

Física Estado Sólido I Examen parcial tema 5 ELECTRONES EN CRISTALES

Las puntuaciones se refieren a ejercicios completamente resueltos, incluyendo valores numéricos finales y unidades (si corresponde), con soluciones razonadas.

1. (50 puntos) Se considera un cristal bidimensional con red cuadrada de parámetro $a = 3\text{\AA}$.

- (5) Obtener los vectores de la red recíproca y dibujar la primera zona de Brillouin.
- (15) La energía cinética, en la aproximación de electrón libre, en el corner de la 1ª Z.B. es mayor que el centro de la cara en un factor C. Calcular el valor de C. Representar en el esquema de zona reducida las bandas $(1, 0)$, $(\bar{1}, 0)$, $(0, 1)$ y $(0, \bar{1})$ en la aproximación de electrones libres, verificando que las cuatro bandas son degeneradas en el punto $\Gamma(0, 0)$.
- (15) El potencial en el cristal se describe por:

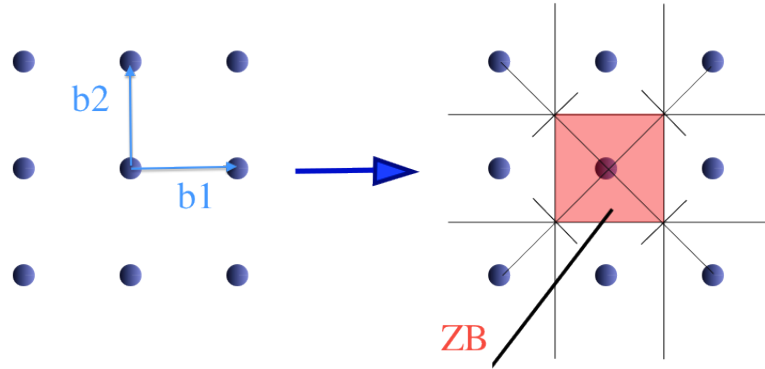
$$V(x, y) = -2V_o \left(\cos \frac{2\pi x}{a} + \cos \frac{2\pi y}{a} \right)$$

Obtener el valor aproximado del gap de energía en el punto $X = \frac{\pi}{a}(1, 0)$

- (15) Escribir la matriz 4×4 que será preciso diagonalizar para conocer las energías y funciones propias **en un entorno** del punto Γ en la aproximación de campo débil.

Solución:

- Los vectores de la base directa son $a_1 = a(1, 0)$ y $a_2 = a(0, 1)$ referidos a un sistema (\vec{i}, \vec{j}) . Los vectores recíprocos son $b_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0)$ y $b_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1)$.
La energía $E = \frac{\hbar^2}{2m}(\pm G)^2$ es degenerada para $G = \pm \frac{2\pi}{a}(1, 0)$ y $G = \pm \frac{2\pi}{a}(0, 1)$. También para $k \mp G$ con $k = \frac{\pi}{a}$. $E = \frac{\hbar^2}{2m}(-\frac{\pi}{a})^2 = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a} - \frac{2\pi}{a})^2$



- En el modelo de electrón libre la energía cinética $E \sim k^2$. Para el corner de coordenadas $M = (\pi/a)(1, 1)$, $k_M = (\frac{\pi}{a})\sqrt{2}$ y para el medio de la cara en el punto $X(\pi/a)(1, 0)$, $k_X = (\frac{\pi}{a})$ de donde obtenemos $E_M = 2E_X$ con lo que tenemos $C = 2$.
- El potencial en el cristal podemos expresarlo como combinación lineal de ondas planas:

$$V(x, y) = -V_o \left[e^{2\pi i x/a} + e^{-2\pi i x/a} + e^{2\pi i y/a} + e^{-2\pi i y/a} \right]$$

donde intervienen ondas planas con los vectores de la red recíproca $K_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0)$, $K_2 = -\frac{2\pi}{a}(1, 0)$, $K_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 1)$ y $K_4 = -\frac{2\pi}{a}(0, 1)$ y con el mismo coeficiente $-V_o$. En el punto $X = \frac{\pi}{a}$, la energía es degenerada para k_X , $k_X - K_1$ y, en la ecuación de Schrodinger en k se mezclan dichos vectores, así como los coeficientes de la función de onda c_k y c_{k-K_1} a través de correspondiente coeficiente del potencial. Esto nos lleva a 2 ecuaciones:

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{k-K_i}^o) c_{k-K_i} = \sum_{K_j} U_{K_j-K_i} c_{k-K_i} \quad (1)$$

con $K_i = 0, K_1$:

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_k^o) c_k = U_{-K_1} c_{k-K_1} \quad (2)$$

$$U_{-K_1} c_k = (\mathcal{E} - \mathcal{E}_{k-K_1}^o) c_{k-K_1} \quad (3)$$

Cuya solución viene dada por:

$$\begin{bmatrix} E - E_k^o & -U_{-K_1} \\ -U_{-K_1} & E - E_{k-K_1}^o \end{bmatrix} = 0$$

Para $k = \pi/a$, $E_k^o = E_{k-K_1}^o$ y $U_{-K_1} = -V_o$ de donde

$$(E_{k=\pi/a}^o - E)^2 - V_o^2 = 0$$

Cuya solución lleva a que el gap que se abre en X es $|2V_o|$.

- E, el entorno del punto Γ se mezclan las funciones de onda con $k - K_1$, $k + K_1$, $k - K_3$, $k + K_3$, con $K_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0)$ y $K_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 1)$. Construimos las ecuaciones correspondientes a estos coeficientes:

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{k-K_i}^o) c_{k-K_i} = \sum_{K_j} U_{K_j-K_i} c_{k-K_i} \quad (4)$$

cuya solución viene dada por la condición:

$$\begin{bmatrix} E - E_{k-K_1}^o & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E - E_{k+K_1}^o & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E - E_{k-K_3}^o & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E - E_{k+K_3}^o \end{bmatrix} = 0$$

que para $k = 0$ muestra una única solución trivial con degeneración. para ese punto, en la aproximación de primer orden, el potencial dado no rompe la degeneración.

2. (50 puntos) Considerar un cristal unidimensional con átomos separados regularmente una distancia a . Las funciones de onda que describen el electrón $1s$ del átomo vienen dadas por $\Psi(r - R_n)$ donde $R_n = na$ es la posición del átomo en la celda n . En un modelo de "tight-binding" tenemos las siguientes integrales de solapamiento:

$$\int \Psi^*(r - R_n) H \Psi(r - R_n) dr = E_o \quad (5)$$

$$\int \Psi^*(r - R_n) H \Psi(r - R_{n\pm 1}) dr = -V \quad (6)$$

$$\int \Psi^*(r - R_n) H \Psi(r - R_m) dr = 0, n \neq m, m \pm 1 \quad (7)$$

donde h es el Hamiltoniano. Calcular:

- (25) La relación de dispersión $\mathcal{E}(k)$
- (25) La densidad de estados electrónicos

Solución:

- Las funciones de onda del electrón en el cristal son funciones de Bloch:

$$\Phi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum e^{ikR_n} \Psi(r - R_n)$$

donde N es el número de celdas (átomos). La ecuación de Schrodinger $H\Phi = E(k)\Phi$ proyectada sobre $\langle \Phi_k |$ nos lleva a:

$$\begin{aligned} E(k) &= \langle \Phi_k | H \Phi_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n,m} e^{ik(R_n - R_m)} \langle \Phi_k(r - R_n) | H | \Psi(r - R_m) \rangle = \\ &= \langle \Phi_k(r - R_n) | H | \Psi(r - R_n) \rangle + e^{ika} \langle \Phi_k(r - R_n) | H | \Psi(r - R_{n-1}) \rangle + \\ &\quad + e^{-ika} \langle \Phi_k(r - R_n) | H | \Psi(r - R_{n+1}) \rangle = \\ &= E_o - 2V \cos(ka) \end{aligned}$$

- Los valores de k vienen dados por $k = \pi m / Na$ donde $m = \text{entero}$. El número de estados hasta un valor de k es $N(k) = k / (\pi / Na) = (Na / \pi) k$ de donde $N(k) dk = (Na / \pi) dk$ y, la densidad de estados $\rho(k) dk = (N(k) / Na) dk = dk / \pi$. Para electrones con dos valores de spin por estado tenemos $\rho(k) = 2 / \pi$. Para calcular $\rho(E)$ tenemos en cuenta que $\rho(k) dk = \rho(E) dE$ con

$$\begin{aligned} dE &= 2aV \sin(ka) dk = 2aV \sqrt{1 - \left(\frac{E_o - E}{2V}\right)^2} dE \\ \rho(E) &= \frac{2}{2\pi V a \sin(ka)} = \frac{1}{\pi V a} \left(1 - \left(\frac{E_o - E}{2V}\right)^2\right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$