

Løsningsforløp Øving 8, T FY 4210 ^①

Oppgave 1 1 WKB-approximasjon

av energi-spektrum bereknet av
kvantisering betingelsen

$$\int_{x_1}^{x_2} dx p(x) = (n + \frac{1}{2}) \frac{1}{2} \pi; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

der x_1 og x_2 er h.h.v. venstre
og høyre klassiske vendepunkt, og
 $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$. Med det oppgitte
potensialet, får vi vendepunkter

$$E - \lambda_\alpha |x|^\alpha = 0$$

$$|x| = \pm \left(\frac{E}{\lambda_\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha}}$$

Da blir kvantisering betingelsen gitt ved:

$$2 \sqrt{2m} \int_0^{\left(\frac{E}{\lambda_\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha}}} dx \sqrt{E - \lambda_\alpha x^\alpha}$$
$$= 2 \sqrt{2mE} \int_0^1 dx \sqrt{1 - \frac{\lambda_\alpha x^\alpha}{E}}$$

$$\text{Innfør } y^\alpha = \frac{\lambda_\alpha x^\alpha}{E}$$

②

$$y = \left(\frac{\lambda_\alpha}{E} \right)^{\frac{1}{\alpha}} x$$

$$dy = \left(\frac{\lambda_\alpha}{E} \right)^{\frac{1}{\alpha}} dx$$

Insatt i kvantiserings betingelsen, får vi:

$$2 \sqrt{2mE} \left(\frac{E}{\lambda_\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha}} \int_0^1 dy \sqrt{1-y^2} = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\pi$$

$$\equiv C_\alpha$$

$$\frac{\sqrt{8m} C_\alpha}{\lambda_\alpha^{\frac{1}{\alpha}}} E^{\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha}} = K_\alpha^{-1} E^{\frac{\alpha+2}{2\alpha}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\pi$$

$$\equiv K_\alpha^{-1}$$

$$E = \left(K_\alpha \pi \left(n + \frac{1}{2}\right) h \right)^{\frac{2\alpha}{\alpha+2}}$$

Sjekk: $\alpha = 2 \Rightarrow \lambda_2 = \frac{1}{2} m \omega^2$

$$C_2 = \frac{\pi}{4}$$

$$K_2^{-1} = \frac{\sqrt{8m} \frac{\pi}{4}}{\sqrt{\frac{m}{2}} \omega} = \frac{\pi}{\omega}$$

$$K_2 = \frac{\omega}{\pi} \Rightarrow K_2 \pi = \omega; \quad \frac{2\alpha}{\alpha+2} = \underline{\underline{1}}$$

Da får vi:

$$E = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

slik det skal være for harmonisk oscillator ($d=2$).

~~Minneoppgave~~

Oppgave 2

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i) \right]$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{coul} (|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

$$= H_1 + H_2$$

Bloch-funksjoner er egentilstander for (\vec{r}, s) til hele e -partikkel dette er Hamilton-operatoren, inkludert krysstellpotensialet $U(\vec{r})$, som vi her regner for i ha sitt opphav i et totalt statistisk gitter.

$$\left[\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] \psi_{k\sigma}(\vec{r}, s)$$

$$= E_{k\sigma} \psi_{k\sigma}(\vec{r}, s)$$

Da blir $E_{k\sigma}$ energi-bånd som elektronene kan bevege seg i.

Da blir 2. kvadrant formen $\textcircled{4}$
 H_1 gitt ved

$$H_1 = \sum_{\vec{k}, \sigma} E_{k\sigma} C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

hvor vi har innført kreasjons-
 og destruksjons-operatorene $C_{k\sigma}^\dagger, C_{k\sigma}$
 definert ved

$$\Psi^\dagger(\vec{r}, s, \psi) = \sum_{\vec{k}, \sigma} C_{k\sigma}^\dagger(\psi) \psi_{k\sigma}^*(\vec{r}, s)$$

$$\Psi(\vec{r}, s, \psi) = \sum_{\vec{k}, \sigma} C_{k\sigma}(\psi) \psi_{k\sigma}(\vec{r}, s)$$

der $\Psi^\dagger(\vec{r}, s, \psi), \Psi(\vec{r}, s, \psi)$ er felt-operatører
 som har verdiene av de skruete
 elektronene i "punktet" (\vec{r}, s, ψ) .

