

Potencial débil

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

Aproximación de potencial débil

La aproximación, también conocida como de *electrones casi libres* (*nearly free electron approximation*), fue introducida en 1930 por Rudolf Peierls.

Suponer no solo que los electrones actúan como si la repulsión Coulombiana entre ellos no existe si no, además, que el potencial de todos los iones de la red es despreciable, parecía demasiado simple para ser viable.

Sin embargo, cuando los primeros experimentos en metales caracterizando las superficies de Fermi vieron la luz, la aproximación se confirmó como valedera.

Introducción

Aproximación de potencial débil

Los metales alcalinos (Na, K, etc.) son monovalentes y por lo tanto cada celda unidad aporta un electrón (N en total). La superficie de Fermi por tanto, tendrá un volumen que es la mitad de la primera zona de Brillouin.

La red de Bravais de estos metales es la BCC. Por lo tanto podemos elegir como celda convencional una cúbica de lado a con dos átomos en la base. La densidad electrónica es entonces $n = 2/a^3$.

Utilizando las fórmulas de electrón libre, esto corresponde a un $k_F = 1,24\pi/a$. Esto representa el 88% de la distancia más corta al borde de zona. Por lo tanto **los estados ocupados están alejados de los bordes de cualquiera de las BZs.**

Teoría

Aproximación de potencial débil

El punto de partida, es la formulación en Fourier de la ecuación de Schrödinger que obtuvimos la clase pasada.

$$\left(\frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{K})^2}{2m} - \varepsilon \right) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K}'} U_{\mathbf{K}'-\mathbf{K}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}'} = 0 \quad \forall \mathbf{k} \in 1\text{BZ}.$$

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K} \in \text{RR}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}}$$

Teoría

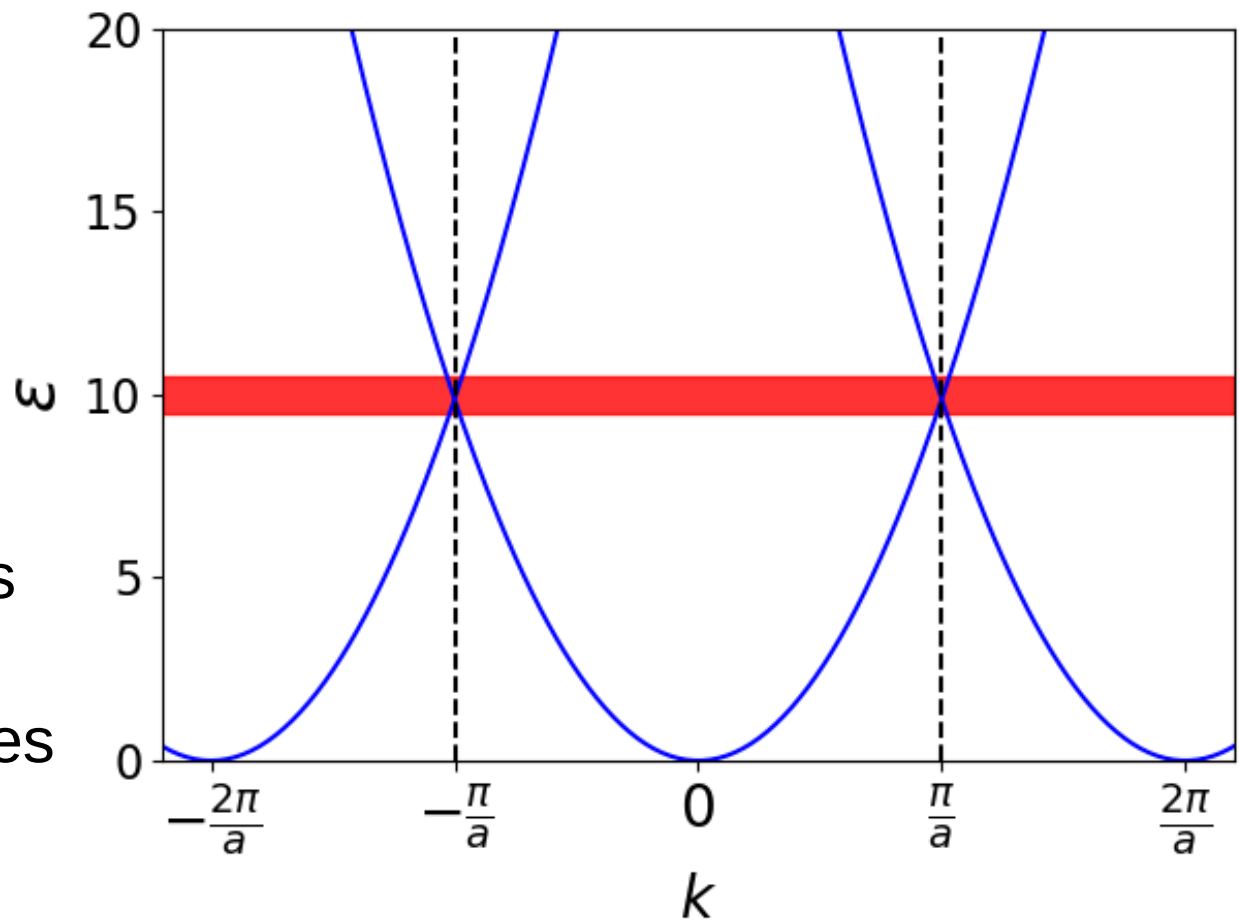
Orden cero

Si el potencial es cero, tenemos

$$(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0 - \varepsilon) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}},$$

$$\text{Donde } \varepsilon_{\mathbf{q}}^0 = \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m}.$$

Si vamos a tratar al potencial en teoría de perturbaciones podemos ver que la misma será degenerada en los bordes de zona.



