Aux3 P1

P1| 1.- La relación de dispersión de un electrón libre

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 .$$

Al poner un potencial periodico con periodo "a", las energías cambian a

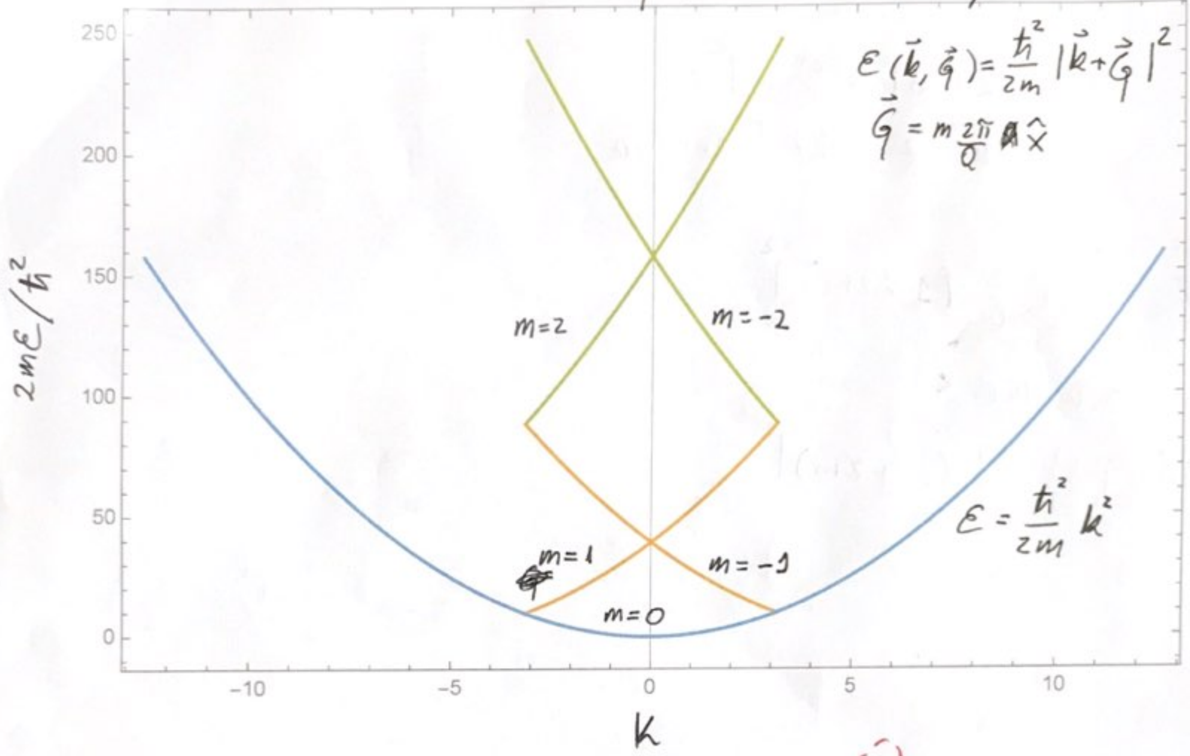
$$\varepsilon(\vec{k}, \vec{G}) = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2$$

con $\vec{k} = k\hat{x}$ (1D) y $\vec{G} = n a \hat{x}$.

Al hacer el plot con diferentes "n" (en la figura puse "m" pero es el "n", es lo mismo), observamos como se doblan los bandos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathcal{E}(\vec{k})\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

G: Vectores de la red reciproca



P1.2 | Las diferentes energías para $m=\{0,\pm1,\pm2\}$:

$$\boxed{\begin{aligned}&\text{Lattice real: } \vec{R}_{\vec{n}} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3\\ &\text{Red Reciproca: } \vec{G}_{\vec{m}} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3\\ &\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V}\vec{a}_2\times\vec{a}_3;\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V}\vec{a}_3\times\vec{a}_1;\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V}\vec{a}_1\times\vec{a}_2\end{aligned}}$$

$\mathcal{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ $\quad m=0$

$\mathcal{E}_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)^2$ $\quad m=1$

$\mathcal{E}_{m=-1} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2$ $\quad m=-1$

$\mathcal{E}_{m=2} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k+\frac{4\pi}{a}\right)^2$ $\quad m=2$

$\mathcal{E}_{m=-2} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k-\frac{4\pi}{a}\right)^2$ $\quad m=-2$

no confundir "m" de iterador con "m" de masa

P1.3 |

$$\mathcal{E}(\vec{k},\vec{G}) = \frac{\hbar^2}{2m}\left|\frac{\pi}{2a}+\delta k + G\right|^2 \Rightarrow \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} = \left|\underbrace{k+\frac{\pi}{2a}+m\frac{2\pi}{a}}_{k+\frac{\pi}{a}\left(\frac{1}{2}+2m\right)}\right|^2$$

We can add a reciprocal lattice vector

$$\left|k+\frac{\pi}{a}\left(\frac{1}{2}+2m+\underbrace{2\bar{m}}_{new}\right)\right|^2$$

m	$2m\mathcal{E}/\hbar^2$
0	$\lvert k+\pi/2a\rvert^2$
1	$\lvert k+5\pi/2a\rvert^2$
-1	$\lvert k-3\pi/2a\rvert^2$
2	$\lvert k+9\pi/2a\rvert^2$
-2	$\lvert k-7\pi/2a\rvert^2$