ЗАДАЧИ ПО ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Осенний семестр 2005 г

Задачи для зачета:	*Задачи для экзамена: задачи для зачета +* **:**
1.1; 1.2; 1.3; 1.4; 1.5; 1.6; 1.7; 1.9; 1.10;	1.12; 1.13;
2.2; 2.3; 2.4; 2.5; 2.6;	2.8; 2.9; 2.10; 2.11; 2.12;
3.1;	3.3; 3.4; 3.5
4.1; 4.7;	4.3; 4.5;
5.1; 5.2;	5.4; 5.5; 5.6;
6.1; 6.5;	6.2;
	7.1-7.13

1 Кристаллическая и обратная решетки

Задача 1.1 Доказать, что кристаллическая решетка может обладать поворотными осями симметрии 2, 3, 4 и 6 порядков.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена, например, в [1], стр. 97.*

Задача 1.2 Показать, что основные вектора $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$, $\vec{b}_3$ обратной решетки $\vec{K} = l_1 \vec{b}_1 + l_3 \vec{b}_2 + l_3 \vec{b}_3$ определяются следующими выражениями:

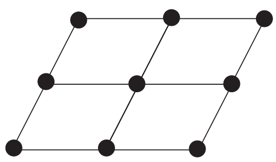
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{v}\left[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right], \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{v}\left[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\right], \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{v}\left[\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right],$$

где $v = \vec{a}_1 \cdot [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]$ - объем элементарной ячейки прямой решетки.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена, например, в [3], стр. 96.*

Задача 1.3 Показать, что решетка, обратная к обратной, совпадает с прямой решеткой.

Задача 1.4 Доказать соотношение $V = (2\pi)^n/v$, где V — объем элементарной ячейки обратной решетки, v – объем элементарной ячейки кристаллической решетки, n – число измерений. Рассмотреть случаи $n = 2$ и $n = 3$.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена, например, в [3], стр. 96.*

Задача 1.5 Построить ячейку Вигнера-Зейтца для двумерной решетки Бравэ вида



Задача 1.6 Запишем вектора основных трансляций для некоторых типов кристаллических решеток (простой кубической, объемноцентрированной кубической и гранецентрированной кубической решеток соответственно) в следующем виде:

$$\vec{a}_1 = a\,\vec{x}_0, \quad \vec{a}_2 = a\,\vec{y}_0, \quad \vec{a}_3 = a\,\vec{z}_0;$$
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(\vec{y}_0 + \vec{z}_0 - \vec{x}_0\right), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{z}_0 + \vec{x}_0 - \vec{y}_0\right), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{x}_0 + \vec{y}_0 - \vec{z}_0\right);$$
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(\vec{y}_0 + \vec{z}_0\right), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{z}_0 + \vec{x}_0\right), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{x}_0 + \vec{y}_0\right);$$

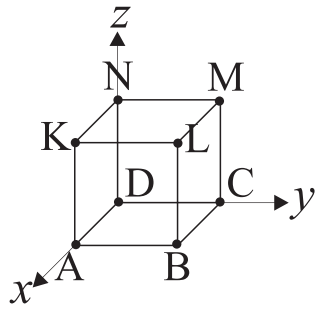
где a - постоянная кристаллической решетки. Для указанных типов решетки найти вектора обратной решетки.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена в [3], т.1, стр. 97 - 98.*

Задача 1.7 Построить обратную решетку и первые три зоны Бриллюэна для квадратной и прямоугольной (с соотношением сторон 1 : 2) двумерных решеток.

Задача 1.8 Предположим, что мы поместили в пространстве идентичные твердые сферы таким образом, чтобы центры сфер лежали в точках, соответствующих простой кубической решетке (п.к.), гранецентрированной решетке (г.ц.к.), объемноцентрированной решетке (о.ц.к.) и структуре типа алмаза. Пусть сферы с центрами в соседних точках касаются друг друга не перекрываясь (такое расположение сфер называют плотноупакованным). Для каждой структуры вычислите плотность упаковки (отношение объема, занятого сферами, к полному объему, занимаемому решеткой)

г.ц.к. — $\sqrt{2}\pi/6 = 0.74$; о.ц.к. — $\sqrt{3}\pi/8 = 0.68$; п.к. — $\pi/6 = 0.52$; алмаз — $\sqrt{3}\pi/16 = 0.74$.

