Fasta tillståndets fysisk VT 2015, RÖ 7

Sista inlämning 30.3. kl. 16:00.

Uppgift 1

Visa att $\phi_1(x) = \sin(kx)$ och $\phi_2(x) = \cos(kx)$ är de enda ortogonala linjärkombinationerna av e^{ikx} och e^{-ikx} som uppfyller

$$\int \mathrm{d}x \phi_1^*(x) V(x) \phi_2(x) = 0$$

för *alla* värden på k, där $V(x)$ är den periodiska potentialen

$$V(x) = -\sum_{n=1}^{\infty} V_n \cos\left(\frac{2\pi n x}{a}\right) \ .$$

Uppgift 2

Nära gränsen till den första Brillouinzonen ger teorin för nästan fria elektroner att summan i gitterpotentialen $V(x)$ ovan domineras av termen $V_1 \cos(2\pi x/a)$ och att vågfunktionen är approximativt

$$\psi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{i(k-2\pi/a)x}.$$

Visa att energin ε ges av uttrycket

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi}{ma}\left(\frac{\pi}{a} - k \pm \sqrt{\left(\frac{\pi}{a} - k\right)^2 + \left(\frac{amV_1}{2\pi\hbar^2}\right)^2}\right) \ .$$

Tips: Multiplicera Schrödingerekvationen med e^{-ikx} och integrera över hela rummet, vilket ger en ekvation i α och β. Den andra ekvationen fås då Schrödingerekvationen integreras efter multiplikation med $e^{-i(k-2\pi/a)x}$.

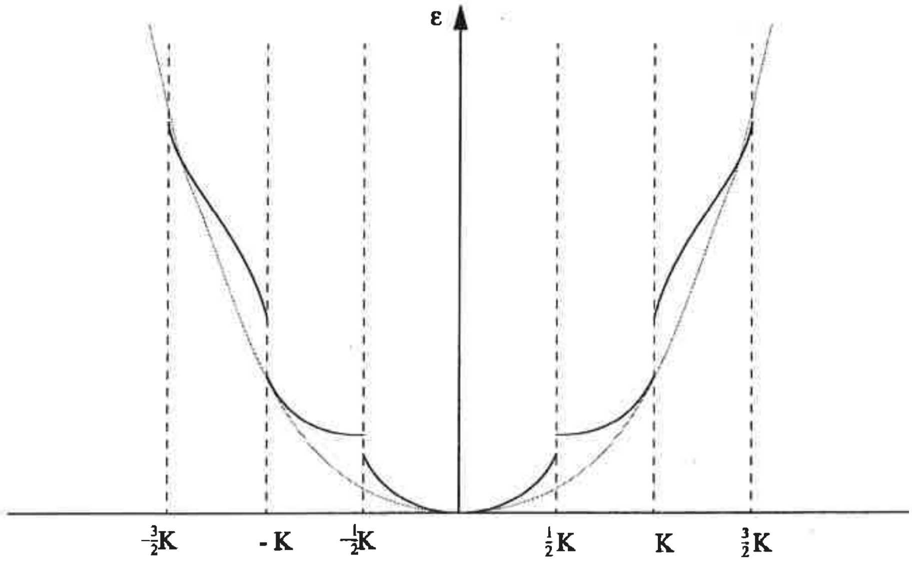
Uppgift 3

Anta att det existerar en metall med det enkla kubiska Bravais-gittret som kristallstruktur och exakt en valenselektron per atom. Är Fermi-sfären för fria elektroner för denna metall helt innanför den första Brillouin-zonen? Hur skulle du anta att en svag periodisk potential modifierar Fermi-sfären för fria elektroner?

Uppgift 4

Betrakta dispersionsrelationen för en endimensionell kristall som illustreras av de svarta kurvorna i bilden ovan. Rita samma relation i upprepade och reducerade zoners schema.

Vad är fel med denna dispersionsrelation?



Uppgift 5

sp^3-hybridisering, dvs kombination av s, p_x, p_y, p_z för att erhålla fyra våg-funktioner vars sannolikhetstäthet är kraftigt riktad, förklarar den interatomära bindningen i diamant, kisel och germanium. Bindningarna är riktade så att de går från mittpunkten till fyra hörnpunkter i en kub och därmed bildar en reguljär tetraeder (vinkeln mellan bindnigarna är då 109°). Härled utifrån detta de fyra linjärkombinationerna av s, p_x, p_y, p_z som bildar sp^3-hybridiseringen.

Tips: Eftersom s-tillståndet är sfäriskt symmetriskt medan p_x, p_y och p_z har lober i riktningarna x, y respektive z, kan man först kombinera p-vågfunktionerna så att de ovannämnda fyra bindningsriktningarna formas.

Uppgift 6

Visa att vågfunktionerna som gavs i föreläsningsanteckningarna för sp^2-hybridisering är ortonormala. Du kan anta att de atomära vågfunktionerna s,p_x,p_y och p_z är det.