Teoría

Caso no degenerado

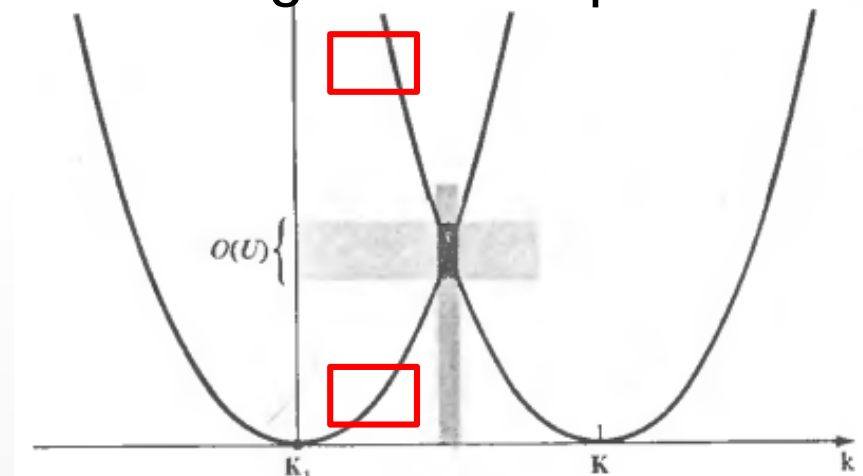
Llamemos U a la escala típica de los coeficientes del potencial. Queremos hacer teoría de perturbaciones para una dado $\mathbf{k}$ fijo. Si llamamos

$$\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1}^0$$

al nivel de energía considerado y

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

podemos utilizar teoría de perturbaciones no degeneradas para estudiar el efecto del potencial en la energía seleccionada y en los coeficientes de la función de onda.



Teoría

Caso no degenerado

Despejando los coeficientes en la ecuación de Schrödinger:

$$(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}} = \sum_{\mathbf{K}'} U_{\mathbf{K}'-\mathbf{K}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}'}$$

podemos obtener, separando el término más relevante,

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

$$= \frac{U_{\mathbf{K}_1-\mathbf{K}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0} + \mathcal{O}(U^2).$$

Teoría

Caso no degenerado

Para el nivel que estamos considerando, resulta:

$$(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1}^0) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1} = \sum_{\mathbf{K}} \frac{U_{\mathbf{K}-\mathbf{K}_1} U_{\mathbf{K}_1-\mathbf{K}}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1} + O(U^3)$$

Despejando la energía hasta orden 2, nos da:

$$\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1}^0 + \sum_{\mathbf{K}} \frac{|U_{\mathbf{K}-\mathbf{K}_1}|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1}^0 - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0} + O(U^3).$$

En resumen, ***en el caso no degenerado, el corrimiento en las energías es de segundo orden.***

Teoría

Caso degenerado

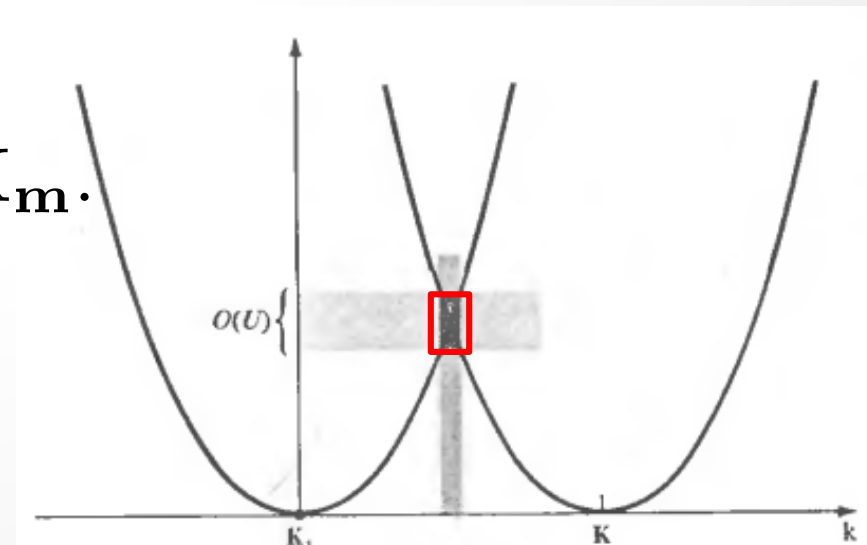
Supongamos que para un dado vector de onda en la 1BZ, existen $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m$ vectores recíprocos con energías

$\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1}^0, \dots, \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_m}^0$ tales que

$$|\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_i}^0 - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_j}^0| \lesssim U, \quad i, j \in 1, \dots, m \text{ y}$$

$$|\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0 - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_i}^0| \gg U,$$

con $i \in 1, \dots, m; \mathbf{K} \neq \mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m$.



