Física del Estado Sólido

Guía 3 - 5 de abril de 2023

Problema 1.

Considere un potencial unidimensional periódico $U(x)$ que puede ser visualizado como una superposición de barreras de potencial $v(x)$ de ancho $a-\delta$ ($\delta>0$) y centradas en los puntos $x_n=\pm na$, con $n=0,\pm1,\pm2,\dots$ La única suposición con respecto a las barreras es que $v(x-x_n)=v(-x+x_n)$, de modo que la forma de $U(x)$ es completamente general. Los iones del cristal se encuentran ubicados en aquellas posiciones en las que $U(x)$ es mínimo y en estos puntos tomamos $U(x)=0$.

La estructura de bandas de energía para un electrón en este sólido unidimensional puede ser descripta en términos de las propiedades del electrón en presencia de una única barrera de potencial $v(x)$. Suponga entonces que un electrón incide desde la izquierda sobre la barrera con energía $E=\hbar^2q^2/2m$, de modo que su función de onda tendrá la forma:

$$\psi_i(x) \simeq \begin{cases} e^{iqx}+re^{-iqx} & x\le -a/2 \\ te^{iqx} & x\ge a/2 \end{cases}$$

donde r y t son las amplitudes de reflexión y transmisión respectivamente. La dependencia de r y t con el vector de onda q de la onda plana incidente estará determinada por la forma de $v(x)$.

Debido a la paridad de $v(x)$ resulta $\psi_d(x)=\psi_i(-x)$, en donde $\psi_d(x)$ describe a un electrón que incide desde la derecha. Como $\psi_d(x)$ y $\psi_i(x)$ son dos soluciones independientes de la ecuación de Schrödinger para una barrera, con la misma energía, cualquier otra solución $\psi(x)$ con esa energía debe ser una combinación lineal de ψ_d y ψ_i.

a) Aplicando el teorema de Bloch a $\psi(x)$ en $x=-a/2$, muestre que la energía de un electrón de Bloch está relacionada con el vector de onda de Bloch k de la siguiente forma:

$$\cos(ka)=\frac{t^2-r^2}{2t}e^{iqa}+\frac{1}{2t}e^{-iqa}\,.$$

Verifique que se obtiene el resultado correcto para el caso del electrón libre ($v=0$).

Si ϕ_1 y ϕ_2 son dos soluciones de la ecuación de Schrödinger para una barrera con la misma energía, se define el Wronskiano $w(\phi_1,\phi_2)$ como:

$$w(\phi_1,\phi_2)=\phi_1'(x)\,\phi_2(x)-\phi_1(x)\,\phi_2'(x)$$

b) Muestre que w es independiente de x.

c) Muestre que $|t|^2+|r|^2=1$ evaluando $w(\psi_i,\psi_i^*)$ para $x\le -a/2$ y $x\ge a/2$, teniendo en cuenta que como $v(x)$ es real, ψ_i^* es solución de la misma ecuación de Schrödinger que ψ_i.

d) Evaluando $w(\psi_i,\psi_d^*)$ muestre que rt^* es un número imaginario y que si t es de la forma $t=|t|e^{i\delta}$, entonces $r=\pm i|r|e^{i\delta}$.

e) Usando los resultados de los incisos (c) y (d), muestre que la energía y el vector de onda de un electrón de Bloch están relacionados por:

$$\cos(ka)=\frac{\cos(qa+\delta)}{|t|}$$

Graficando $\cos(qa+\delta)/|t|$ en función de q y teniendo en cuenta que $|t(q)|<1$, muestre que resultan regiones de q permitidas y prohibidas (brechas o *gaps*).

f) Suponga que la barrera es muy débil, de modo que $|t|\approx 1, |r|\approx 0$ y $\delta\approx 0$. Muestre que las brechas de energía son muy angostas y que el ancho de la brecha que contiene al vector de onda $q=n\pi/a$ es

$$E_{\text{gap}}\approx 2\pi n\frac{\hbar^2}{ma^2}|r|$$

g) Suponga ahora que la barrera es muy alta, de modo que $|t|\approx 0, |r|\approx 1$. Muestre que las bandas de energía son muy angostas y que su ancho es

$$\Delta E=E_{\max}-E_{\min}=\mathcal{O}(|t|).$$

Problema 2. *Born - von Karman*
Muestre que la cantidad de vectores de onda permitidos por el Teorema de Bloch en la primera zona de Brillouin para un cristal de tamaño finito con condiciones periódicas de contorno (Born - von Karman) es igual al número *total* de sitios de la red de Bravais que describe al cristal.

