2}{ma^2}\left[\dfrac{7}{8} - \cos(ka) + \dfrac{1}{8}\cos(2ka)\right]$.
   a) Určite efektívne hmotnosti pre dno a vrchol pásov.nd top of the band.
   b) Vujadrite Blochové rýchlosti na dne a na vrchole pásov pomocou efektívnej hmotnosti.

7. [*1 point*] Z definície Wannierových funkcií $\phi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j) = \dfrac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, kde *n* je index pásu a $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ je stav splňajúci Blochovu teorému, dokážte ortogonalitu $\langle\phi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)|\phi_{n'}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{j'})\rangle = \delta_{nn'}\delta_{jj'}$.

8. [*1 point*] Pôvodny normalizovaný Blochov stav môže byť napísaný v tvare $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \dfrac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j}\phi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)$. Ukážte, že disperzia $\epsilon(k) = \epsilon_0 + \sum_{\mathbf{R}} t(\mathbf{R})\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$, a definujte $\epsilon_0$ a $t(\mathbf{R})$.

9. [*5 extra points*] Elektróny s malými energiami okolo Fermiho hladiny v grafénе sa nazyvajú Diracovské elektróny alebo elektróny s nulovou efektívnou hmotnosťou, a ich disperzie energie je lineárna funkcia vlnového vektora, $\epsilon(\mathbf{k}) = v_F|\mathbf{k}|$, kde $v_F$ je materiálova konštanta, Fermiho rýchlosť. Nájdite alternatívnu definíciu efektívnej hmotnosti keďže štandartná definícia $(1/m)^* = 1/\hbar^2(\partial^2\epsilon(k)/\partial k^2)$ diverguje.

**DOMÁCE ÚLOHY 04**

Teória kondenzovaných látok

UFV/TKL1/99 prednašajúci Martin Gmitra

Zimný semester 2024, miestnosť KNKTFA