Teoría

Caso degenerado

En este caso, los coeficientes se pueden aproximar como

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}} &= \sum_{j=1}^m \frac{U_{\mathbf{K}_j-\mathbf{K}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_j}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0} + \sum_{\mathbf{K}' \neq \mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m} \frac{U_{\mathbf{K}'-\mathbf{K}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}'}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0} \\ &= \sum_{j=1}^m \frac{U_{\mathbf{K}_j-\mathbf{K}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_j}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0} + \mathcal{O}(U^2). \end{aligned}$$

Reemplazando en la ecuación de Schrödinger.

Teoría

Caso degenerado

Reemplazando en la ecuación de Schrödinger.

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_i}^0) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_i} &= \sum_{j=1}^m U_{\mathbf{K}_j-\mathbf{K}_i} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_j} + \\ &+ \sum_{j=1}^m \left(\sum_{\mathbf{K} \neq \mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_m} \frac{U_{\mathbf{K}-\mathbf{K}_i} U_{\mathbf{K}_j-\mathbf{K}}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}^0} \right) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_j} + O(U^3) \end{aligned}$$

Teoría

Caso degenerado

A primer orden no nulo, resulta:

$$\left(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_i}^0 \right) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_i} = \sum_{j=1}^m U_{\mathbf{K}_j-\mathbf{K}_i} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_j}, \quad \mathbf{i} = \mathbf{1}, \dots, \mathbf{m}.$$

Así, ***en el caso degenerado, la corrección es a orden lineal.***

Ejemplo y propiedades

Ejemplo: dos bandas degeneradas

El caso más representativo es el de dos bandas que son casi degeneradas cerca de un borde de zona (plano de Bragg) y separadas del resto. En este caso:

$$\begin{aligned}(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1}^0) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1} &= U_{\mathbf{K}_2-\mathbf{K}_1} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_2} \\(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_2}^0) c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_2} &= U_{\mathbf{K}_1-\mathbf{K}_2} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_1}\end{aligned}$$

Recordemos que $U_0 = 0$ por construcción.

Para simplificar, definamos las variables

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}_1, \mathbf{K} = \mathbf{K}_2 - \mathbf{K}_1$$

Ejemplo y propiedades

Ejemplo: dos bandas degeneradas

Reemplazando, las ecuaciones resultan:

$$(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{q}}^0) c_{\mathbf{q}} = U_{\mathbf{K}} c_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}$$

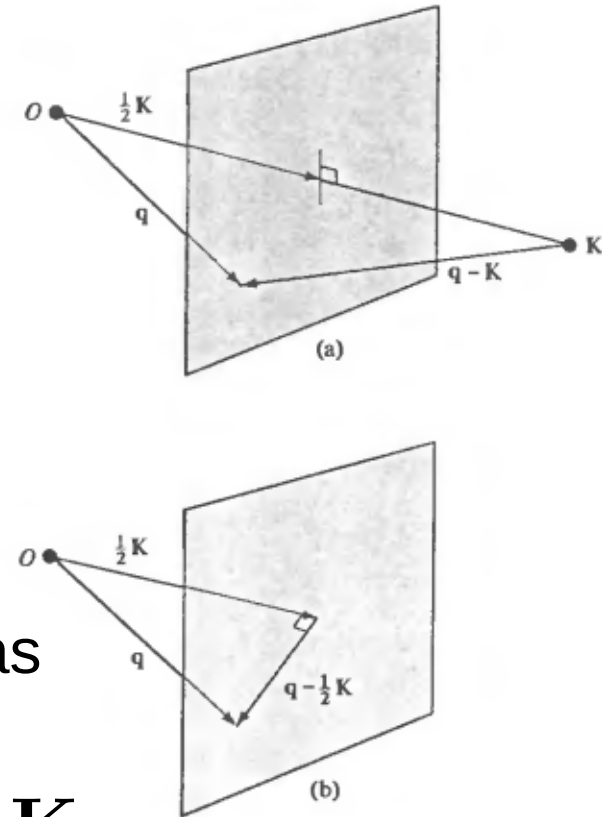
$$(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0) c_{\mathbf{q}-\mathbf{K}} = U_{-\mathbf{K}} c_{\mathbf{q}} = U_{\mathbf{K}}^* c_{\mathbf{q}}$$

Las energías son casi degeneradas y separadas del resto,

$$\varepsilon_{\mathbf{q}}^0 \approx \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0, |\varepsilon_{\mathbf{q}}^0 - \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}'}^0| \gg U, \forall \mathbf{K}' \neq \mathbf{0}, \mathbf{K}.$$

Ahora $|\mathbf{q}| = |\mathbf{q} - \mathbf{K}|$ solamente si el vector $\mathbf{q}$ cae en un plan de Bragg y cumple:

$$\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{K}} = \frac{1}{2}K$$



Ejemplo y propiedades

Ejemplo: dos bandas degeneradas

Por lo tanto, el caso de dos niveles degenerados aplica a un electrón cuyo vector es cercano a satisfacer la condición de scattering de Bragg.

El caso general, de degeneración múltiple, aplica al caso de un electrón cuyo vector de onda es cercano al cruce de varios planos de Bragg.

