**Tarea 5**

**1.**
Considerar un electrón confinado en un pozo cuántico infinitamente profundo. El sistema es unidimensional y el pozo se extiende entre $x = -L/2$ y $x = L/2$.

a) Calcular energías y funciones de onda para el caso de las condiciones de contorno "naturales"
$\psi\left(-L/2\right) = \psi\left(-L/2\right) = 0$

b) Calcular energías y funciones de onda para el caso de las condiciones periódicas de contorno
$\psi\left(-L/2\right) = \psi\left(-L/2\right)$

c) Comparar las soluciones obtenidas en los dos casos. En particular, estudiar el límite $L \to\infty$, y discutir cuidadosamente las energías y funciones de onda correspondientes a cada caso. Discutir también lo que ocurre con la energía total cuando ponemos $N$ electrones en el sistema (obedeciendo el principio de exclusión).

**2.**
Demostrar que la función

$$\phi_{aj,\boldsymbol{k}}\left(\boldsymbol{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\left(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{d}_j\right)}\phi_{aj,\boldsymbol{R}}\left(\boldsymbol{r}\right)$$

definida en clase, satisface el teorema de Bloch.

**3.**
Considerar el problema de autovalores generalizado

$$\sum_{aj}\left[H_{a'j',aj}\left(\boldsymbol{k}\right) - E_{n\boldsymbol{k}}S_{a'j',aj}\left(\boldsymbol{k}\right)\right]c_{n\boldsymbol{k},aj} = 0$$

que aparece como ecuación fundamental en el método de tight-binding. Rescribiendo la ecuación en forma matricial,

$$\left[\mathbf{H}\left(\boldsymbol{k}\right) - E_{nk}\mathbf{S}\left(\boldsymbol{k}\right)\right]\mathbf{c}_{nk}$$

a) Si definimos ahora las matrices $\mathbf{S}^{1/2}$ y $\mathbf{S}^{-1/2}$ tales que $\mathbf{S}^{1/2}\mathbf{S}^{1/2} = \mathbf{S}$ y $\mathbf{S}^{-1/2} = \left(\mathbf{S}^{1/2}\right)^{-1}$, demostrar que la ecuación puede rescribirse como un problema de autvalores standard

$$\left[\hat{\mathbf{H}}\left(\boldsymbol{k}\right) - E_{nk}\mathbf{1}\left(\boldsymbol{k}\right)\right]\mathbf{z}_{nk}$$

donde **1** es la matriz identidad y $\mathbf{z}_{n\boldsymbol{k}} = \mathbf{S}^{1/2}\left(\boldsymbol{k}\right)\mathbf{c}_{nk}\mathbf{S}^{-1/2}\left(\boldsymbol{k}\right)$ Esta es la transformación de Löwdin.

b) Escribir la expresión que relaciona la matriz $\hat{\mathbf{H}}$ con la matriz $\mathbf{H}$.

**4.**
El modelo de Kronig-Penney consiste en una cadena lineal de pozos cuánticos, que tiene dos aspectos atractivos: 1) se puede resolver exactamente, y 2) tiene relevancia para la solución del problema de superredes artificiales que se forman al depositar periódicamente películas delgadas de distintos materiales. Por ahora utilizaremos el primer aspecto para comparar las soluciones exactas con las soluciones aproximadas obtenidas a partir del método de ondas planas y el método de tight-binding.
Considerar un electrón con una energía potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} U/2 & \text{for } 0 \le x \le b \\ -U/2 & \text{for } -c < x < 0 \end{cases}$$

que se repite infinitamente a lo largo del eje $x$ con período $a = b+c$.

a) Resolver la ecuación de Schrödinger's para los estados ligados (autovalores y autofunciones). Para ello, utilizar las soluciones estándar dentro del pozo (combinación lineal de senos y cosenos) y fuera del pozo (combinación lineal de las funciones hiperbólicas sinh and cosh). Utilizar condiciones de contorno apropiadas, que consisten en la continuidad de la función de onda y su derivada en las interfaces y la condición de Bloch, aplicada tanto a la función como a su derivada. Nótese que las expresiones resultantes darán una ecuación trascendental para las energías $E$, que debe resolverse numéricamente. Para ello es conveniente definir parámetros sin dimensión, tales como

$$\gamma^2 = \frac{mU}{\hbar^2} c^2$$

$$r = \frac{b}{c}$$

$$E = f \frac{U}{2}$$

y expresar las energías en términos de $f$.

b) Graficar la relación de dispersión (energía versus vector de onda, aunque es más cómodo graficar $f$ vs $ka$) y la función de onda para unas pocas selecciones de $\gamma$ y $r$ y explicar los resultados.

**5.**

Resolver el modelo de Kronig-Penney utilizando el método de ondas planas

$$\left( \frac{\hbar^2 \left( \boldsymbol{k} - \boldsymbol{K} \right)^2}{2m} - E \right) c_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{K}} + \sum_{\boldsymbol{K}'} c_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{K}'} U_{\boldsymbol{K}'-\boldsymbol{K}} = 0$$

con

$$U_{\boldsymbol{K}} = \frac{1}{v_c} \int_{\text{unit cell}} d\boldsymbol{r}\, V\left(\boldsymbol{r}\right) e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}$$

Esto da una matriz de tamaño infinito porque hay infinitos valores de $\boldsymbol{K}$. La idea es entonces "truncar" la matriz empezando por ignorar todos los $\boldsymbol{K} \neq 0$ (lo cual da un problema trival de tamaño 1×1), y luego agregar sucesivamente vectores $\boldsymbol{K}$ al problema. En este caso particular, los vectores de la red recíproca están dados por $K_m = 2\pi m / a$ de modo que si incluimos $m$ =1 también deberíamos incluir $m$ = -1 por simetría, o sea que obtendremos matrices de tamaño 3×3, 5×5, 7×7, etc, a medida que agregamos más y más vectores de la red recíproca. Estudiar el tamaño necesario para obtener soluciones cercanas a la solución exacta. Esto depende de qué estados consideremos, porque algunos estarán cercanos a la solución exacta y otros no. Normalmente estamos interesados en las bandas de menor energía porque son las que resultan ocupadas por electrones. Por lo tanto, para la comparación entre la solución exacta y la aproximada podemos enfocarnos en las bandas de menor energía, por ejemplo las dos de energías más bajas.

**6.**

Resolver el modelo de Kronig-Penney utilizando el método de tight binding

$$\sum_{ja} \left[ H_{a'j',aj}\left(\boldsymbol{k}\right) - E_{n\boldsymbol{k}} S_{a'j',aj}\left(\boldsymbol{k}\right) \right] c_{n\boldsymbol{k},ja} = 0$$

Nótese que el problema se simplifica considerablemente porque el modelo de Kronig-Penney es una red de Bravais, de modo que el índice $j$ no es necesario. En cuanto al índice $a$, corresponde a funciones atómicas. En el modelo de Kronig-Penney, un "átomo" es un pozo cuántico aislado, de modo que habrá que obtener las soluciones correspondientes antes de calcular los elementos de matriz de la ecuación de tight-binding.

**NOTA IMPORTANTE:**

Aunque esta tarea no contiene un "challenge problem" per se, aquellos estudiantes que entreguen estudios exhaustivos de todos los problemas numéricos, con buenos comentarios y excelente presentación, recibirán crédito como si hubieran resuelto un tal "challenge problem".