

# Estructura de la Materia 2

Clase 7 - Teoría

## Docentes

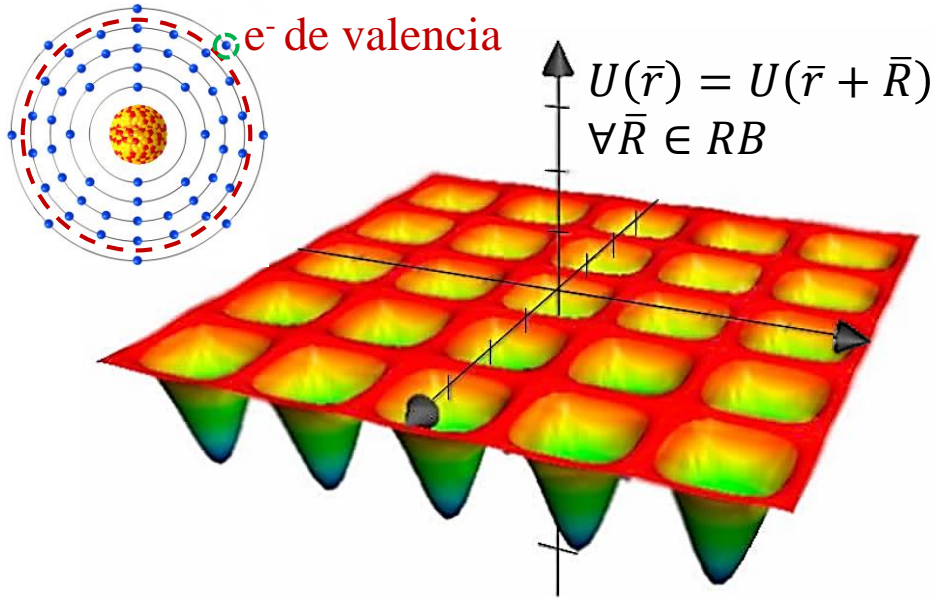
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Tomás Bortolin, Agustina Casafuz

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

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

# Repaso

## Potencial periódico



## Teorema de Bloch y condiciones periódicas de contorno

Los autoestados de  $\mathcal{H} = K + U$  pueden elegirse como:

$$\psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \quad \text{con} \quad u_{n\bar{k}}(\vec{r} + \bar{R}) = u_{n\bar{k}}(\vec{r})$$

$\in 1ZB$   
 $\uparrow$   
 Índice de banda

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

$$\bar{k} = \frac{m_1}{N_1} \bar{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \bar{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \bar{b}_3, \quad m_i \in \mathbb{Z}, \bar{k} \in 1ZB$$

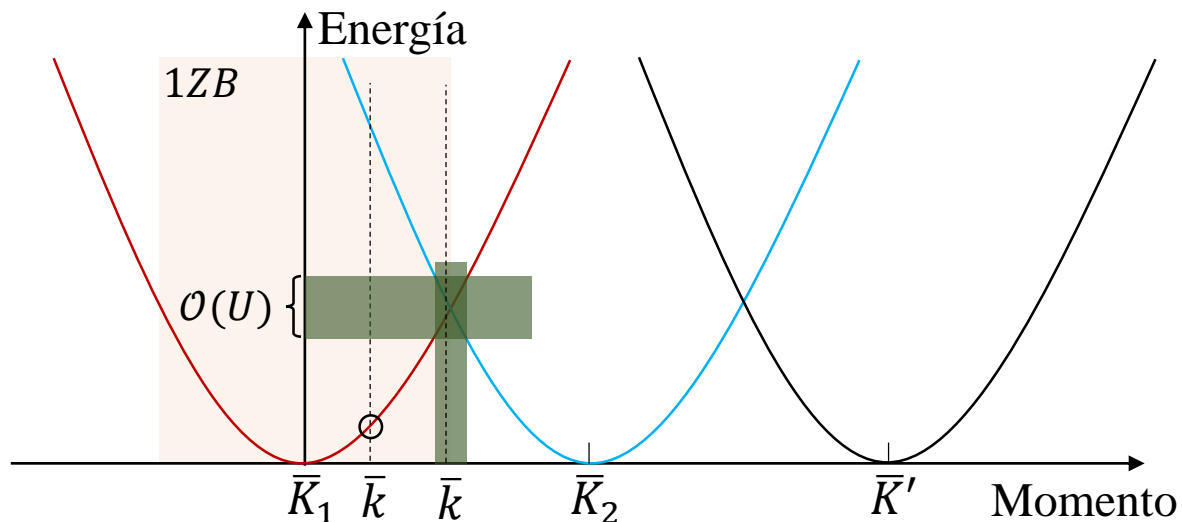
$$\psi(\vec{r} + N_i \bar{a}_i) = \psi(\vec{r}); \quad i = 1, 2, 3, \quad N_1 N_2 N_3 = N$$

## Consecuencias del teorema de Bloch

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\bar{q}} c_{\bar{q}} e^{i\bar{q}\cdot\vec{r}}; \quad U(\vec{r}) = \sum_{\bar{K}} U_{\bar{K}} e^{i\bar{K}\cdot\vec{r}} \quad \rightarrow \quad \begin{cases} \psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \sum_{\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}} e^{i(\bar{k}-\bar{K})\cdot\vec{r}} \\ (\varepsilon - \underbrace{\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0}_{\frac{\hbar^2}{2m}(\bar{k}-\bar{K})^2}) c_{\bar{k}-\bar{K}} = \sum_{\bar{K}'} U_{\bar{K}'-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}'} \end{cases}$$

# Repaso

## Potencial periódico débil



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

$$\left| \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0 \right| \gg U, \forall \bar{K} \neq \bar{K}_1 \rightarrow \varepsilon = \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 + \sum_{\bar{K}} \frac{|U_{\bar{K}-\bar{K}_1}|^2}{\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0}$$

