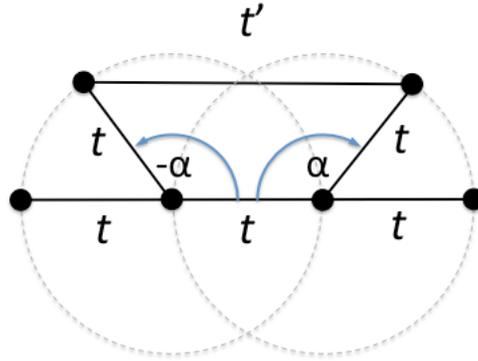


Tarea 4

1.

La simetría de traslación en un cristal limita los ángulos posibles para las simetrías de rotación. Si escribimos estos ángulos como $2\pi/n$, sólo $n=1,2,3,4$, y 6 son posibles. Demostrar que este es el caso utilizando por ejemplo el diagrama que se muestra abajo. (Hint: notar que $t' = mt$, donde m es un entero. Por qué?)



2.

Considerar el operador

$$\hat{T}_R = \int d\mathbf{r}' |\mathbf{r}' - \mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{r}'|,$$

donde $|\mathbf{r}'\rangle$ es un ket que representa un autoestado de posición.

- Calcular el efecto de este operador sobre un estado $|\mathbf{r}\rangle$.
- Demostrar, usando por ejemplo los resultados de la primera tarea para un operador definido por un producto exterior, que el operador \hat{T}_R es unitario, y que $\hat{T}_R^\dagger = \hat{T}_{-\mathbf{R}}$.
- Escribir $\hat{T}_R \equiv e^{i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{R}/\hbar}$, donde $\hat{\mathbf{p}}$ es un operador en principio ignoto. Demostrar que la unitariedad de \hat{T}_R

implica que $\hat{\mathbf{p}}$ es hermitico. Demostrar que $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left. \frac{\partial T_R}{\partial \mathbf{R}} \right|_{\mathbf{R}=0}$

- Usando el resultado de la parte c), demostrar que

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r} \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

- Si $\psi(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$, demostrar, usando el resultado del punto d), que $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}$. Interpretar el significado del operador $\hat{\mathbf{p}}$ en vista de este resultado.

- Demostrar que $\left[\hat{T}_R, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right] = 0$.

- Demostrar que en general $\left[\hat{T}_R, V(\hat{\mathbf{r}}) \right] \neq 0$, donde V es una función y $\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle$

- Usar los resultados de f) y g) para demostrar que \hat{T}_R conmuta con el hamiltoniano de un electron en un potencial periódico en \mathbf{R} .

- i) El operador de traslación discutido en clase y en algunos textos, como Ashcroft-Mermin, no es exactamente $\hat{T}_{\mathbf{R}}$, porque actúa en el espacio de Hilbert de las funciones de onda. Definamos entonces un operador en ese espacio, que llamaremos aquí $\hat{T}'_{\mathbf{R}}$, que satisface

$$\hat{T}'_{\mathbf{R}} f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | T_{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{r}}) | \psi \rangle$$

donde f es cualquier función de posición y donde $\hat{\mathbf{r}}$ es el operador de posición. Demostrar que $\hat{T}'_{\mathbf{R}}$ tiene las mismas propiedades que el operador de traslación definido en clase, o sea $\hat{T}'_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ y $\hat{T}'_{\mathbf{R}} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, y que $\hat{T}'_{\mathbf{R}} = e^{i\hat{\mathbf{p}}\mathbf{R}/\hbar}$ si $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \partial/\partial \mathbf{r}$.

- j) Demostrar que $\hat{T}'_{\mathbf{R}}$ conmuta con el hamiltoniano $H = \frac{1}{2} p^2/m + V(\mathbf{r})$ si $V(\mathbf{r})$ es periódica con periodicidad \mathbf{R} .

Challenge problem

En cristales con estructura de diamante (silicio, germanio, α -estaño) cada átomo ocupa el centro de un tetraedro, y sus cuatro vecinos más cercanos ocupan los vértices. De ese modo, todo el cristal puede "llenarse" de tetraedros en los cuales los átomos ubicados en los vértices son compartidos entre tetraedros. El desafío es demostrar que la estructura de diamante también puede verse como una combinación de tetraedros en los cuales cada átomo pertenece a un solo tetraedro. Dicho de otro modo, la estructura de diamante puede construirse a partir de "moléculas" de cinco átomos en forma de tetraedro con un átomo central. La demostración puede ser matemática o consistir en la fabricación de un modelo.