9.feladat megoldás

Szigeti Bertalan György

2018. január 15.

A feladatkiírásnak megfelelően mindkét algoritmust leprogramoztam Matlabban. A forrás kódot kommentált formátumban mellékelem a függelékben. Mivel az algoritmus magában a feladatban is le volt írva, ezért azt itt nem ismertetem. Csupán néhány technikai részletre térek ki.

A program egymás után végigfuttatja mindkét algoritmust. Először az a) típusú módszerrel méri ki a DOS(ω) függést, majd a b) feladatrészben ismertetett módszerrel. Ehhez, bár a feladat elméletéből világos, hogy csupán az $x_0 - 1 \leq \Re(\omega) \leq x_0 + 1$ intervallumon van fizikailag értelme vizsgálódnunk, annak szemléltetése képpen, hogy az állapotsűrűség kompakt tartójú, mégis csak nagyobb ω intervallumra kiszámíttattam és ábrázoltattam azt a programmal. Az ω intervallumot minden esetben 200 pontból tettem össze, ennyi ω értékre futtattam le az algoritmusokat külön-külön.

Az algoritmusok végtelen hurokba való kerülését megakadályozandó, iterációszám korlátot és konvergencia kritériumot is alkalmaztam. Az iterációszám korlát magától értetődő: bármelyik ω-nál is tartsunk, bizonyos iterációszám fölé nem mehet az algoritmus. A konvergencia feltételt olyan formában szabtam ki, hogy két, egymást követő x_c érték eltérésének abszolút értékének elegendő volt egy bizonyos ϵ érték alá esnie, hogy leálljon az algoritmus. Ha ez nem történne meg, a lépésszám korlát lép éetbe előbb utóbb. A lépésszám korlátot $n = 10000$ értékben, az konvergencialimitet $\epsilon = 1\mathrm{E}{-6}$ érétkben szabtam meg. Ezen paraméter páros esetében mindig gyorsabban konvergált az iteráció, mint hogy a megszakításra szükség lett volna.

Az algoritmusok futtatása során tekintettel voltam a komplex gyökökre. Minden egyes alkalommal megvizsgáltam, hogy valóban a pozitív imaginárius részű gyököt használja-e az algoritmus, s ha úgy találtam, hogy ez sérül, akkor a gyök (-1)-szeresét vettem.

Alább közlöm az eredményül kapott DOS(ω) függvényeket.