Dado que el caso degenerado es el más afectado por el potencial, concluimos que ***un potencial débil tiene sus efectos mayores solo en aquellos niveles de electrón libre cuyos vectores de onda son cercanos a los planos de Bragg.***

Ejemplo y propiedades

Ejemplo: dos bandas degeneradas

Siguiendo con el caso de dos bandas, el sistema tiene solución cuando se cumple

$$\begin{vmatrix} \varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{q}}^0 & -U_{\mathbf{K}} \\ -U_{\mathbf{K}}^* & \varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0 \end{vmatrix} = 0$$

Por lo tanto

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}^0 - \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}^0 - \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0}{2}\right)^2 + |U_{\mathbf{K}}|^2}$$

Ejemplo y propiedades

Ejemplo: q en el plano de Bragg.

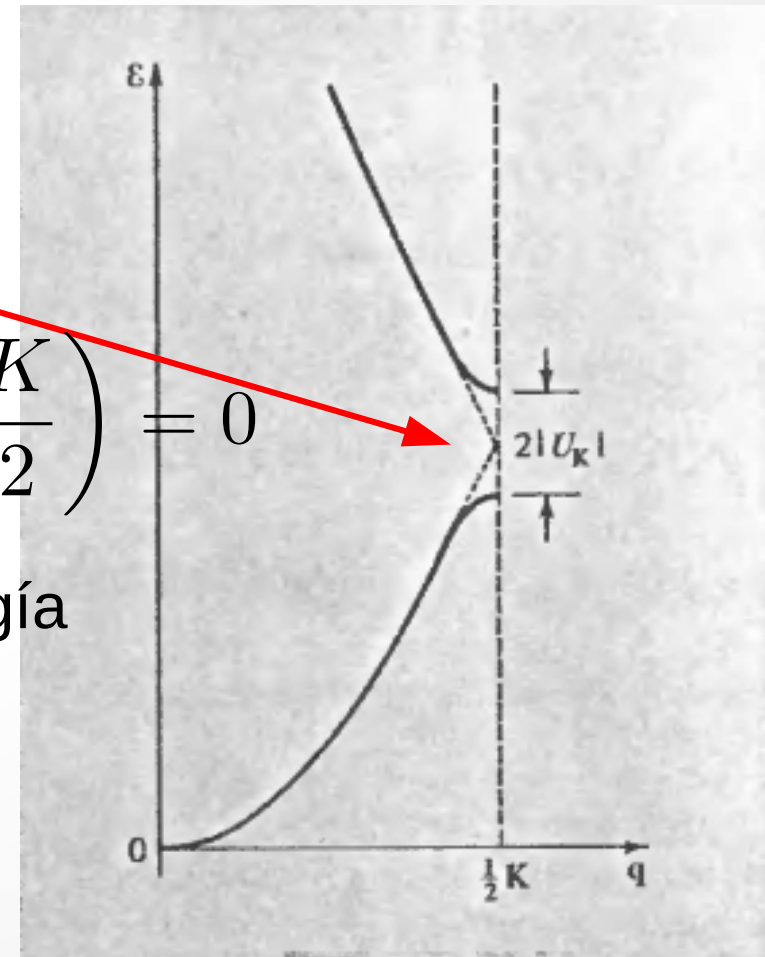
En el caso que los vectores de onda estén exactamente sobre un plano de Bragg, $\varepsilon_{\mathbf{q}}^0 = \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0$. Así, la energía es

$$\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{q}}^0 \pm |U_{\mathbf{K}}|^2$$

Además

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{K}} \propto \left(\mathbf{q} - \frac{1}{2} \mathbf{K} \right) \cdot \hat{\mathbf{K}} = \left(\frac{K}{2} - \frac{K}{2} \right) = 0$$

lo que implica que las superficies de energía constante en el plano de Bragg son perpendiculares al mismo.



Ejemplo y propiedades

Ejemplo: $\mathbf{q}$ en el plano de Bragg.

En el caso que los vectores de onda estén exactamente sobre un plano de Bragg, ¿cómo son las funciones de onda?

Resolviendo el sistema con $\varepsilon_{\mathbf{q}}^0 = \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0$ se obtiene la relación

$$c_{\mathbf{q}} = \pm \text{signo}(U_{\mathbf{K}}) c_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}.$$

Las funciones de onda correspondientes, son ($U_{\mathbf{K}} > 0$)

$$|\psi_+(\mathbf{r})|^2 \propto \cos^2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{K} \cdot \mathbf{r} \right), \quad \varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{q}}^0 + |U_{\mathbf{K}}|$$

$$|\psi_-(\mathbf{r})|^2 \propto \sin^2 \left(\frac{1}{2} \mathbf{K} \cdot \mathbf{r} \right), \quad \varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{q}}^0 - |U_{\mathbf{K}}|$$