- Tomamos  $\bar{k}$  y  $\bar{K}_1, \dots, \bar{K}_m$ , con  $\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_i}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_j}^0 \leq \mathcal{O}(U)$  y tal que:

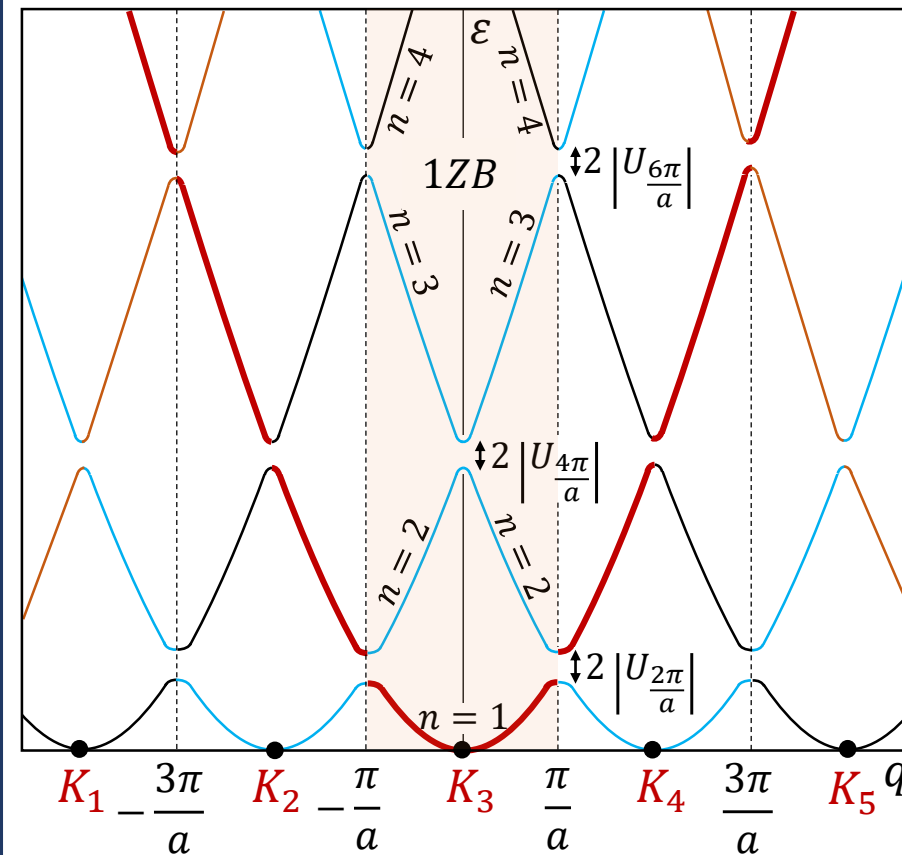
$$\left| \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_i}^0 \right| \gg U, \quad i = 1, \dots, m, \quad \forall \bar{K} \neq \bar{K}_1, \dots, \bar{K}_m$$

$$\rightarrow \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_i}^0 \right) c_{\bar{k}-\bar{K}_i} = \sum_{j=1}^m U_{\bar{K}_j-\bar{K}_i} c_{\bar{k}-\bar{K}_j} + \mathcal{O}(U^2)$$

## RB 1D



$$\varepsilon_{k-K_i}^0 = \varepsilon_{k-K_j}^0 \rightarrow \varepsilon = \varepsilon_{k-K_i}^0 \pm \left| U_{K_j-K_i} \right|$$



# Consecuencias del Teorema de Bloch

## Momento cristalino y velocidad media

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

$$\xrightarrow{p = \frac{\hbar}{i}\nabla} \frac{\hbar}{i}\nabla\psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\nabla[e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r})] = \hbar\bar{k}\psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) + e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} \frac{\hbar}{i}\nabla u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \rightarrow$$

A diferencia del caso de e<sup>-</sup> libres, para e<sup>-</sup> de Bloch  $\bar{k}$  no es proporcional al momento, y  $\hbar\bar{k}$  recibe el nombre de “Momento cristalino”.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \left( e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \right) + U(\vec{r})e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \varepsilon e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \quad (\text{Ec. de Schrödinger para un estado de Bloch})$$

$$\begin{aligned} \nabla \left( i\bar{k}e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) + e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} \nabla u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \right) &= \left( -k^2 e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) + i\bar{k}e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} \nabla u_{n\bar{k}}(\vec{r}) + i\bar{k}e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} \nabla u_{n\bar{k}}(\vec{r}) + e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} \nabla^2 u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \right) \\ &= e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} (-k^2 + 2i\bar{k}\nabla + \nabla^2) u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$\rightarrow \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2i\bar{k}\nabla - k^2) + U(\vec{r}) \right] u_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \varepsilon u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \rightarrow \varepsilon_{n\bar{k}} = \langle \psi_{n\bar{k}} | \mathcal{H} | \psi_{n\bar{k}} \rangle = \langle u_{n\bar{k}} | \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle$$

$\mathcal{H}_{\bar{k}}$

# Consecuencias del Teorema de Bloch

## Momento cristalino y velocidad media

$$\begin{aligned}
 \nabla_{\bar{k}} \varepsilon_n(\bar{k}) &= \nabla_{\bar{k}} \langle u_{n\bar{k}} | \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle = \langle \nabla_{\bar{k}} u_{n\bar{k}} | \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle + \langle u_{n\bar{k}} | \nabla_{\bar{k}} \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle + \langle u_{n\bar{k}} | \mathcal{H}_{\bar{k}} | \nabla_{\bar{k}} u_{n\bar{k}} \rangle \\
 &= \langle \nabla_{\bar{k}} u_{n\bar{k}} | \varepsilon_n(\bar{k}) | u_{n\bar{k}} \rangle + \langle u_{n\bar{k}} | \nabla_{\bar{k}} \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle + \langle u_{n\bar{k}} | \varepsilon_n(\bar{k}) | \nabla_{\bar{k}} u_{n\bar{k}} \rangle \\
 &= \varepsilon_n(\bar{k}) (\langle \nabla_{\bar{k}} u_{n\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle + \langle u_{n\bar{k}} | \nabla_{\bar{k}} u_{n\bar{k}} \rangle) + \langle u_{n\bar{k}} | \nabla_{\bar{k}} \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle \\
 &= \varepsilon_n(\bar{k}) \nabla_{\bar{k}} \langle u_{n\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle + \langle u_{n\bar{k}} | \nabla_{\bar{k}} \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle = \langle u_{n\bar{k}} | \nabla_{\bar{k}} \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle
 \end{aligned}$$

