

## Introducción a la Física del Sólido Física de los Materiales

Tarea N° 3  
Publicada el 12 de septiembre de 2008

Profesor: Alvaro Nuñez  
Auxiliar: Daniel Asenjo

### Resuelva 4 de los siguientes problemas.

1. Considere la expansión de Sommerfeld (1928) para las propiedades termodinámicas de un sistema.

$$C_V = aT + bT^3 + \dots$$

$$\mu = c + dT^2 + \dots$$

Calcule analítica y numéricamente las constantes  $a, b, c, d$ .

2. Considere un potencial periódico en 1D que viene dado por la peineta de Dirac

$$V(x) = \sum_n V_0 \delta(x - nx_0)$$

es decir deltas de Dirac separadas por una distancia  $x_0$ . Calcule la masa efectiva para longitudes de onda largas..

3. Se aplica un campo magnético  $H$  perpendicular a las capas de conducción de un material quasi-2D. La estructura cristalina de las capas es tetragonal con parámetro de red  $a = 3,5 \text{ [\AA]}$ . La banda de energía en las capas se puede describir mediante la aproximación *Tight-Binding*, no hay dispersión de energía en la tercera dirección.

La resistencia y otras propiedades del material oscilan cuando varía el campo. La oscilación es periódica en  $1/H$  y el periodo es  $6,1 \times 10^{-8} \text{ [G}^{-1}\text{]}$ . ¿Cuál es la densidad de electrones de conducción ( $\text{cm}^{-2}$ ) para este material? (Tenga cuidado: ¡La aproximación de masa efectiva no funciona en este caso!).

4. (Marder 6.5) Considere una delgada capa cuadrada de plata de  $10^6 \text{ [\AA]} \times 10^6 \text{ [\AA]}$  en el plano  $xy$ .
  - a) Suponga que el grosor de la capa es  $4,1 \text{ [\AA]}$  en la dirección  $z$  y que es un gas libre de electrones cuya función de onda desaparece en los bordes en la dirección  $z$ . Encuentre la diferencia de energía entre el nivel más bajo y más alto de los estados ocupados por una sola partícula.
  - b) Repita lo anterior considerando que el grosor es  $8,2 \text{ [\AA]}$  en la dirección  $z$ .

5. a) Calcule y grafique la densidad de estados para la aproximación *Tight-Binding* en 1D. El Hamiltoniano es

$$H_{\text{TB}} = \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} |\vec{R}\rangle t \langle \vec{R} + \vec{\delta}| + \sum_{\vec{R}} |\vec{R}\rangle U \langle \vec{R}|$$

donde  $t$  y  $U$  son constantes,  $\vec{R}$  es un sitio en la red y los  $\vec{\delta}$  son un conjunto de vectores que apuntan a los vecinos más cercanos.

- b) Diagonalice numéricamente y grafique el histograma de energía (densidad de estados).
- c) Agregue *hopping* aleatorio, es decir los  $t$  se ponen al azar.
- d) Comente los resultados obtenidos. ¿Qué sucede al introducir *hopping* aleatorio?
6. Considere una red periódica en 1D que está compuesta por dos tipos de átomos  $A$  y  $B$  que se van alternando. El parámetro de red es  $a$ . Calcule la estructura de bandas considerando dos casos:
- a)  $|\epsilon_A - \epsilon_B| \gg t$
- b)  $|\epsilon_A - \epsilon_B| \ll t$

donde  $t$  es el parámetro de *hopping* y  $\epsilon_A$  y  $\epsilon_B$  son las energías de  $A$  y  $B$  respectivamente.

ENTREGA EL 26 DE SEPTIEMBRE DEL 2008, ANTES DE LAS 10:15 A.M.