

# Estructura de la Materia 2

Clase 8 - Teoría

## Docentes

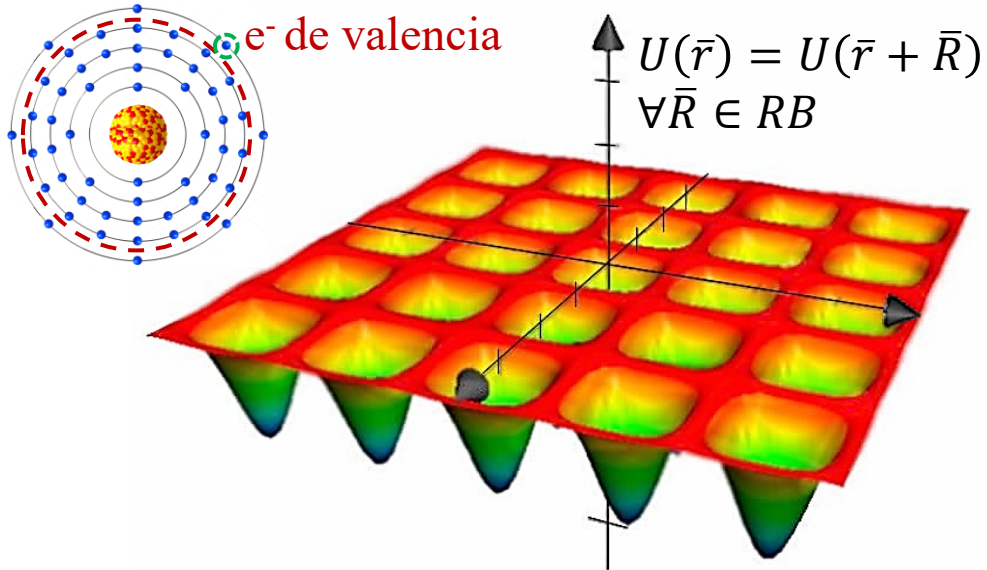
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Juan Herrera Mateos

Departamento de Física, FCEN, UBA – Curso de Verano, 2022

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2022v>

# Repaso

## Potencial periódico



## Teorema de Bloch y condiciones periódicas de contorno

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

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

$\in 1ZB$   
 Índice de banda

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

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

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

## Consecuencias del teorema de Bloch

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

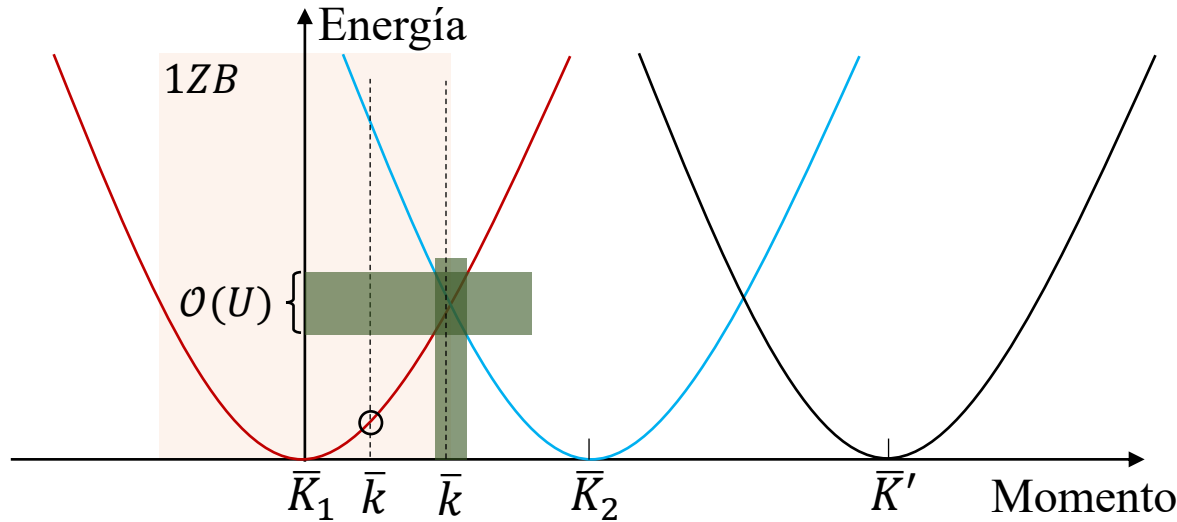
$$\overbrace{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2i\bar{k}\nabla - k^2) + U(\vec{r}) \right]}^{\mathcal{H}_{\bar{k}}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \varepsilon u_{n\bar{k}}(\vec{r})$$

