

Estructura de la Materia 2

Clase 6 - Teoría

Docentes

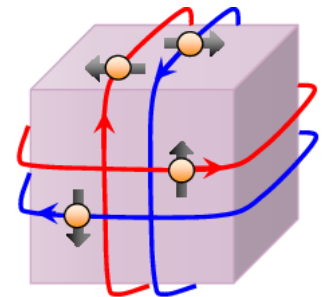
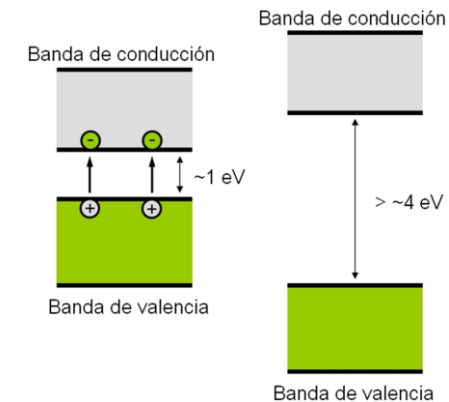
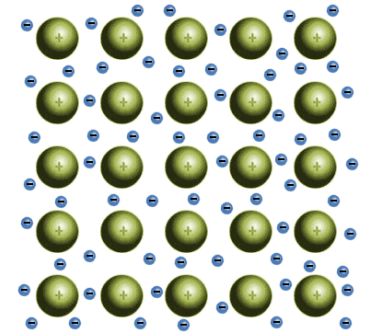
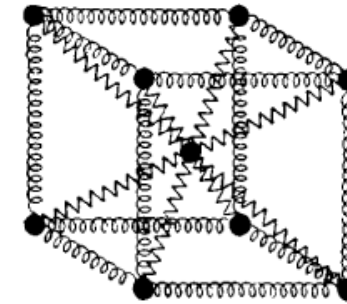
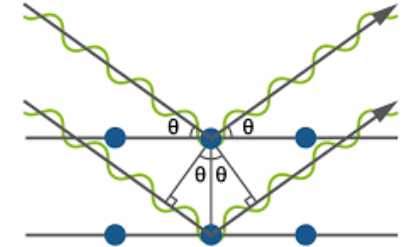
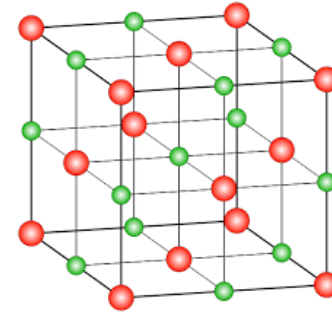
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Tomás Bortolin, Agustina Casafuz

Departamento de Física, FCEN, UBA – 2do Cuatrimestre, 2020

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2020c2>

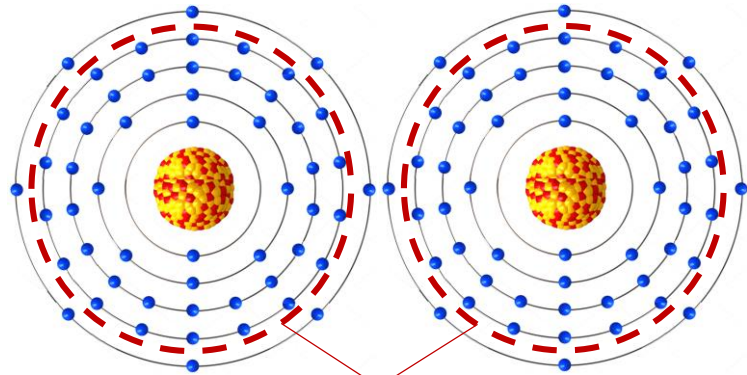
Programa de la materia

- Red cristalina, red recíproca y difracción de rayos X ✓
- Clasificación de los sólidos y energía de cohesión ✓
- Vibraciones, fonones y propiedades térmicas ✓
- Electrones en sólidos (potencial periódico)
- Semiconductores y juntura semiconductor
- Magnetismo en sólidos
- Introducción a los aisladores topológicos

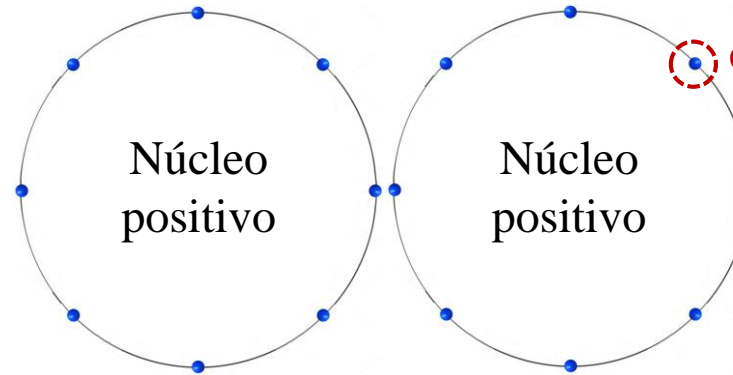


Electrones en sólidos: Introducción

Electrones en sólidos

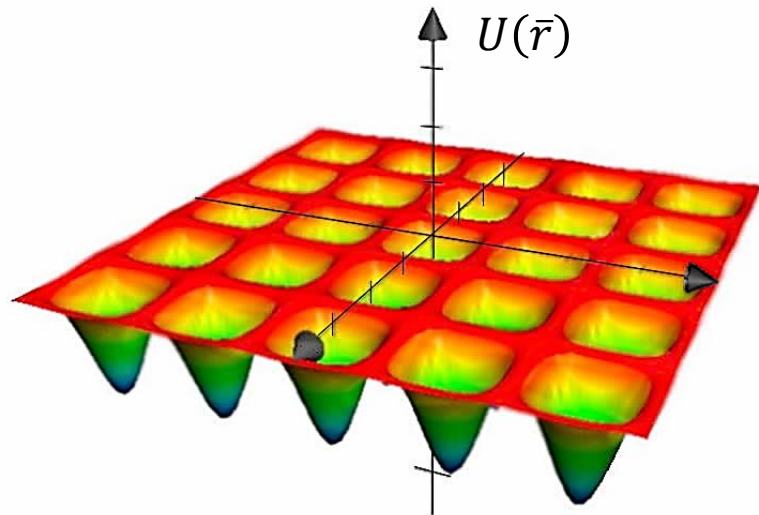


Niveles aquí dentro no se modifican notablemente al formar el sólido



e^- de valencia
(Su comportamiento sí se modifica al formar el sólido)

Los iones de la red generan un potencial periódico, en el cual se encuentran inmersos los e^- más externos.