Problema 3. *Zonas de Brillouin*

a) Dibuje las cinco primeras zonas de Brillouin para una red bidimensional cuadrada de lado a.

b) Sobre el dibujo anterior grafique la superficie de Fermi considerando que la red de Bravais es monoatómica y que los átomos poseen 1, 2, 3 o 4 electrones de valencia. Analice las zonas que quedan total y parcialmente llenas en cada caso.

c) Dibuje la superficie de Fermi en cada caso en un esquema de zona reducida.

Problema 4. *Electrones en un potencial periódico débil*
Considere electrones no interactuantes de masa m confinados en una dimensión en presencia de un potencial periódico débil descripto por:

$$V(x) = -V_1 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right),$$

con $V_1 > 0$.

a) Escriba el hamiltoniano en representación matricial suponiendo una expansión en ondas planas como la utilizada en la segunda prueba del teorema de Bloch.

b) Dibuje las tres primeras bandas de energía a orden cero en la primera zona de Brillouin, es decir grafique las relaciones de dispersión $\varepsilon^0_{k-K_n} = \frac{\hbar^2\,(k-K_n)^2}{2m}$, en donde los K_n son los vectores de la red recíproca.

c) Calcule a primer orden el gap en $k=\pi/a$. Evalúe la relación de dispersión cerca de esta brecha. Analice qué ocurre con la densidad de estados cerca de la misma.

d) Si piensa a la función de onda como una superposición de ondas planas, calcule los coeficientes de dicha expansión para $k \approx \pi/a$ para la primera y segunda banda. Caracterice la simetría de las funciones de onda considerando que los átomos se encuentran en las posiciones $x=na$.

Problema 5. *Electrones en un potencial periódico débil*
Considere electrones no interactuantes de masa m confinados en una dimensión en presencia de un potencial periódico débil descripto por la serie de Fourier:

$$V(x) = -\sum_{n=1}^{\infty} V_n \cos\left(\frac{2\pi n x}{a}\right),$$

con $V_n > 0$.

a) Escriba el hamiltoniano en representación matricial suponiendo una expansión en ondas planas como la utilizada en la segunda prueba del teorema de Bloch.

b) Esquematice las tres primeras bandas de energía a orden cero en la primera zona de Brillouin.

c) Analizando el esquema anterior explique dónde se abrirán las brechas de energía. Estime el ancho de estos *gaps* a primer orden.

Problema 6. *Potencial periódico débil en 2 dimensiones*
Considere un sistema de electrones 'casi libres' en una red cuadrada, bidimensional, con parámetro de red a. El potencial de la red es de la forma

$$U(x,y) = -4U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$$

a) Encuentre los coeficientes $U_{\boldsymbol{K}}$ del desarrollo en serie de Fourier del potencial $U(\boldsymbol{r})$.

b) Para $\boldsymbol{k}_1=(\pi/a,\pi/a)$, el coeficiente $c_{\boldsymbol{k}_1}$ de la expansión de $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ en ondas planas se acoplará fuertemente a otras tres componentes $c_{\boldsymbol{k}_i}$ que se relacionan con $\boldsymbol{k}_1$ mediante vectores de la red recíproca $\boldsymbol{K}$. ¿Cuáles son los otros tres puntos $\boldsymbol{k}_i$?

c) Escriba el sistema de ecuaciones lineales que resultan de aplicar teoría de perturbaciones de primer orden en U_0. Muestre que este se reduce a un sistema de ecuaciones 2×2. Encuentre los dos valores de energía permitidos para el vector de onda de Bloch $\boldsymbol{k}_1=(\pi/a,\pi/a)$.

d) Dibuje esquemáticamente las bandas de energía a lo largo de la línea que une los puntos Γ y W donde esos puntos son $\Gamma=(0,0)$ y $W=(\pi/a,\pi/a)$.