Zadania z Kwantowej Teorii Ciała Stałego

Zestaw II - na 31.10.2002

4. *Wskazówka do Zadania 3.*

   a) Pokazać, że lagrangian układu ma postać:

   $$L = \frac{1}{2} \sum_j \left[\dot{\phi}_j^2 - K \Big(\phi_j - \phi_{j-1} \Big)^2 - K' \phi_j^2 \right],$$

   gdzie zmienne zredukowane ϕ_j, parametry K, K' oraz czas τ należy wyrazić poprzez parametry fizyczne układu m, k, k'. Równania ruchu wyprowadzamy standardowo.

   b) Stosując *sieciową transformatę Fouriera*: $\psi_q = N^{-1/2} \sum_j \phi_j \exp(-2\pi i j q/N)$ sprowadzić lagrangian do postaci:

   $$L = \frac{1}{2} \sum_q \left[\left| \dot{\psi}_q \right|^2 - \omega_q^2 \left| \psi_q \right|^2 \right]. \qquad (1)$$

   c) *Kwantowanie kanoniczne w obrazie Heisenberga.*
   Dla lagrangianu w postaci (1) wprowadzić pędy kanonicznie sprzężone p_q, wypisać Hamiltonian układu w zmiennych p_q, ψ_q i pokazać, że dla nawiasów Poissona zachodzi: $\{p_q, \psi_r\} = \delta_{qr}$. Następnie zastąpić formalnie w równaniach ruchu nawiasy Poissona komutatorami:

   $$\{p_q, \psi_r\} \to \frac{[p_q, \psi_r]}{i\hbar},$$

   i rozwiązać równanie ruchu dla operatora ψ_q w obrazie Heisenberga:

   $$\dot{\psi}_q = -\frac{i}{\hbar} [H, \psi_q].$$

   Wynik: $\psi_q(t) = b_q e^{-i\omega_q t} + b_q^\dagger e^{i\omega_q t}$. Wyrazić operatory p_q, ψ_q oraz Hamiltonian przez operatory $b_q^\dagger$, b_q, i wyprowadzić relacje komutacji dla operatorów $b_q^\dagger$, b_q.

5. 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*).