$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}), \quad \forall \vec{R} \in RB$$

Trabajamos en un modelo de e^- independientes, donde $U(\vec{r})$ es un potencial efectivo que también incluye las interacciones e^-e^- .

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = \varepsilon \psi(\vec{r}) \quad (\text{ec. de Schrödinger de } 1e^-)$$

Consideramos distintas aproximaciones

Gas de electrones libres: Estado fundamental

Estado fundamental del gas de electrones libres (no interactúan entre sí, ni con los iones de la red)

N e⁻ libres confinados en un volumen V . Buscamos los niveles de energía de un e⁻ individual, y luego los llenamos con N e⁻ en forma consistente con el principio de exclusión de Pauli.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}) \rightarrow \psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \left(\int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1\right) \rightarrow \varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

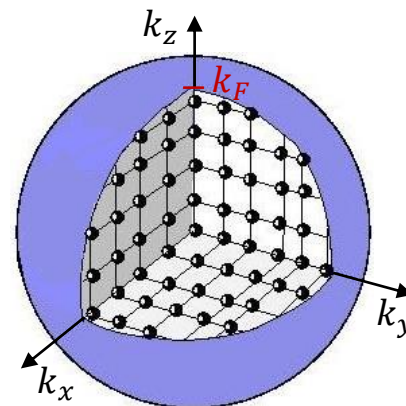
Condiciones de contorno periódicas de Born-von Karman $\rightarrow \psi(\vec{r} + L\hat{i}) = \psi(\vec{r}); i = x, y, z$ (Cubo, $L^3 = V$)

$$e^{ik_i(i+L)} = e^{ik_i i} \rightarrow k_i = \frac{2\pi m_i}{L}, m_i \in \mathbb{Z} \rightarrow \text{Volumen por } \vec{k} \text{ permitido: } \Delta\vec{k} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Empezamos poniendo 2 e⁻ en el nivel de $\vec{k} = \vec{0}$ (espines \uparrow y \downarrow), y luego se van llenando los niveles siguientes que no están ocupados.

Cuando N es suficientemente grande, la región ocupada es esencialmente una esfera, de radio k_F .

$$\text{Energía de Fermi} \rightarrow \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$



Esfera de Fermi

$$n = \frac{N}{V} = \frac{2}{V} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) \left(\frac{V}{8\pi^3} \right)$$

$$\rightarrow n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

Gas de electrones libres: Estado fundamental

Estado fundamental del gas de electrones libres (no interactúan entre sí, ni con los iones de la red)

$$E = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow E = 2V \int_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{d\bar{k}}{(2\pi)^3} = \frac{V\hbar^2}{2\pi^2 m} \int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{V\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m}$$

$$\rightarrow \frac{E}{N} = \frac{1}{n} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} \quad \left| \quad n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \right. = \frac{3\hbar^2 k_F^2}{10m} = \frac{3}{5} \varepsilon_F = \frac{3}{5} k_B T_F$$

Temperatura de Fermi $\sim 10^4 - 10^5 K$ en metales

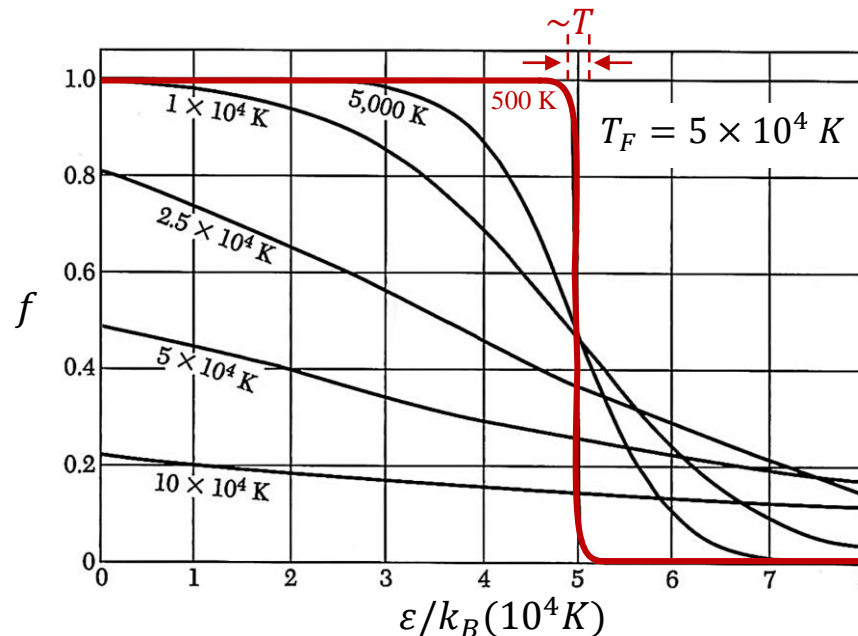
$T \neq 0$

Describimos a los e^- con la estadística de FD:

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1}$$

Potencial químico
($\mu = \varepsilon_F$ a $T = 0$)

$$\varepsilon = \mu \rightarrow f = 0.5$$



Tenemos entonces:

$$\begin{cases} u = \int \varepsilon(\bar{k}) f(\varepsilon(\bar{k})) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3} \\ n = \int f(\varepsilon(\bar{k})) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3} \end{cases}$$

