ΜΑΘΗΜΑ: «Κβαντική Θεωρία της Ύλης», ΔΜΠΣ-ΜΙΝΑ, ΑΚΑΔ. ΕΤΟΣ 2024-2025
ΔΙΔΑΣΚΩΝ: Λ. ΤΣΕΤΣΕΡΗΣ
4η ΣΕΙΡΑ ΑΣΚΗΣΕΩΝ

Οι ασκήσεις δίνονται για εξάσκηση, δεν ζητείται η παράδοση των λύσεων στον διδάσκοντα.

Πρόβλημα Δ.1: (α) Βρείτε την ενεργειακή πυκνότητα καταστάσεων ελεύθερων ηλεκτρονίων στις 1, 2, και 3 διαστάσεις. **(β)** Βρείτε την ολική ενέργεια ενός συστήματος N ελεύθερων ηλεκτρονίων σε 1, 2, και 3 διαστάσεις συναρτήσει της ενέργειας Fermi του συστήματος.

Πρόβλημα Δ.2: Δι-διάστατο τετραγωνικό πλέγμα φέρει ένα άτομο Cu στην αρχή των αξόνων και δύο άτομα O στις θέσεις $\boldsymbol{a}_1/2$ και $\boldsymbol{a}_2/2$, όπου $\boldsymbol{a}_1=a\hat{x}, \boldsymbol{a}_2=a\hat{y}$ και a η σταθερά του πλέγματος. Το σύστημα αυτό αντιστοιχεί στα επίπεδα CuO_2 που εμφανίζονται σε πολλά υπεραγώγιμα υλικά. Θεωρούμε ότι τα ατομικά τροχιακά των ατόμων Cu και O είναι ορθογώνια μεταξύ τους και ότι υπάρχει σημαντική επικάλυψη μόνο μεταξύ των d τροχιακών του Cu και των p τροχιακών ατόμων O που βρίσκονται σε θέση πλησιέστερου γείτονα ως προς το άτομο του Cu. **(α)** Παρόλο που υπάρχουν πέντε d τροχιακά του Cu και τρία p τροχιακά του O, μόνο το $d_{x^2-y^2}$, το p_x στην θέση $\boldsymbol{a}_1/2$ και το p_y στην θέση $\boldsymbol{a}_2/2$ είναι σημαντικά για τον προσδιορισμό των ενεργειακών ζωνών του πλέγματος. Τα στοιχεία της Χαμιλτονιανής μήτρας για τα υπόλοιπα τροχιακά είτε μηδενίζονται λόγω συμμετρίας, είτε μπορούν να θεωρηθούν ότι μηδενίζονται κατά προσέγγιση. Επιχειρηματολογήστε γιατί αυτό είναι σωστό (Υπενθύμιση: Τα p και d τροχιακά είναι κατευθυντικά με λοβούς εναλλασσόμενου πρόσημου). **(β)** Έστω ότι ε_p και ε_d είναι οι ατομικές ιδιοενέργειες των p και d τροχιακών (on-site energies) και ορίζουμε $t\equiv\langle\varphi_{d_{x^2-y^2}}(\boldsymbol{r})|H|\varphi_{p_x}\left(\boldsymbol{r}-\frac{\boldsymbol{a}_1}{2}\right)\rangle$. Σχηματίστε και επιλύστε την εξίσωση ιδιοτιμών που περιγράφει τις ενεργειακές ζώνες του συστήματος. **(γ)** Έστω τώρα ότι οι TB παράμετροι λαμβάνουν τις τιμές ε_p = -0.5 eV, ε_d = 0.5 eV και t = 0.1 eV. Ποιο είναι το εύρος της ενεργειακής ζώνης για σημεία του αντίστροφου χώρου πάνω στην γραμμή $k_y = 0$;

Πρόβλημα Δ.3: **(α)**Χρησιμοποιήστε θεωρία διαταραχών για να δείξετε την σχέση

$$\varepsilon_{k+q}^{(n)}=\varepsilon_k^{(n)}+\frac{\hbar}{m_e}q\cdot p^{(nn)}(k)+\frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}+\frac{\hbar^2}{m_e^2}\sum_{n'\neq n}\frac{|q\cdot p^{(nn')}(k)|^2}{\varepsilon_k^{(n)}-\varepsilon_k^{(n')}} \quad (1).$$

(β) Δείξτε ότι από την σχέση (1) και τον ορισμό του τανυστή μάζας προκύπτει η εξίσωση

$$\frac{1}{\bar{m}_{ij}^{(n)}(k)}\equiv\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\varepsilon_k^{(n)}}{\partial k_i\partial k_j}=\frac{1}{m_e}\delta_{ij}+\frac{1}{m_e^2}\sum_{n'\neq n}\frac{p_i^{(nn')}p_j^{(n'n)}+p_j^{(nn')}p_i^{(n'n)}}{\varepsilon_k^{(n)}-\varepsilon_k^{(n')}}(2).$$

Πρόβλημα Δ.4: Δίνεται δισδιάστατο (στο επίπεδο xy) τετραγωνικό πλέγμα σταθεράς a. Έστω ότι κάθε σημείο του πλέγματος καταλαμβάνεται από άτομο με p τροχιακά σθένους.

Βρείτε την Χαμιλτονιανή μήτρα για τυχαίο κυματάνυσμα $\boldsymbol{k}$ συναρτήσει κατάλληλων (μη-μηδενικών) παραμέτρων για τα on-site energies και τα hopping integrals.

Πρόβλημα Δ.5: Το πλέγμα honeycomb περιγράφεται από τα διανύσματα $\boldsymbol{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} a\hat{x} - \frac{1}{2} a\hat{y}, \boldsymbol{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} a\hat{x} + \frac{1}{2} a\hat{y}$ που δημιουργούν ένα διαδιάστατο εξαγωνικό πλέγμα και τα διανύσματα βάσης $\boldsymbol{t}_1 = 0, \boldsymbol{t}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} a\hat{x}$.

(α) Θεωρείστε ως αρχή των αξόνων σε αυτό το πλέγμα το κέντρο ενός από τα εξάγωνα που περιέχει. Βρείτε τότε όλες τις συμμετρίες και δώστε τον σχετικό πίνακα πολλαπλασιασμών (multiplication table) της ομάδας (υπόδειξη: υπάρχουν 12 συνολικά στοιχεία σε αυτήν την ομάδα συμμετρίας). **(β)** Ζωγραφίστε την μη-αναγωγίσιμη ζώνη Brillouin (Irreducible BZ). Ποια είναι τα σημεία υψηλής συμμετρίας; **(γ)** Κατά προσέγγιση, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι τα p_z τροχιακά των ατόμων του άνθρακα στο γραφένιο δεν έχουν σημαντική αλληλεπικάλυψη με τα sp^2 τροχιακά. Στα πλαίσια αυτής της προσέγγισης, βρείτε και ζωγραφίστε τις p_z ενεργειακές ζώνες του γραφενίου.

Πρόβλημα Δ.6: **(α)** Βρείτε τις ενεργειακές ζώνες για έναν μονοδιάστατο κρύσταλλο (με σταθερά πλέγματος *a*) με δύο ίδιου τύπου άτομα στη βάση (στις θέσεις 0 και *d*) και ένα τροχιακό *s* σε κάθε άτομο. **(β)** Τι συμβαίνει στην περίπτωση που $d = a/2$; Βρείτε και σχεδιάστε την ενεργειακή πυκνότητα καταστάσεων σε αυτήν την περίπτωση.