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

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

# 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:

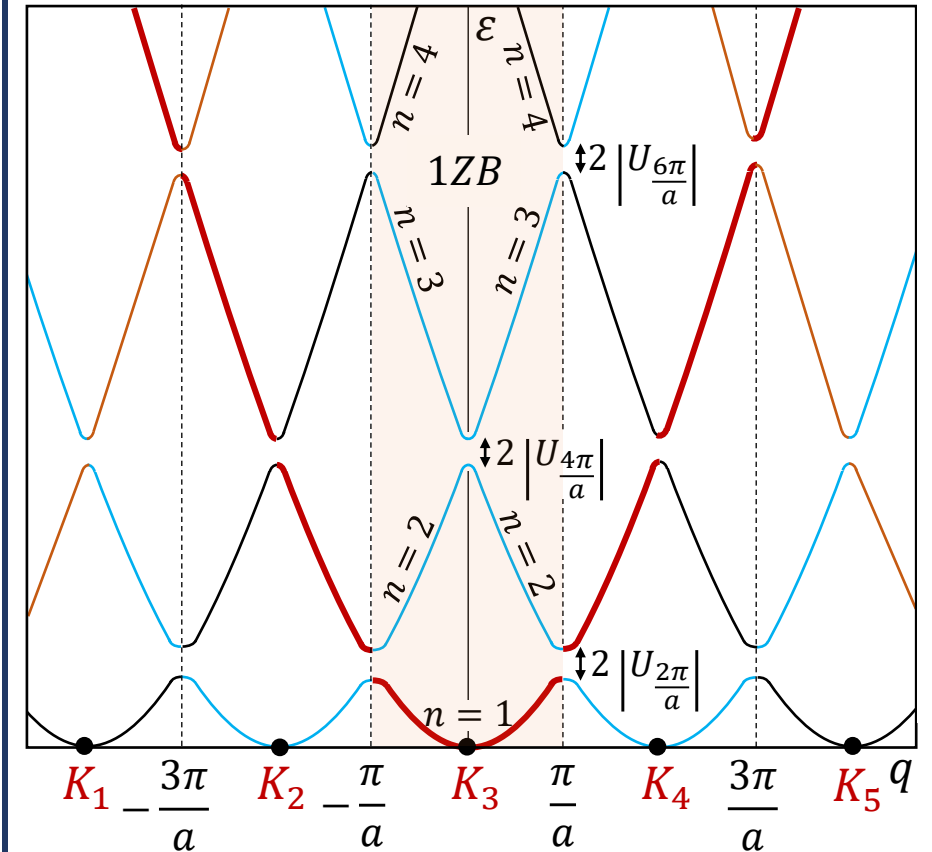
$$\left| \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0 - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}_i}^0 \right| \gg U, \quad i = 1, \dots, m, \quad \forall \bar{K} \neq \bar{K}_1, \dots, \bar{K}_m$$