Gas de electrones libres: Temperatura finita

$T \neq 0$

$$\begin{cases} u = \int \varepsilon(\bar{k}) f(\varepsilon(\bar{k})) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3} \\ n = \int f(\varepsilon(\bar{k})) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3} \end{cases} \longrightarrow \int Q(\varepsilon(\bar{k})) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3} = \int_0^\infty Q(\varepsilon(\bar{k})) \frac{k^2 dk}{\pi^2} = \int_{-\infty}^\infty Q(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon$$

Densidad de estados

$$k = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}; dk = \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\varepsilon}} d\varepsilon \longrightarrow k^2 dk = \frac{m}{\hbar^3} \sqrt{2m\varepsilon} d\varepsilon$$

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m\varepsilon}, & \varepsilon > 0 \\ 0, & \varepsilon < 0 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} u = \int_{-\infty}^\infty \varepsilon f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \\ n = \int_{-\infty}^\infty f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon \end{cases}$$

Integrales de la forma $\int_{-\infty}^\infty F(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$ diferirán de su valor a $T = 0$ ($\int_{-\infty}^{\varepsilon_F} F(\varepsilon) d\varepsilon$) según cómo varíe $F(\varepsilon)$ en torno a $\varepsilon = \mu$ en un ancho $\sim k_B T$.

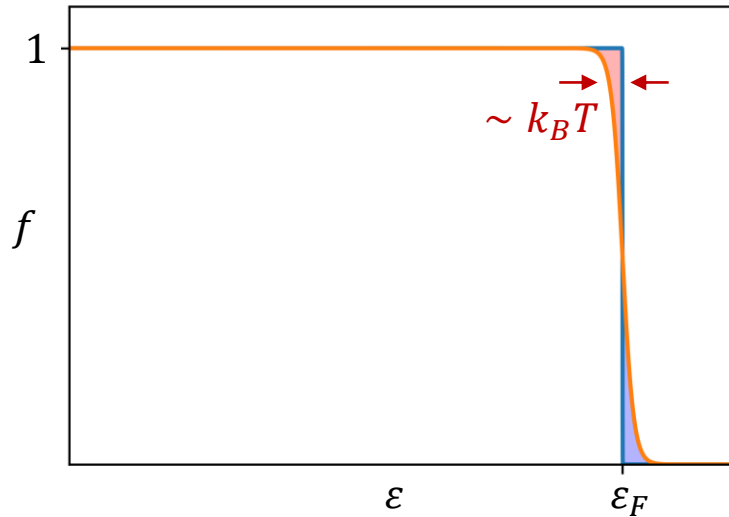
Expansión de Sommerfeld

$$\left. F(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n}{d\varepsilon^n} F(\varepsilon) \right|_{\varepsilon=\mu} \frac{(\varepsilon - \mu)^n}{n!} \longrightarrow \int_{-\infty}^\infty F(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{-\infty}^\mu F(\varepsilon) d\varepsilon + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (k_B T)^{2n} \frac{d^{2n-1}}{d\varepsilon^{2n-1}} F(\varepsilon) \Big|_{\varepsilon=\mu}$$

Taylor

Gas de electrones libres: Calor específico

Calor específico electrónico (estimación)



Nº de e⁻ excitados por unidad de volumen: $\sim (k_B T)g(\epsilon_F)$

Energía de excitación: $\sim k_B T$

→ Energía térmica ganada: $\sim g(\epsilon_F)(k_B T)^2 \left[\frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g(\epsilon_F) \right]$
(Resultado exacto)

$$\begin{aligned} \rightarrow c_v^{el} &\sim 2g(\epsilon_F)(k_B^2 T) \\ &= \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m\epsilon_F} = \frac{k_F^3}{2\pi^2} \underbrace{\frac{2m}{\hbar^3 k_F^3}}_{1/\epsilon_F^{3/2}} \sqrt{2m\epsilon_F} = \frac{k_F^3}{2\pi^2 \epsilon_F} = \frac{3n}{2\epsilon_F} \end{aligned}$$

$n = k_F^3 / 3\pi^2$

$$\rightarrow c_v^{el} \sim 2g(\epsilon_F)(k_B^2 T) = \frac{3k_B T}{\epsilon_F} n k_B \left[\frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right) n k_B \right] \text{ (Resultado exacto)}$$

Gas de electrones libres: Calor específico

Calor específico a baja temperatura

$$\frac{c_v^{el}}{c_v^{fon}} = \left(\frac{\pi^2}{2} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 n_e k_B \right) / \left(\frac{12\pi^4}{5} n_i k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \right) = \frac{5}{24\pi^2} Z \frac{\Theta_D^3}{T^2 T_F}$$

↓
A baja T

Ambas contribuciones se igualan cuando: $T = 0.145 \left(Z \frac{\Theta_D}{T_F} \right)^{1/2} \Theta_D \sim 1K \rightarrow$ ¡La contribución electrónica solo se observa a muy baja T!

