Estructura de la Materia 2

Primer Cuatrimestre de 2021

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. ELECTRONES EN UN POTENCIAL PERIODICO DEBIL (1D)
   Sea una cadena unidimensional de átomos iguales a distancia a.

   a) Dibuje el esquema de zona reducida para electrones libres.

   b) Dibuje la densidad de estados para las dos primeras bandas.

   c) Si el potencial creado por los iones es apreciable, ¿cómo se modificarán las bandas? ¿y la densidad de estados?.

   d) Analice las condiciones que deben cumplirse para que el sistema sea aislante.

   e) 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.

6. ELECTRONES EN UN POTENCIAL PERIODICO DEBIL (2D)
   Considere electrones libres en una red bidimensional cuadrada de período a.

   a) Dibuje las primeras cuatro zonas de Brillouin.

   b) 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.

   c) Dibuje en cada caso la superficie de Fermi en un esquema de zona reducida.

   d) Analice la estructura de bandas graficando la relación de dispersión cuando el vector de onda efectúa el recorrido $\Gamma \longrightarrow X \longrightarrow M \longrightarrow \Gamma$, 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 b).

   e) Introduzca ahora un potencial periódico débil

   $$V(x, y) = -V_0 \left[\cos(2\pi x/a) + \cos(2\pi y/a)\right]$$

   y analice cualitativamente las modificaciones en la estructura de bandas y las superficies de Fermi.

7. 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°; y los correspondientes de la red recíproca son $\mathbf{b}_1$ y $\mathbf{b}_2$, siendo el ángulo entre ellos de 60°.

   a) Dibujar la primera zona de Brillouin para esta red.

   b) Hacer el diagrama de electrón libre en un esquema de zona reducida, en el recorrido $\Gamma \to X \to M \to \Gamma$, 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).

   c) Representar la superficie de Fermi si cada átomo aporta 1 y 2 electrones a la red.

   d) 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?