Задача 1.9 Запишите индексы Миллера для некоторых атомных плоскостей простой кубической решетки: ABLK, KLMN, BCML, ACN, BKM (см. рис.).



Задача 1.10 Покажите, что для каждого семейства атомных плоскостей, отстоящих друг от друга на расстояние d, существует такие вектора обратной решетки, которые перпендикулярны к этим плоскостям, причем наименьший из них имеет длину $2\pi/d$.
Указание: Задача рассмотрена в [2], стр. 24-26; в [3], т.1, стр. 99 - 101.

Задача 1.11 Покажите, что для простой кубической решетки с постоянной решетки a расстояние между атомными плоскостями, характеризуемыми индексами Миллера $h,\ k,\ l$ равно

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}.$$

Задача 1.12 Пусть на кристаллическую структуру падает плоская монохроматическая электромагнитная волна вида $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(i(\mathbf{k}\,\mathbf{r} - \omega\, t))$. Будем считать, что каждый атом кристалла порождает расходящуюся сферическую вида $\mathbf{E}_{sc} = \mathbf{A} \exp(i(\mathbf{k}'\,\mathbf{r}'))/r'$, где $\mathbf{A}$ - амплитуда поля в точке расположения атома, $\mathbf{k}'$ - волновой вектор рассеянной волны, $\mathbf{r}'$ - расстояние от атома. Суммируя вклады от отдельных атомов, получите, что на больших расстояниях от кристалла условие резонансного рассеяния может быть записано в виде $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{K}$, где $\mathbf{K}$ - вектор обратной решетки. Это условие известно как условие дифракции Лауэ.
Указание: Задача рассмотрена в [4], стр. 72 - 77, а также частично рассмотрена в [3], т.1, стр. 106 -107.

Задача 1.13 Докажите эквивалентность условия дифракции рентгеновских лучей Лауэ и условия Брегга-Вульфа: $2d\sin\theta = n\lambda$, где d - наименьшее расстояние между атомными плоскостями, θ - угол падения, λ - длина волны падающего излучения.
Указание: Задача рассмотрена в [3], т.1, стр. 108 - 109.

2 Термодинамические свойства газа свободных невзаимодействующих электронов

Задача 2.1 Используя принцип максимума энтропии, получить условия равновесия двухфазной системы: $p_1 = p_2$, $T_1 = T_2$, $\mu_1 = \mu_2$. Обобщить полученные выражения на случай наличия внешних полей.
Указание: Задача рассмотрена в [5], стр. 96, 292–293.

Задача 2.2 Используя большое каноническое распределение Гиббса, получить функции распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена в [5], стр. 189–191.*

Задача 2.3 Определить радиус сферы Ферми k_F газа свободных и независимых электронов с концентрацией $n = N/V$, где N - число электронов в объеме V .

Задача 2.4 Показать, что при $T = 0$ химический потенциал μ вырожденного газа свободных электронов с концентрацией $n = N/V$, где N - число электронов в объеме V, находится на уровне Ферми:

$$\mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$$

.

Задача 2.5 Покажите, что при $T = 0$ средняя энергия газа свободных электронов, приходящаяся на одну частицу, равна $\bar{\mathcal{E}} = 3/5\mathcal{E}_F$.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена в [1], стр. 282; [8], стр. 215–224.*

Задача 2.6 Вычислить плотность состояний $g(\mathcal{E})$ для системы свободных невзаимодействующих электронов. Рассмотреть случаи одномерного, двумерного и трехмерного движения электронов.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена, например, в [11], стр. 168–169; [8], стр. 215–224.*

