задачи, часть 1

1

Гамильтониан H зависит от переменной η как от параметра, ψ — собственная функция H, соответствующая собственному значению E. Получить используемые в лекции 1 формулы дифференцирования E по параметру:

$$\frac{\partial E}{\partial \eta} = \int \psi^* \frac{\partial H}{\partial \eta} \psi d\mathbf{r},$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \eta^2} = \int \psi^* \frac{\partial^2 H}{\partial \eta^2} \psi d\mathbf{r} + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial \eta} \frac{\partial H}{\partial \eta} \psi d\mathbf{r} + \int \psi^* \frac{\partial H}{\partial \eta} \frac{\partial \psi}{\partial \eta} d\mathbf{r}.$$

2

Показать, что для невырожденного электронного состояния n в первом порядке теории возмущений поправка к адиабатической энергии U_n, обусловленная неадиабатичекскими слагаемыми с $\mathbf{A}^{(j)}_{nn'}$ [см. уравнение (1.4) лекции 1], обращается в 0.

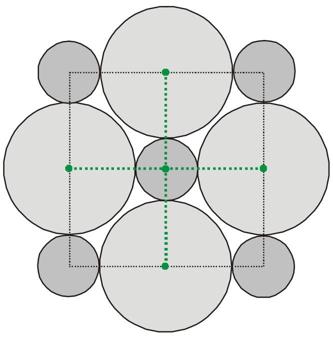
3

Показать, что идеальный кристалл не может иметь осей симметрии порядка n с $n = 5$ и $n \geq 7$.

4

Объемноцентрированная и гранецентрированная кубические решетки могут быть представлены как простые кубические решетки с соответствующими базисами. Определить количество и расположение (т.е. радиус-векторы $\mathbf{r}_s$) точек в этих базисах.

5



Модель плотноупакованной кристаллической структуры: сферы (не обязательно с одинаковыми радиусами) с центрами в точках $\mathbf{R_n} + \mathbf{r}_s$ ($\mathbf{R_n}$ задает решетку Браве, $\mathbf{r}_s$ — базис), причем расстояния между этими точками таковы, что каждая сфера касается (без пересечений) своих <u>ближайших</u> соседей (см. рис.) Относительная доля объема, занятого сферами, называется коэффициентом упаковки. Рассчитать значения коэффициента упаковки для

1) простой кубической решетки;
2) объемноцентрированной кубической решетки;
3) гранецентрированной кубической решетки;
4) структуры алмаза;
5) структуры хлорида натрия.

В случаях 1) — 4) считать, что сферы имеют одинаковые радиусы, в случае 5) — что отношение радиусов сфер, моделирующих ионы соответственно натрия и хлора, равно 1/2.

6

Пусть $\mathbf{k_m}$ — решетка, обратная к решетке Браве $\mathbf{R_n}$. Доказать, что решетка, обратная к $\mathbf{k_m}$, есть исходная решетка $\mathbf{R_n}$.

7

Найти векторы и определить тип решетки, обратной к

1) гексагональной решетке;
2) гранецентрированной кубической решетке.

8

Постоянная простой кубической решетки (длина ребра примитивной элементарной ячейки) равна a. Найти длины (выразив их через a) векторов основных трансляций и углы между этими векторами для двумерных решеток, образованных узлами, лежащими в следующих атомных плоскостях:

(1, 1, 1);
(4, 2, 7);
(5, 27, 0).