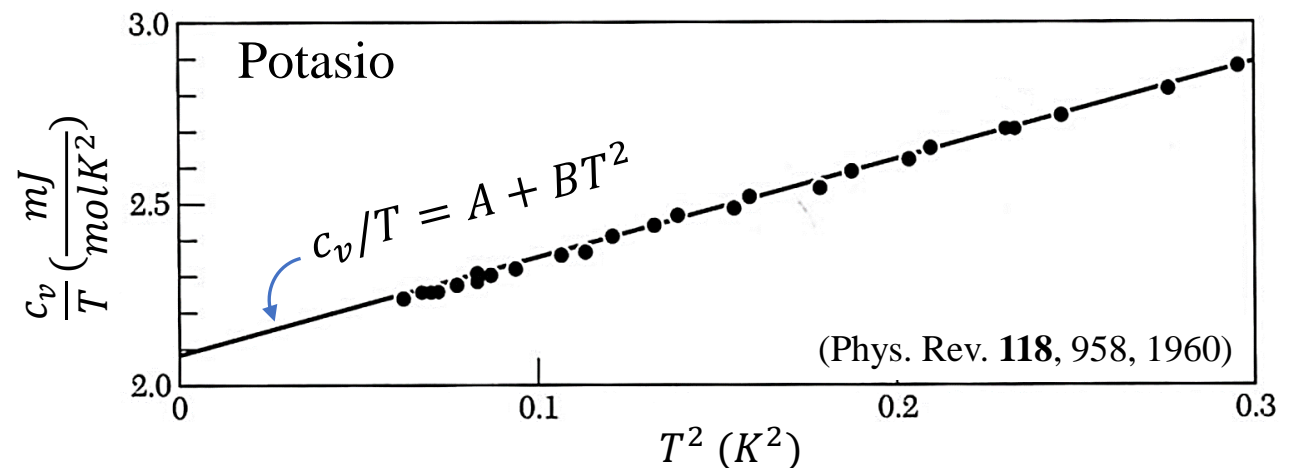
~10⁴K ~10²K

Resultado experimental

$$c_v = c_v^{el} + c_v^{fon} = AT + BT^3$$

$$A_{exp} = 2.1 \frac{mJ}{molK^2}; A_{teo} = 1.8 \frac{mJ}{molK^2}$$

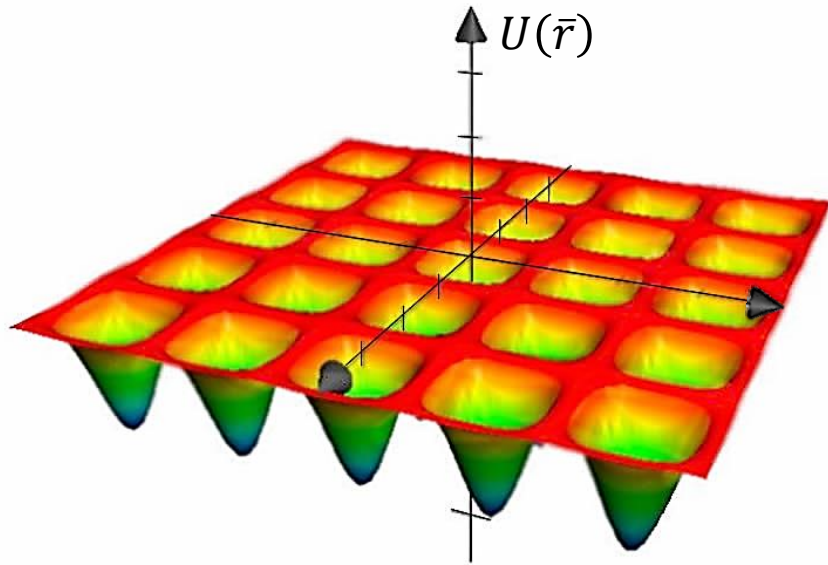
$$B = 2.6 \frac{mJ}{molK^4} \rightarrow \Theta_D = 100 K$$



Electrones en un potencial periódico

Potencial periódico

Los iones de la red generan un potencial periódico, en el cual se encuentran inmersos los e^- más externos.



$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}), \quad \forall \vec{R} \in RB$$

Trabajamos en un modelo de e^- independientes, donde $U(\vec{r})$ es un potencial efectivo que también incluye las interacciones e^-e^- .

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right)}_{\mathcal{H}} \psi(\vec{r}) = \varepsilon \psi(\vec{r}) \quad (\text{Ec. de Schrödinger de 1 } e^-)$$

Teorema de Bloch

Los autoestados de \mathcal{H} pueden elegirse como: $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ con $u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r})$
 $\vec{k} \in 1ZB$
Índice de banda

$$\rightarrow \psi_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r} + \vec{R})} u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

Teorema de Bloch

Condiciones de contorno periódicas (Born-von Karman)

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i); \quad i = 1, 2, 3 \quad \vec{a}_i: \text{VP de la RD}; \quad N_1 N_2 N_3 = N \quad (\text{N}^\circ \text{ total de CP en el cristal})$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + N_i \vec{a}_i)} \rightarrow e^{i\vec{q} N_i \vec{a}_i} = 1$$

Expandimos en ondas planas (base ortogonal completa)

$$\vec{q} = x_1 \vec{b}_1 + x_2 \vec{b}_2 + x_3 \vec{b}_3, \quad \vec{b}_i: \text{VP de la RR}, \quad x_i \in \mathbb{R} \rightarrow 2\pi x_i N_i = 2\pi m_i, \quad m_i \in \mathbb{Z} \rightarrow x_i = \frac{m_i}{N_i}$$

$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

$$\vec{q} = \frac{m_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \vec{b}_3 \rightarrow \text{Volumen por } \vec{q} \text{ permitido: } \Delta \vec{q} = \frac{\vec{b}_1}{N_1} \left(\frac{\vec{b}_2}{N_2} \times \frac{\vec{b}_3}{N_3} \right) = \frac{1}{N} \frac{(2\pi)^3}{v} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Demostración del Teorema de Bloch

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}; \quad U(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} U_{\vec{K}} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} \rightarrow \text{Coeficiente de Fourier } U_{\vec{K}} = \frac{1}{v} \int_{CP} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} U(\vec{r}) d\vec{r}$$

\vec{q} — Satisface CCP \vec{K} — $\in RR$ ($U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$)

Simetría de inversión

$$\text{Elegimos } U_0 = \frac{1}{v} \int_{CP} U(\vec{r}) d\vec{r} = 0; \quad U(\vec{r}) \text{ real} \rightarrow U_{-\vec{K}} = U_{\vec{K}}^*; \quad U(\vec{r}) = U(-\vec{r}) \rightarrow U_{-\vec{K}} = U_{\vec{K}} = U_{\vec{K}}^*$$

