

Auxiliar 3

Prof: Rodrigo Arias F.

Aux: Gabriel Cáceres-Aravena

Problema 1: El modelo de electrón casi libre (nearly free electron model) es una manera de obtener la estructura electrónica de bandas de un sólido. Conceptualmente, este método involucra dos pasos. Comenzamos con la relación de dispersión de la energía del electrón libre $\epsilon^0(k)$. Note que en el nivel del electrón libre, nosotros no tenemos notación para la periodicidad atómica en mente. En el primer paso, imaginamos que un potencial periódico de fuerza infinitesimal es encendido. Después de imponer la periodicidad atómica, entonces aparecen las ideas de red, red recíproca, primera zona de Brillouin, etc. Sin embargo, dado que el potencial tiene una fuerza muy muy pequeña, entonces las energías de los electrones libres no es modificada, pero entonces podemos doblar las energías del electrón libre de la relación de dispersión **en la primera zona de Brillouin (ZB)**. Esto es conocido como la aproximación de red vacía (empty lattice approximation). De esta forma, la idea es que en el paso 1, sólo la periodicidad es considerada y no la fuerza del potencial. En el paso 2, consideramos los efectos de la fuerza del potencial y entonces aberturas (gaps) aparecen en la estructura de bandas. En este problema vamos a practicar el paso 1.

Considere una red 1D con periodicidad a (i.e. constante de red a)

1. En un diagrama limpio dibuje la relación de dispersión de energía del electrón libre. Luego considere el efecto de imponer un potencial periódico infinitesimalmente débil con periodo a . En otro diagrama limpio, doble la banda de electrón libre en la primera zona de Brillouin. Muestre que al menos 4 bandas (i.e. por cada valor de k en la primera zona de Brillouin debe haber al menos cuatro energías). Lo que obtienes es la aproximación de red vacía en un sistema 1D.

2. Con la periodicidad vamos a considerar los k dentro de la primera ZB. Tome $k = 0$ (zona central), escriba las energías (4 de ellas son las mostradas en su figura) de los 4 estados en términos de k y el vector de la red recíproca G . Note que $G = n\frac{2\pi}{a}\hat{x}$ en un sistema 1D, con n un entero.
3. Similar al problema anterior, tome $k = \pi/2a$. Escriba las energías de los 4 estados en términos de k y el vector de la red recíproca G .
4. Ahora considere los valores de k dentro de la primera ZB (el valor que usted quiera). Ve a si hay una forma general para las energías mayores que la menor energía para un valor de k , esto en función de k y G .
5. Cuál es la máxima energía de la menor banda? ¿Cuál es el mínimo de energía de la segunda banda menor? Luego, liste de menor a mayor la energía de cada una de las 4 bandas mostradas en su figura.

Nota: Es simple usar la aproximación de red vacía en 1D. En sistemas de mayores dimensiones, la aproximación de red vacía es un poco más complicada debido a la mayor dimensionalidad de la primera ZB y la posibilidad de tener degeneraciones de las energías en la primera ZB. Si usted quiere tener un mejor entendimiento de esto se le recomienda hacer el mismo procedimiento en una red 2D.

Problema 2: El calcio tiene una estructura fcc con un largo de red de 5.58\AA

1. Asuma que las bandas de interés son las bandas de electrón libre. Encuentre la energía máxima de la banda de electrón libre inferior, relativa a la energía al fondo de la banda. Cuál son los vectores de estados asociados a esta energía? [Idea: fcc en espacio directo implica un espacio recíproco particular en la primera ZB. Mire la ZB y encuentre los puntos correspondientes a la energía máxima en la aproximación de red vacía.]
2. Encuentre la energía mínima de la segunda banda de electrón libre, con respecto al fondo de la primera banda. Cuáles son los vectores de propagación de los estados asociados a estas energías? [Hint: Siguiendo la parte anterior, uno podría mirar a la segunda ZB, i.e., sólo fuera de la primera ZB. ¿Dónde en la segunda ZB está la energía en un mínimo

para la relación de dispersión de energía del electrón libre?] ¿Puedes ver que hay un rango de energías donde la primera y la segunda banda se superponen (overlap)?

3. Esquemáticamente (significa que no necesariamente debe ser preciso pero deben aparecer las principales características), indique esta situación entre la primera y la segunda bandas del electrón libre en términos de una figura mostrando la densidad de estados.
4. En presencia de un potencial periódico $V(\vec{r})$ de amplitud finita, los estados de electrón libre se van empujar los unos a los otros en energía (teoría de perturbación). Ahora use el modelo de electrón casi libre para estimar la magnitud del componente de Fourier de la función de energía potencial requerido por la segunda banda para estar completamente sobre el primero, i.e., queremos abrir un gap entre la menor banda y la segunda menor banda.

¿Qué componente de Fourier debería ser incrementado para hacer esto? [Idea: Desde (1) y (2) vemos que el máximo de la menor banda es mayor que el mínimo de la banda mayor, i.e., hay una banda que se superpone para la banda del electrón libre. Ésta es una característica de las bandas de electrón libre en dimensiones mayores (2D y 3D). Ahora, queremos encender $V(\vec{r})$ para abrir un gap entre las bandas. La idea principal en teoría de bandas es la siguiente: Cuando vemos dos estados de electrón libre $\psi_{\vec{k}+\vec{G}_1}(\vec{r})$ y $\psi_{\vec{k}+\vec{G}_2}(\vec{r})$ que son muy cercanos en energía o tienen la misma energía (degenerados), entonces nosotros necesitamos tratarlos con igual 'footing' (¿fundamento? ¿base?), i.e., formando una matriz 2x2 y los elementos no-diagonales que representan cómo los dos estados interactúan a través del potencial periódico que está simplemente relacionado con la componente de Fourier particular $V(\vec{G}_1 - \vec{G}_2)$ de $V(\vec{r})$. Para abrir un gap, lo que se debe intentar es pensar en un criterio en término de los componentes de Fourier para que el mínimo de la mayor banda es empujada y/o el máximo de la banda menor es empujada hacia abajo.]

5. Esquemáticamente, indique la situación entre la primera y la segunda bandas de electrón casi libre en términos de la figura mostrando la densidad de estados, después de que un gap es abierto.

Remark: Este problema muestra que en altas dimensiones (e.g. 3D)

muestra estructuras de bandas que no son simples y que necesitamos pensar en zonas de Brillouin 3D en el espacio recíproco. La apertura entre bandas o 'gaps' requieren una cierta fuerza del potencial periódico.