Estructura de la Materia 2

Clase 8 - Teoría

Docentes

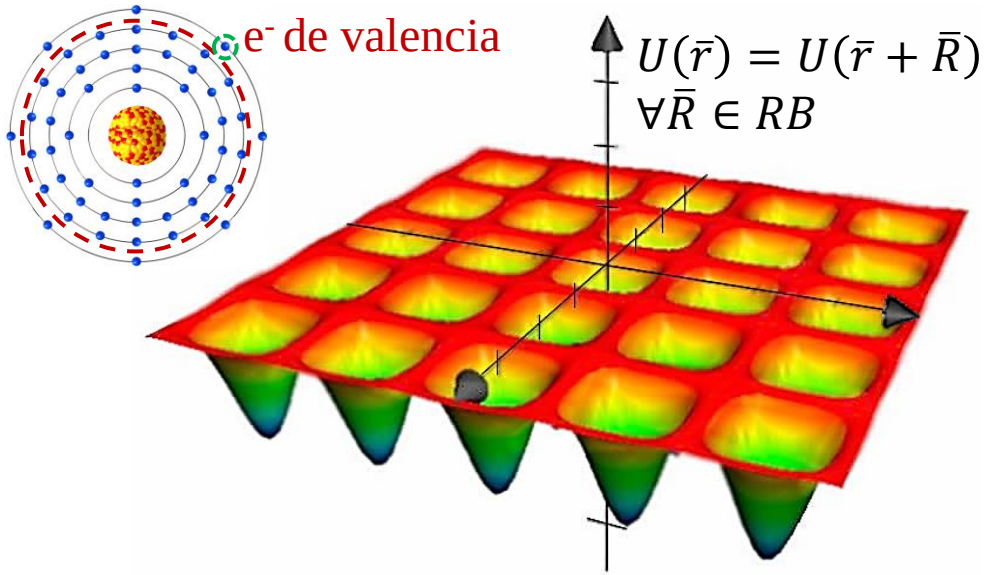
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Franco Mayo, Alejandra Fernández

Departamento de Física, FCEN, UBA – Segundo Cuatrimestre, 2022

Web: http://materias.df.uba.ar/edlm2a2022c2

Repaso

Potencial periódico



Teorema de Bloch y condiciones periódicas de contorno

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

$\in 1ZB$

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

Índice de banda

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

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

$\psi(\bar{r} + N_i\bar{a}_i) = \psi(\bar{r});\ i = 1,2,3,\ \ N_1N_2N_3 = N$

Consecuencias del teorema de Bloch

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

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\bar{k} - \bar{K})^2$$

$$\overbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla^2 + 2i\bar{k}\nabla - k^2\right) + U(\bar{r})\right]}^{\mathcal{H}_{\bar{k}}} u_{n\bar{k}}(\bar{r}) = \varepsilon u_{n\bar{k}}(\bar{r})$$

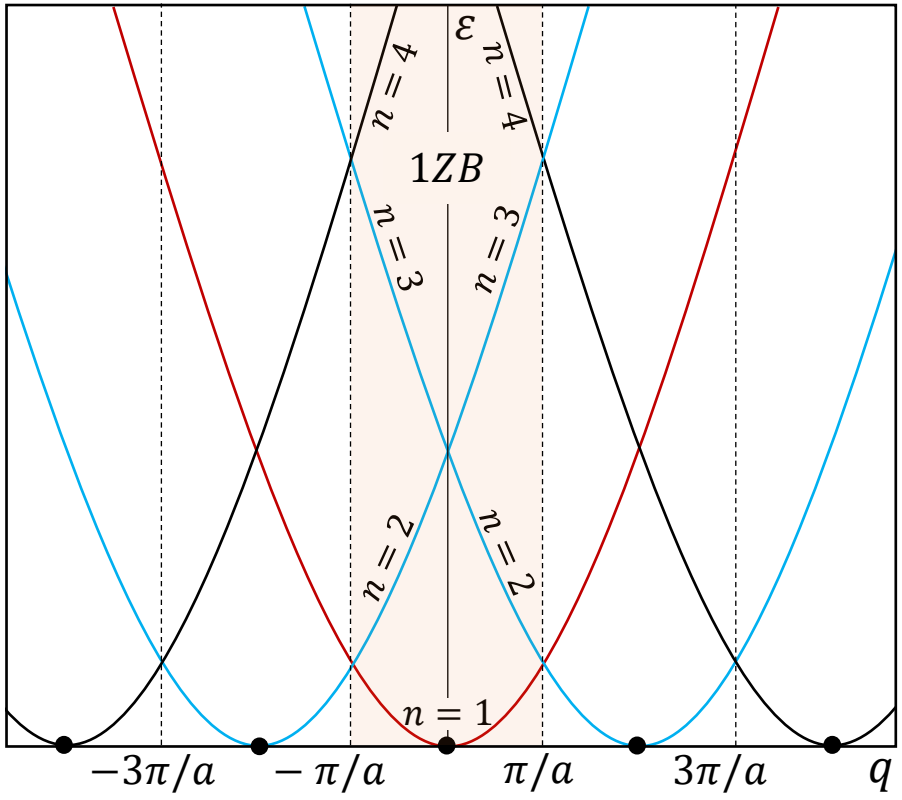
$$\rightarrow \varepsilon_{n\bar{k}} = \langle \psi_{n\bar{k}} | \mathcal{H} | \psi_{n\bar{k}} \rangle = \langle u_{n\bar{k}} | \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle$$