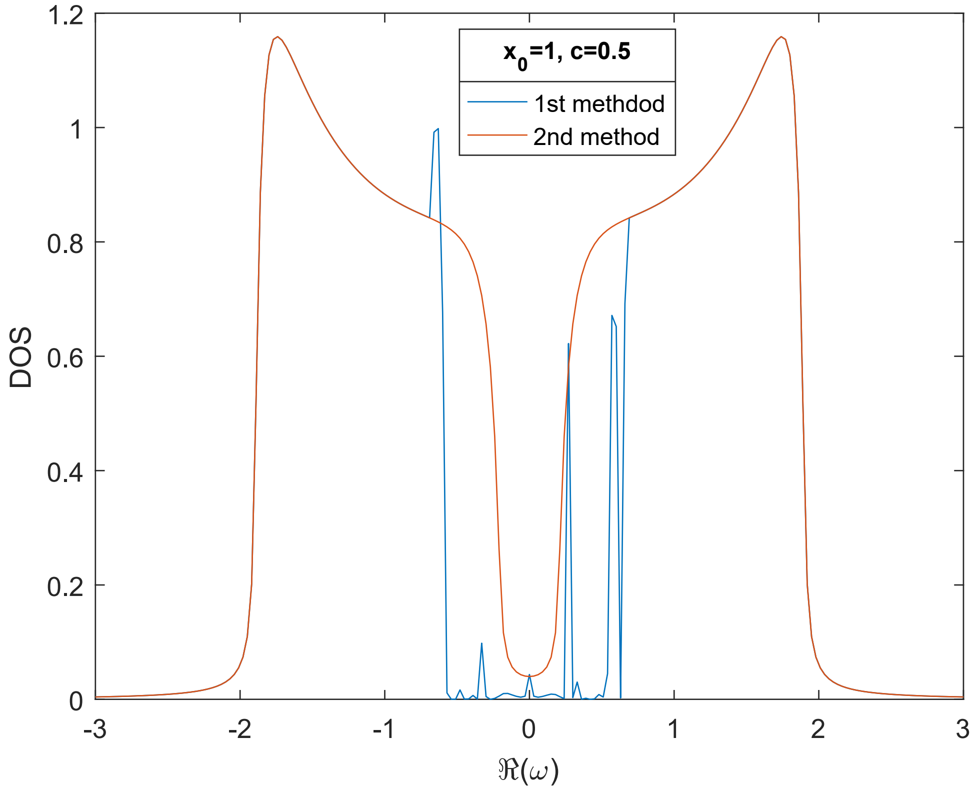


Figure 1: $DOS(\omega)$ *függés* $x_0 = 1$ *és* $c = 0.5$ *esetén.*

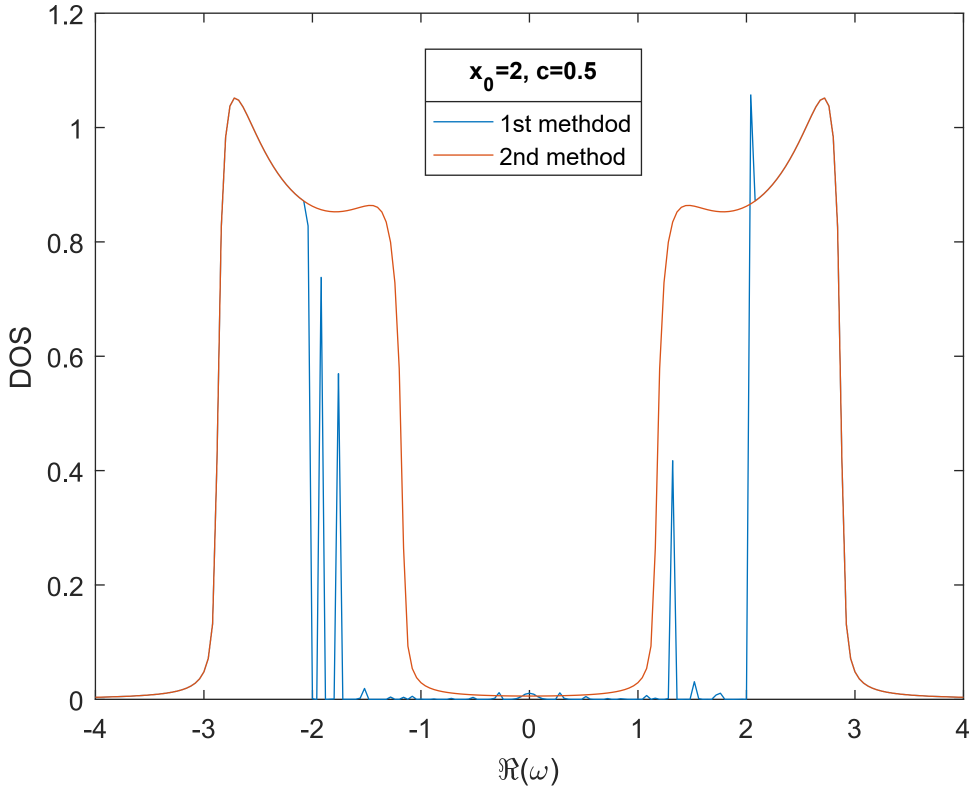


Figure 2: *$DOS(\omega)$ függés $x_0 = 2$ és $c = 0.5$ esetén.*

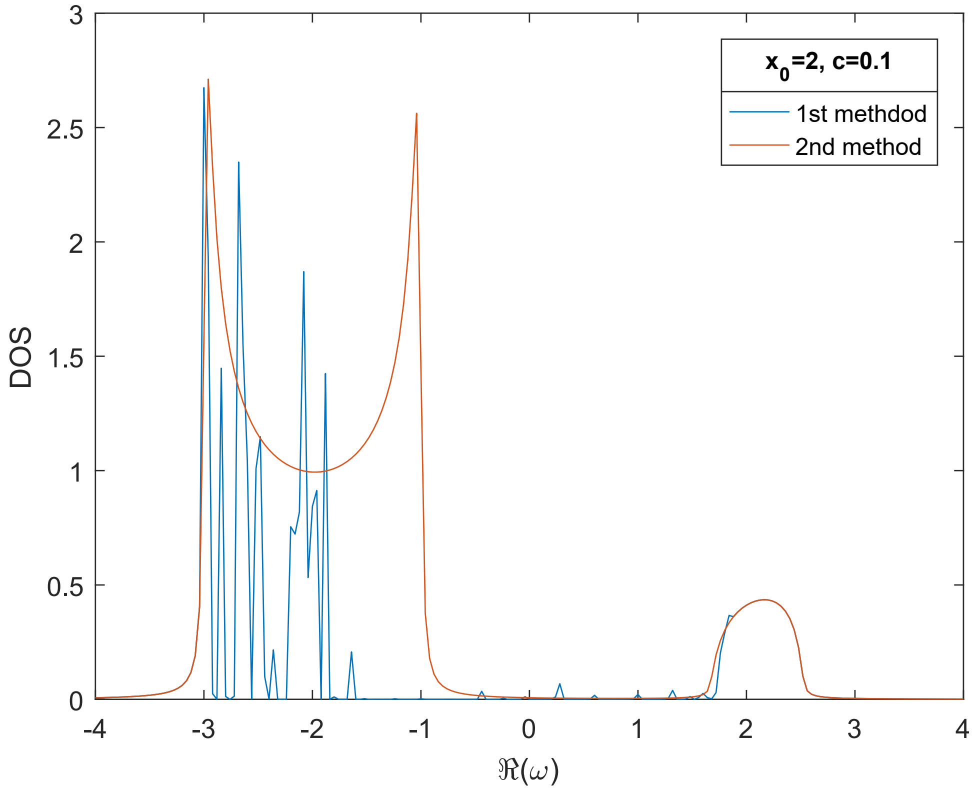


Figure 3: *$DOS(\omega)$ függés $x_0 = 2$ és $c = 0.1$ esetén.*

1 Forráskód

```
clc %korabbi parancsok torlese
clear all
format long %pontos szamabrazolas
x0=2; %az aktualis x0 ertek
%x0=2;
c=0.1; %az aktualis c ertek
%c=0.1;
maxstep=10000;%lepesszam korlat az iteracio szamra
limit=1e-12; %konvergencia feltetel: ha max ennyi az eltere ket egmast koveti iteracio kozott, akkor leall (kulonben, ha nem, akkor a lepesszamkorlat lep ervenybe)
omegalimup=x0+2; %omega intervalluma
omegalimlow=x0-6;
div=200; %hany ponton merjunk bele az omega intervallumba
omega=zeros(1,div+1);
imomega=0.02;
alpha=0.2;
for l=1:(div+1)
    omega(l)=omegalimlow+(l-1)*(omegalimup-omegalimlow)/div+i*imomega; %itt vektorba (tombbe) rendezzuk azokat az omegakat, amikre kiszamoljuka DOSt
end
xccoll=zeros(1,div+1); %ez meg tomb lesz, amibe gyujtjuk a bekonvergalt iteraciok eredmenyet minden egyes omegahoz
for j=1:(div+1)%j fut az omegakon
xcin=zeros(1,maxstep); %inicializaljuk az iteraciot
xcout=zeros(1,maxstep);
dxc=limit*2; %inicializaljuk a konvergenciafeltetelt, hogy legeloszor meg tutira fusson az algoritmus
xcin(1)=alpha*(2*c-1)*x0+(1-alpha)*x0; %linear kombinacio
rot=sqrt((omega(j)-xcin(1))^2-1); %a kritikus gyokre odafigyelunk
if(imag(rot)<0)
    rot=-rot;%a pozitiv imaginarius reszu gyokot vesszuk
end
xcout(1)=(2*c-1)*x0+(x0^2-xcin(1)^2)/rot;%meg az n=1 lepest is kuln csinaljuk meg
n=2;
while n<= maxstep-2 && abs(dxc)>limit%innentol mar hurokban fut
xcin(n)=alpha*xcout(n-1)+(1-alpha)*xcin(n-1);%linear kombi
rot=sqrt((omega(j)-xcin(n))^2-1);%gyokviszgalat
if(imag(rot)<0)
    rot=-rot;
end
xcout(n)=(2*c-1)*x0+(x0^2-xcin(n)^2)/rot;%egyenlet
dxc=xcin(n)-xcin(n-1);%vizsgaljuk a konvergenciat
n=n+1;
end
xccoll(j)=xcin(n-1);%az iteracio veget (xc) elmentjuk
end

rot=zeros(1,div+1);%DOS(omega) fugges elkeszitese, elmentese
for l=1:(div+1)
    rot(l)=sqrt((omega(l)-xccoll(l))^2-1);
    if(imag(rot(l))<0)
        rot(l)=-rot(l);
    end

end
```

```
omega2=omega;
rot2=rot;

%itt kezdodik a masodik modszer (azonos lepesszamkorlat,
%konvergenciakorlat, omega

for j=1:(div+1)%2. fajta iteracioban is vegig megyunk az omegakon
xc=zeros(1,maxstep);%deklaralas
Gc=zeros(1,maxstep);
tc=zeros(1,maxstep);
dxc=zeros(1,maxstep);
dxc(1)=limit+1;%eloszor meg biztosan teljesitheto konvergencikriterium, hogy menjen bele az elso hurokba az iteracio
xc(1)=(2*c-1)*x0;%nulladik lepes
n=1;
while n<= maxstep && abs(dxc(n))>limit%itt megy hurokban
ro=sqrt((omega(j)-xc(n)).^2-1);%gyokvizsgalat
if (imag(ro)<0)
    ro=-ro;
