

Lista zadań 1

1. Definiujemy operator translacji (ciągły):

$$\hat{T}_{\vec{R}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R})$$

gdzie $\vec{R}$ jest dowolnym wektorem. Rozwijając $\psi(\vec{r} + \vec{R})$ w szereg Taylora (zakładamy małe $\vec{R}$ gwarantujące zbieżność) pokaż, że

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{R} \cdot \hat{p} / \hbar} \psi(\vec{r})$$

gdzie $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ jest operatorem pędu. Pokaż, że zbiór translacji z działaniem $\hat{T}_{\vec{R}_1} \hat{T}_{\vec{R}_2} = \hat{T}_{\vec{R}_1 + \vec{R}_2}$ tworzy grupę abelową. Mówimy, że operator pędu jest generatorem grupy translacji. Następnie, korzystając z $[\hat{T}_{\vec{R}}, \hat{p}] = 0$ pokaż, że wartości własne $\hat{T}_{\vec{R}}$ to $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ tzn.

$$\hat{T}_{\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \text{ nie jest funkcją Blocha!})$$

$\vec{k}$ jest wektorem falowym tzn. $\hat{p} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hbar \vec{k} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$.

2. Pokaż, że dla funkcji Blocha $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$ równanie Schrödingera $\hat{H} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ sprowadza się do równania na wartości własne

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) u_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

3. Pokaż, że $u_{\vec{k} + \vec{K}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$

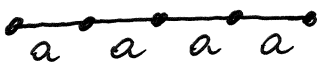
gdzie $\vec{K}$ jest wektorem sieci odwrotnej.

4. Pokaż, że funkcja Blocha nie jest funkcją własną operatora pędu $\hat{p}$.

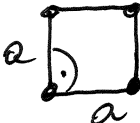
Policz wartość oczekiwaną $\langle \hat{p} \rangle$ w stanie Blocha przyjmując, że kryształ składa się z całkowitej liczby komórek elementarnych tzn. rozciąga się od $\vec{r}$ do $\vec{r} + \vec{L}_N$.

5. Oblicz objętość komórki elementarnej przestrzeni odwrotnej.

6. Skonstruuj sieć odwrotną czyli otrzymaj prymitywną komórkę elementarną sieci odwrotnej do sieci prostej:

a) jednowymiarowej 

b) ukośnej 

c) kwadratowej 

d) heksagonalnej



7. Otrzymaj pierwszą strefę Brillouina dla sieci odwrotnych z zad. 6.

8. Znajdź sieci odwrotne do sieci regularnych:

a) prostej $\bar{a}_1 = a\hat{x}$, $\bar{a}_2 = a\hat{y}$, $\bar{a}_3 = a\hat{z}$,

b) przestrzenie centrowanej $\bar{a}_1 = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$, $\bar{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$,
 $\bar{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$,

c) powierzchniowo centrowanej $\bar{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z})$, $\bar{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z})$, $\bar{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$.

Dla każdej z tych sieci znajdź objętości prymitywnych komórek elementarnych sieci prostej i sieci odwrotnej. Narysuj umowne komórki elementarne sieci b) i c), są to sześciany o krawędzi a , określ liczbę węzłów w tych komórkach i na tej podstawie policz objętość prymitywnej komórki elementarnej.