$$\bar{v}_n(\bar{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\bar{k}}\varepsilon_n(\bar{k})$$

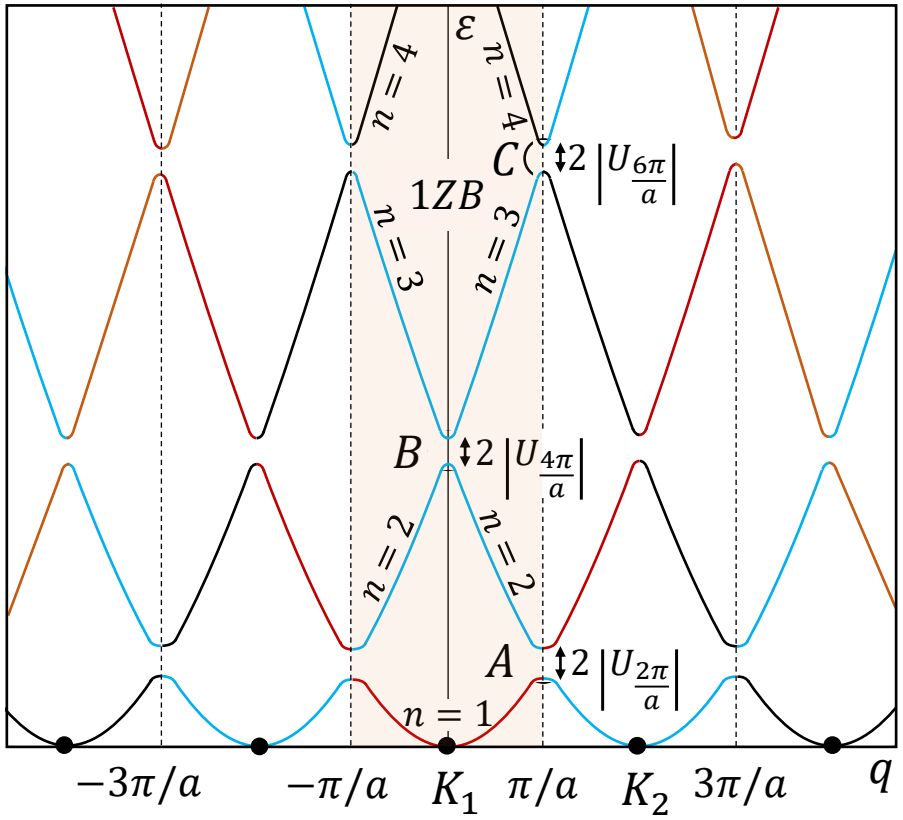
(velocidad media de un e- de Bloch en el estado n, $\bar{k}$)