end
Gc(n)=1./ro;%vesszuk sorra a lepeseket
tc(n)=c*(x0-xc(n))./(1-(x0-xc(n)).*Gc(n))-(1-c)*(x0+xc(n))./(1+(x0+xc(n)).*Gc(n));
dxc(n+1)=tc(n)./(1+tc(n).*Gc(n));
xc(n+1)=xc(n)+dxc(n+1);
n=n+1;
end
xccoll(j)=xc(n);%vegul kimentjuka  vegeredmenyt
end
rot=zeros(1,div+1);%itt is elkeszitjuk a DOS(omega) fuggest
for l=1:(div+1)
    rot(l)=sqrt((omega(l)-xccoll(l)).^2-1);
    if(imag(rot(l))<0)
        rot(l)=-rot(l);
    end

end

figure(1)%egyben abrazoljuk
plot(real(omega2), -imag(1./rot2),real(omega), -imag(1./rot))
xlabel('\Re(\omega)')
ylabel('DOS')
lgd=legend('1st methdod','2nd method')
title(lgd,'x_0=2, c=0.1' )
```

1. feladat

a) Az elsőrendű degenerált perturbációszámítás során a sajátfüggvényt a degenerált állapotok lineáris kombinációjának formájában keressük:

$$\Psi_{nx}(\underline{r}) = c_D \varphi_D(\underline{r}) + c_E \varphi_E(\underline{r}) + c_F \varphi_F(\underline{r}) + c_G \varphi_G(\underline{r})$$

A Hamilton-operátor mátrixa a degenerált altéren a következő alakú:

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon & V_{DE} & V_{DF} & V_{DG} \\ V_{ED} & \varepsilon & V_{EF} & V_{EG} \\ V_{FD} & V_{FE} & \varepsilon & V_{FG} \\ V_{GD} & V_{GE} & V_{GF} & \varepsilon \end{bmatrix},$$

ahol $V_{ij} = \langle \varphi_i | V | \varphi_j \rangle$, illetve $\varepsilon = \varepsilon_{D,E,F,G}(\underline{k}) - \varepsilon(\underline{k}) - V_{ii}$.

Definíció szerint felírva egy ilyen, hullámfüggvényekkel szendvicsezett potenciál mátrixelemet (legyen az $\langle i|$ állapot a $\underline{K}$ sávhoz, a $|j\rangle$ állapot a $\underline{K}'$ sávhoz asszociált Bloch-állapot) (ld. jegyzet (5) egyenlete):

$$V_{ij} = V_{\underline{K},\underline{K}'} = \int d^3r\, \phi^*_{\underline{K}}(\underline{k},\underline{r})\, V(\underline{r})\, \phi_{\underline{K}'}(\underline{k},\underline{r}) = \frac{1}{V}\int d^3r\, e^{-i(\underline{k}+\underline{K})\underline{r}}\, V(\underline{r})\, e^{i(\underline{k}+\underline{K}')\underline{r}} =$$

$$= \frac{1}{V}\int d^3r\, e^{i(\underline{K}'-\underline{K})\underline{r}}\, V(\underline{r}) = V_{\underline{K}-\underline{K}'}$$

A mátrixelemek tehát valójában csak a hullámszámok különbségétől függenek. Emiatt a diagonálisban lévő V_{ii} tagokat konstans voltuk miatt el is hagyhatjuk.
$V_{ii} := 0$

Továbbá, a jegyzet (35) egyenlete értelmében valamely $g \in G$ pontcsoport-szimmetria esetén (melyre G a rács pontcsoportja):

$$V_{\underline{K}} = V_{g\underline{K}}$$

Így az offdiagonális elemek között is találunk további egyezéseket. A teljesség igénye nélkül most nem részletezem, hiszen triviálisan látható, hogy két különböző mátrixelem lesz, ezek pedig:

$V_1 = V_{\frac{2\pi}{a}(1,1,0)}$

$V_2 = V_{\frac{2\pi}{a}(2,0,0)}$, amint az a k vektorok kiscsoportjából (C_{4v}) levezethető.

