5 Como el potencial es periódico, puedo encontrar una serie de Fourier:

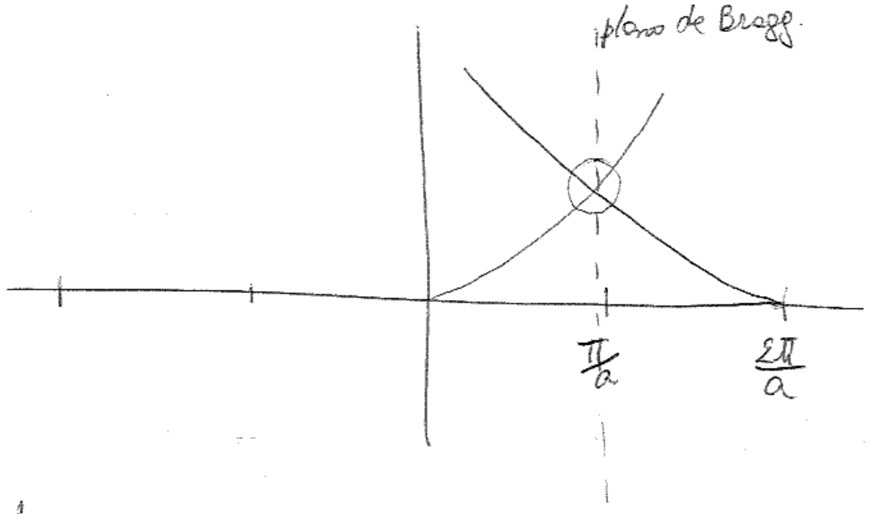
$$U_K = \sum \ldots \qquad V(x) = \sum e^{iKx} \cdot V_K$$

donde: $\boxed{K = \frac{2\pi}{a} n}$ $\quad n \in \mathbb{Z}$.

$$V_K = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} V(x)\, e^{-iKx} = \frac{1}{a}\int a V_0\, \delta(x)\, e^{-iKx}$$

$$\boxed{V_K = V_0}$$

Sabemos de la teoría, que la influencia mayor del potencial estará dada en los planos de Bragg:



Uso:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}(k-K)^2 - \varepsilon\right] C_{k-K} + \sum_{K'} V_{K'-K}\, C_{k-K'} = 0$$

que en nuestro caso se reduce a:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}(k-K)^2-\varepsilon\right]c_{k-K}+V_0\sum_{K'\neq K}c_{k-K'}=0$$

por renormaliz. del potencial $V_0=0$

Tomo las bandas $K=0$ y $K=2\pi/a$ en $k=\frac{\pi}{a}$, pues ambos tienen $\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}-\frac{2\pi}{a}\right)^2$

misma energía.

solo aquellos del subespacio degenerado

$$\begin{cases}\left[\overbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}^{\varepsilon^{(0)}}-\varepsilon\right]c_k+V_0\,c_{k-K}=0\\[2ex]\left[\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}_{\varepsilon^{(0)}}-\varepsilon\right]c_{k-K}+V_0\,c_k=0\end{cases}$$

$$\left|\begin{pmatrix}\varepsilon_0-\varepsilon & V_0\\ V_0 & \varepsilon^{(0)}-\varepsilon\end{pmatrix}\right|=0$$

$$(\varepsilon_0-\varepsilon)^2=V_0^2\quad\rightarrow\quad\boxed{\varepsilon=\varepsilon_0\pm V_0}$$

gap.

SOLO ENCONTRÉ EL GAP, pues para ver como cambia la energía con k, tengo que estudiar $\left[\frac{\hbar^2}{2m}(k-K)^2-\varepsilon\right]c_k\ldots$

Preguntas adicionales:

¿Es el sistema aislante o conductor?

Para contestar esta pregunta determinamos qué sucede cuando cada sitio aporta 1 o 2 e^-.