Задача 2.7 Покажите, что интегралы, содержащие функцию распределения Ферми–Дирака, могут быть вычислены следующим образом (при условии, что подинтегральное выражение не имеет особенностей при $\mathcal{E} = \mu$)

$$\int\limits_0^\infty H(\mathcal{E}) f(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \int\limits_0^\mu H(\mathcal{E}) d\mathcal{E} + \sum_{m=0}^{\infty} a_m (k_B T)^{2m} \frac{d^{2m-1}}{d\mathcal{E}^{2m-1}} H(\mathcal{E})\Big|_{\mathcal{E}=\mu},$$

$$\int\limits_0^\infty K(\mathcal{E}) \frac{\partial f(\mathcal{E})}{\partial \mathcal{E}} d\mathcal{E} = -K(\mu) - \sum_{m=0}^{\infty} a_m (k_B T)^{2m} \frac{d^{2m}}{d\mathcal{E}^{2m}} K(\mathcal{E})\Big|_{\mathcal{E}=\mu},$$

$$f(\mathcal{E}) = \frac{1}{\exp((\mathcal{E}-\mu)/k_B T) + 1},$$

$$a_m = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^{2m}}{(2m)!} \left(-\frac{d}{dx} \frac{1}{e^x + 1}\right) dx, \qquad a_1 = \frac{\pi^2}{6}, \qquad a_2 = \frac{7}{4} \cdot \frac{\pi^4}{90}.$$

<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена в [6], стр. 33–34; [3], т.1, стр. 374–375.*

Задача 2.8 Для системы с фиксированным числом частиц, определите температурную зависимость химического потенциала $\mu(T)$ для системы свободных невзаимодействующих электронов. Убедитесь, что

$$\mu(T) = \mathcal{E}_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \cdot \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F}\right)^2\right]$$

Задача 2.9 Обобщите результат задачи 2.8 для системы ферми–частиц с произвольной зависимостью плотности состояний от энергии.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена в [6], стр. 32–34.*

Задача 2.10 Покажите, что при $T \neq 0$ средняя энергия газа свободных невзаимодействующих электронов может быть найдена следующим образом:

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{3}{5} \mathcal{E}_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \cdot \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F}\right)^2\right]$$

<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена в [1], стр. 282; [8], стр. 215–224.*

Задача 2.11 Вычислите теплоемкость газа при постоянном объеме C_v для системы свободных невзаимодействующих электронов при низких температурах.
<u>Указание:</u> *Задача рассмотрена в [1], стр. 282; [8], стр. 215–224.*

Задача 2.12 Вычислите теплоемкость C_v при низких температурах для системы ферми–частиц на случай системы с произвольной зависимостью плотности состояний от энергии (обобщение задачи 2.11).
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [6], стр. 32–34.*

Задача 2.13 Найти давление газа электронов, подчиняющихся статистике Ферми–Дирака.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [1], стр. 285.*

Задача 2.14 Показать, что магнитная восприимчивость χ вырожденного газа свободных невзаимодействующих электронов определяется выражением

$$\chi = \mu_B^2 \; g(\mathcal{E}_F) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F} \right)^2 \right],$$

где $\mu_B = e\hbar/2mc$ - магнетрон Бора.

3 Транспортные свойства газа свободных невзаимодействующих электронов

Задача 3.1 Вычислить удельную проводимость металла σ, его диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$ и электронную теплопроводность κ в модели Друде.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [3], т.1, стр. 31–38.*

Задача 3.2 Пусть металл, находящийся при постоянной температуре, помещен в однородное постоянное электрическое E. Покажите, что в модели Друде средняя энергия, передаваемая движущимся электроном кристаллической решетке, за одно столкновение равна $(eE\tau)^2/m$, где τ — среднее время между столкновениями. Покажите, что средняя потеря энергии всеми электронами в проводнике в 1 см^3 за 1 сек равна σE^2 (σ — удельная проводимость, см. задачу 3.1).

Задача 3.3 Вычислить компоненты тензора проводимости σ_{ij} ($\mathbf{j} = \hat{\sigma}\mathbf{E}$)для кристалла в магнитном поле с учетом рассеяния(эффект Холла).
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [11], стр. 25–28.*

Задача 3.4 Вычислить теплопроводность металла в модели Зоммерфельда, используя кинетическое уравнение Больцмана.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [6], стр. 42–44.*

Задача 3.5 Вычислить удельную проводимость металла, используя кинетическое уравнение Больцмана.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [6], стр. 41–42.*

Задача 3.6 Вычислить удельную проводимость металла в слабом магнитном поле, используя кинетическое уравнение Больцмана. (эффект Холла).
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [6], стр. 76–78.*

4 Электрон в периодическом потенциале. Поверхность Ферми.