Teorema de Bloch

Demostración del Teorema de Bloch

Energía cinética:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left(\sum_{\bar{q}} c_{\bar{q}} e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}} \right) = \sum_{\bar{q}} \frac{\hbar^2}{2m} q^2 c_{\bar{q}} e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}}$$

Energía potencial:
$$\sum_{\bar{K}} U_{\bar{K}} e^{i\bar{K}\cdot\bar{r}} \left(\sum_{\bar{q}} c_{\bar{q}} e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}} \right) = \sum_{\bar{K}\bar{q}} U_{\bar{K}} c_{\bar{q}} e^{i(\bar{K}+\bar{q})\cdot\bar{r}} \stackrel{\bar{q}' = \bar{K} + \bar{q}}{=} \sum_{\bar{K}\bar{q}'} U_{\bar{K}} c_{\bar{q}' - \bar{K}} e^{i\bar{q}'\cdot\bar{r}}$$

$$\sum_{\bar{q}} e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}} \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{2m} q^2 - \varepsilon \right) c_{\bar{q}} + \sum_{\bar{K}'} U_{\bar{K}'} c_{\bar{q} - \bar{K}'} \right\} = 0 \stackrel{\bar{q} = \bar{k} - \bar{K}, \bar{k} \in 1ZB, \bar{K} \in RR}{\rightarrow} \left(\frac{\hbar^2}{2m} (\bar{k} - \bar{K})^2 - \varepsilon \right) c_{\bar{k} - \bar{K}} + \sum_{\bar{K}'} U_{\bar{K}'} c_{\bar{k} - \bar{K} - \bar{K}'} = 0$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\bar{k} - \bar{K})^2 - \varepsilon \right) c_{\bar{k} - \bar{K}} + \sum_{\bar{K}'} U_{\bar{K}' - \bar{K}} c_{\bar{k} - \bar{K}'} = 0 \stackrel{\forall \bar{K} \in RR}{\rightarrow}$$

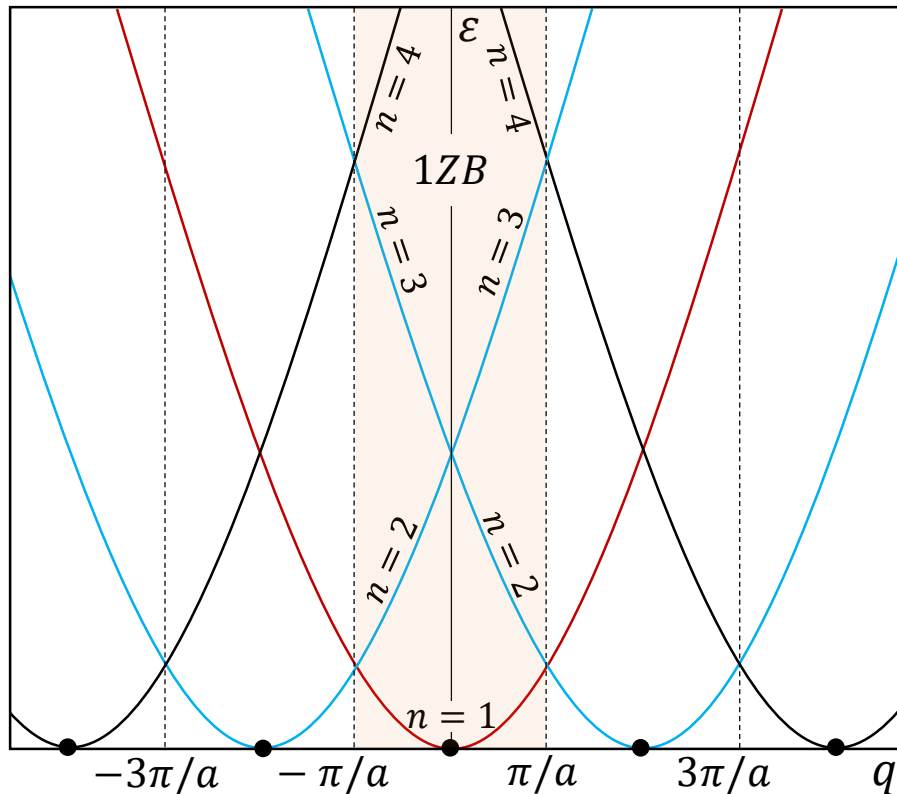
$$\psi_{n\bar{k}}(\bar{r}) = \sum_{\bar{K}} c_{\bar{k} - \bar{K}} e^{i(\bar{k} - \bar{K})\cdot\bar{r}} = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} \sum_{\bar{K}} c_{\bar{k} - \bar{K}} e^{-i\bar{K}\cdot\bar{r}}$$

Tenemos N problemas independientes, uno para cada \bar{k} permitido en la 1ZB. Cada problema tiene como soluciones superposiciones de ondas planas con vectores de onda que solo pueden diferir de \bar{k} en un vector de la RR.

Potencial periódico débil

Potencial débil

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \sum_{\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}} e^{i(\bar{k}-\bar{K})\cdot\vec{r}} \\ (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0) c_{\bar{k}-\bar{K}} = \sum_{\bar{K}'} U_{\bar{K}'-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}'} \end{array} \right. \quad = 0 \text{ (e- libres)}$$