Coulomb-energi blir:

$$\sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4} V_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4} C_{\lambda_1}^\dagger C_{\lambda_2}^\dagger C_{\lambda_3} C_{\lambda_4}$$

med $\lambda = (\vec{k}, \sigma)$ og

$$V_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4} = \frac{1}{2} \int_{S_1} d\vec{r}_1 \dots \int_{S_4} d\vec{r}_4 \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_4} \psi_{\lambda_1}^*(\vec{r}_1) \psi_{\lambda_2}^*(\vec{r}_2) V_{\text{Coul}}(|\vec{r}_3 - \vec{r}_4|) \psi_{\lambda_3}(\vec{r}_3) \psi_{\lambda_4}(\vec{r}_4) \delta_{\vec{r}_1, \vec{r}_4} \delta_{\vec{r}_2, \vec{r}_3}$$

der vi har brugt at

(5)

$$\langle x_1, x_2 \mid V_{\text{coul}} \mid x_3, x_4 \rangle$$

$$= \delta_{\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_4} \delta_{\mathcal{E}_2, \mathcal{E}_3} \delta_{\vec{r}_1, \vec{r}_4} \delta_{\vec{r}_2, \vec{r}_3} \\ V_{\text{coul}} (|\vec{r}_3 - \vec{r}_4|) \\ (x = (\vec{r}, s))$$

Dermed får vi, siden Coulomb-pot.
er spin-uafhængig:

$$\sqrt{2} \sqrt{2} \sqrt{2} \sqrt{2}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \chi_{\sigma_1}^*(s_1) \chi_{\sigma_4}(s_4) \chi_{\sigma_2}^*(s_2) \chi_{\sigma_3}(s_3)$$

$$\cdot \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 g_{k\sigma_1}^*(\vec{r}_1) g_{k\sigma_2}^*(\vec{r}_2)$$

$$\cdot \left[\frac{1}{2} V_{\text{coul}} (|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \right]$$

$$\cdot g_{k\sigma_3}(\vec{r}_2) g_{k\sigma_4}(\vec{r}_1)$$

der

$$g_{k\sigma}(\vec{r}) = u_{k\sigma}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$= \delta_{\sigma_1, \sigma_4} \delta_{\sigma_2, \sigma_3} F_{k_1, k_2, k_3, k_4}$$

der F er defineret ved det sidste
integral.

Dermed får vi, for Coulomb-ditet: ^⑥

$$V_2 = \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \\ \sigma_1, \sigma_2}} F_{k_1, k_2, k_3, k_4}^{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4}$$

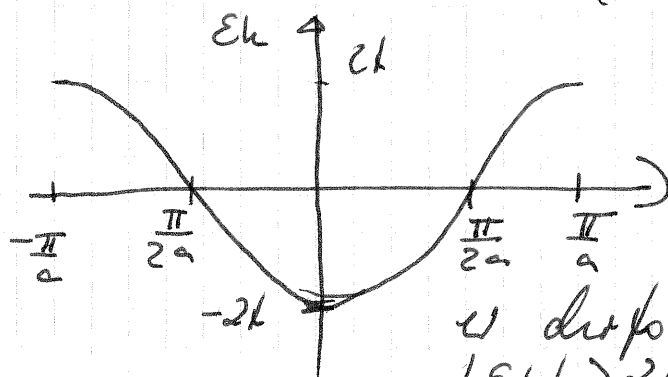
$$\cdot C_{k_1, \sigma_1}^+ C_{k_2, \sigma_2}^+ C_{k_3, \sigma_3}^- C_{k_4, \sigma_4}^-$$

Indegreket som gir F er nå mer komplisert å utlede til Fourier-transformer til Coulomb-potensialet, siden Bloch-funksjoner er mer kompliserte enn planbølger. Som regel må dette integralet beregnes numerisk.

Oppgave 3

$$D(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(\omega - E_k)$$

$$E_k = -2t \cosh(ka)$$



Max: $E_k = +2t$

Min: $E_k = -2t$

Tettstet av tilstander

er derfor null når $|E_k| > 2t$

Vi ser også at antall tilstander per energi-ekvivalent er størst nær toppen og bunnen av energi-båndet.