Задача 4.1 Рассмотреть энергетические уровни в одномерной решетке с периодом d, где потенциальная энергия имеет вид

$$V = \left\{ \begin{array}{lll} V_0, & \text{if} & -b \le x \le 0, \\ 0, & \text{if} & 0 \le x \le (d-b) \end{array} \right. ; \qquad V(x+d) = V(x).$$

Рассмотреть случай, когда $V_0 \to \infty$, $b \to 0$, но $V_0 b = \text{const}$ (модель Кронига–Пенни).
<u>*Указание:*</u> *Решение задачи приведено, например в [1]; [3] стр.152-155; [8] стр.273-281*

Задача 4.2 Используя разложение волновой функции электрона в ряд по плоским волнам, найти вид детерминантного уравнения для определения собственных значений энергии $\mathcal{E}(k)$ в случае одномерного кристалла. Найти собственные значения энергии в трех- и пятиволновом приближении, если в таком кристалле потенциал имеет вид $V(x) = -3 - 2\cos 2x$. Исследовать профиль волновых функций при различных значениях квазиимпульса для двух нижних разрешенных энергетических зон.
Указание: *Для решения задачи необходимо использовать компьютер. Решение задачи о разрешенных энергиях $\mathcal{E}(k)$ для значений квазиимпульса $k/k_B = 0, 0.5, 1$ и профилях волновой функции в нижней разрешенной зоне приведено в [1] стр.307-308*

Задача 4.3 Пользуясь приближением слабой связи, найти зонный спектр и волновые функции для электрона в одномерной решетке с потенциалом $V(x) = -3-2\cos 2x$ (включая состояния вблизи границы зоны Бриллюэна).
Указание: *Задача рассмотрена в [3] стр.158- 166*

Задача 4.4 Пользуясь приближением сильной связи, найти зависимость $\mathcal{E}(k)$ для нижней разрешенной зоны для случая одномерной решетки с потенциалом $V(x) = -3 - 2\cos 2x$. Предположить, что атомные волновые функции такие же, как и у простого гармонического осциллятора, $\Psi(x) = \exp(-ax^2)$. Параметр a должен быть определен из условия минимума энергии при соответствующем значении квазиимпульса k.
Указание: *Для решения задачи необходимо использовать компьютер. Решение задачи о разрешенных энергиях $\mathcal{E}(k)$ для некоторых значений квазиимпульса приведено в [1] стр.312*

Задача 4.5 Используя приближение сильной связи для описания электронов в простой, гранецентрированной и объемноцентрированной кубических решетках и предполагая при этом, что $s-$функции могут быть взяты в качестве электронных атомных волновых функций, найти зависимость $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ для нижней разрешенной зоны. Показать, что энергетические поверхности в таких системах при $k = 0$ имеют сферическую симметрию. Определить эффективную массу электронов вблизи $k \to 0$.
Указание: *Задача решена в [10] стр.155; частично решена в [1] стр.308-309, [3] т.1 стр.186-187.*

Задача 4.6 Пусть $\psi(\mathbf{r}) = u_{k,n}\exp(\mathrm{i}\mathbf{kr})$ — функция Блоха, k — квазиимпульс, n — номер зоны. Введем функцию Ваннье

$$w_{R,n}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega_B} \psi_{k,n}(\mathbf{r}-\mathbf{R})d^3\mathbf{k}.$$

Показать, что функции Ваннье для атомов различных узлов решетки ортогональны.

Задача 4.7 Рассмотрим одномерную периодическую структуру. Пусть вблизи границы зоны Бриллюэна в энергия частицы может быть записана в следующем виде: $\mathcal{E} = \pm\sqrt{\Delta^2 + [k^2 - (k-K)^2]^2}$, где k — квазиимпульс, K — вектор обратной решетки. Какой вид имеют волновые функции электрона при $|\mathcal{E}| < \Delta$, когда его энергия выбрана в запрещенной зоне?

Задача 4.8 Построить схематически поверхности Ферми в $k-$пространстве для простой квадратной решетки для одно-, двух-, трехвалентных металлов.
Указание: *Задача рассмотрена в [1] стр.299; [8],стр.269-273*

5 Частица в магнитном поле. Кристалл в магнитном поле.