En una "esfera" (estamos en 1D), de Fermi de radio k_F quiero alojar N_e electrones (MODELO DE ELECTRON LIBRE):

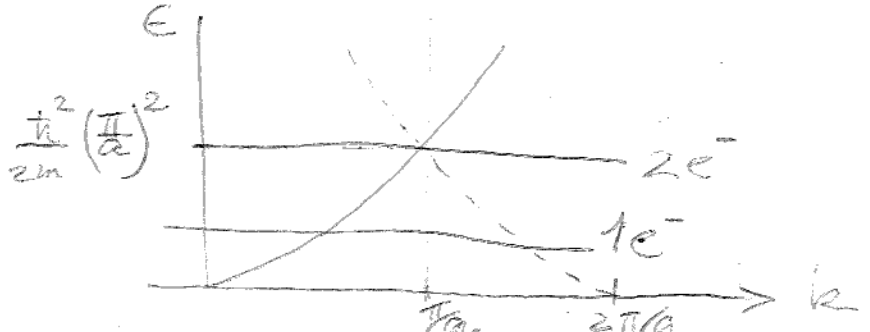
$$N_e = \underset{\text{spin}}{2} \times \frac{2k_F}{\underbrace{\left(\frac{2\pi}{L}\right)}_{\text{discretización}}} = \frac{2}{\pi} \times k_F \times (\underset{\text{parámetro de red}}{a} \times \underset{\text{\# de sitios}}{N})$$

y tomo $N_e = \underset{\text{\# de } e^- \text{ aportados por sitio}}{\mu} \times N$

$$\therefore \quad k_F = \frac{\pi}{2}\mu N \frac{1}{aN} = \frac{\pi\mu}{2a}$$

Notar que, para $\mu = 2$, $k_F = \pi/a$, que es el límite de la 1BZ.

En términos de la $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2\mu^2}{4a^2}$



Ya vimos que, por el potencial, apareció un gap en $\frac{\pi}{a}$. Cualquiera sea el valor de V_0, si tengo 2 e^-/sitio, el sistema será aislante, pues los e^- ocuparán la 1° banda completamente y para pasar a la siguiente necesitarán de una cantidad grande (el gap) de energía.

Si el sistema aporta 1 e^-/sitio el V_0 debe ser lo suficientemente grande para llegar a la $\epsilon_F(1e^-)$.

- Calculemos la densidad de estados (DOS). Existen diferentes maneras, veremos dos.

1) Como en prácticas anteriores:

$$\underbrace{2}_{\text{spin}}\sum_k \cdots \longmapsto 2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{\Delta k}$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L}$$

$$dk = \frac{dk}{dE}\,dE \quad , \quad \varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \frac{d\varepsilon}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

$$dk = \frac{m}{\hbar^2 k} d\varepsilon = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}\, d\varepsilon$$

juntando todo:

$$2\int_0^\infty \frac{2\times\left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}\,d\varepsilon\right)}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)}$$

en $g(\varepsilon)$ la "L" no va, pues uno estudia densidades: ej: $n = \frac{N}{L}$

$$\boxed{g(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}}$$

otro método:

2) Contemos estados k con energía ε:

$$g_n(\varepsilon) = \int_{BZ} \frac{dk}{\pi}\, \delta[\varepsilon - \varepsilon_n(k)]$$

$$\delta[\,] = \sum_{k_0} \frac{\delta(k-k_0)}{\left|\frac{d}{dk}[\varepsilon - \varepsilon_n(k)]\right|_{k_0}}$$

donde k_0 hace que el argumento se anule:

$$\frac{d}{dk}(\varepsilon - \varepsilon_n) = -\hbar^2 k/m \qquad k_0 /\ \varepsilon - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = 0$$

$$k_0 = \pm\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \qquad \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) = \frac{\delta(k-|k_0|)}{\frac{\hbar^2|k_0|}{m}} + \frac{\delta(k+|k_0|)}{\frac{\hbar^2|k_0|}{m}}$$

$$\frac{\hbar^2|k_0|}{m} = \frac{\hbar}{m}\sqrt{2m\varepsilon} = \hbar\sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}$$

$$g_1(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}$$