Estructura de la Materia 2

Segundo cuatrimestre de 2012

# Guía 3: Electrones en un potencial periódico.

1. Sea $\{\mathbf{R}\}$ una red de Bravais. Sea $f(\mathbf{r})$ tal que $f(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = f(\mathbf{r})$.

    *a*) Demostrar que en la expansión de Fourier de $f(\mathbf{r})$:

    $$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} f_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$$

    sólo aparecen los vectores de onda $\mathbf{K}$ de la red recíproca.

    *b*) Demostrar que los coeficientes $f_{\mathbf{K}}$ están dados por:

    $$f_{\mathbf{K}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_C d^3r \, e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$$

    donde $C$ es una celda primitiva cualquiera de la red de Bravais y $\mathcal{V}$ es su volumen.

2. 

    *a*) Demostrar que:

    $$\psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{K}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}$$

    donde los vectores de onda $\mathbf{K}$ pertenecen a la red recíproca, satisface la ecuación de Schrödinger

    $$H\psi_{\mathbf{k}} = E\psi_{\mathbf{k}}$$

    donde $H$ es el hamiltoniano del electrón en la red.

    *b*) Demostrar que las expresiones siguientes sobre funciones de Bloch:

    $$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

    donde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red de Bravais,

    $$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$$

    son equivalentes.

3. ELECTRONES EN UN POTENCIAL PERIÓDICO (MODELO DE KRONIG-PENNEY)
   Considere un potencial de período $a$ formado por barreras cuadradas de alto $V_0$ y ancho $b < a$, es decir:

    $$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < a-b \\ V_0 & \text{si } a-b < x < a \end{cases}$$

   Suponga que en cada zona la función de onda es una combinación de ondas planas con diferentes vectores de onda y que al pasar de una celda a la otra se cumple la condición de Bloch: $\psi(x+a) = \psi(x) e^{ika}$.

*a*) Encuentre una ecuación que vincule a la energía con el índice $k$.

*b*) Analice las condiciones para la existencia de soluciones y la aparición de bandas de energía.

4. Considere electrones libres en una red bidimensional rectangular de períodos $a$ y $b$, $b = 2a$.

   *a*) Dibuje la estructura de bandas en un esquema de zona reducida para energías menores que $16\hbar\pi^2/2ma^2$, correspondiente al recorrido $\Gamma \longrightarrow X \longrightarrow W \longrightarrow \Gamma \longrightarrow Y \longrightarrow W$, donde $\Gamma = (0,0)$, $X = (\pi/a, 0)$, $Y = (0, \pi/b)$ y $W = (\pi/a, \pi/b)$. Indique la degeneración de cada rama.

   *b*) Suponiendo que cada átomo contribuye con 2 electrones, encuentre el valor de la energía de Fermi y ubíquela en el gráfico.

   *c*) Dibuje la esfera de Fermi correspondiente sobre la zona de Brillouin y relacione la ocupación de la primera zona con la estructura de bandas encontrada anteriormente.

5. Sea una red plana hexagonal con un átomo por sitio. Considere los vectores primitivos $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y})$ y $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y})$.

   *a*) Dibuje la red directa, la recíproca y la primera zona de Brillouin.

   *b*) Haga el diagrama de electrón libre en un esquema de zona reducida, en el recorrido $\Gamma \longrightarrow X \longrightarrow M \longrightarrow \Gamma$, siendo $X = \frac{1}{2}\vec{b}_1$ y $M = \frac{1}{3}(\vec{b}_1 + \vec{b}_2)$. Dibuje al menos las tres primeras bandas. Calcule la energía de Fermi para $p = 1, 2$ electrones e indíquela en el diagrama anterior.

   *c*) Represente la superficie de Fermi sobre la zona de Brillouin y relacione la ocupación de la primera zona con la estructura de bandas encontrada en el punto anterior. Hágalo para el caso en que cada átomo aporta $p$ electrones a la red, con $p = 1, 2$.