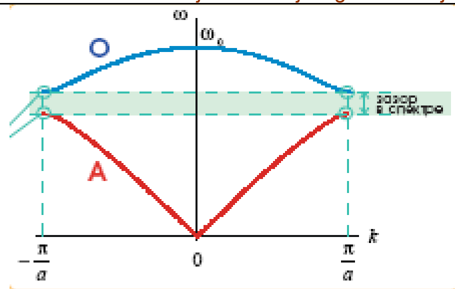
II. Zadaci za samostalan rad iz Fizike čvrstog stanja

A. Klasična i kvantna teorija harmonijskog oscilovanja kristala



1. Razmotriti linearni niz jona Na^{+} i Cl^{-} naizmjenično razmještenih sa ravnotežnim medjusobnim rastojanjem d = 2.81 Å. Mase jona su respektivno $m_{Na} = 3.82 \cdot 10^{-26}$ kg i $m_{Cl} = 5.89 \cdot 10^{-26}$ kg. Pretpostavljajući da je domet elektrostatičke interakcije samo izmedju najbližih susjeda, ocijeniti najveću i najmanju vrijednost kružne učestanosti svake od grana vibracionog spektra. Poznata je vrijednost konstante elastične sile K = 20,7 N/m.

2. Izračunati disperzione relacije $\omega_{\pm}(k)$ homogenog kristala, razmatrajući interakciju samo između najbližih susjednih i sledećih za njima paralelnih ravni, sa međusobnim rastojanjem jednakim a. Ispitati funkciju $\omega_{\pm}(k)$ unutar I Briluenove zone i u zavisnosti od vrijednosti konstanti elastičnosti.

3. Razmotriti lanac od N jednakih atoma, sa nepokretnim krajnjim atomima. Rastojanje izmedju susjednih atoma je a, njihova masa je m, a κ je koeficijent kvazielastične sile. Odrediti maksimalnu vrijednost kružne učestanosti ω_{max} i minimalnu vrijednost talasne dužine λ_{min} kolektivnog oscilovanja atoma $u_n = A \sin(k x_n) \sin(\omega t)$.

4. Razmotriti beskonačan linearni niz, koji sadrži dva atoma masa M_1 i M_2 u jediničnoj ćeliji. Pretpostaviti da je različita od nule samo medjusobna interakcija izmedju prvih susjednih atoma i da konstanta elastičnosti iznosi κ.

(a) Odrediti vrijednost parametra $\alpha = M_1/M_2$ za koju se u granici $\kappa \to \pi/a$ za obadvije grane disperzione krive dobija ista vrijednost $\omega_0 = (\kappa/\mu)^{1/2}$, gdje je $\mu = M_1M_2/(M_1+M_2)$ - redukovana (efektivna) masa sistema.

(b) Izračunati brzinu zvuka u granici $\kappa \to 0$.

5. Izračunati disperzione relacije $\omega_{\pm}(k)$ homogenog kristala, razmatrajući interakciju samo izmedju najbližih susjednih i sledećih za njima paralelnih ravni, sa medjusobnim rastojanjem jednakim a. Odrediti uslov koji treba da zadovoljavaju odgovarajuće konstante elastičnosti da bi postojala samo jedna ekstremna vrijednost funkcije $\omega_{\pm}(k)$ unutar I Briluenove zone.

1. Izvesti Dilong-Pti zakon za temperaturnu zavisnost specifične toplote pri konstantnoj zapremini - c_v.

2. Polazeći od transformacije sa operatora koordinate - q i impulsa - p za 1-D harmonijski oscilator na kanonske komutacione operatore kreacije i anihilacije, i.e.

B. Elektronske osobine kristala

1. Pokazati da je funkcija $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$, koja je dio Blohove funkcije predstavlja 'svojstvenu funkciju' hamiltonijana

$$H_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{i}\vec{\nabla}^2 + \vec{k}\right)^2 + U(\vec{r})$$

sa svojstvenom vrijednošću $\varepsilon_n(\vec{k})$.

2. Izvesti izraze za računanje grupne brzine i tenzora mase u obliku izvoda $\varepsilon_n(\vec{k})$ za 'Blohove elektrone'.

