Estructura de la Materia 2

Segundo cuatrimestre de 2024

Guía 3: Electrones en un potencial periódico. Potencial débil

1. **Electrones en un potencial periódico débil. Caso 1D.**

   Considere una cadena unidimensional de tomos 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 fuera 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 hubiera dos electrones por celda unidad, ubique el nivel de Fermi tanto para el caso de electrones libres como para el de potencial apreciable.

2. **Electrones en un potencial periódico débil. Caso 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 $\Gamma \longrightarrow X \longrightarrow W \longrightarrow \Gamma$, donde Γ=(0,0), X=(k',0) y W=(k',k') con k'=π/a. Grafique en este esquema los niveles de Fermi hallados en ii).

   e) Introduzca ahora un potencial periódico débil y analice cualitativamente las modificaciones en la estructura de bandas y las superficies de Fermi.

3. **Electrones libres bajo el esquema de zona reducida**

   La figura 9.5 que aparece en el libro *Solid State Physics* de N. Ashcroft y N. Mermin, representa las bandas de energía en un esquema de zona reducida para una red FCC. Realice el esquema equivalente para una red cúbica simple en un recorrido:
   $\Gamma \longrightarrow X \longrightarrow K \longrightarrow \Gamma \longrightarrow W \longrightarrow K$, donde Γ=(0,0,0), X=(k',0,0), K=(k',k',0), W=(k',k',k') con k'=π/a.

   Ubique el nivel de Fermi para la misma cantidad de electrones indicados en la gráfica.

4. **Electrones en un potencial periódico: Modelo de Kronig-Penney.**

   Considere un potencial de período a formado por barreras cuadradas de alto Vo y ancho $b < a$, es decir:

   $$V(x) = \begin{cases} 0 & si \quad 0 < x < a-b; \\ V_o & si \quad a-b < x < a. \end{cases}$$

   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: $\psi(x+a) = \psi(x)e^{ika}$. Encuentre una ecuación que vincule a la energía con el índice k. Analice las condiciones para la existencia de soluciones y la aparición de bandas de energía.

5. **Electrones libre débilmente ligados en un potencial de deltas de Dirac.**

   Considere átomos ubicados en una red unidimensional de parámetro a. Cada átomo esta representado por el potencial $V(x) = aV_o\delta(x)$. Determine los gaps de energía entre bandas, suponiendo que es aplicable la aproximación de electrones débilmente ligados.

6. **Bandas de energía - Método de ondas planas.**

   Cerca del borde de la primera zona de Brillouin ($k = \frac{\pi}{a}$) de una cadena unidimensional monoatómica de parámetro de red a, la teoría de electrones debilmente ligados predice que el único término importante del potencial es $V_1 \cos\frac{2\pi x}{a}$ y que la función de onda es aproximadamente,

   $$\psi = \alpha e^{ikx} + \beta e^{i(k-2\pi/a)x}$$

   Sustituya esta función de onda en la ecuación de Schrödinger

   $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = \varepsilon\psi$$

   Multiplique la ecuación resultante (a) por e^{-ikx} e integre en todo el espacio, y (b) por $e^{-i(k-\pi/a)x}$ e integre en todo el espacio. Muestre que la energía ε asociada con dicha función de onda puede escribirse

   $$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2\pi}{ma}\left\{\left(\frac{\pi}{a} - k\right) \pm \left[\left(\frac{\pi}{a} - k\right)^2 + \left(\frac{amV_1}{2\pi\hbar}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}\right\}$$

   Muestre que esta forma da la respuesta correcta en $k = \frac{\pi}{a}$ y que se reduce al resultado de electrones libres para valores de k lejos del borde de zona. Grafique.

7. Considere un cristal unidimensional, con constante de red a. Los electrones de este 'sólido' están sometidos a un potencial periódico V(x) = -V_0 (3+2 cos(2 π x /a)). Se desea calcular las bandas de energía E(**k**) utilizando el método de descomposición de ondas planas, en este método la función de Bloch de índice **k** se puede escribir como:

   $$\psi_k = e^{ikx}\sum_G C_G e^{-iGx} \qquad (\mathbf{G}: \text{ vector de la red recíproca})$$

   a) Escriba los vectores de la red recíproca.

   b) Descomponga el potencial V(x) en sus componentes de Fourier.

   c) Considere en la función de Bloch de índice **k** sólo los cinco términos de menor módulo de G (incluyendo G=0). Escriba el determinante de 5x5 que permitiría encontrar E(**k**)

8. 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 $16\hbar\pi^2/2\mathrm{ma}^2$, correspondinte al recorrido $\Gamma \longrightarrow X \longrightarrow W \longrightarrow \Gamma \longrightarrow Y \longrightarrow W$, donde Γ=(0,0), X=(π/a,0), Y=(0,π/b) y W=(π/a,π/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. 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.

   c) Introduzca un potencial periódico débil de la forma

$$V(x,y) = -4\,V_o\ \cos(2\pi x/a)\ \cos(2\pi y/b)$$

   Analice cualitativamente las modificaciones en la estructura de bandas. Calcule aproximadamente el gap en el punto W.

9. Se tiene nuevamente el sistema bidimensional del problema 2. En este caso el potencial que ven los electrones debido a los iones se puede representar por

$$V(x,y) = -V_o\ (\cos(2\pi x/a) + \cos(2\pi y/a)\ )$$

   Si cada átomo aporta 2 electrones.

   a) ¿Cuál es el mínimo valor de Vo que hace que el sistema sea aislante?

   b) ¿Cuál es el ancho de banda en este caso?

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

    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?