Így tehát a Hamilton alakja:

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon & V_1 & V_2 & V_1 \\ V_1 & \varepsilon & V_1 & V_2 \\ V_2 & V_1 & \varepsilon & V_1 \\ V_1 & V_2 & V_1 & \varepsilon \end{bmatrix}$$

A Hamilton-operátor, mint mátrix karakterisztikus egyenletét megoldva megkapjuk annak sajátértékeit. A számolást nem részletezve azonnal az eredményre jutunk, hogy a Hamilton-operátornak van egy kétszeresen degenerált és két nem degenerált sajátértéke:

$$\varepsilon_{1,2} = \varepsilon_{D,E,F,G}(\underline{k}) - V_2$$

$$\varepsilon_3 = \varepsilon_{D,E,F,G}(\underline{k}) + V_2 - 2V_1$$

$$\varepsilon_4 = \varepsilon_{D,E,F,G}(\underline{k}) + V_2 + 2V_1$$

A fenti sajátértékekhez tartozó sajátvektorok pedig:

$$\Upsilon_1(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_D(\underline{r}) - \varphi_F(\underline{r})\right)$$

$$\Upsilon_2(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_E(\underline{r}) - \varphi_G(\underline{r})\right)$$

$$\Upsilon_3(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{4}}\left(\varphi_D(\underline{r}) - \varphi_E(\underline{r}) + \varphi_F(\underline{r}) - \varphi_G(\underline{r})\right)$$

$$\Upsilon_4(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{4}}\left(\varphi_D(\underline{r}) + \varphi_E(\underline{r}) + \varphi_F(\underline{r}) + \varphi_G(\underline{r})\right)$$

b) Most vizsgáljuk meg a kérdést csoportelméleti eszközökkel! Tudván, hogy a k vektorok kiscsoportja – amint azt már egyszer kihasználtuk – C_{4v}, nincs más dolgunk, mint megvizsgálni, hogyan esik szét a hullámfüggvények alterei a C_{4v} irreducibilis reprezentációira.

Amint az jól ismert, ehhez szükségünk van a C_{4v} elemeinek karaktereire.

Felvéve a Descartes-féle koordinátarendszert, majd végigpróbálva az összes csoportelem hatását a koordinátákra, kiszámíthatjuk, hogy a koordináta transzformáció folytán mely hullámfüggvényt melyikbe viszi át a szimmetria-művelet. A Bloch-állapotok alterén ($\varphi_D, \varphi_E, \varphi_F, \varphi_G$) mátrix alakba írva, így a következő formákat kapjuk

$$C_4 = \begin{bmatrix} 0&1&0&0 \\ 0&0&1&0 \\ 0&0&0&1 \\ 1&0&0&0 \end{bmatrix}; \quad C_2 = \begin{bmatrix} 0&0&1&0 \\ 0&0&0&1 \\ 1&0&0&0 \\ 0&1&0&0 \end{bmatrix}; \quad C_4^3 = \begin{bmatrix} 0&0&0&1 \\ 1&0&0&0 \\ 0&1&0&0 \\ 0&0&1&0 \end{bmatrix};$$

$$\sigma_v' = \begin{bmatrix} 0&0&1&0 \\ 0&1&0&0 \\ 1&0&0&0 \\ 0&0&0&1 \end{bmatrix}; \quad \sigma_v'' = \begin{bmatrix} 1&0&0&0 \\ 0&0&0&1 \\ 0&0&1&0 \\ 0&1&0&0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_d' = \begin{bmatrix} 0&1&0&0 \\ 1&0&0&0 \\ 0&0&0&1 \\ 0&0&1&0 \end{bmatrix}; \quad \sigma_d'' = \begin{bmatrix} 0&0&0&1 \\ 0&0&1&0 \\ 0&1&0&0 \\ 1&0&0&0 \end{bmatrix}$$

Így tehát a karakterek:

$$\chi(C_4) = \chi(C_2) = \chi(C_4^3) = 0$$

$$\chi(\sigma_v) = 2$$

$$\chi(\sigma_d) = 0$$

A nagy ortogonalitási tétel és a C_{4v} karaktertáblájának felhasználásával:

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	1
E	2	0	-2	0	0

$$m_\mu = \frac{1}{\dim G} \sum_{g \in G} \chi_\mu(g)^* \chi(g)$$

$$n_{A_1} = \frac{1}{8}\left(1\cdot 4\cdot 1 + 2\cdot 2\cdot 1\right) = 1$$

$$n_{A_2} = \frac{1}{8}\left(1\cdot 4\cdot 1 + 2\cdot 2\cdot (-1)\right) = 0$$

$$n_{B_1} = \frac{1}{8}\left(1\cdot 4\cdot 1 + 2\cdot 2\cdot 1\right) = 1$$

$$n_{B_2} = \frac{1}{8}\left(1\cdot 4\cdot 1 + 2\cdot 2\cdot (-1)\right) = 0$$

$$n_E = \frac{1}{8}\left(1\cdot 4\cdot 2\right) = 1$$

$$\Longrightarrow \quad \Gamma = E \oplus A_1 \oplus B_1$$

Így tehát megkaptuk, hogy az ábrázolás az E, A_1 és B_1 irrepek direkt összegére esik szét. Mivel A_1 és B_1 1-1 dimenziós, E pedig 2 (ld. karaktertábla), innét megkaptuk, hogy a degeneráció 1 kétszeresen degenerált és további 2, nem-degenerált pályára hasad fel.