Ejemplo y propiedades

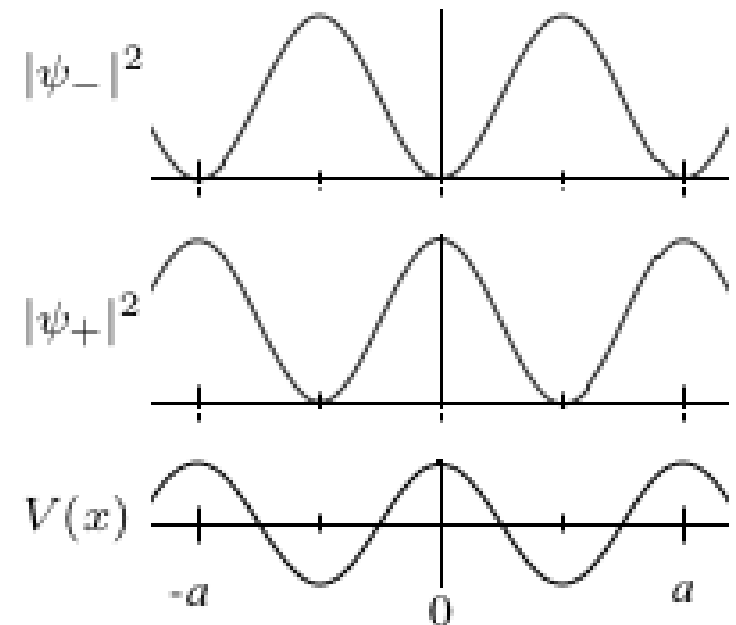
Ejemplo: q en el plano de Bragg.

En el caso que los vectores de onda estén exactamente sobre un plano de Bragg, ¿cómo son las funciones de onda?

Resolviendo el sistema con $\varepsilon_{\mathbf{q}}^0 = \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}^0$ se obtiene la relación

$$c_{\mathbf{q}} = \pm \text{signo}(U_{\mathbf{K}}) c_{\mathbf{q}-\mathbf{K}}.$$

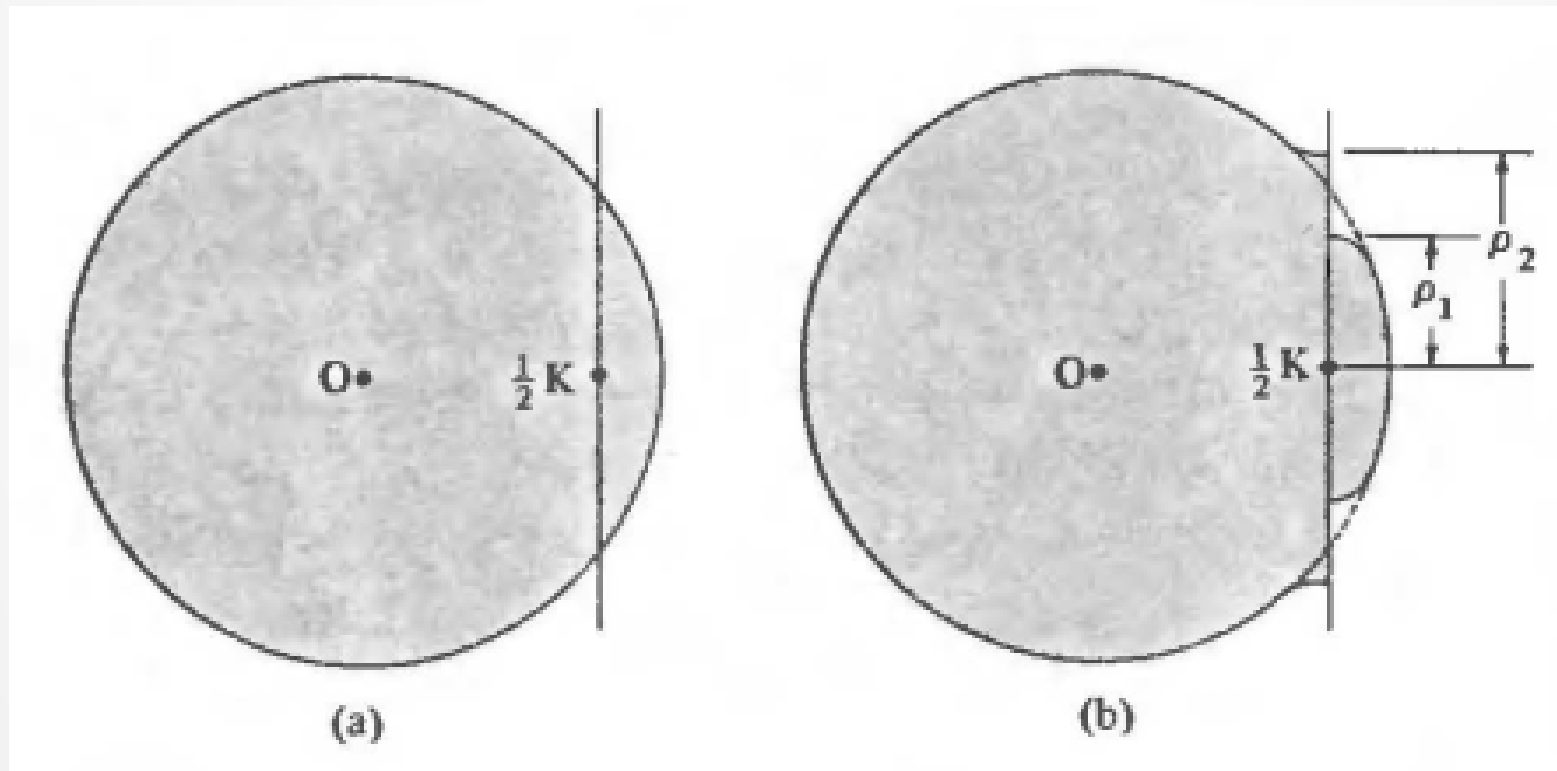
Las funciones de onda correspondientes, son ondas estacionarias:



Ejemplo y propiedades

Ejemplo: energía de Fermi.