= 1

$$\mathcal{H}_{\bar{k}} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2i\bar{k}\nabla - k^2) + U(\bar{r}) \rightarrow \nabla_{\bar{k}} \mathcal{H}_{\bar{k}} = -\frac{\hbar^2}{m} (i\nabla - \bar{k}) = \frac{\hbar}{m} (\bar{P} + \hbar\bar{k})$$

$$\rightarrow \nabla_{\bar{k}} \varepsilon_n(\bar{k}) = \frac{\hbar}{m} \langle u_{n\bar{k}} | \bar{P} + \hbar\bar{k} | u_{n\bar{k}} \rangle = \frac{\hbar}{m} \langle u_{n\bar{k}} | \underbrace{e^{-i\bar{k}\cdot\bar{r}} \bar{P} e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}}_{\text{}} | u_{n\bar{k}} \rangle = \frac{\hbar}{m} \langle \psi_{n\bar{k}} | \bar{P} | \psi_{n\bar{k}} \rangle$$

$$\hbar\bar{k} e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} | u_{n\bar{k}} \rangle + e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} \bar{P} | u_{n\bar{k}} \rangle = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} (\hbar\bar{k} + \bar{P}) | u_{n\bar{k}} \rangle$$

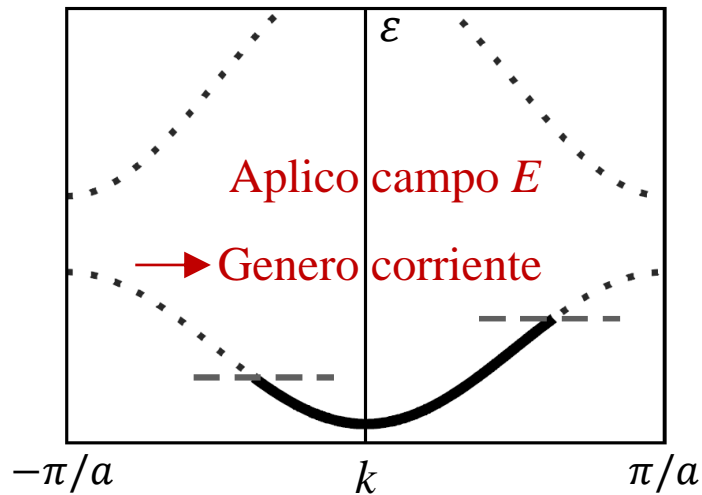
$$\rightarrow \bar{P}_n(\bar{k}) = \frac{m}{\hbar} \nabla_{\bar{k}} \varepsilon_n(\bar{k}) \rightarrow \bar{v}_n(\bar{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\bar{k}} \varepsilon_n(\bar{k}) \text{ (velocidad media de un e- de Bloch en el estado } n, \bar{k}\text{)}$$

# Comportamiento eléctrico

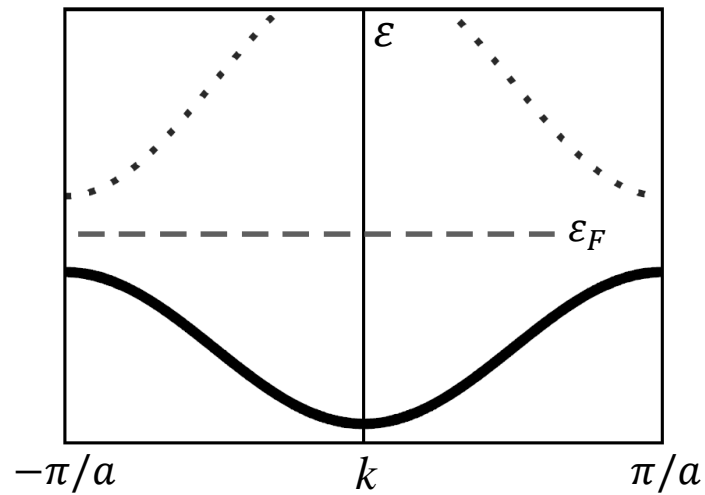
## ¿Metal o aislante?

En cada banda podemos acomodar  $2N e^-$  ( $N$ : N° de CP en el cristal).

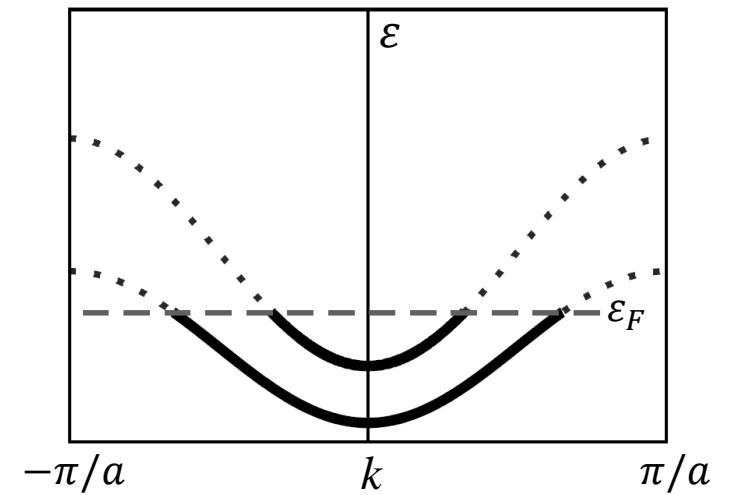
Cada CP aporta  $1e^-$ :  $N e^-$   
Banda semi-llena  $\rightarrow$  Metal