Potencial periódico débil

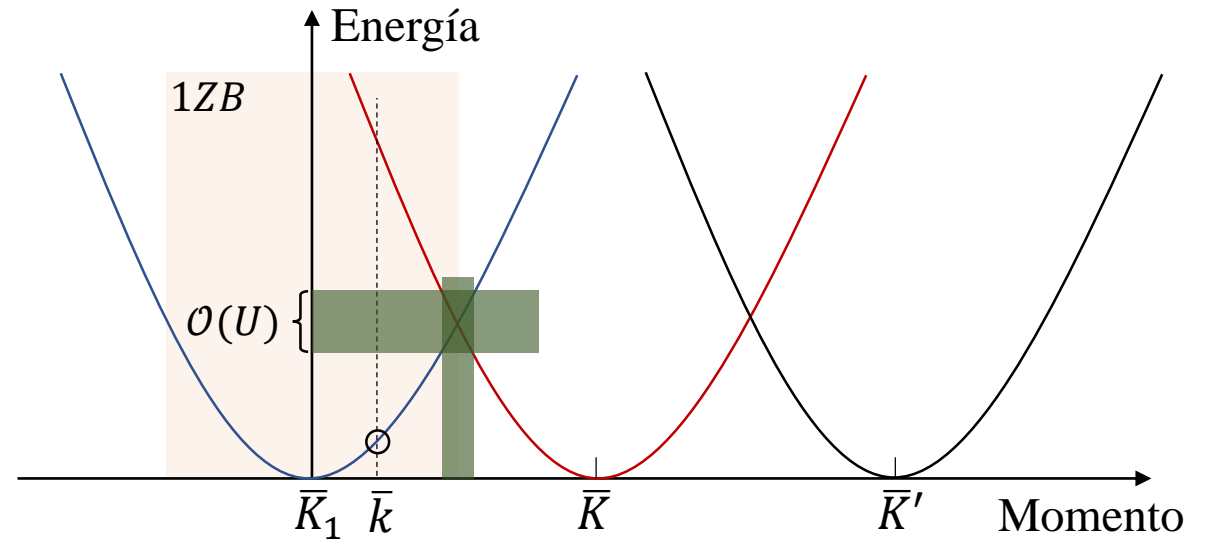
Potencial débil

$$\begin{cases} \psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \sum_{\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}} e^{i(\bar{k}-\bar{K})\cdot\vec{r}} \\ (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0) c_{\bar{k}-\bar{K}} = \sum_{\bar{K}'} U_{\bar{K}'-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}'} \end{cases}$$

Tomamos \bar{k} y \bar{K}_1 tal que:

$$|\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0| \gg U, \forall \bar{K} \neq \bar{K}_1$$

Valor típico de $U_{\bar{K}}$



Queremos ver cómo afecta el potencial al estado de e⁻ libre dado por: $\varepsilon = \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0, c_{\bar{k}-\bar{K}} = 0, \forall \bar{K} \neq \bar{K}_1$

$$\bar{K} = \bar{K}_1: (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0) c_{\bar{k}-\bar{K}_1} = \sum_{\bar{K}} U_{\bar{K}-\bar{K}_1} c_{\bar{k}-\bar{K}} \approx \sum_{\bar{K}} \frac{U_{\bar{K}-\bar{K}_1} U_{\bar{K}_1-\bar{K}}}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0} c_{\bar{k}-\bar{K}_1}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 + \sum_{\bar{K}} \frac{|U_{\bar{K}-\bar{K}_1}|^2}{\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0}$$

$$\bar{K} \neq \bar{K}_1: c_{\bar{k}-\bar{K}} = \frac{U_{\bar{K}_1-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}_1}}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0} + \sum_{\bar{K}' \neq \bar{K}_1} \frac{U_{\bar{K}'-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}'}}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0} \approx \frac{U_{\bar{K}_1-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}_1}}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0}$$

= 0 cuando $U = 0$

$$U_{-\bar{K}} = U_{\bar{K}} = U_{\bar{K}}^*$$

→ Las bandas se repelen entre sí

Potencial periódico débil

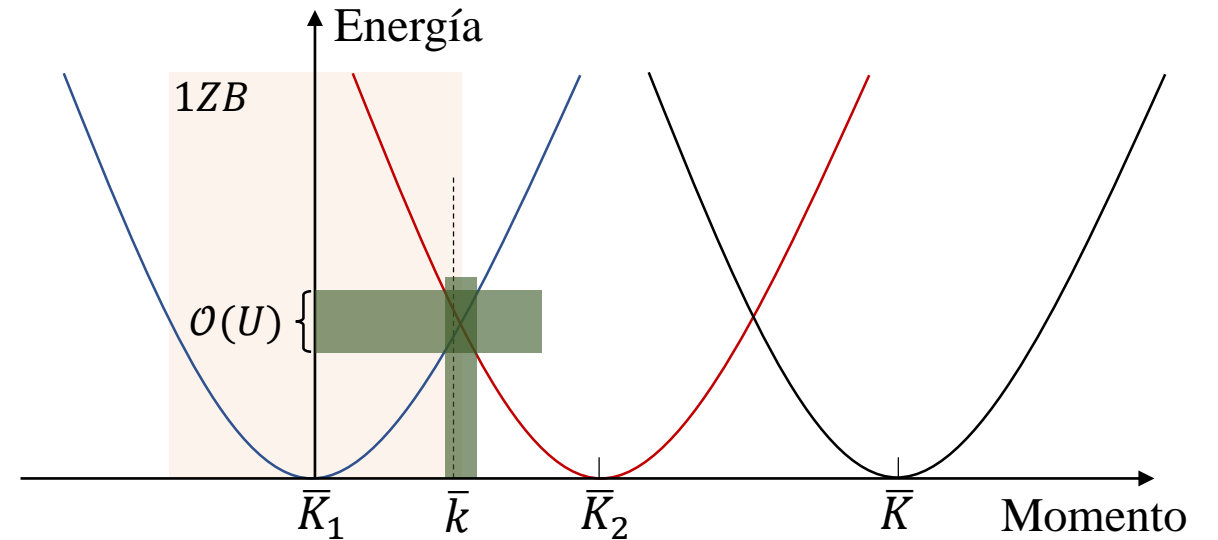
Potencial débil

$$\begin{cases} \psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \sum_{\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}} e^{i(\bar{k}-\bar{K})\cdot\vec{r}} \\ (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0) c_{\bar{k}-\bar{K}} = \sum_{\bar{K}'} U_{\bar{K}'-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}'} \end{cases}$$