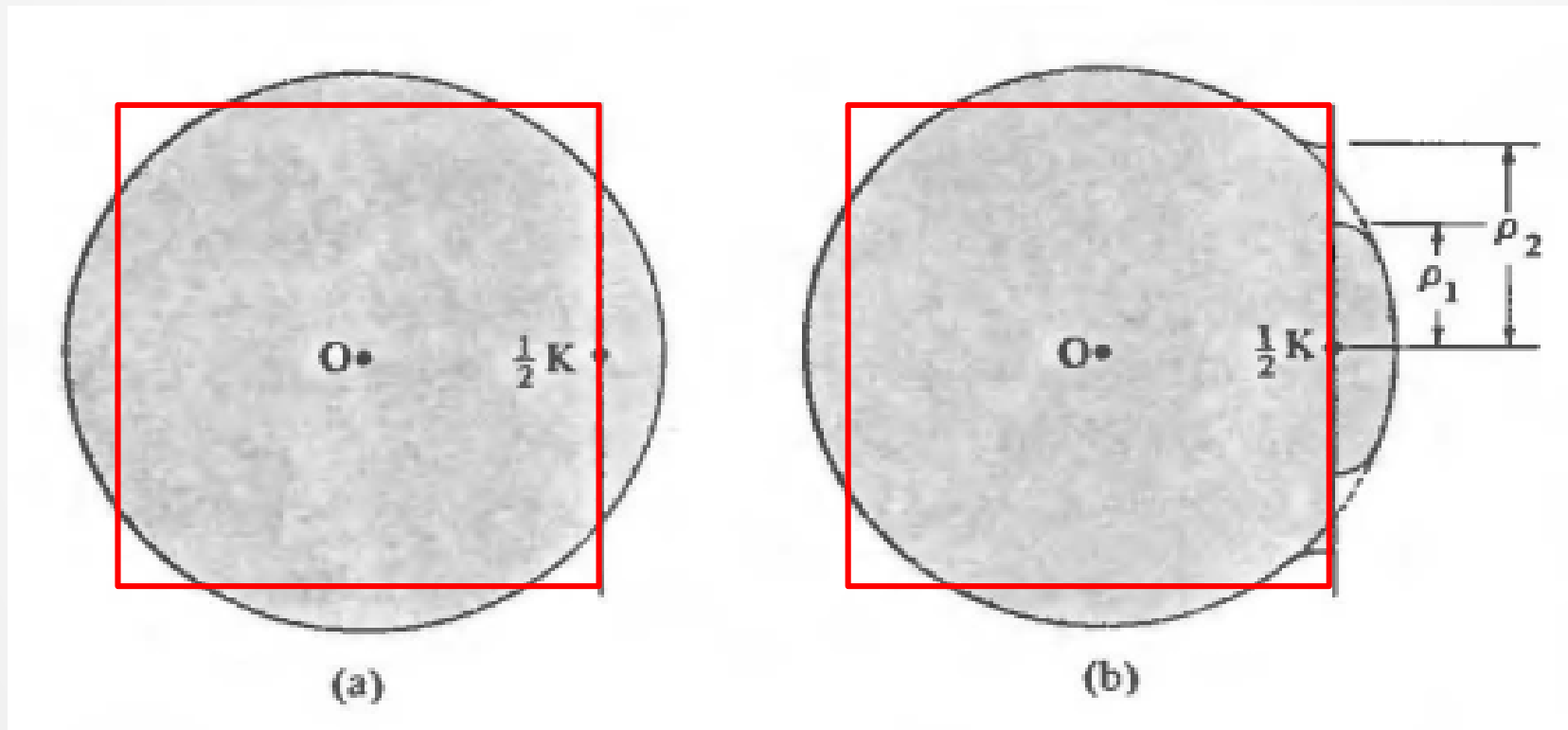
La superficie de Fermi se verá afectada solo en los planos de Bragg.



Ejemplo y propiedades

Ejemplo: energía de Fermi.