Cada CP aporta  $2e^-$ : Banda llena  
¿Hay gap?  $\rightarrow$  Sí  $\rightarrow$  Aislante



Cada CP aporta  $2e^-$ , pero  
las bandas se solapan  $\rightarrow$  Metal



Si cada CP aporta un N° impar de  $e^- \rightarrow$  Metal

Si cada CP aporta un N° par de  $e^- \rightarrow$  Metal o aislante

Si el material es aislante  $\rightarrow$  Cada CP aporta un N° par de  $e^-$

# Electrones en un potencial periódico débil

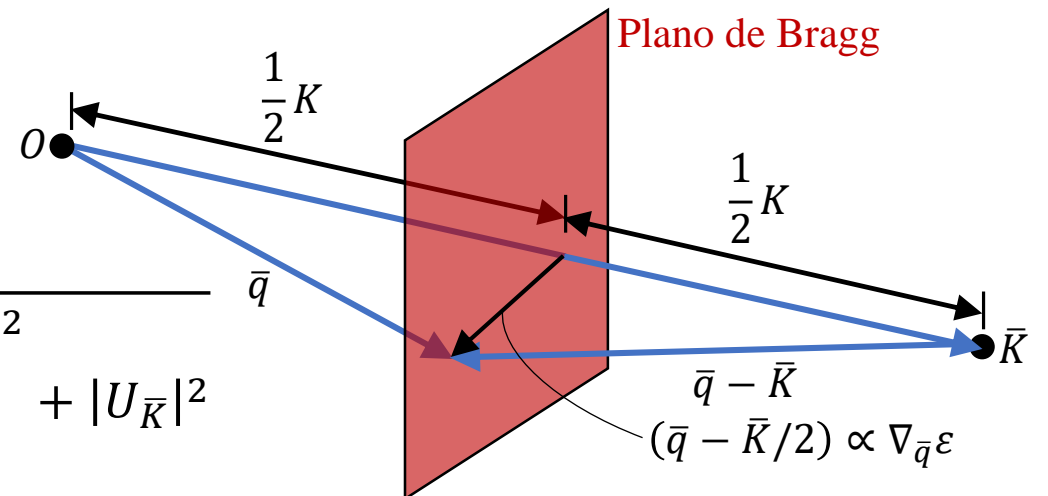
## Potencial periódico débil: Niveles de energía cerca de un (único) plano de Bragg

Tomamos  $\bar{k}$ ,  $\bar{K}_1$  y  $\bar{K}_2$  tal que  $\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_2}^0 \leq \mathcal{O}(U) \wedge \left| \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_{1,2}}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0 \right| \gg U \forall \bar{K} \neq \bar{K}_1, \bar{K}_2$ .

$$\left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_i}^0 \right) c_{\bar{k}-\bar{K}_i} = \sum_{j=1}^2 U_{\bar{K}_j-\bar{K}_i} c_{\bar{k}-\bar{K}_j} \quad \left\{ \begin{array}{l} \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 \right) c_{\bar{k}-\bar{K}_1} = U_{\bar{K}_2-\bar{K}_1} c_{\bar{k}-\bar{K}_2} \\ \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_2}^0 \right) c_{\bar{k}-\bar{K}_2} = U_{\bar{K}_1-\bar{K}_2} c_{\bar{k}-\bar{K}_1} \end{array} \right. \xrightarrow{\bar{q} = \bar{k} - \bar{K}_1; \bar{K} = \bar{K}_2 - \bar{K}_1} \left\{ \begin{array}{l} \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}}^0 \right) c_{\bar{q}} = U_{\bar{K}} c_{\bar{q}-\bar{K}} \\ \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0 \right) c_{\bar{q}-\bar{K}} = U_{\bar{K}} c_{\bar{q}} \end{array} \right.$$

$\varepsilon_{\bar{q}}^0 = \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0 \leftrightarrow |\bar{q}| = |\bar{q} - \bar{K}| \rightarrow$  La punta de  $\bar{q}$  debe caer en el plano de Bragg que biseca la línea que une el origen con  $\bar{K}$  (y en ningún otro).

Para tener solo 2 niveles cuasi-degenerados, el  $e^-$  debe estar cerca de satisfacer la condición de dispersión de Bragg para un único plano. Múltiples niveles degenerados aparecen al tratar reflexiones de Bragg simultáneas.



$$\begin{vmatrix} \varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}}^0 & -U_{\bar{K}} \\ -U_{\bar{K}} & \varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0 \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \varepsilon = \frac{\varepsilon_{\bar{q}}^0 + \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{\varepsilon_{\bar{q}}^0 - \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0}{2} \right)^2 + |U_{\bar{K}}|^2}$$