Задача 5.1 Найти оператор скорости $\hat{\mathbf{v}}$, оператор координат центра орбиты $\hat{\mathbf{r}}_0$ и оператор квадрата радиуса орбиты $\hat{\mathbf{r}}_L^2$, соответствующих движению частицы в перпендикулярном однородном и постоянном магнитном поле. Установить коммутационные соотношения для этих операторов с гамильтонианом.
Указание: *Задача рассмотрена в [12] стр.258- 259; [13],стр.553*

Задача 5.2 Найти волновые функции и уровни энергии стационарных состояний заряженной бесспиновой частицы в однородном магнитном поле при следующих калибровках векторного потенциала:

а) $A_x = 0$, $A_y = H_0 x$, $A_z = 0$;
б) $A_x = -H_0 y$, $A_y = 0$, $A_z = 0$;
в) $\mathbf{A} = [\mathbf{H}_0 \times \mathbf{r}]/2$;
Какова кратность вырождения энергетических уровней поперечного движения частицы?
Указание: *Задача рассмотрена в [6] стр.154- 155; [12] стр.260-263; [13],стр.554-557*

Задача 5.3 Охарактеризовать поперечное пространственное распределение заряженной частицы $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ в однородном магнитном поле в стационарных состояниях Ψ_{m,n,p_z} (состояния заряженной бесспиновой частицы в магнитном поле в радиальной калибровке). Рассмотреть предельный случай $n \gg 1$ (переход к классической механике).
Указание: *Задача решена в [12], стр. 264- 266.*

Задача 5.4 Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии заряженной частицы со спином $s = 1/2$ в однородном магнитном поле при следующих калибровках векторного потенциала:

$$
\begin{aligned}
&A_x = 0, \qquad A_y = H_0 x, \quad A_z = 0;\\
&A_x = -H_0 y, \quad A_y = 0, \qquad A_z = 0;\\
&\mathbf{A} = [\mathbf{H}_0 \times \mathbf{r}]/2;
\end{aligned}
$$

Задача 5.5 Вывести уравнения полуклассической динамики электронов в твердом теле

$$
\begin{aligned}
&\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}},\\
&\hbar\frac{\partial \mathbf{k}}{dt} = e\left(\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\,\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r},t)\right),
\end{aligned}
$$

из уравнений Гамильтона, $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ - локальное электрическое поле. $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ - локальное магнитное поле.
Указание: *Задача рассмотрена в [3] стр.385.*

Задача 5.6 Для металлов, у которых на границе зоны Бриллюэна щель между энергетическими зонами мала, существует вероятность перехода электрона через эту щель, если приложено магнитное поле; это явление называют магнитным пробоем. Показать, что магнитный пробой имеет место при условии

$$
\frac{\hbar\omega_c \mathcal{E}_F}{\mathcal{E}_g^2} > 1.
$$

где $\mathcal{E}_F$ — энергия Ферми, $\mathcal{E}_g$ — ширина энергетической щели, ω_c — циклотронная частота.
Указание: *Задача рассмотрена в [1] стр.294- 295.*

поле

6 Колебания кристаллической решетки. Фононы.

Задача 6.1 Получите закон дисперсии фононов в одномерной цепочке атомов со взаимодействием между $m-$ ближайшими соседями.

$$
U = \sum_n \sum_{m>0} \frac{1}{2} C_m \left(u_n - u_{n+m}\right),
$$

где u_n смещение $n-$го атома в решетке.

Задача 6.2 Вычислить фононную теплоемкость кристалла.
Указание: *Задача рассмотрена в [3] т.2 стр.81- 91*

Задача 6.3 Вычислить теплопроводность изолятора (фононную часть теплопроводности кристалла).
Указание: *Задача рассмотрена в [3] т.2 стр.127- 133*

Задача 6.4 ?

Задача 6.5 Для фононов в металлах вывести соотношение Бома–Ставера, связывающее скорость Ферми v_F и скорость звука в металле c:

$$c^2 = \frac{Zm}{3M}v_F^2,$$

где Z — заряд иона, M — масса иона, m — масса электрона.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [3] т.2 стр.138- 141*

7 Взаимодействие электронов. Экранировка.