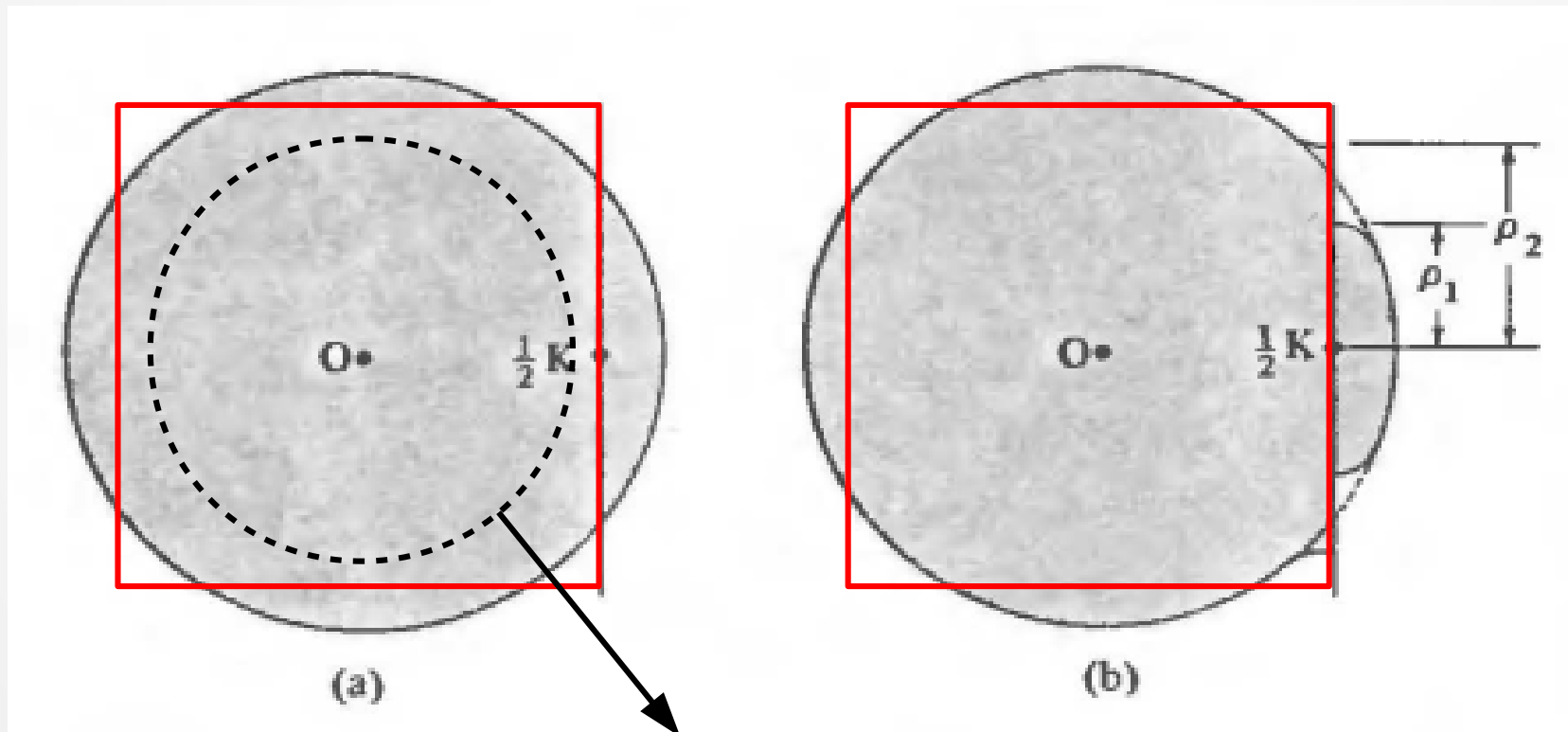
La superficie de Fermi se verá afectada solo en los planos de Bragg.



Ejemplo y propiedades

Ejemplo: energía de Fermi.

La superficie de Fermi se verá afectada solo en los planos de Bragg.

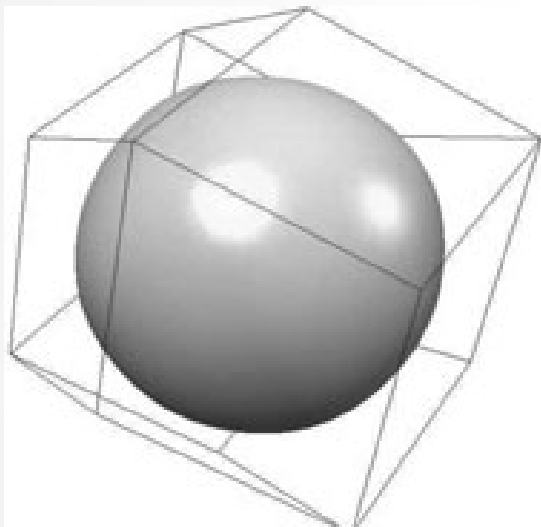


Caso discutido en la introducción

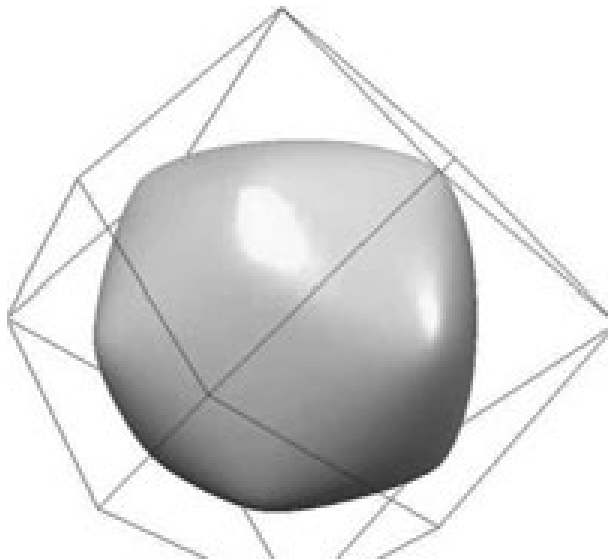
Ejemplo y propiedades

Ejemplo: energía de Fermi.