Tomamos \bar{k} y $\bar{K}_1, \dots, \bar{K}_m$ tal que:

$\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0, \dots, \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_m}^0$ se encuentran en $\mathcal{O}(U)$ entre sí

$$|\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_i}^0| \gg U, \quad i = 1, \dots, m, \quad \forall \bar{K} \neq \bar{K}_1, \dots, \bar{K}_m$$



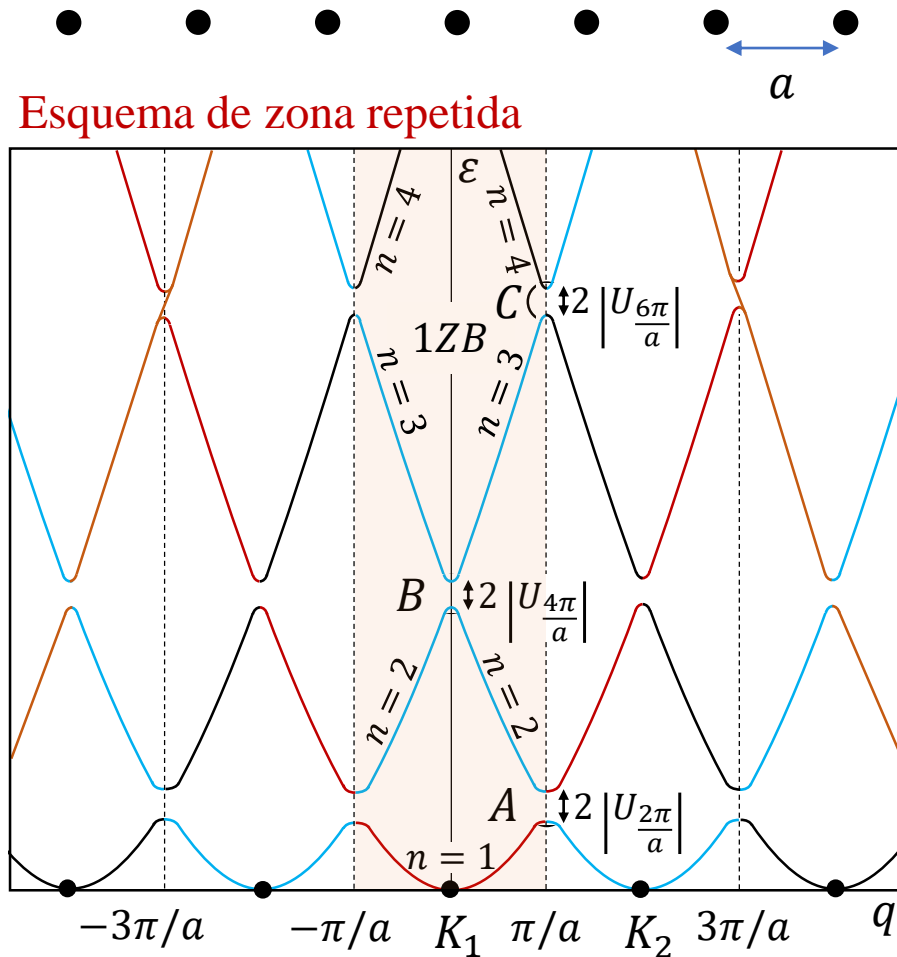
$$\underline{\bar{K} = \bar{K}_i}: (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_i}^0) c_{\bar{k}-\bar{K}_i} = \sum_{j=1}^m U_{\bar{K}_j-\bar{K}_i} c_{\bar{k}-\bar{K}_j} + \sum_{\bar{K} \neq \bar{K}_1, \dots, \bar{K}_m} U_{\bar{K}-\bar{K}_i} c_{\bar{k}-\bar{K}} \approx \sum_{j=1}^m U_{\bar{K}_j-\bar{K}_i} c_{\bar{k}-\bar{K}_j} + \mathcal{O}(U^2)$$

$$\underline{\bar{K} \neq \bar{K}_i}: c_{\bar{k}-\bar{K}} = \sum_{j=1}^m \frac{U_{\bar{K}_j-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}_j}}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0} + \sum_{\bar{K}' \neq \bar{K}_1, \dots, \bar{K}_m} \frac{U_{\bar{K}'-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}'}}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0} \approx \sum_{j=1}^m \frac{U_{\bar{K}_j-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}_j}}{\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0}$$

Para niveles cuasi-degenerados tenemos correcciones de $\mathcal{O}(U)$

Potencial periódico débil

Potencial débil: RB 1D



$$(\psi_{n, \bar{k} + \bar{K}}(\vec{r}) = \psi_{n \bar{k}}(\vec{r}); \epsilon_{n, \bar{k} + \bar{K}} = \epsilon_{n \bar{k}})$$

$$(\epsilon - \epsilon_{\bar{k} - \bar{K}_i}^0) c_{\bar{k} - \bar{K}_i} = \sum_{j=1}^m U_{\bar{K}_j - \bar{K}_i} c_{\bar{k} - \bar{K}_j} \quad (m = 2)$$

$$\begin{cases} (\epsilon - \epsilon_{k - K_1}^0) c_{k - K_1} = U_{K_2 - K_1} c_{k - K_2} \\ (\epsilon - \epsilon_{k - K_2}^0) c_{k - K_2} = U_{K_1 - K_2} c_{k - K_1} \end{cases} \quad \left(K_1 = 0; K_2 = \frac{2\pi}{a} \right)$$

$$\rightarrow \begin{vmatrix} \epsilon - \epsilon_{k - K_1}^0 & -U_{K_2 - K_1} \\ -U_{K_2 - K_1} & \epsilon - \epsilon_{k - K_2}^0 \end{vmatrix} = 0$$