Задача 7.1 Запишем гамильтониан $\hat{H}$ системы N взаимодействующих электронов в виде

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 - U^{ion}(\mathbf{r}_i)\right) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|},$$

$$U^{ion}(\mathbf{r}_i) = -\sum_{\mathbf{R}}\frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|}$$

где Z — заряд ионов, $\mathbf{R}$ — координаты неподвижных ионов, $\mathbf{r}_i$ — координаты электронов. Будем искать решение стационарного уравнения Шредингера $\hat{H}\Psi = \mathcal{E}\Psi$ в виде:

$$\Psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^{N}\psi_i(\mathbf{r}_i), \qquad \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_i|^2 d\mathbf{r} = 1.$$

Используя вариационный принцип и условие нормировки волновых функций, получите систему уравнений Хартри

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i + U^{\mathrm{ion}}\psi_i + \left(e^2\sum_j\int\frac{|\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}'\right)\psi_i = \mathcal{E}_i\psi_i.$$

Задача 7.2 Используя гамильтониан $\hat{H}$ из задачи 7.1 и предполагая, что волновая функция системы является антисимметричной комбинацией одноэлектронных функций $\psi_i(\mathbf{r}_i, s_i)$ (детерминант Слетера) где s_i - спиновая переменная. Используя вариационный принцип и условие нормировки одноэлектронных волновых функций ψ_i, получить систему уравнений Хартри–Фока

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i + U^{\mathrm{ion}}\psi_i + U^{\mathrm{el}}\psi_i - \sum_j\int_{-\infty}^{+\infty}d\mathbf{r}'\,\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\psi_j^*(\mathbf{r}')\psi_i(\mathbf{r}')\psi_j(\mathbf{r})\delta_{s_i s_j} = \mathcal{E}_i\psi_i,$$

$$U^{\mathrm{el}} = -e\sum_{i=1}^{N}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_i(\mathbf{r}_i', s_i)|^2\frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|},$$

где δ_{ij} — символ Кронекера.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [3] т.1, стр.331-333*

Задача 7.3 Покажите, что линейная комбинация плоских волн вида $\psi_i(\mathbf{r}) = \exp(\mathrm{i}\mathbf{k}_i\mathbf{r})$ является решением уравнений Хартри–Фока (см. задачу 7.2), при этом энергия электрона $\mathcal{E}(k)$ определяется следующим выражением

$$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{2e^2}{\pi}k_F\left(\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right), \quad x = k/k_F.$$

<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [3] т.1, стр.333-334*

Задача 7.4 Используя решение задачи 7.3, вычислите энергию системы свободных взаимодействующих электронов:

$$\mathcal{E} = 2\sum_{|k|<k_F} = N\left(\frac{3}{5}E_F - \frac{3}{4}\frac{e^2k_F}{\pi}\right),$$

где N — число электронов, $\mathcal{E}_F = \mu(T=0)$ — энергия Ферми.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [3] т.1, стр.334*

Задача 7.5 Используя формулу первого порядка стационарной теории возмущений

$$\psi_k = \psi_k^0 + \sum_{k'\neq k}\frac{(\psi_{k'}^0, \hat{V}\psi_k^0)}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'}}\psi_k^0,$$

и учитывая, что

$$\rho(\mathbf{r}) = -e\sum_k f_k|\psi_k|^2,$$

где $f_k = f_0(\mathcal{E}_k)$ - функция распределения Ферми-Дирака, покажите, что в первом приближении по возмущающему потенциалу $\tilde{\varphi}$ фурье–образ индуцированного заряда есть

$$\rho^{\mathrm{ind}}(\mathbf{q}) = e^2\int\frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\cdot\frac{f_{k+q} - f_k}{\mathcal{E}_{k+q}^0 - \mathcal{E}_k^0}\,\tilde{\varphi}(\mathbf{q}).$$

Задача 7.6 Используя решение предыдущей задачи 7.5 , покажите, что статическая продольная диэлектрическая проницаемость свободного электронного газа описывается следующим выражением

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2}\int\frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\cdot\frac{f_{k+q} - f_k}{\mathcal{E}_{k+q}^0 - \mathcal{E}_k^0}$$

(экранировка Линдхарда).