Electrones en un potencial periódico débil

<u>Potencial débil</u>: RB 1D

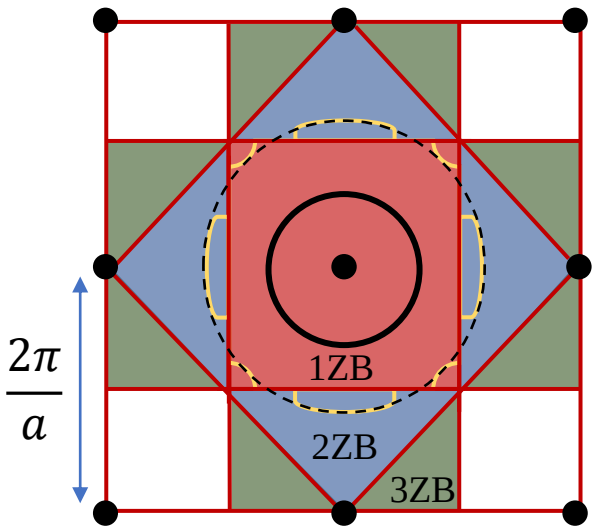


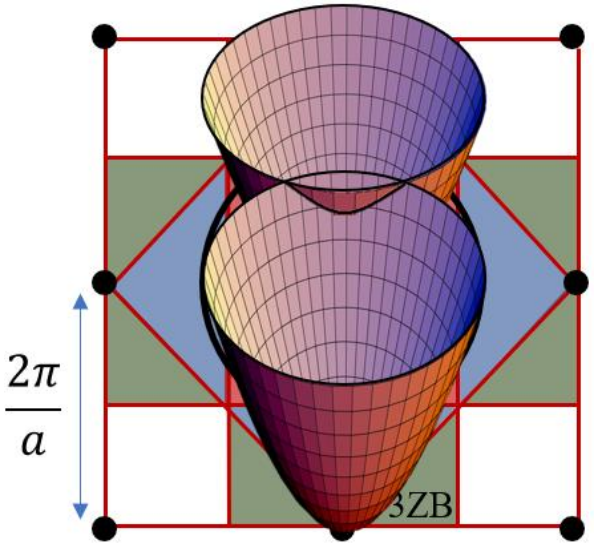
Esquema de zona repetida



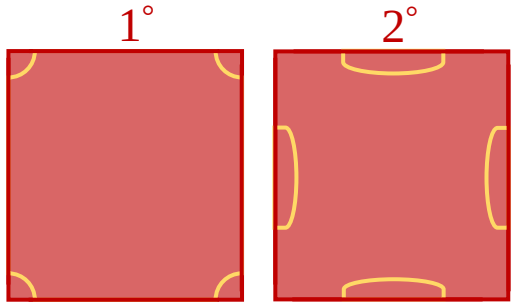
Electrones en un potencial periódico débil

<u>Potencial periódico débil en 2D</u>: Red cuadrada

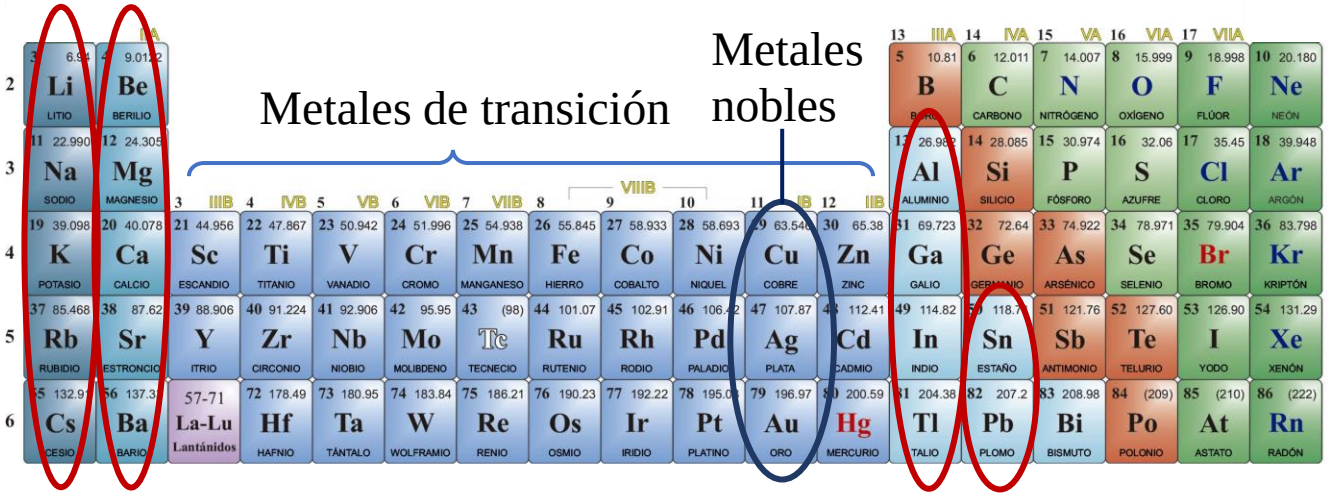




Esquema de zona reducida



<u>¿Para qué elementos funciona bien la aproximación de electrones cuasi-libres?</u>