3. U 1-D kristalnoj rešetki energija elektrona je:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\left[\frac{7}{8} - \cos(ka) + \frac{1}{8}\cos(2ka)\right].$$

(a) Nacrtati grafik energetske zone $\varepsilon(\vec{k})$;

(b) Naći efektivnu masu na dnu i na vrhu zone razlagajući $\varepsilon(\vec{k})$ po k do drugog reda u okolini tih tačaka.

4. Odrediti jednoelektronske energije u aproksimaciji jake veze (TBA) u slučaju ako su jednovalentni atomi smješteni u čvorovima:
(a) sc - , (b) fcc - , (c) bcc - kristalne rešetke.

5. Odrediti elektronski doprinos u kohezionoj energiji E_c kristala, čiji atomi sa po Z valentnih elektrona su poređani tako da čine sc rešetku i to:

(a) u 1D - ; (b) u 2D – slučaju polupopunjene zone;

(c) za malo popunjenu zonu u 1D, 2D i 3D. Uzeti da su jednoelektronske energije date u aproksimaciji jake veze (TBA).

$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$, $a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2h}}q - i\sqrt{\frac{1}{2hm\omega}}p$, izvesti komutacionu relaciju $[a, a^+]$.

3. Izraziti hamiltonijan za 1D – harmonijski oscilator $h = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$ preko operatora a i a^+.

4. Polazeći od transformacije sa operatora pomjeraja - $\vec{u}(\vec{R})$ i impulsa - $\vec{p}(\vec{R})$ jona čiji je ravnotežni položaj $\vec{R}$ za harmonijski kristal na fononske operatore kreacije i anihilacije, i.e.

$$a_{\vec{k}s} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \vec{\in}_s(\vec{k})\{A\cdot\vec{u}(\vec{R}) + iB\cdot\vec{p}(\vec{R})\};$$

$$a^+_{\vec{k}s} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \vec{\in}_s(\vec{k})\{A\cdot\vec{u}(\vec{R}) + iB\cdot\vec{p}(\vec{R})\},$$

i kanonskih komutacionih relacija

$[u_k(\vec{R}), p_l(\vec{R}')] = i\hbar\delta_{kl}\delta_{\vec{R},\vec{R}'}$ i

$[u_k(\vec{R}), u_l(\vec{R}')] = [p_k(\vec{R}), p_l(\vec{R}')] = 0$, izvesti komutacione relacije za $a_{\vec{k}s}$ i $a^+_{\vec{k}s}$. Uvedene su pomoćne oznake: $A = \sqrt{M\omega_s(\vec{k})/(2\hbar)}$ i $B = \sqrt{1/[2\hbar M\omega_s(\vec{k})]}$.

5. Izraziti hamiltonijan oscilovanja kristalne rešetke dat u harmonijskoj aproksimaciji, i.e. $H = T + V$, gdje su $T = \sum_{\vec{R}} \frac{\vec{p}(\vec{R})^2}{2M}$, $V = \frac{1}{2}\sum_{\vec{R},\vec{R}'} u_k(\vec{R}) D_{kl}(\vec{R}-\vec{R}') u_l(\vec{R}')$ kao sumu od 3N hamiltonijana nezavisnih oscilatora, po jedan za svaki talasni vektor $\vec{k}$ i svaku polarizaciju s.
Uputstvo. Iskoristiti 'relaciju ortogonalnosti'

$$\sum_{s=1}^{3}[\vec{\in}_s(\vec{k})]_k[\vec{\in}_s(\vec{k})]_l = \delta_{kl}$$ i identitet $$\sum_{\vec{k}}^{\vec{R}\neq\vec{0}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 0.$$

6. Izvesti izraz za zapreminsku gustinu unutrašnje energije $u = -\partial f/\partial\beta$ oscilovanja kristalne rešetke, gdje je zapreminska gustina slobodne energije Helmholca u kanonskom ansamblu data kao $f = \frac{1}{V}\ln\sum_n e^{-\beta E_n}$, srednja vrijednost broja kvanata pobuđenja normalne mode oscilovanja - fonona $(\vec{k}, s)$ jednaka $n_s(\vec{k}) = [e^{\beta\hbar\omega_S(\vec{k})} - 1]^{-1}$.

7. Računajući c_v u granici visokih temperatura, odrediti prvu popravku zakona Dilong – Pti.

8. Izvesti izraz za $c_v \propto T^3$ u granici niskih temperatura.