

**Estructura de la Materia 2**  
**2do cuatrimestre 2017**

**Guía 6: Electrones en un potencial periódico. Potencial débil**

**1. ELECTRONES EN UN POTENCIAL PERIODICO DEBIL (1-D)**

Sea una cadena unidimensional de átomos iguales a distancia  $a$ .

- i) Dibuje el esquema de zona reducida para electrones libres.
- ii) Dibuje la densidad de estados para las dos primeras bandas.
- iii) Si el potencial creado por los iones es apreciable, ¿cómo se modificarán las bandas?, ¿y la densidad de estados?.
- iv) Analice las condiciones que deben cumplirse para que el sistema sea aislante.
- v) Si hay dos electrones por celda unidad, ubique el nivel de Fermi tanto para electrones libres como para el caso donde el potencial es apreciable.

**2. ELECTRONES EN UN POTENCIAL PERIODICO DEBIL (2D)**

Considere electrones libres en una red bidimensional cuadrada de período  $a$

- i) Dibuje las primeras cuatro zonas de Brillouin.
- ii) Dibuje sobre este esquema las circunferencias correspondientes al nivel de Fermi para 1, 2 y 3 electrones por celda. Analice qué zonas quedan total y parcialmente llenas en cada caso.
- iii) Dibuje en cada caso la superficie de Fermi en un esquema de zona reducida.
- iv) Analice la estructura de bandas graficando la relación de dispersión cuando el vector de onda efectúa el recorrido  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$ , donde  $\Gamma=(0,0)$ ,  $X=(k',0)$  y  $W=(k',k')$  con  $k'=\pi/a$ . Grafique en este esquema los niveles de Fermi hallados en ii).
- v) Introduzca ahora un potencial periódico débil y analice cualitativamente las modificaciones en la estructura de bandas y las superficies de Fermi.

**3. ELECTRONES LIBRES EN ESQUEMA DE ZONA REDUCIDA**

La figura 9.5 que aparece en el libro *Solid State Physics* de N. Ashcroft y N. Mermin representa las bandas de energía en un esquema de zona reducida para una red FCC. Haga el dibujo equivalente para una red cúbica simple en un recorrido:

$\Gamma \rightarrow X \rightarrow K \rightarrow \Gamma \rightarrow W \rightarrow K$ , donde  $\Gamma=(0,0,0)$ ,  $X=(k',0,0)$ ,  $K=(k',k',0)$ ,  $W=(k',k',k')$  con  $k'=\pi/a$ .

Ubique el nivel de Fermi para la misma cantidad de electrones indicados en la gráfica.

4. 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:  $\psi(x+a) = \psi(x)e^{ika}$ . Encuentre una ecuación que vincule a la energía con el índice  $k$ . Analice las condiciones para la existencia de soluciones y la aparición de bandas de energía.

5. ELECTRONES DEBILMENTE LIGADOS EN UN POTENCIAL DE DELTAS DE DIRAC

Considere átomos ubicados en una red unidimensional de parámetro  $a$ . Cada átomo esta representado por el potencial  $V(x) = aV_0\delta(x)$ . Determine los gaps de energía entre bandas, suponiendo que es aplicable la aproximación de electrones débilmente ligados.

6. BANDAS DE ENERGIA - METODO DE ONDAS PLANAS

Cerca del borde de la primera zona de Brillouin ( $k = \frac{\pi}{a}$ ) de una cadena unidimensional monoatómica de parámetro de red  $a$ , la teoría de electrones débilmente ligados predice que el único término importante del potencial es  $V_1 \cos \frac{2\pi x}{a}$  y que la función de onda es aproximadamente,

$$\psi = \alpha e^{ikx} + \beta e^{i(k-2\pi/a)x}$$

Sustituya esta función de onda en la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = \varepsilon\psi$$

Multiplique la ecuación resultante (a) por  $e^{-ikx}$  e integre en todo el espacio, y (b) por  $e^{-i(k-\pi/a)x}$  e integre en todo el espacio. Muestre que la energía  $\varepsilon$  asociada con dicha función de onda puede escribirse

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi}{ma} \left\{ \left( \frac{\pi}{a} - k \right) \pm \left[ \left( \frac{\pi}{a} - k \right)^2 + \left( \frac{amV_1}{2\pi\hbar} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

Muestre que esta forma da la respuesta correcta en  $k = \frac{\pi}{a}$  y que se reduce al resultado de electrones libres para valores de  $k$  lejos del borde de zona. Grafique.