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

## RB 1D

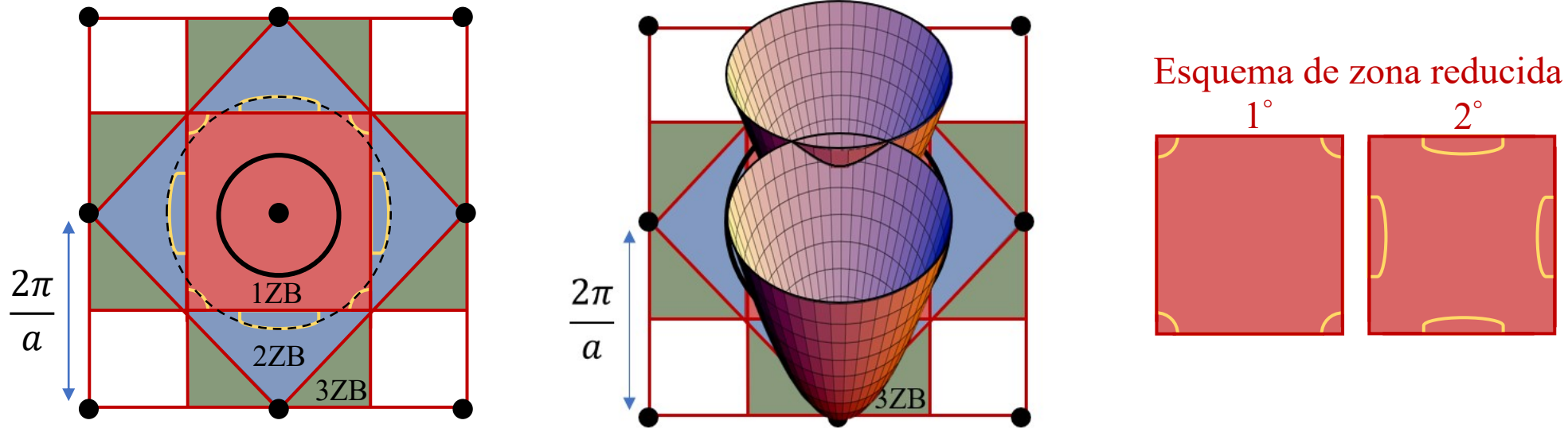


$$\varepsilon_{k-K_i}^0 = \varepsilon_{k-K_j}^0 \rightarrow \varepsilon = \varepsilon_{k-K_i}^0 \pm \left| U_{K_j-K_i} \right|$$



# Electrones en un potencial periódico débil

## Potencial periódico débil en 2D: Red cuadrada



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

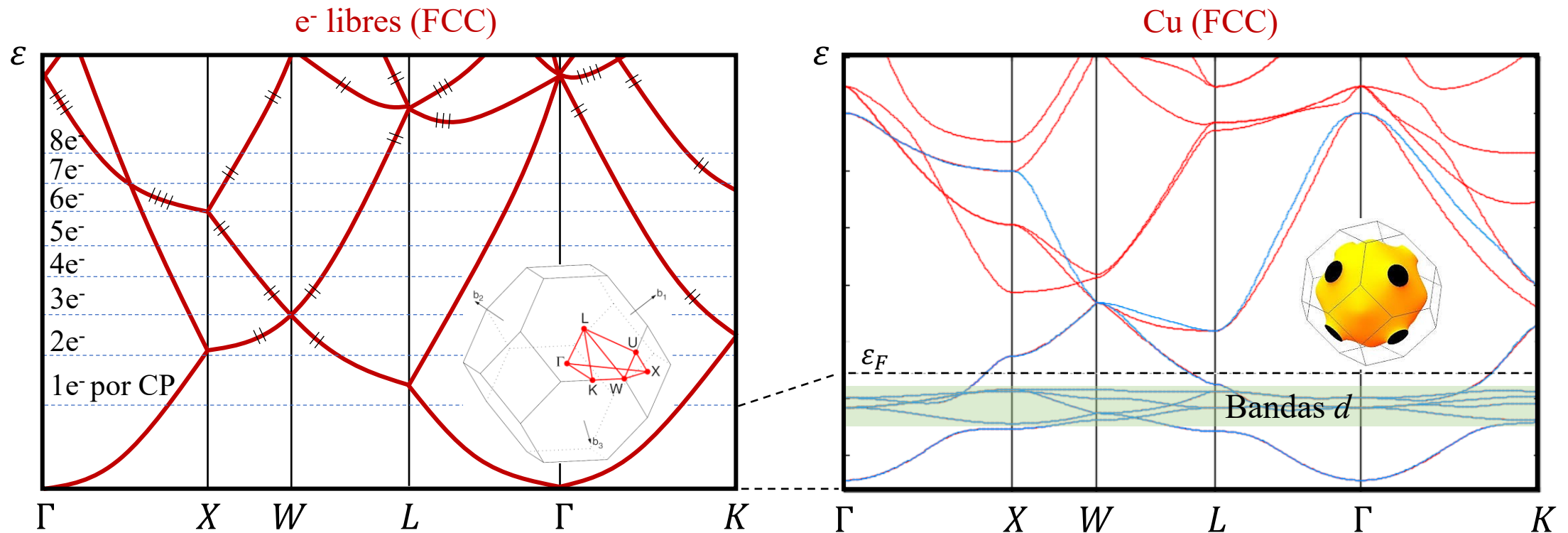
		Metales de transición										Metales nobles							
		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
		IIIB	IVB	VB	VIB	VIB	VIB	VIB	VIB	IB	IIB	IIIA	IIIA	IIIA	IIIA	IIIA	IIIA		
2		Li	Be									B	C	N	O	F	Ne		
3		Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar		
4		K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5		Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6		Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

# 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



# Resumen

- 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