# Electrones en un potencial periódico débil

## Potencial periódico débil: Niveles de energía cerca de un (único) plano de Bragg

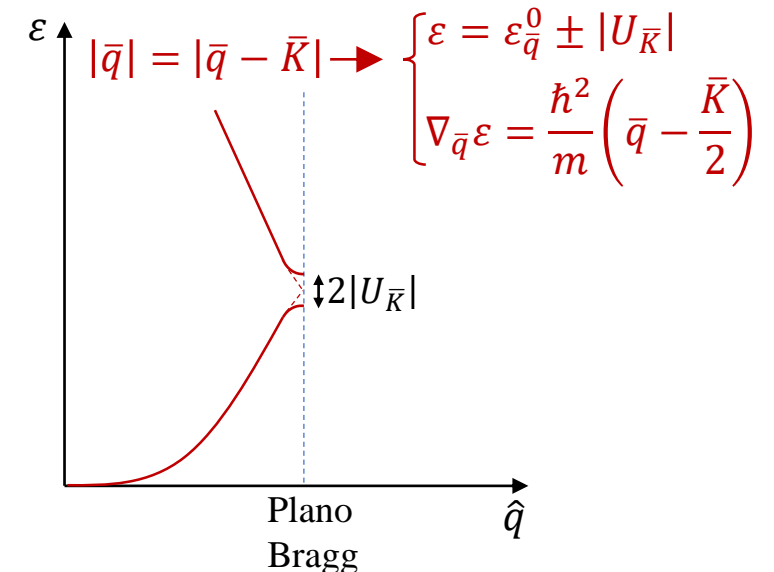
Tomamos  $\bar{k}$ ,  $\bar{K}_1$  y  $\bar{K}_2$  tal que  $\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_2}^0 \leq \mathcal{O}(U) \wedge \left| \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_{1,2}}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0 \right| \gg U \forall \bar{K} \neq \bar{K}_1, \bar{K}_2$ .

$$\left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_i}^0 \right) c_{\bar{k}-\bar{K}_i} = \sum_{j=1}^2 U_{\bar{K}_j-\bar{K}_i} c_{\bar{k}-\bar{K}_j} \quad \begin{cases} \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_1}^0 \right) c_{\bar{k}-\bar{K}_1} = U_{\bar{K}_2-\bar{K}_1} c_{\bar{k}-\bar{K}_2} \\ \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_2}^0 \right) c_{\bar{k}-\bar{K}_2} = U_{\bar{K}_1-\bar{K}_2} c_{\bar{k}-\bar{K}_1} \end{cases} \xrightarrow{\substack{\bar{q} = \bar{k} - \bar{K}_1; \bar{K} = \bar{K}_2 - \bar{K}_1 \\ \downarrow}} \begin{cases} \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}}^0 \right) c_{\bar{q}} = U_{\bar{K}} c_{\bar{q}-\bar{K}} \\ \left( \varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0 \right) c_{\bar{q}-\bar{K}} = U_{\bar{K}} c_{\bar{q}} \end{cases}$$

$\varepsilon_{\bar{q}}^0 = \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0 \leftrightarrow |\bar{q}| = |\bar{q} - \bar{K}| \rightarrow$  La punta de  $\bar{q}$  debe caer en el plano de Bragg que biseca la línea que une el origen con  $\bar{K}$  (y en ningún otro).

Para tener solo 2 niveles cuasi-degenerados, el  $e^-$  debe estar cerca de satisfacer la condición de dispersión de Bragg para un único plano. Múltiples niveles degenerados aparecen al tratar reflexiones de Bragg simultáneas.

$$\begin{vmatrix} \varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}}^0 & -U_{\bar{K}} \\ -U_{\bar{K}} & \varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0 \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \varepsilon = \frac{\varepsilon_{\bar{q}}^0 + \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{\varepsilon_{\bar{q}}^0 - \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0}{2} \right)^2 + |U_{\bar{K}}|^2}$$





# Electrones en un potencial periódico débil

## Potencial periódico débil: Autoestados sobre un plano de Bragg

$$\begin{cases} (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}}^0) c_{\bar{q}} = U_{\bar{K}} c_{\bar{q}-\bar{K}} \\ (\varepsilon - \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0) c_{\bar{q}-\bar{K}} = U_{\bar{K}} c_{\bar{q}} \\ \varepsilon = \varepsilon_{\bar{q}}^0 \pm |U_{\bar{K}}| \end{cases} \xrightarrow{\begin{cases} \pm |U_{\bar{K}}| c_{\bar{q}} = U_{\bar{K}} c_{\bar{q}-\bar{K}} \\ c_{\bar{q}} = \pm \text{sgn}(U_{\bar{K}}) c_{\bar{q}-\bar{K}} \\ U_{\bar{K}} < 0 \rightarrow c_{\bar{q}} = \mp c_{\bar{q}-\bar{K}} \end{cases}} \begin{cases} \psi_{n\bar{q}}(\vec{r}) = \sum_{\bar{K}'} c_{\bar{q}-\bar{K}'} e^{i(\bar{q}-\bar{K}') \cdot \vec{r}} = c_{\bar{q}} (e^{i\bar{q} \cdot \vec{r}} + e^{i(\bar{q}-\bar{K}) \cdot \vec{r}}) \\ \psi_{n+1,\bar{q}} = c_{\bar{q}} (e^{i\bar{q} \cdot \vec{r}} - e^{i(\bar{q}-\bar{K}) \cdot \vec{r}}) \end{cases}$$

$\varepsilon_{\bar{q}}^0 = \varepsilon_{\bar{q}-\bar{K}}^0$

$$|\psi_{n\bar{q}}(\vec{r})|^2 \propto |e^{i\bar{q} \cdot \vec{r}} + e^{i(\bar{q}-\bar{K}) \cdot \vec{r}}|^2 = 2 + e^{i\bar{K} \cdot \vec{r}} + e^{-i\bar{K} \cdot \vec{r}} = 2(1 + \cos \bar{K} \cdot \vec{r}) \rightarrow \begin{cases} |\psi_{n\bar{q}}(\vec{r})|^2 \propto \cos^2 \left( \frac{\bar{K}}{2} \cdot \vec{r} \right) \\ |\psi_{n+1,\bar{q}}(\vec{r})|^2 \propto \text{sen}^2 \left( \frac{\bar{K}}{2} \cdot \vec{r} \right) \end{cases}$$

