Zadania z Kwantowej Teorii Ciała Stałego

Zestaw III - na 7.11.2002

Proszę dokończyć zadania z poprzednich zestawów.

6. *Wskazówka do zadania 5:* Energię pasmową w przybliżeniu ciasnego wiązania obliczamy według wzoru:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{j(i)} t \exp\left(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{ij}\right), \tag{2}$$

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 (2).

7. Dla układu z Zadania 3 wyliczyć średni kwadrat amplitudy drgań zerowych $\left\langle \phi_j^2 \right\rangle$ (przeanalizować osobno przypadki $k' = 0$ i $k' \neq 0$). Następnie rozważyć ogólniejszy przypadek układu, w którym oddziaływanie opisane jest potencjałem:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \left[K_0 \phi_j^2 + \sum_{m=1}^{R} K_m (\phi_j - \phi_{j+m})^2 \right],$$

gdzie R jest zasięgiem oddziaływań. Obliczyć stałe sprzężenia $\{K_m\}$ i oszacować kwadrat amplitudy drgań zerowych $\left\langle \phi_j^2 \right\rangle$ dla cząstek odziałujących siłami kulombowskimi *(jednowymiarowy kryształ Wignera)*. Jako zasięg oddziaływań przyjąć w tym wypadku $R = N/2$.