

Inlämning senast fredag 31.3 kl. 16:00.

1. Tillståndstätheten för det n :te bandet i en bandstruktur kan allmänt skrivas i form av ytintegralen:

$$g_n(\varepsilon) = \int_{S_n(\varepsilon)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla \varepsilon_n(k)|} \quad (1)$$

där $S_n(\varepsilon)$ är den del av ytan $\varepsilon_n(k) = \varepsilon$ som ligger innanför den första Brillouin-zonen (eller annan valfri reciprok primitiv enhetscell).

- (a) Visa att för tillståndstätheten av en fri elektrongas vid Fermiytan reduceras ekvationen ovan till $g(\varepsilon_F) = mk_F/\hbar^2\pi^2$. Du kan anta att Fermi-sfären ligger helt innanför den första Brillouin-zonen.
- (b) $\varepsilon_n(k)$ är en periodisk funktion i det reciproka gittret. På basen av denna information, vad kan sägas om formen av $g_n(\varepsilon)$?
(*Tips*: betrakta $|\nabla \varepsilon_n(k)|$ i nämnaren)

2. 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?
3. Nära gränsen till den första Brillouin-zonen ger teorin för nästan fria elektroner (i en dimension) att summan i gitterpotentialen $V(x)$ domineras av termen $n = 1$ enligt

$$V(x) = - \sum_{n=1}^{\infty} V_n \cos\left(\frac{2\pi nx}{a}\right) \approx -V_1 \cos(2\pi x/a) \quad (2)$$

och att vågfunktionen är approximativt

$$\psi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{i(k-2\pi/a)x}. \quad (3)$$

Sätt in dessa uttryck i Schrödingerekvationen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = \varepsilon\psi, \quad (4)$$

och visa att energin ε ges av uttrycket

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi}{ma} \left(\frac{\pi}{a} - k \pm \sqrt{\left(\frac{\pi}{a} - k\right)^2 + \left(\frac{amV_1}{2\pi\hbar^2}\right)^2} \right). \quad (5)$$

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 $e^{-i(k-2\pi/a)x}$. (9 p)

4. Visa att vågfunktionerna som gavs i föreläsningssanteckningarna för sp^2 -hybridisering är ortonormala. Du kan anta att de atomära vågfunktionerna s , p_x , p_y och p_z är det.
5. sp^3 -hybridisering, dvs. kombination av s, p_x, p_y, p_z för att erhålla fyra vågfunktioner 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 bindningarna 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 lobber i riktningarna x, y respektive z , kan man först kombinera p -vågfunktionerna så att de ovannämnda fyra bindningsriktningarna formas. (9 p)