A reprezentáció sajátvektorait az irreducibilis alterek projektorainak meghatározásával kaphatjuk meg. Ezt az órán is elhangzott képlet alapján:

$$P^\mu = \frac{n_\mu}{\dim G} \sum_{g\in G} \chi^\mu(g)^* \, \Gamma(g),$$

majd a standard bázisvektorokra hattatva kapjuk, hogy a sajátvektorok:

$$v_{A_1} = \frac{1}{\sqrt{4}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\end{pmatrix}$$

$$v_{B_1} = \frac{1}{\sqrt{4}}\begin{pmatrix}1\\-1\\1\\-1\end{pmatrix}$$

$$v_E = \alpha\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\\0\end{pmatrix} + \beta\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\-1\end{pmatrix}, \quad \text{ahol} \quad |\alpha|^2+|\beta|^2 = 1$$

Vegyük észre, hogy ezek ugyanazok, mint a korábban kapott sajátvektorok, csupán most csak az együtthatókat látjuk a $\{\varphi_D, \varphi_E, \varphi_F, \varphi_G\}$ bázisban.

2. feladat

a) A feladatot az 1. feladatban adott megoldásommal teljesen analóg módon oldottam meg. Ezúttal a sajátfüggvényt a $\varphi_B, \varphi_F, \varphi_G$ Bloch-függvények lineáris kombinációjaként keressük:

$$\psi_{FK}(\underline{k}) = c_B \varphi_B(\underline{k}) + c_F \varphi_F(\underline{k}) + c_G \varphi_G(\underline{k})$$

A Hamilton-operátor mátrixa a degenerált altéren a következő alakot ölti:

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon & V_{BF} & V_{BG} \\ V_{FB} & \varepsilon & V_{FG} \\ V_{GB} & V_{GF} & \varepsilon \end{bmatrix}$$

Az 1. feladatban adott indoklás itt is érvényes, ezt ezúttal már mellőzve a mátrixelemekről elmondhatjuk, hogy a diagonális tagokban is mind elhagyhatjuk a perturbációtól származó konstans mátrixelemet, hiszen ugyanúgy megmutatható, hogy az ilyen jellegű mátrixelemek csupán a hullámszám vektorok különbségétől függenek.

A szimmetria transzformációk hatásáról sem megfeledkezve, ezen vektorok által a kiscsoport, a C_{3v} tudatában ismét végigzongorázható a gondolatmenet, melynek eredményeképpen ezúttal azt kapjuk, hogy minden offdiagonális perturbatív tag azonosan

$V_1 = V_{\frac{2\pi}{a}(\bar{1},1,0)}$ alakú

Így:

$$H = \begin{bmatrix} \varepsilon & V_1 & V_1 \\ V_1 & \varepsilon & V_1 \\ V_1 & V_1 & \varepsilon \end{bmatrix}$$

Ismét a szokásos karakterisztikus-egyenlethez folyamodva, ennek a mátrixnak is meghatározhatóak a sajátértékei, majd az azokhoz tartozó sajátvektorok.

A részleteket mellőzve ismét találunk egy degenerált energiaszintet, illetve egy nem degeneráltat.

$$\varepsilon_{1,2} = \varepsilon_{B,F,G}(\underline{k}) - V_1$$

$$\varepsilon_3 = \varepsilon_{B,F,G}(\underline{k}) + 2V_1$$

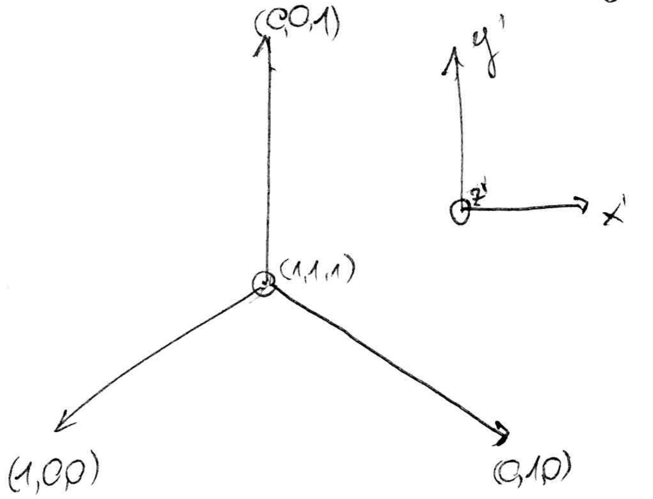
A sajátállapotok pedig:

$$\psi_1(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\varphi_B(\underline{r}) + (-1)\varphi_F(\underline{r}) - \varphi_G(\underline{r})\right)$$

$$\psi_2(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_F(\underline{r}) - \varphi_G(\underline{r})\right)$$

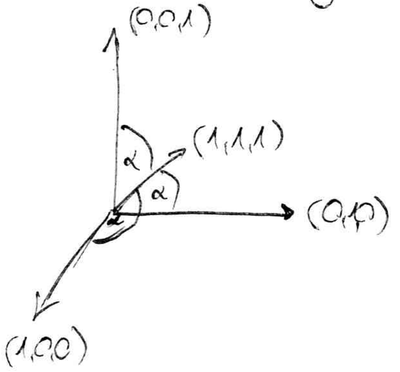
$$\psi_3(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\varphi_B(\underline{r}) + \varphi_F(\underline{r}) + \varphi_G(\underline{r})\right)$$

b, Ezen feladat csoportelméleti eszközökkel való megoldása is teljesen analóg lesz az előzővel. Egyetlen lényeges pontban különbözik attól, erre pedig a feladat maga is felhívja a figyelmet: érdemes a $\underline{k}$ vektorokat áttranszformálni. Az egész transzformáció elképzelhető úgy is, hogy az (1,1,1) irányból nézünk rá a rendszerre úgy, hogy például az (1,1,1) irányra merőleges síkban az y tengelynek a (0,0,1)-et tekintjük.



