

Lista zadań 4

1. Pokaż, że spełnione są tożsamości sieciowe

$$\frac{1}{N} \sum_{\bar{k} \in \text{RBZ}} e^{i\bar{k}(\bar{R}_i - \bar{R}_j)} = \delta_{\bar{R}_i, \bar{R}_j}, \quad \frac{1}{N} \sum_{\bar{R}_i} e^{i(\bar{k} - \bar{k}')\bar{R}_i} = \delta_{\bar{k} + \bar{K}, \bar{k}'}$$

2. Zapisz dyskretne transformaty na sieci

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{k} \in \text{RBZ}} e^{-i\bar{k}\bar{R}_i}, \quad \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{R}_i} e^{i\bar{k}\bar{R}_i}$$

dla odpowiednio dużego układu, $V \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$, jako transformaty ciągłe, a następnie otrzymaj tożsamości odpowiadające tożsamościom dyskretnym z zad. 1.

Wskazówka: Skorzystaj z tożsamości

$$\psi_{\underline{k}}(\bar{r}) = \sum_{\bar{k}' \in \text{RBZ}} \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{\bar{R}_i} e^{-i(\bar{k}' - \bar{k})\bar{R}_i}}_{\delta_{\underline{k}, \underline{k}'} \text{ (reduced to RBZ)}} \psi_{\underline{k}'}(\bar{r})$$

$$w_i(\bar{r}) = \sum_{\bar{R}_j} \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{\bar{k} \in \text{RBZ}} e^{i\bar{k}(\bar{R}_j - \bar{R}_i)}}_{\delta_{\bar{R}_i, \bar{R}_j}} w_j(\bar{r})$$

3. Otrzymaj funkcję Wanniera fali płaskiej używając dyskretnej i ciągłej transformaty Fouriera.

4. Wychodząc z funkcji falowych orbitali atomowych otrzymaj funkcję Wanniera dla Tróćmucha atomów o stałej sieci a w przybliżeniu najbliższych sąsiadów (nn) i w przybliżeniu następnych najbliższych sąsiadów (nnn).
5. Otrzymaj energię elektronu w przybliżeniu ciasnego wiązania dla sieci z zad. 4; uwzględnij nn i nnn sąsiadów.
6. Otrzymaj energię elektronu na sieci kwadratowej o stałej sieci a używając przybliżenia ciasnego wiązania z uwzględnieniem najbliższych i następnych najbliższych sąsiadów.
(kolejnych)
7. Otrzymaj energię elektronu w przybliżeniu ciasnego wiązania dla sieci regularnych o stałej sieci a :
a) prostej, b) powierzchniowo centrowanej, c) objęściowo centrowanej. Uwzględnij najbliższych sąsiadów.
8. Rozwiąż zad. 7 dla kolejnych najbliższych sąsiadów.
9. Znajdź energię elektronu w przybliżeniu ciasnego wiązania dla sieci heksagonalnej dwu- i trójwymiarowej, stałe sieciowe a i c .