ZADANIA Z KWANTOWEJ TEORII CIAŁA STAŁEGO

Zestaw I - na 6.10.2009

1. Znaleźć transformację postaci $b_k^\dagger = \sum_i B_{ik} a_i^\dagger$ diagonalizującą hamiltonian:

$$H = \epsilon \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + t \sum_{i\sigma} \left(a_i^\dagger a_{i+1} + \mathrm{h.c.} \right),$$

dla łańcucha jednowymiarowego. Wyznaczyć energie własne i przedyskutować charakter stanu podstawowego, osobno dla $t < 0$ i $t > 0$.

2. Temat jak w Zadaniu 1, dla hamiltonianu:

$$H = \epsilon_A \sum_{i \in A,\sigma} n_{i\sigma} + \epsilon_B \sum_{j \in B,\sigma} n_{j\sigma} + t_A \sum_{i \in A,\sigma} \left(a_i^\dagger b_{i+1} + \mathrm{h.c.} \right) + t_B \sum_{j \in B,\sigma} \left(b_j^\dagger a_{j+1} + \mathrm{h.c.} \right),$$

gdzie do podsieci A należą węzły o numerach parzystych, do B - o nieparzystych. *Wskazówka:* zastosować najpierw transformację otrzymaną w Zadaniu 1 niezależnie dla każdej podsieci, a następnie zdiagonalizować otrzymaną macierz 2×2.

3. W przybliżeniu ciasnego wiązania obliczyć energie pasmowe dla sieci krystalicznych: *sc, bcc, fcc, hcp* (Informacje o strukturach krystalicznych: C.Kittel, *Wstęp do fizyki ciała stałego*). *Wskazówka:* Energia pasmowa w przybliżeniu ciasnego wiązania dana jest wzorem:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{j(i)} t \exp\left(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{ij} \right), \qquad (1)$$

gdzie wektor falowy $\mathbf{k}$ należy do pierwszej strefy Brillouina, $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$, zaś sumowanie przebiega po *najbliższych sąsiadach* węzła i-tego. Należy znać wyprowadzenie wzoru (1).