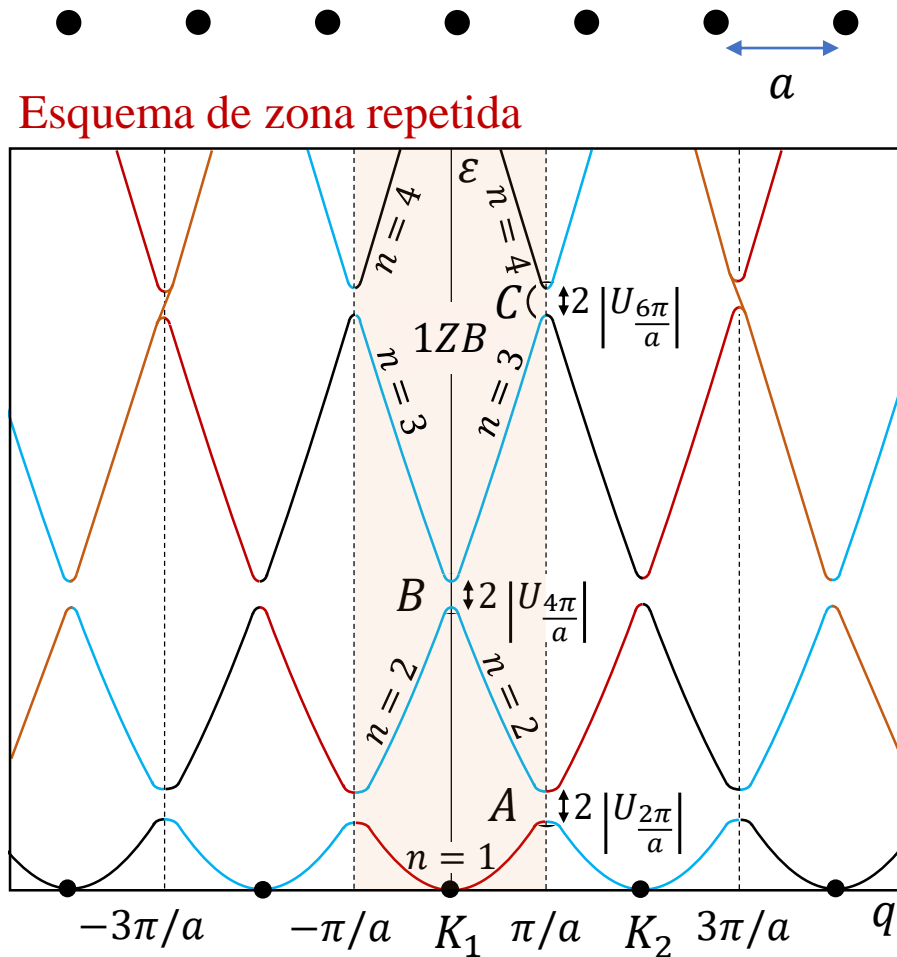
$$\rightarrow \epsilon^2 - \epsilon(\epsilon_{k - K_1}^0 + \epsilon_{k - K_2}^0) + \epsilon_{k - K_1}^0 \epsilon_{k - K_2}^0 - |U_{K_2 - K_1}|^2 = 0$$

$$\rightarrow \epsilon = \frac{\epsilon_{k - K_1}^0 + \epsilon_{k - K_2}^0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_{k - K_1}^0 - \epsilon_{k - K_2}^0}{2} \right)^2 + |U_{K_2 - K_1}|^2}$$

$$\epsilon_{k - K_1}^0 \stackrel{k = \pi/a}{=} \epsilon_{k - K_2}^0 \rightarrow \epsilon = \epsilon_{k - K_1}^0 \pm |U_{K_2 - K_1}| \quad \boxed{\text{!Se abre un gap!}}$$

Potencial periódico débil

Potencial débil: RB 1D



$$(\psi_{n, \bar{k} + \bar{K}}(\vec{r}) = \psi_{n \bar{k}}(\vec{r}); \varepsilon_{n, \bar{k} + \bar{K}} = \varepsilon_{n \bar{k}})$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k} - \bar{K}_i}^0) c_{\bar{k} - \bar{K}_i} = \sum_{j=1}^m U_{\bar{K}_j - \bar{K}_i} c_{\bar{k} - \bar{K}_j} \quad (m = 2)$$

$$\begin{cases} (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k} - \bar{K}_i}^0) c_{\bar{k} - \bar{K}_i} = U_{\bar{K}_j - \bar{K}_i} c_{\bar{k} - \bar{K}_j} \\ (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{k} - \bar{K}_j}^0) c_{\bar{k} - \bar{K}_j} = U_{\bar{K}_i - \bar{K}_j} c_{\bar{k} - \bar{K}_i} \end{cases} \quad \forall i, j \text{ tal que } \varepsilon_{\bar{k} - \bar{K}_i}^0 \text{ y } \varepsilon_{\bar{k} - \bar{K}_j}^0 \text{ difieren entre sí en } \mathcal{O}(U)$$

$$\varepsilon_{\bar{k} - \bar{K}_i}^0 = \varepsilon_{\bar{k} - \bar{K}_j}^0 \rightarrow \varepsilon = \varepsilon_{\bar{k} - \bar{K}_i}^0 \pm |U_{\bar{K}_j - \bar{K}_i}|$$

Ejemplo

$$U = -2V_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

$$U(\vec{r}) = \sum_{\bar{K}} U_{\bar{K}} e^{i\bar{K} \cdot \vec{r}} \rightarrow U_{\frac{2\pi}{a}} = U_{-\frac{2\pi}{a}} = -V_0$$

¿Se abren gaps en A, B, C? → ¡Sí, pero solo en A!

Resumen

- Estado fundamental del gas de electrones libres
- Temperatura finita: calor específico electrónico
- Potencial periódico y teorema de Bloch
- Potencial periódico débil
- Estructura de bandas en 1D