A három bázisvektort ekkor úgy értelmezzük, hogy azok egymással mind 120°-os szöget feszítenek ki az (1,1,1) síkra vetítve. Ne feledkezzünk meg azonban ami azt jelenti, hogy van (1,1,1) irányú komponensük is, hiszen nem merőlegesek rá. Bár nincsen rá feltétlenül szükség, kiszámíthatjuk a vektorok koordinátáit az új bázisban.

Mind a három irány azonos szöget zár be az (1,1,1)-gyel, nevezetesen:



$$(0,0,1)\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix} = 1 = 1\cdot\sqrt{3}\cdot\cos\alpha$$

$\cos\alpha = 1/\sqrt{3}$ szöget,

ahogy azt a skalárszorzatból meghatározhatjuk.

Az új bázisban éppen ez a $\cos\alpha$ adja majd a z' irányú komponensét mindhárom vektornak.

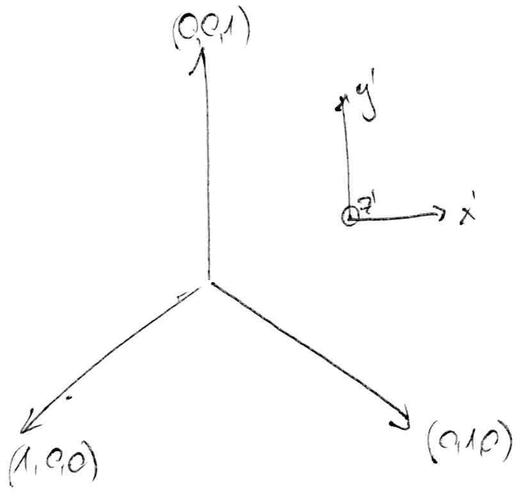
$\cos^2\alpha + \sin^2\alpha = 1$ azonosságból az is tudható, hogy a síkbeli vetületüket $\sin\alpha = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$ adja majd.

Kihasználva továbbá, hogy egyenlő szögeket feszítenek ki páronként, s emiatt a síkban ($x'y'$ sík) 120°-ot feszít ki bármelyik kettő, a régi bázisvektoraink a következő koordináták szerint jelennek meg:

$$\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix}-1/\sqrt{2}\\-1/\sqrt{6}\\1/\sqrt{3}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\-1/\sqrt{6}\\1/\sqrt{3}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix}0\\\sqrt{2}/\sqrt{3}\\1/\sqrt{3}\end{pmatrix}$$



Ezen $\{x', y', z'\}$ bázisban írjuk fel a C_{3v} csoportelemeit, amik a korábbi gondolatmenet eredményeképpen a következő alakot nyerik:

$$C_3 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \chi(C_3) = \emptyset$$

$$\sigma_v = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \chi(\sigma_v) = 1$$

Felhasználva a nagy ortogonalitási tételt és C_{3v} karaktertábláját:

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	$\emptyset$

$$m_\mu = \frac{1}{\dim G} \sum_{g \in G} \chi_\mu(g)^* \chi(g)$$

$$m_{A_1} = \frac{1}{6}\left[1 \cdot 3 \cdot 1 + 1 \cdot 3 \cdot 1\right] = 1$$

$$m_{A_2} = \frac{1}{6}\left[1 \cdot 3 \cdot 1 - 1 \cdot 3 \cdot 1\right] = \emptyset$$

$$m_E = \frac{1}{6}\left[2 \cdot 3 \cdot 1 + \emptyset\right] = 1$$

Azaz:

$$\Gamma = E \oplus A_1$$

Az ábrázolásunk ismét egy 1D és egy 2D irrep direkt összegére esett szét, összhangban az a) feladatrésszel.

Ismét a $P^\mu = \frac{n_\mu}{\dim G} \sum_{g \in G} \chi^\mu(g)^* \Gamma(g)$ projektorok segítségével kapva, a sajátvektorok

$$v_{A_1} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$v_E = \alpha \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} + \beta \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

alakban állnak elő, ami összhangban az a) feladatrésszel.

7. feladat

A feladat kiírása alapján elindulva felírjuk a hermitikus operátor várható értékét:

$$A = \sum_n f(\varepsilon_n)\langle \varphi_n|A|\varphi_n\rangle$$

Kihasználjuk a Dirac-delta disztribúciót:

$$\int f(\varepsilon)\,\delta(\varepsilon-\varepsilon_n)\,d\varepsilon = f(\varepsilon_n)$$

$$A = \sum_n \int f(\varepsilon)\,\delta(\varepsilon-\varepsilon_n)\,d\varepsilon\,\langle\varphi_n|A|\varphi_n\rangle =$$

$$= \int f(\varepsilon)\sum_n \delta(\varepsilon-\varepsilon_n)\langle\varphi_n|A|\varphi_n\rangle\,d\varepsilon =$$

$$= \int f(\varepsilon)\,\mathrm{Tr}\Big(\sum_n \delta(\varepsilon-\varepsilon_n)|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|A\Big)\,d\varepsilon$$

Ahol felcseréltük az integrálást és a szummázást, illetve trace-t vettünk.
Ezen a ponton felhasználjuk az előadásjegyzet (13) egyenletét, majd a trace-en belüli ciklikusságot, illetve $G(\varepsilon)$ adjungált azonosságát.

$$A = \int f(\varepsilon)\left(-\frac{1}{\pi}\right)\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\left(G^{+}(\varepsilon)A\right)d\varepsilon =$$

$$= \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int f(\varepsilon)\,\mathrm{Tr}\left(G(\varepsilon)A\right)d\varepsilon =$$

$$= \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int f(\varepsilon)\,\mathrm{Tr}\left(AG(\varepsilon)\right)d\varepsilon$$