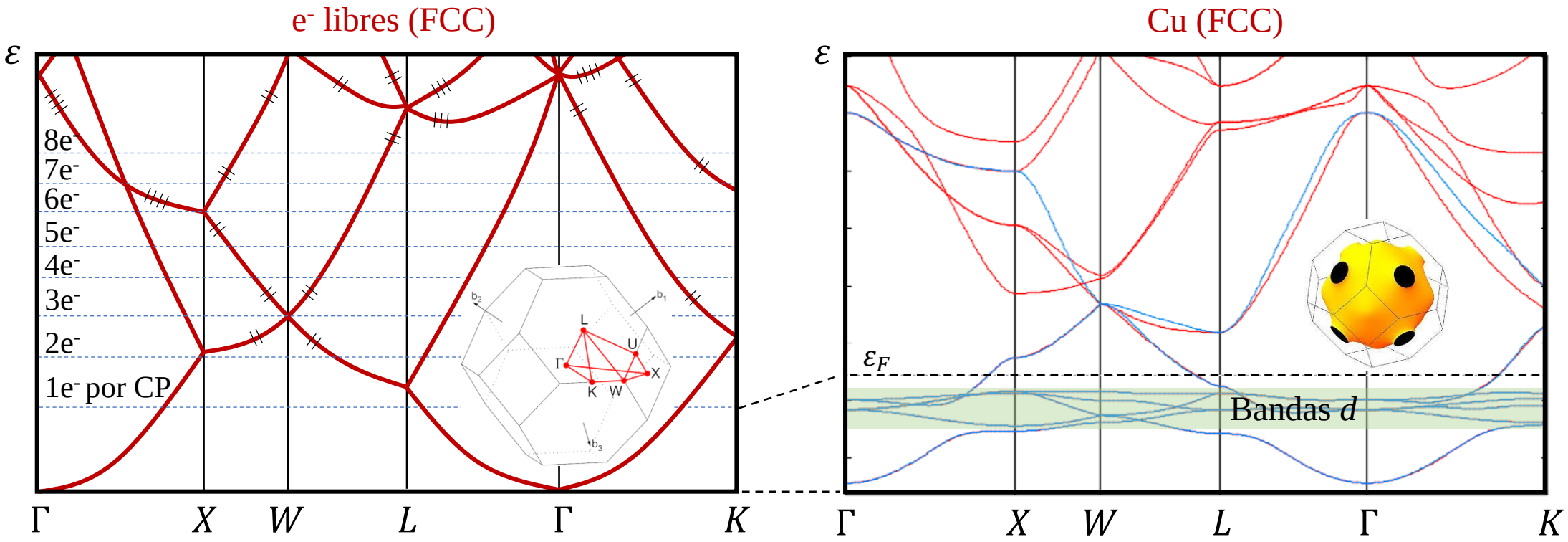


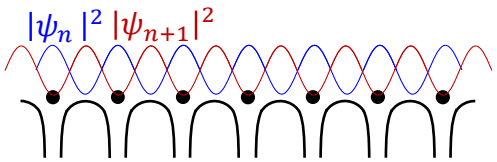
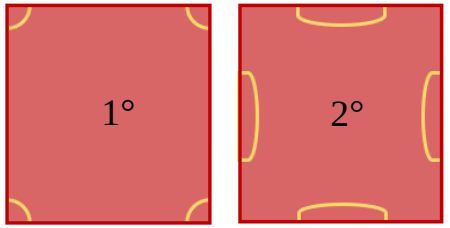
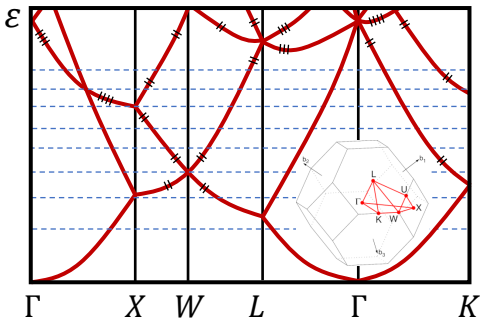
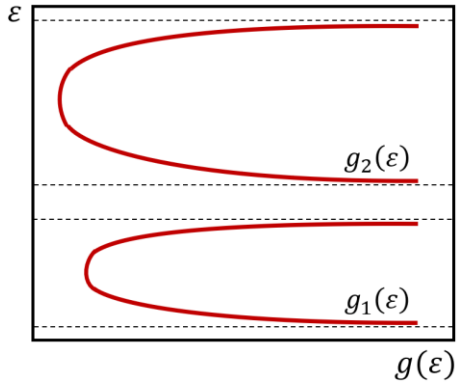
Electrones en un potencial periódico débil

Relación de dispersión para redes en 3D

En el caso de e⁻ libres, se grafican los valores de $\varepsilon^0_{\bar{k}-\bar{K}} = \frac{\hbar^2}{2m}(\bar{k}-\bar{K})^2$ 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



Resumen

- Potencial periódico débil
- Ejemplo en red 1D y red cuadrada
- Potencial periódico débil cerca de un plano de Bragg
- Comportamiento eléctrico
- Relación de dispersión para redes en 3D
- Densidad de estados de electrones