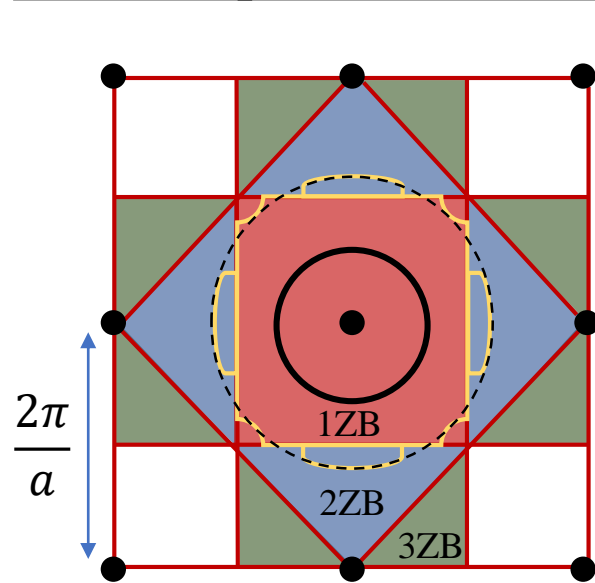
$$\frac{\bar{K}}{2} \cdot \bar{R} = \frac{2\pi(hn_1 + kn_2 + ln_3)}{2} = \pi m \quad \begin{matrix} \in \mathbb{Z} \\ \text{---} \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} |\psi_n|^2 & |\psi_{n+1}|^2 & & & & & & & & & |\psi|^2 (U=0) \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} \end{matrix}$$

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

→ El nivel con menos energía es aquel que presenta mayor densidad de carga en la posición de los iones.

# Electrones en un potencial periódico débil

## Potencial periódico débil en 2D: Red cuadrada



$$N_e = 2(\pi k_F^2) \left( \frac{A}{4\pi^2} \right) = k_F^2 \left( \frac{Na^2}{2\pi} \right) = \overset{\text{N}^\circ \text{ de e}^- \text{ por CP}}{N_{ec}} N \rightarrow k_F = \frac{1}{a} \sqrt{2\pi N_{ec}}$$

2.5

Si cada CP aporta  $1e^-$ , la “esfera” de Fermi de  $e^-$  libres queda contenida en la 1ZB.

Las correcciones a la energía son solo de  $\mathcal{O}(U^2)$ :

$$\varepsilon = \varepsilon_{\vec{k}}^0 + \underbrace{\sum_{\vec{K}} \frac{|U_{\vec{K}}|^2}{\varepsilon_{\vec{k}}^0 - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}}^0}}_{\text{correcciones de } \mathcal{O}(U^2)}$$

→ Tenemos esencialmente  $e^-$  libres.

Para ningún  $\vec{k}$  ocupado tenemos niveles cuasi-degenerados

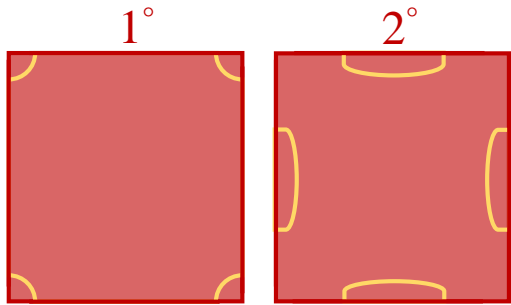
Si cada CP aporta  $2e^-$ , la “esfera” de Fermi cruza a la 2ZB ( $k_F = 3.55/a$ ), y tenemos cuasi-degeneración.

Las correcciones a la energía son de  $\mathcal{O}(U)$ :  $(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_i}^0) c_{\vec{k}-\vec{K}_i} = \sum_{j=1}^m U_{\vec{K}_j-\vec{K}_i} c_{\vec{k}-\vec{K}_j}$  → La superficie de Fermi deja de ser esférica, y pueden abrirse *gaps*.

# Electrones en un potencial periódico débil

## Potencial periódico débil en 2D: Red cuadrada

Esquema de zona reducida



$$N_e = 2(\pi k_F^2) \left( \frac{A}{4\pi^2} \right) = k_F^2 \left( \frac{Na^2}{2\pi} \right) = \overset{\text{N}^\circ \text{ de e}^- \text{ por CP}}{N_{ec}} N \quad \rightarrow \quad k_F = \frac{1}{a} \sqrt{2\pi N_{ec}}$$

2.5

Si cada CP aporta  $1e^-$ , la “esfera” de Fermi de  $e^-$  libres queda contenida en la 1ZB.

Las correcciones a la energía son solo de  $\mathcal{O}(U^2)$ :

$$\varepsilon = \varepsilon_{\vec{k}}^0 + \underbrace{\sum_{\vec{K}} \frac{|U_{\vec{K}}|^2}{\varepsilon_{\vec{k}}^0 - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}}^0}}_{\text{corrección de } \mathcal{O}(U^2)}$$

→ Tenemos esencialmente  $e^-$  libres.

Para ningún  $\vec{k}$  ocupado tenemos niveles cuasi-degenerados

Si cada CP aporta  $2e^-$ , la “esfera” de Fermi cruza a la 2ZB ( $k_F = 3.55/a$ ), y tenemos cuasi-degeneración.

Las correcciones a la energía son de  $\mathcal{O}(U)$ :

$$\left( \varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}_i}^0 \right) c_{\vec{k}-\vec{K}_i} = \sum_{j=1}^m U_{\vec{K}_j-\vec{K}_i} c_{\vec{k}-\vec{K}_j} \rightarrow$$

La superficie de Fermi deja de ser esférica, y pueden abrirse *gaps*.