Ezen a ponton terjesztjük ki az integrálást a komplex síkra, hiszen - bár nem jelöljük - az energia szerinti integrál határozott, $-\infty$-től $+\infty$-ig fut. Így:

$$A = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{\oint f(z)\,\mathrm{Tr}\left(AG(z)\right)dz - \int_{\curvearrowright} f(z)\,\mathrm{Tr}\left(AG(z)\right)dz\right\}$$

A megjelenő összeg első tagját a reziduum-tétel felhasználásával kifejezhetjük, felismerve a szinguláris, egyszeres pólusokkal bíró, hányados alakban írható függvényt.

$$\oint f(z)\,\mathrm{Tr}\left(AG(z)\right)dz = 2\pi i \sum_{\mathrm{Im}\, z_k>0} \frac{\mathrm{Tr}\left(AG(z_k)\right)}{\frac{1}{k_BT}\, e^{\frac{z_k-\mu}{k_BT}}}$$

Kihasználva, hogy ismerjük a pólusok konkrét értékét ($z_k=\mu+i(2k+1)\pi k_BT$):

$$\oint f(z)\,\mathrm{Tr}\left(AG(z)\right)dz = 2\pi i \sum_{\mathrm{Im}\, z_k>0} (-k_BT)\,\mathrm{Tr}\left(AG(z_k)\right) = -2\pi i k_BT \sum_{\mathrm{Im}\, z_k>0} \mathrm{Tr}\left(AG(z_k)\right)$$

Így tehát:

$$A = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{-2\pi i k_BT \sum_{\mathrm{Im}\, z_k>0} \mathrm{Tr}\left(AG(z_k)\right)\right\} - \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int_{\curvearrowright} f(z)\,\mathrm{Tr}\left(AG(z)\right)dz =$$

$$= -2k_BT \sum_{\mathrm{Im}\, z_k>0} \mathrm{Re}\,\mathrm{Tr}\left(AG(z_k)\right) - \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int_{\curvearrowright} f(z)\,\mathrm{Tr}\left(AG(z)\right)dz =$$

$$= -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int_{\curvearrowright} f(z)\,\mathrm{Tr}\left(AG(z)\right)dz - 2k_BT \sum_{\mathrm{Im}\, z_k>0} \mathrm{Re}\,\mathrm{Tr}\left(AG(z_k)\right)$$

A behelyettesítés után egyetlen imaginárius részt átírva a kívánt alakra jutottunk

6. feladat

Az előadás jegyzet (53) egyenlete értelmében az effektív Hamilton a következő, általános formában is felírható:

$$H(\underline{k}) = \gamma_0(\underline{k})\, I_2 + \underline{\gamma}(\underline{k})\underline{\sigma} .$$

Az ún. Rashba-probléma 2×2-es effektív Hamilton-mátrixában I_2 a 2×2-es egységmátrixot, míg $\underline{\sigma}$ a jól ismert Pauli-mátrix, a γ függvények pedig a szimmetriáért felelős együtthatók.
A γ együtthatók a következő szimmetria relációkat elégítik ki a rendszer $\underline{Q}$ kiscsoportjának valamely $g \in G$ (ahol G a $\underline{Q}$ kiscsoportja) szimmetria-műveletre nézve:

$$\gamma_0(\underline{k}) = \gamma_0(g\underline{k})$$
$$\underline{\gamma}(g\underline{k}) = \det(g)\, g\, \underline{\gamma}(\underline{k})$$

A γ együtthatókat $\underline{k}$ szerinti hatványsorba fejtve, majd a tagokat fokszám szerint csoportosítva a Hamilton-operátor már a feladatban közölt alakra hozható. Célszerű a fenti szimmetria tulajdonságokat ezen alakon ellenőrizni. A jegyzet (66) egyenlete értelmében egy adott pontcsoport vizsgálatakor elegendő csupán annak generátoraira kitérni.
Mindezek fényében a következő megállapításokat tehetjük.

C_{2v} eset

C_{2v} generátorai (egy lehetséges választás): C_2, σ_v

· C_2 által megkövetelt relációk

C_2 hatása: $x \to -x$, $y \to -x$, mátrix alakban: $C_2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\det C_2 = 1$

· 2. rend ($\gamma_0(\underline{k})$): $b_{20} k_x^2 + b_{11} k_x k_y + b_{02} k_y^2 = b_{20} k_x^2 + b_{11} k_x k_y + b_{02} k_y^2$

$\Longrightarrow$ azonosság, nem jelent megszorítást

· 1. rend

$$\begin{pmatrix} -c_{10}k_x - c_{01}k_y \\ -d_{10}k_x - d_{01}k_y \\ -e_{10}k_x - e_{01}k_y \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} -(c_{10}k_x + c_{01}k_y) \\ -(d_{10}k_x + d_{01}k_y) \\ e_{10}k_x + e_{01}k_y \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad e_{10} = e_{01} = 0$$

· 3. rend

$$\begin{pmatrix} -c_{30}k_x^3 - c_{21}k_x^2k_y - c_{12}k_xk_y^2 - c_{03}k_y^3 \\ -d_{30}k_x^3 - d_{21}k_x^2k_y - d_{12}k_xk_y^2 - d_{03}k_y^3 \\ -e_{30}k_x^3 - e_{21}k_x^2k_y - e_{12}k_xk_y^2 - e_{03}k_y^3 \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} -(c_{30}k_x^3 + c_{21}k_x^2k_y + c_{12}k_xk_y^2 + c_{03}k_y^3) \\ -(d_{30}k_x^3 + d_{21}k_x^2k_y + d_{12}k_xk_y^2 + d_{03}k_y^3) \\ e_{30}k_x^3 + e_{21}k_x^2k_y + e_{12}k_xk_y^2 + e_{03}k_y^3 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad e_{30} = e_{21} = e_{12} = e_{03} = 0$$