Задача 7.7 Пусть приложенное переменное гармоническое поле (частоты ω) вызывает возмущение плотности газа свободных электронов. Ограничиваясь членами первого порядка по возмущению, показать, что реакция электронного газа на такое возмущение описывается диэлектрической проницаемостью, равной

$$\varepsilon(\mathbf{q},\omega) = 1 - \frac{4\pi^2 e^2}{q^2}\int\frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3}\cdot\frac{f_{k+q} - f_k}{\mathcal{E}_{k+q}^0 - \mathcal{E}_k^0 - \hbar\omega}$$

<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [1], стр. 286–287; [7], стр. 827–830.*

Задача 7.8 Пользуясь результатом задачи 7.6, показать, что в пределе $\omega \to 0$ и $|\mathbf{q}| \ll k_F$ статическая диэлектрическая проницаемость описывается следующим выражением

$$\varepsilon(\mathbf{q},0) \to 1 + \frac{k_0^2}{q^2},$$

где $K_0^2 = 4\pi e^2 g(\mathcal{E}_F)$, где $g(\mathcal{E}_F)$ — плотность состояний на поверхности Ферми. Этот результат известен как приближение Томаса–Ферми.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [1], стр. 286–287; [7], стр. 830–831.*

Задача 7.9 В приближении Томаса–Ферми ($|q| \ll k_F$) исследовать пространственное распределение электрического поля, создаваемого точечным зарядом в газе свободных свободных электронов.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [1], стр. 287–288; [7], стр. 830–831; [3], т. 1, стр. 340–342.*

Задача 7.10 В приближении Томаса–Ферми ($|q| \ll k_F$) исследовать пространственное распределение электрического поля, создаваемого равномерно заряженной прямолинейной нитью в газе свободных свободных электронов.

Задача 7.11 Пользуясь результатом задачи 7.6, показать, что при $\omega = 0$ и $T = 0$ статическая диэлектрическая проницаемость описывается следующим выражением

$$\varepsilon(\mathbf{q},0) = 1 + \frac{4\pi^2 e^2}{q^2}\cdot\frac{m^* k_F}{\hbar^2\pi^2}\left(\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right), \qquad x = q/2k_F.$$

Задача 7.12 Пользуясь результатом задачи 7.11, показать, что вдали от точечного заряда электрический потенциал спадает по следующему закону

$$\varphi(r) \propto \frac{Q}{r^3} \cos(2k_F r).$$

Этот результат известен как осцилляции Фриделя.
<u>*Указание:*</u> *Подобная задача рассмотрена в [15], стр. 204–206.*

Задача 7.13 Пользуясь результатом задачи 7.7, показать, что при $\omega \gg \mathcal{E}^0_{k+q} - \mathcal{E}^0_k$ диэлектрическая проницаемость описывается следующим выражением

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) \to 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2},$$

где $\omega_p^2 = 4\pi e^2 N/m^*$ — плазменная частота.
<u>*Указание:*</u> *Задача рассмотрена в [7], стр. 832.*

Список литературы

[1] *Задачи по физике твердого тела*, под ред. Г. Дж. Голдсмида, М.: – "Наука", 1976 г.

[2] Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, М.: Мир, 1966.

[3] Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, М.: – "Мир", 1979 г.

[4] Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, М., 1978 г.

[5] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики, т. V*, М.: Физматлит, 2001.

[6] А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, М.: Наука, 1987.

[7] В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин, В. А. Мямлин, *Курс теоретической физики, т. 2*, М.: Наука, 1971.

[8] П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов, *Физика твердого тела*, Нижний Новгород, 1993 г.

[9] В. Я. Демиховский, Г. А. Вугальтер, *Физика квантовых низкоразмерных структур*, Нижний Новгород, 2000 г.

[10] А. И.Ансельм, *Введение в теорию полупроводников*, М.: Наука, 1978.

[11] В.Л.Бонч–Бруевич, С.Г.Калашников, *Физика полупроводников*, М.

[12] В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган *Задачи по квантовой механике, М.: Наука, 1981*

[13] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики, т. III*, М.: Физматлит, 2001

[14] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики, т. IX*, М.: Физматлит, 2001

[15] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики, т. X*, М.: Физматлит, 2001.