7. Considere un cristal unidimensional, con constante de red  $a$ . Los electrones de este 'sólido' están sometidos a un potencial periódico  $V(x) = -V_0 (3+2 \cos(2 \pi x /a))$ . Se desea calcular las bandas de energía  $E(\mathbf{k})$  utilizando el método de descomposición de ondas planas, en este método la función de Bloch de índice  $\mathbf{k}$  se puede escribir como:

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}x} \sum_G C_G e^{-iGx} \quad (\mathbf{G} \text{ vector de la red recíproca})$$

i) Escriba los vectores de la red recíproca.

ii) Descomponga el potencial  $V(x)$  en sus componentes de Fourier.

- iii) Considere en la función de Bloch de índice  $\mathbf{k}$  sólo los cinco términos de menor módulo de  $G$  (incluyendo  $G=0$ ). Escriba el determinante de  $5 \times 5$  que permitiría encontrar  $E(\mathbf{k})$
8. Considere electrones libres en una red bidimensional rectangular de períodos  $a$  y  $b$ ,  $b = 2a$ .
- i) Dibuje la estructura de bandas en un esquema de zona reducida para energías menores que  $16\hbar^2\pi^2/2ma^2$ , correspondiente al recorrido  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow W \rightarrow \Gamma \rightarrow Y \rightarrow W$ , donde  $\Gamma=(0,0)$ ,  $X=(\pi/a,0)$ ,  $Y=(0,\pi/b)$  y  $W=(\pi/a,\pi/b)$ . Indique la degeneración de cada rama.
- ii) Suponiendo que cada átomo contribuye con 2 electrones, encuentre el valor de la energía de Fermi y ubíquela en el gráfico. 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.
- iii) Introduzca un potencial periódico débil de la forma

$$V(x, y) = -4 V_o \cos(2\pi x/a) \cos(2\pi y/b)$$

Analice cualitativamente las modificaciones en la estructura de bandas. Calcule aproximadamente el gap en el punto  $W$ .

9. Se tiene nuevamente el sistema bidimensional del problema 2. En este caso el potencial que ven los electrones debido a los iones se puede representar por

$$V(x, y) = -V_o (\cos(2\pi x/a) + \cos(2\pi y/a))$$

Si cada átomo aporta 2 electrones.

- i) ¿Cuál es el mínimo valor de  $V_o$  que hace que el sistema sea aislante?
- ii) ¿Cuál es el ancho de banda en este caso?
10. Sea una red plana hexagonal con un átomo por sitio. Los vectores de la red directa son  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$ , que forman un ángulo de  $120^\circ$ ; y los correspondientes de la red recíproca son  $\mathbf{b}_1$  y  $\mathbf{b}_2$ , siendo el ángulo entre ellos de  $60^\circ$ .
- i) Dibujar la primera zona de Brillouin para esta red.
- ii) Hacer el diagrama de electrón libre en un esquema de zona reducida, en el recorrido  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$ , siendo  $X = \frac{1}{2}\mathbf{b}_1$  y  $M = \frac{1}{3}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)$  (dibujar al menos las tres primeras bandas).
- iii) Representar la superficie de Fermi si cada átomo aporta 1 y 2 electrones a la red.
- iv) Suponiendo que los electrones sienten a la red a través de un potencial débil, proponer una forma funcional para este potencial que haga que el sistema se vuelva aislante. ¿Con cuántos electrones por sitio se consigue esto?