· <u>σ_v által megkövetelt változók</u>

σ_v hatása (pl. yz tükrözés): $x \to x$, mátrix alakban $\sigma_v = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\det \sigma_v = -1$

· 2. rend

$$b_{20}k_x^2 + b_{11}k_xk_y + b_{02}k_y^2 = b_{20}k_x^2 - b_{11}k_xk_y + b_{02}k_y^2$$

$$\Longrightarrow \quad b_{11} = 0$$

· 1. rend

$$\begin{pmatrix} -c_{10}k_x + c_{01}k_y \\ -d_{10}k_x + d_{01}k_y \\ -e_{10}k_x + e_{01}k_y \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} -(c_{10}k_x + c_{01}k_y) \\ d_{10}k_x + d_{01}k_y \\ e_{10}k_x + e_{01}k_y \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad c_{10} = d_{01} = e_{01} = 0$$

· 3. rend

$$\begin{pmatrix} -c_{30}k_x^3 + c_{21}k_x^2k_y - c_{12}k_xk_y^2 + c_{03}k_y^3 \\ -d_{30}k_x^3 + d_{21}k_x^2k_y - d_{12}k_xk_y^2 + d_{03}k_y^3 \\ -e_{30}k_x^3 + e_{21}k_x^2k_y - e_{12}k_xk_y^2 + e_{03}k_y^3 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} -(c_{30}k_x^3 + c_{21}k_x^2k_y + c_{12}k_xk_y^2 + c_{03}k_y^3) \\ d_{30}k_x^3 + d_{21}k_x^2k_y + d_{12}k_xk_y^2 + d_{03}k_y^3 \\ e_{30}k_x^3 + e_{21}k_x^2k_y + e_{12}k_xk_y^2 + e_{03}k_y^3 \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad c_{30} = c_{12} = d_{21} = d_{03} = e_{21} = e_{03} = 0$$

Így a C_{2v} pontcsoport esetén eltűnő paraméterek:

$e_{10}, e_{01}, e_{30}, e_{21}, e_{12}, e_{03}, b_{11}, c_{10}, d_{01}, \cancel{e_{01}}, c_{30}, c_{12}, d_{21}, d_{03}, \cancel{e_{21}}, \cancel{e_{03}}$

megmarad tehát 8 független, azaz a Hamilton alakja:

$$H(k) = \varepsilon_0 + b_{20}k_x^2 + b_{02}k_y^2 + c_{01}k_y\sigma_x + d_{10}k_x\sigma_y + (c_{21}k_x^2k_y + c_{03}k_y^3)\sigma_x + (d_{30}k_x^3 + d_{12}k_xk_y^2)\sigma_y$$

C_{4v} eset

C_{4v} generátorai (egy lehetséges választás): C_4, σ_v

σ_v-t az előbb már tárgyaltuk.

C_4 által megkövetelt relációk

C_4 hatása: $x \to y$, $y \to x$, $z \to z$, mátrix alakban: $C_4 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$, $\det C_4 = 1$

2. rend
$$b_{20}k_x^2 + b_{11}k_xk_y + b_{02}k_y^2 = b_{20}k_y^2 + b_{02}k_x^2 - b_{11}k_xk_y$$
$$\Rightarrow b_{20} = b_{02} \quad ; \quad b_{11} = 0$$

1. rend
$$\begin{pmatrix} c_{10}k_y - c_{01}k_x \\ d_{10}k_y - d_{01}k_x \\ e_{10}k_y - e_{01}k_x \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} d_{10}k_x + d_{01}k_y \\ -(c_{10}k_x + c_{01}k_y) \\ e_{10}k_x + e_{01}k_y \end{pmatrix}$$
$$\Longrightarrow c_{10} = d_{01} \quad ; \quad c_{01} = -d_{10} ; \quad e_{10} = e_{01} = 0$$

3. rend
$$\begin{pmatrix} c_{30}k_y^3 - c_{21}k_y^2k_x + c_{12}k_yk_x^2 - c_{03}k_x^3 \\ d_{30}k_y^3 - d_{21}k_y^2k_x + d_{12}k_yk_x^2 - d_{03}k_x^3 \\ e_{30}k_y^3 - e_{21}k_y^2k_x + e_{12}k_yk_x^2 - e_{03}k_x^3 \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} d_{30}k_x^3 + d_{21}k_x^2k_y + d_{12}k_xk_y^2 + d_{03}k_y^3 \\ -(c_{30}k_x^3 + c_{21}k_x^2k_y + c_{12}k_xk_y^2 + c_{03}k_y^3) \\ e_{30}k_x^3 + e_{21}k_x^2k_y + e_{12}k_xk_y^2 + e_{03}k_y^3 \end{pmatrix}$$

$c_{30} = d_{03}$; $-c_{21} = d_{12}$; $c_{12} = d_{21}$; $-c_{03} = d_{30}$; $e_{30} = e_{03} = e_{12} = e_{21} = 0$

Így tehát a C_{4v} pontcsoport esetén eltűnő paraméterek:

$b_{11}, c_{10}, d_{01}, e_{01}, e_{10}, c_{30}, c_{12}, d_{21}, d_{03}, e_{21}, e_{03}, e_{12}, e_{30}$

s megmarad 4 független paraméter:

$$H(\underline{k}) = \varepsilon_0 + b_{20}(k_x^2 + k_y^2) + c_{01} k_y \sigma_x - c_{01} k_x \sigma_y + (c_{21} k_x^2 k_y + c_{03} k_y^3)\sigma_x +$$
$$- (c_{03} k_x^3 + c_{21} k_x k_y^2)\sigma_y$$