# Electrones en un potencial periódico débil

¿Qué sucede en una RB con base? (Caso monoatómico)

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} U_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{R}} \sum_j \phi(\vec{r} - \vec{R} - \vec{d}_j)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow U_{\vec{K}} &= \frac{1}{v} \int_{CP} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} U(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{v} \int_{CP} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{R}} \sum_j \phi(\vec{r} - \vec{R} - \vec{d}_j) d\vec{r} \\ &= \frac{1}{v} \int_{\text{Todo el espacio}} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} \sum_j \phi(\vec{r} - \vec{d}_j) d\vec{r} = \frac{1}{v} \int_{\text{Todo el espacio}} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}) \underbrace{\sum_j e^{-i\vec{K}\cdot\vec{d}_j}}_{S_{\vec{K}}^*} d\vec{r} = \frac{1}{v} \phi(\vec{K}) S_{\vec{K}}^* \end{aligned}$$

$S_{\vec{K}}^*$  ( $S_{\vec{K}}$ : factor de estructura)

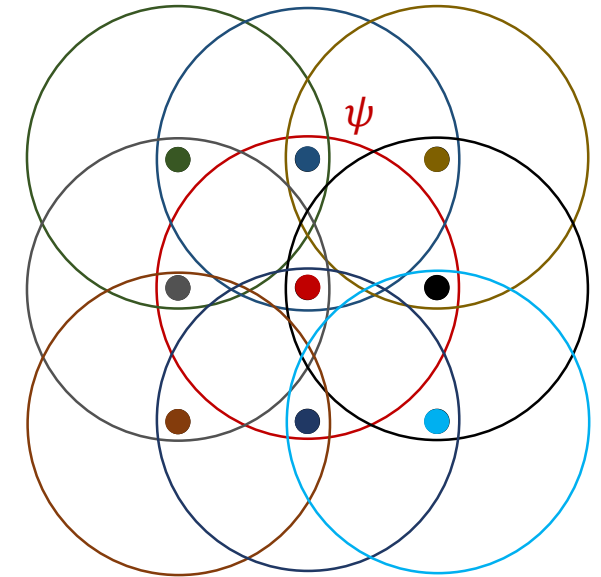
Cuando la base da lugar a una extinción en el factor de estructura para algún plano de Bragg, entonces la componente de Fourier del potencial asociada a ese plano se anula, y no ocurre el desdoblamiento de niveles.

# Electrones en un potencial periódico débil

## ¿Para qué elementos funciona bien la aproximación de electrones cuasi-libres?

Describe adecuadamente propiedades de metales de la columna I, II, III, IV, que cuentan con electrones  $s$  y  $p$  externos a capas cerradas de gases nobles. En menor medida la aproximación funciona también para metales nobles (monovalentes en orbitales  $s$ ).

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	I	II	IIIB	IVB	VB	VIB	VIB	VIB	VIB	VIB	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIA	VIA
2	Li LITIO	Be BERILIO											B BORO	C CARBONO	N NITRÓGENO	O OXÍGENO	F FLUOR	Ne NEÓN
3	Na SODIO	Mg MAGNESIO											Al ALUMINIO	Si SILICIO	P FÓSFORO	S AZUFRE	Cl CLORO	Ar ARGÓN
4	K POTASIO	Ca CALCIO	Sc ESCANDIO	Ti TITANIO	V VANADIO	Cr CROMO	Mn MANGANESO	Fe HIERRO	Co COBALTO	Ni NIQUEL	Cu COBRE	Zn ZINC	Ga GALIO	Ge GERMANIO	As ARSENICO	Se SELENIO	Br BROMO	Kr KRIPTÓN
5	Rb RUBIDIO	Sr ESTRONCIO	Y ITRIO	Zr CIRCONIO	Nb NIOBIO	Mo MOLIBDENO	Tc TECNECIO	Ru RUTENIO	Rh RODIO	Pd PALADIO	Ag PLATA	Cd CADMIO	In INDIO	Sn ESTAÑO	Sb ANTIMONIO	Te TELURIO	I YODO	Xe XENÓN
6	Cs CESIO	Ba BARIO	La-Lu Lantánidos	Hf HAFNIO	Ta TANTALO	W WOLFRAMIO	Re RENIÓ	Os OSMIO	Ir IRIDIO	Pt PLATINO	Au ORO	Hg MERCURIO	Tl TALIO	Pb PLOMO	Bi BISMUTO	Po POLONIO	At ASTATO	Rn RADÓN



## ¿Por qué funciona bien esta descripción?

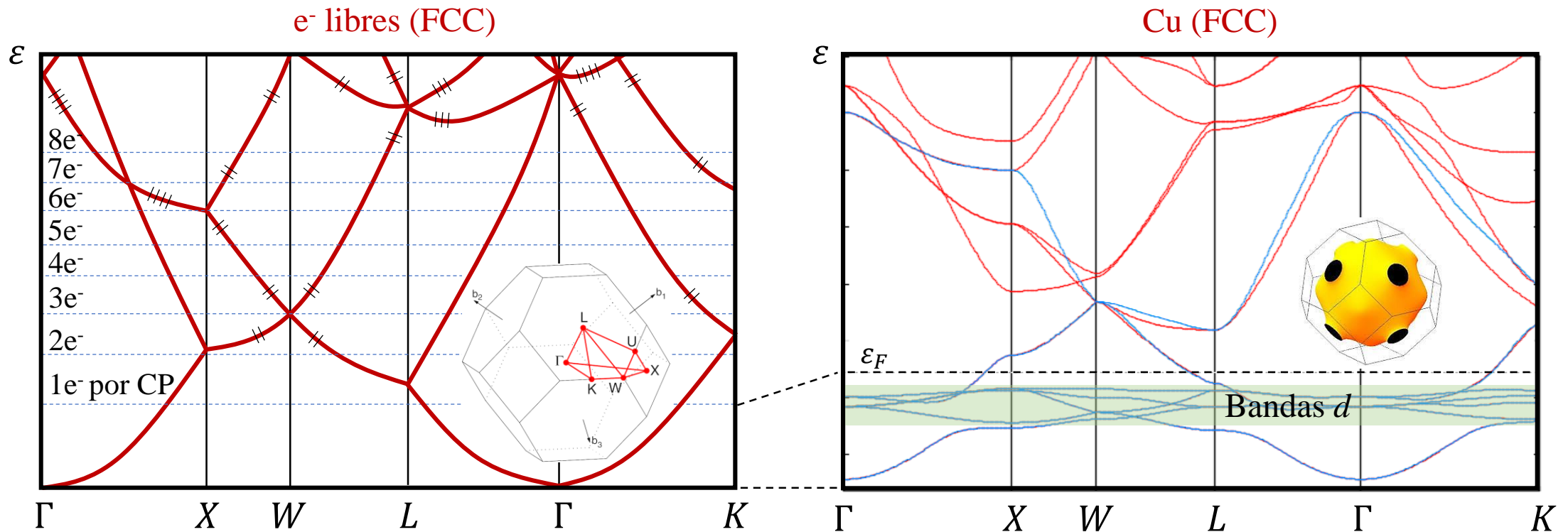
- Las funciones de onda de  $e^-$  de valencia se superponen ampliamente entre átomos vecinos y se forman estados (casi) completamente deslocalizados. Los  $e^-$  de conducción tienen prohibido acercarse demasiado a los iones positivos debido a la presencia de  $e^-$  en torno al núcleo que ocupan los estados disponibles (PEP).
- Los  $e^-$  de conducción mismos reducen el potencial atractivo neto que un  $e^-$  percibe, puesto que apantallan los campos producidos por los iones positivos, dando lugar a un potencial efectivo menor.