Dette fordi antall tilstander ($T_{k,\sigma}$) ligger junt fordelt langs k -aksen, og energien varierer minst med k nær $k=0$ og $\pm \frac{\pi}{a}$. Derfor foretar vi maksimale verdier for $D(\omega)$ nær $\omega = \pm 2\epsilon$, og disse maksimumene stammer fra $k=0$ og $\pm \frac{\pi}{a}$.

$$\begin{aligned}
 D(\omega) &= \frac{1}{N} \sum_k \delta(\omega + 2\epsilon \cos ka) \\
 &= \frac{1}{N} \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{\frac{2\pi}{Na}} \delta\left(\frac{\omega}{2\epsilon} + \cos ka\right) \\
 &= \frac{1}{N} \frac{Na}{2\pi} \frac{1}{2\epsilon} \frac{1}{a} \int_{-\pi}^{\pi} du \delta\left(\frac{\omega}{2\epsilon} + \cos u\right) \\
 &= \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot 2 \int_0^{\pi} du \delta\left(\frac{\omega}{2\epsilon} + \cos u\right)
 \end{aligned}$$

Innfor

$$\begin{aligned}
 y &= \cos u \\
 u &= \cos^{-1}(y) \Rightarrow du = \frac{-dy}{\sqrt{1-y^2}}
 \end{aligned}$$

$$D(\omega) = \frac{-1}{2\pi t} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} f\left(\frac{\omega}{2t} + y\right) \quad (8)$$

$$= \frac{1}{2\pi t} \int_{-1}^1 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} f\left(\frac{\omega}{2t} + y\right)$$

Vi får bare bidrag til dette integralet dersom $-1 < \frac{\omega}{2t} < 1$

fordi $y \in (-1, 1)$ og vi

får bare bidrag når argumentet i f -funksjonen er null. Dermed

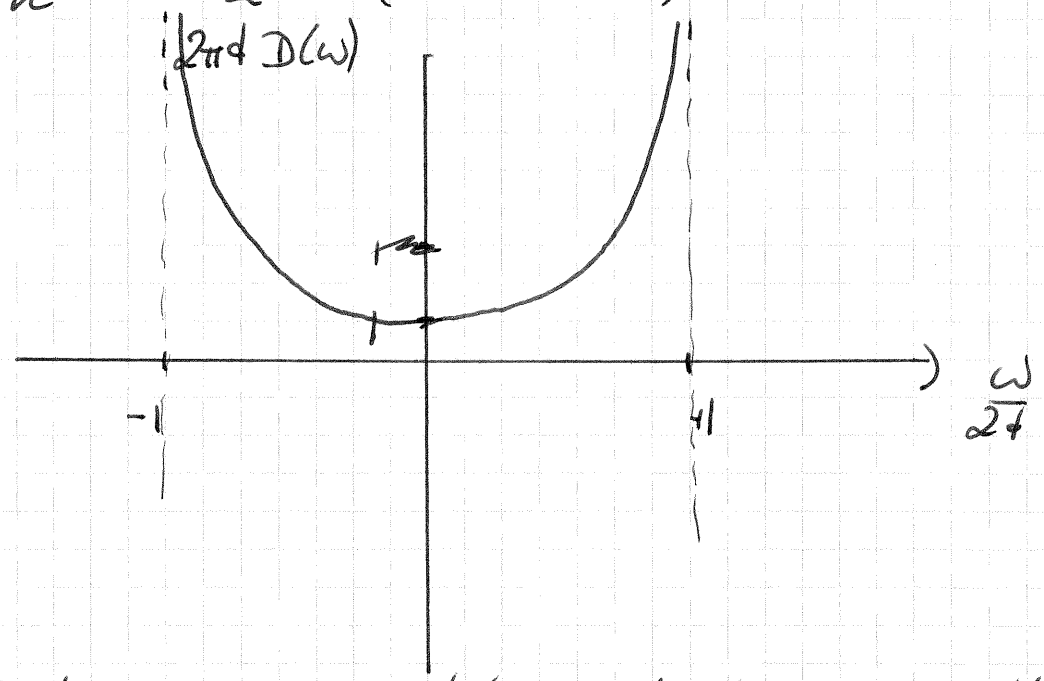
får vi et $D(\omega) = 0$ når $|\omega| > 2t$ slik vi forventet i antakningsvis

$$D(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi t} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{2t}\right)^2}} & ; \left|\frac{\omega}{2t}\right| < 1 \\ 0 & ; \left|\frac{\omega}{2t}\right| > 1 \end{cases}$$

Vi ser at vi får kvadratt-rot singulariteter i $D(\omega)$ når $\omega = -2t$ og $\omega = +2t$, dvs. får toppen og bunnen

av energi-bänder, eller
for $k=0$ ($\omega = -2\epsilon$) og

$k = \pm \frac{\pi}{a}$ ($\omega = +2\epsilon$)



Slike singulariteter kalles van Hove singulariteter, og er mest utbredt i 2D dimensjon. De blir svakkere i 1D og 3D dimensjon.

I 1D dimensjon blir singularitetene logaritmiske

I 3D dimensjon (det mest realistiske) blir van Hove singularitetene cusps i $D(\omega)$

