Departamento de Física
Universidad de Santiago

Estructura electrónica de moléculas y sólidos
Profesor: Gonzalo Gutiérrez

Guía y Tarea # 5

Miércoles 9 de Julio del 2003
Los problemas con * están de tarea. Entregar Miércoles 16 de Julio del 2003

1.– Teorema de Bloch

Sea $H = p^2/2m + V(\vec{r})$ el hamiltoniano de un electrón en la red periódica, esto es $V(\vec{r}+\vec{R}) = V(\vec{r})$ para todo $\vec{R}$ perteneciente a la red de Bravais. Demuestre entonces que la función de onda es de la forma

$$\phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r}) \ ,$$

con $u(\vec{r}) = u(\vec{r}+\vec{R})$.

Para ello, considere el operador de traslación "propio" de la red, definido por

$$T_R f(\vec{r}) = f(\vec{r}+\vec{R}) \ ,$$

con $\vec{R}$ en la red y proceda del siguiente modo:

- Demuestre que $[H, T_R] = 0$ y $[T_R, T_{R'}] = 0$, i.e que H y todos los T pueden diagonalizarse simultáneamente.
- Si $t(\vec{R})$ es el valor propio de T_R asociado a Φ, i.e.

  $$T_R\Phi = t(\vec{R})\Phi \ ,$$

  demuestre que

  $$t(\vec{R}+\vec{R}') = t(\vec{R})t(\vec{R}') \ .$$

- Sea $t(\vec{a}_i) = t_i$, con $\vec{a}_1, \ \vec{a}_2, \ \vec{a}_3$ vectores generadores de la red. Muestre que si $\vec{R} = \sum_i n_i\vec{a}_i$, entonces

  $$t(\vec{R}) = t_1^{n_1} \ t_2^{n_2} \ t_3^{n_3} \ .$$

- Luego, como siempre se puede escribir $t_i = \exp(2\pi i x_i)$, deduzca que

  $$t(\vec{R}) = \exp(i\vec{R}\cdot[x_1\vec{b}_1 + x_2\vec{b}_2 + x_3\vec{b}_3]) \ .$$

- Defina $\vec{k} = \sum_i x_i\vec{b}_i$ y demuestre que

  $$T_R\Phi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{R})\Phi(\vec{r}) \ .$$

- Armado con lo anterior, muestre que
  1. si a) $\Phi(\vec{r}+\vec{R}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{R})\Phi(\vec{R})$; y
     b) $\Phi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})u(\vec{r})$,
     donde $\quad u(\vec{r}+\vec{R}) = u(\vec{r})$,
     a) y b) son formas equivalentes del Teorema de Bloch.
  2. $\vec{k}$ es desconocido por ahora y parte del problema consiste en determinarlo. Los valores posibles de $\vec{k}$ quedan determinados por las condiciones de borde periódicas vistas en clase.

     Note que los $\vec{k}$ *son reales*, por lo que la función de Bloch $\psi = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u$ corresponde a una onda plana ($e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$) modulada por una amplitud con la periodicidad de la red.

*** 2.– Velocidad de Grupo**. Considere una cadena infinita con condiciones de borde periódicas. Como vimos en clases, en la aproximación de enlace fuerte (*tight binding*) la estructura de bandas $E(k)$ está dada por

$$E(k) = \alpha + 2h\cos(ka)$$

donde $\mathbf{k}$ es un vector que pertenece a la primera zona de Brillouin $(-\pi/2, \pi/2)$, a es el espaciado de la red, α es la energía en el sitio y h el término de *hopping*. La velocidad de grupo de un electrón en el autoestado $\Phi_\mathbf{k}$ está definida por

$$v_k = \langle \Phi_\mathbf{k} | (p/m) | \Phi_\mathbf{k} \rangle \ ,$$

donde

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

es el operador de momentum y m la masa en reposo del electrón. Usando el Teorema de Bloch y la ecuación de Schrödinger para $\Phi_\mathbf{k}$ deduzca que

$$v_k(x) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE(k)}{dk}.$$

Muestre que la velocidad de grupo es nula en los bordes de zona. Calcule la velocidad de grupo máxima para $a = 1$ Å y $|h| = 1$ eV.

*** 3 .– Energía de enlace en una cadena infinita.** Considere nuevamente la cadena planteada en el Problema 1. Calcule la energía de enlace

1. Usando el orden de enlace

$$\rho_{mn} = \frac{2}{\pi}\frac{\sin k_f(m-n)a}{m-n}$$

y,

2. Usando la densidad local de estados

$$d(E) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{(4h^2 - (E-\alpha)^2)^{1/2}}.$$

*** 4.– Modelo de Kronig–Penney con deltas**. El modelo de Kronig-Penney es uno de los pocos potenciales periódicos que admiten una solución sencilla.

Considere aqui el problema unidimensional con un potencial consistente en un arreglo periódico de deltas de Dirac:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a \cdot V_o \delta(x - na) \ ,$$

donde V_o es la intensidad del potencial (a se introduce para que V tenga dimensiones de energía).

Defina las magnitudes adimensionales

$$\alpha^2 = \frac{2mEa^2}{h^2} \quad ; \quad b^2 = \frac{2mV_oa^2}{h^2} \quad ; \quad q = \frac{mV_oa^2}{h^2} \ .$$

1. Escriba (en general) la condición de contorno para la función de onda y su derivada en $x = 0$.
2. Luego, use el teorema de Bloch para escribirlas explícitamente.
3. Exprese la condición para que (ii) tenga solución no trivial (determinante secular).
4. Calcule el determinante y redúzcalo a una ecuación trascendental que defina implícitamente la energía E como función del vector de onda k.
5. Deduzca que en el límite de partícula libre se reobtiene la energía conocida pero en forma de estructura de bandas.

6. Considere el caso de una partícula de baja energía. Muestre que en este límite
$$E(k) = E_o + \frac{h^2 k^2}{2m^*} \quad .$$
Calcule m^* y verifique que puede ser mayor, menor o igual a m.

Esto significa que una partícula cerca del "fondo"de la banda se comporta como una partícula libre pero con una masa efectiva m^*.

7. Deduzca que en el caso 1-dim la densidad de estados es
$$g(E) = \frac{1}{\pi}\frac{dk}{dE}$$
y calcule explícitamente $\frac{dk}{dE}$ para obtener $g(E)$. Muestre que (en este caso) $g(E)$ diverge si $ka = n\pi$.

8. Demuestre que en general existen *gaps* (brechas, zanjas) de energía prohibidas, es decir, existen valores de energía E para los cuales no existen estados de Bloch.

9. Muestre que para los valores de E prohibidos la ecuación trascendental no tiene solución para k real.