Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης
Μάθημα ασκήσεων 04/12/2006

Έστω μια άπειρη μονοδιάστατη αλυσίδα όμοιων ατόμων σε απόσταση α μεταξύ τους. (Ένα κατάλληλο μοντέλο για την περιγραφή ενός **μονοδιάστατου στοιχειακού στερεού**).

Το ατομικό τροχιακό (η ατομική κυματοσυνάρτηση) γύρω από το ν-οστό άτομο είναι η $\varphi_\nu(r) \equiv \varphi(r-R_\nu)$, όπου R_ν η απόσταση του ν-οστού ατόμου από την αρχή κάποιου συστήματος αναφοράς. Θεωρούμε δηλαδή ότι τα ατομικά τροχιακά όλων των ατόμων είναι της ίδιας μορφής, φ(r), το καθένα όμως γύρω από το κέντρο R_ν του ατόμου στο οποίο αναφέρεται.
Για τα ατομικά τροχιακά θα θεωρήσουμε ότι:

- είναι ορθοκανονικοποιημένα, $\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_\nu(r)^* \phi_\mu(r)\, dr = \delta_{\nu\mu} = \begin{cases} 0, & \nu \neq \mu \\ 1, & \nu = \mu \end{cases}}$ (σχέση 1)

δηλαδή ότι το τροχιακό κάθε ατόμου είναι κανονικοποιημένο, ενώ τα τροχιακά διαφορετικών ατόμων δεν έχουν καθόλου αλληλοεπικάλυψη.

- αλληλεπιδρούν μόνο μέχρι πρώτους γείτονες,

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_\nu(r)^* H \phi_\mu(r)\, dr = \begin{cases} \varepsilon, & \nu = \mu \\ V_2, & \nu = \mu \pm 1 \\ 0, & \text{αλλού} \end{cases}} \qquad \text{(σχέση 2)}$$

Ώστε $H\,\varphi_\nu(r) = \varepsilon\,\varphi_\nu(r)$, το οποίο είναι προσεγγιστικά σωστό, αφού η Χαμιλτονιανή δεν είναι η χαμιλτονιανή του ατόμου αλλά όλου του στερεού.

Θα χρησιμοποιήσουμε ***συμβολισμό Dirac***, σύμφωνα με τον οποίο

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_\nu(r)^* H \phi_\mu(r)\, dr \equiv \left\langle \phi_\nu(r) \middle| H \middle| \phi_\mu(r) \right\rangle$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_\nu(r)^* \phi_\mu(r)\, dr \equiv \left\langle \phi_\nu(r) \middle| \phi_\mu(r) \right\rangle$$

Σύμφωνα με τη θεωρία στο βιβλίο του Οικονόμου, §9.1

1ο βήμα: Γράφω την κυματοσυνάρτηση του στερεού ως γραμμικό συνδυασμό ατομικών τροχιακών $\boxed{\Psi = \sum_\nu c_\nu \phi_\nu}$ (σχέση 3α)

2ο βήμα: Εξίσωση Schrödinger $H\,\Psi = E\,\Psi$

Σκοπός μας είναι να υπολογίσουμε τις ιδιοενέργειες Ε της μοριακής κυματοσυνάρτησης, δεδομένων των ε, V_2.

$$\sum_\nu c_\nu H \phi_\nu = E \sum_\nu c_\nu \phi_\nu$$

3ο βήμα: Πολλαπλασιάζω από αριστερά με φ_μ^* και ολοκληρώνω για $-\infty < r < \infty$

$$\sum_\nu c_\nu \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\mu^*(r) H \phi_\nu(r)\, dr = E \sum_\nu c_\nu \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\mu^* \phi_\nu\, dr$$

ή με το συμβολισμό Dirac

$$\sum_{\nu} c_{\nu} \langle \phi_{\mu} | \mathrm{H} | \phi_{\nu} \rangle = E \sum_{\nu} c_{\nu} \langle \phi_{\mu} | \phi_{\nu} \rangle \qquad \text{(σχέση 4α)}$$

4^{o} βήμα: Λόγω των σχέσεων (1) και (2), από το άθροισμα στο δεξιό μέλος θα επιζήσει μόνο ο όρος για ν = μ, ενώ από το άθροισμα στο αριστερό μέλος οι όροι ν = μ, μ ± 1

$$c_{\mu}\varepsilon + c_{\mu-1}V_2 + c_{\mu+1}V = \mathrm{E}c_{\mu} \qquad \text{(σχέση 5α)}$$

5^{o} βήμα: Χρήση θεωρήματος Bloch, γιατί υπάρχει περιοδικότητα μετατόπισης κατά α

$$c_{\mu} = c_0 e^{ik\mu\alpha}$$

ώστε

$$c_{\mu\pm1} = c_{\mu}\, e^{\pm ik\alpha}$$

Έτσι η (4) γράφεται

$$c_{\mu}\varepsilon + c_{\mu}V_2\left(e^{-ika} + e^{ika}\right) = \mathrm{E}c_{\mu}$$

$$\boxed{E = \varepsilon + 2V_2 \cos(ka)}$$

ή επειδή $V_2<0$,

$$\boxed{E = \varepsilon - 2|V_2|\cos(ka)}$$

Σύμφωνα με την άλυτη άσκηση 9.1

1^{o} βήμα: Γράφω την κυματοσυνάρτηση του στερεού ως γραμμικό συνδυασμό των δεσμικών τροχιακών

$$\Psi_{\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{\nu} + \phi_{\nu+1}\right)$$

$$\boxed{\Psi = \sum_{\nu} c_{\nu}\Psi_{\nu}} \qquad \text{(σχέση 3β)}$$

2^{o} βήμα:

$$\sum_{\nu} c_{\nu} H\Psi_{\nu} = E\sum_{\nu} c_{\nu}\Psi_{\nu}$$

3^{o} βήμα:

$$\sum_{\nu} c_{\nu} \langle \Psi_{\mu} | \mathrm{H} | \Psi_{\nu} \rangle = E \sum_{\nu} c_{\nu} \langle \Psi_{\mu} | \Psi_{\nu} \rangle$$

$$\sum_{\nu} c_{\nu} \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{\mu} + \phi_{\mu+1}) \right| \mathrm{H} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{\nu} + \phi_{\nu+1}) \right\rangle = E \sum_{\nu} c_{\nu} \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{\mu} + \phi_{\mu+1}) \right| \left. \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{\nu} + \phi_{\nu+1}) \right\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{\nu} c_{\nu} \frac{1}{2}\left[\langle \phi_{\mu}|\mathrm{H}|\phi_{\nu}\rangle + \langle \phi_{\mu}|\mathrm{H}|\phi_{\nu+1}\rangle + \langle \phi_{\mu+1}|\mathrm{H}|\phi_{\nu}\rangle + \langle \phi_{\mu+1}|\mathrm{H}|\phi_{\nu+1}\rangle\right] =$$

$$= E\sum_{\nu} c_{\nu} \frac{1}{2}\left[\langle \phi_{\mu}|\phi_{\nu}\rangle + \langle \phi_{\mu}|\phi_{\nu+1}\rangle + \langle \phi_{\mu+1}|\phi_{\nu}\rangle + \langle \phi_{\mu+1}|\phi_{\nu+1}\rangle\right] \qquad \text{(σχέση 4β)}$$

4^{o} βήμα: Χρειάζεται να βρούμε τους μη μηδενικούς όρους στα αθροίσματα

Για το άθροισμα στο αριστερό μέλος

- Όρος για ν = μ: $\frac{1}{2}c_{\mu}\left[\varepsilon + V_2 + V_2 + \varepsilon\right] = c_{\mu}\left(\varepsilon + V_2\right)$
- Όρος για ν = μ + 1: $\frac{1}{2}c_{\mu+1}\left[V_2 + 0 + \varepsilon + V_2\right] = \frac{1}{2}c_{\mu+1}\left(\varepsilon + 2V_2\right)$
- Όρος για ν = μ – 1: $\frac{1}{2}c_{\mu-1}\left[V_2 + \varepsilon + 0 + V_2\right] = \frac{1}{2}c_{\mu-1}\left(\varepsilon + 2V_2\right)$

- Όρος για ν = μ + 2: $\frac{1}{2}c_{\mu+2}\left[0+0+V_2+0\right]=\frac{1}{2}c_{\mu+2}V_2$
- Όρος για ν = μ – 2: $\frac{1}{2}c_{\mu-2}\left[0+V_2+0+0\right]=\frac{1}{2}c_{\mu-2}V_2$
- Άλλοι όροι δεν έχουν συνεισφορά...

Το άθροισμα στο δεξιό μέλος γράφεται

$$\sum_{\nu}\frac{1}{2}c_{\nu}\left(\delta_{\nu,\mu}+\delta_{\mu,\nu+1}+\delta_{\mu+1,\nu}+\delta_{\mu+1,\nu+1}\right)=\frac{1}{2}\left(c_{\mu}+c_{\mu-1}+c_{\mu+1}+c_{\mu}\right)$$

Επομένως η σχέση (4β) γίνεται

$$c_{\mu}\left(\varepsilon+V_2\right)+\frac{1}{2}\left(\varepsilon+2V_2\right)\left(c_{\mu+1}+c_{\mu-1}\right)+\frac{1}{2}V_2\left(c_{\mu+2}+c_{\mu-2}\right)=E\left[c_{\mu}+\frac{1}{2}\left(c_{\mu+1}+c_{\mu-1}\right)\right]$$

(σχέση 5β)

5^{o} βήμα: Χρήση θεωρήματος Bloch, $c_{\mu\pm\zeta}=c_{\mu}\,e^{\pm\zeta\,ik\alpha}$

$$c_{\mu}\left(\varepsilon+V_2\right)+\frac{1}{2}\left(\varepsilon+2V_2\right)c_{\mu}\left(e^{ika}+e^{-ika}\right)+\frac{1}{2}V_2c_{\mu}\left(e^{i2ka}+e^{-i2ka}\right)=E\left[c_{\mu}+\frac{1}{2}c_{\mu}\left(e^{ika}+e^{-ika}\right)\right]$$

$$\varepsilon+V_2+\left(\varepsilon+2V_2\right)\cos(ka)+V_2\cos(2ka)=E\left[1+\cos(ka)\right]$$

$$\varepsilon\left(1+\cos(ka)\right)+V_2\left(1+2\cos(ka)+\cos(2ka)\right)=E\left[1+\cos(ka)\right]$$

και, διαιρώντας με [1+cos(kα)], καταλήγουμε

$$\boxed{E=\varepsilon+2V_2\cos(ka)}$$

γιατί $\frac{1+2\cos(ka)+\cos(2ka)}{1+\cos(ka)}=2\cos(ka)$

Απόδειξη: Αφού $\begin{cases}1=\cos^2(ka)+\sin^2(ka)\\ \cos(2ka)=\cos^2(ka)-\sin^2(ka)\end{cases}$

είναι $1+2\cos(ka)+\cos(2ka)=2\cos^2(ka)+2\cos(ka)=$
$=2\cos(ka)\left(1+\cos(ka)\right)$

Φυσικά το αποτέλεσμα προέκυψε ανεξάρτητο της βάσης στην οποία αναλύσαμε την κυματοσυνάρτηση του στερεού!