# Electrones en un potencial periódico débil

## Relación de dispersión para redes en 3D

En el caso de  $e^-$  libres, se grafican los valores de  $\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0 = \frac{\hbar^2}{2m} (\bar{k} - \bar{K})^2$  para recorridos específicos de  $\bar{k}$  dentro de la 1ZB, considerando vectores  $\bar{K}$  en torno al origen.

Ejemplo:  $e^-$  libres en red FCC y comparación con el caso del Cu



# Densidad de estados de electrones

## Densidad de estados

La densidad de estados  $g(\varepsilon)$ , se define tal que  $g(\varepsilon)d\varepsilon$  es el número total de estados de  $1e^-$  con energías entre  $\varepsilon$  y  $\varepsilon + d\varepsilon$ , por unidad de volumen del cristal.

$$g_s(\omega) = \int \delta(\omega - \omega_s(\bar{k})) \frac{d\bar{k}}{(2\pi)^3}$$

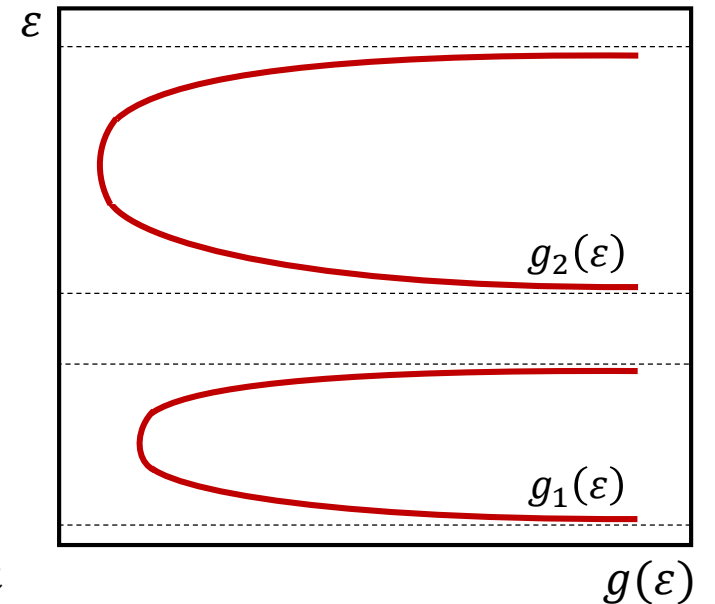
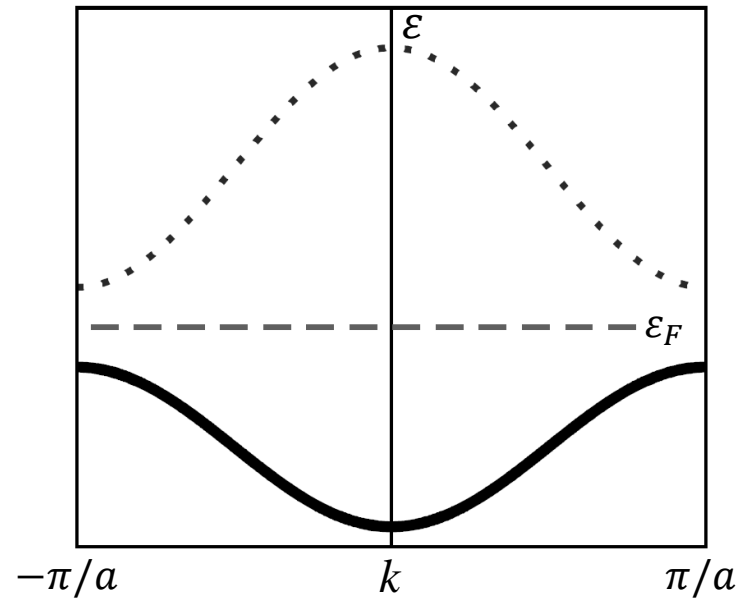
$$g_s(\omega) = \int_{A_s(\omega)} \frac{1}{|\nabla\omega_s(\bar{k})|} \frac{dA}{(2\pi)^3}$$

De fonones  
a electrones

$$g_n(\varepsilon) = \int \delta(\varepsilon - \varepsilon_n(\bar{k})) \frac{d\bar{k}}{4\pi^3}$$

$$g_n(\varepsilon) = \int_{A_n(\varepsilon)} \frac{1}{|\nabla\varepsilon_n(\bar{k})|} \frac{dA}{4\pi^3}$$

Ejemplo ( cualitativo)



Densidad de estados total:  $g(\varepsilon) = \sum_n g_n(\varepsilon)$

# Resumen

- Momento cristalino y velocidad media
- Comportamiento eléctrico
- Potencial periódico débil cerca de un plano de Bragg
- Ejemplo en red cuadrada
- Extinción de coeficientes  $U_{\bar{K}}$  en RB + Base
- Relación de dispersión para redes en 3D
- Densidad de estados de electrones