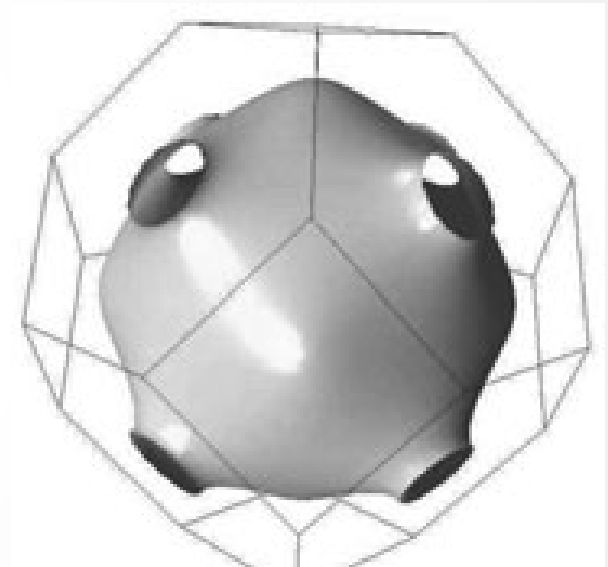
La superficie de Fermi se verá afectada solo en los planos de Bragg.



Potasio



Litio



Cobre

Caso discutido en la introducción

Alcance

Potencial general

¿Cómo se modifican estas propiedades en el caso de un potencial general, no necesariamente débil?

El panorama general resulta inalterado. Las características principales son:

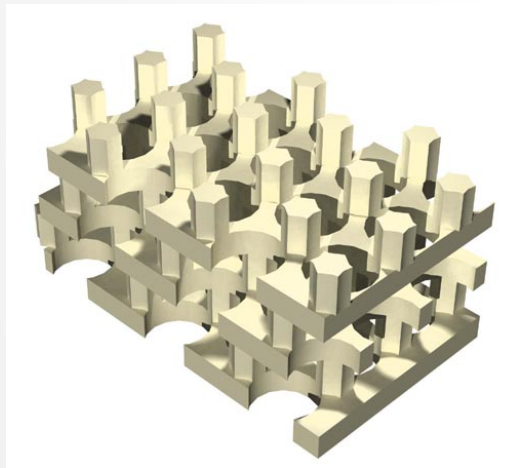
- Formación de gaps en los bordes de zona.
- Los estados cerca de los planos de Bragg se asemejan a ondas estacionarias (su velocidad media es ~ 0).
- La superficie de Fermi se modifica fuertemente en las intersecciones con los planos de Bragg.

Un ejemplo simple, que puede resolverse de manera exacta, es el potencial de Kronig—Penney [Marder, Kittel].

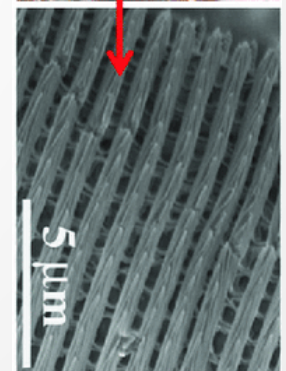
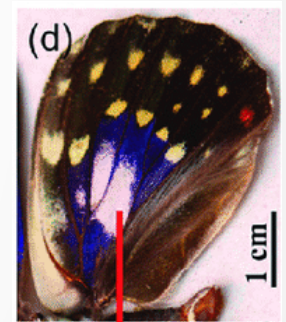
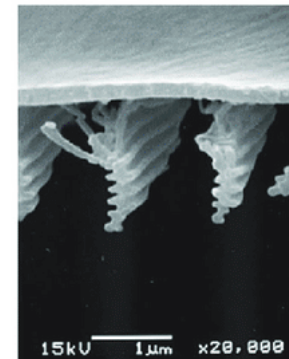
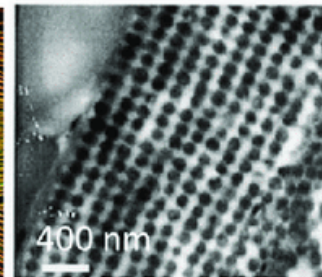
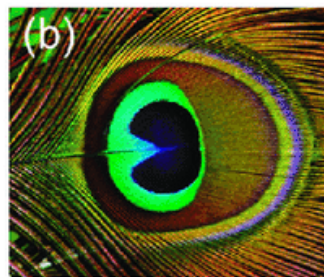
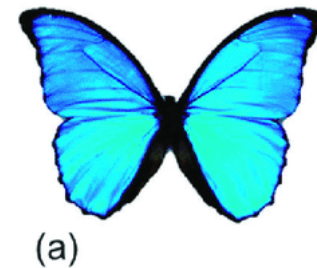
Alcance

Exportando ideas

Óptica. En el centro de la descripción de Bloch hay dos ingredientes: el carácter ondulatorio de las funciones de onda electrónicas y la periodicidad del potencial.
¿Qué sucede si reemplazamos el cristal por un arreglo periódico de material dieléctrico y los electrones por fotones?



Cristales fotónicos



Alcance

Exportando ideas

Acústica. Estas ideas las podemos aplicar a otro tipo de ondas. Ondas de sonido en el aire y arreglos regulares de obstáculos, que forman lo que se conoce como Meta-materiales acústicos o

Cristales acústicos



Órgano, de E. Sempere



Paradoja de Klein, con sonido!
(Science 370, 1447 (2020))

Fin de la clase

¡Muchas gracias!