Exercici 1.

Compara l'estructura de bandes en un material metàl·lic i un material aïllant.

Exercici 2.

En un cristall, l'electró es descriu per una funció d'ona de Bloch de la forma $\psi_{\boldsymbol{k}}(r) = e^{i\boldsymbol{kr}} u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$. Si la funció periòdica $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ té un màxim al lloc r=0 i l'electró està en una banda d'energia on el nombre d'ona **k** no és zero, ¿ com descriuries el comportament d'aquest electró?

Exercici 3.

Considereu un cristall 1D amb una xarxa periòdica simple. Si la funció d'ona per un electró de la zona de Brillouin es descriu com $\psi_{\boldsymbol{k}}(r) = e^{i\boldsymbol{kr}} u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ té un període a (el període de la xarxa), com afectaria la periodicitat de la xarxa el comportament de les bandes d'energia?

Exercici 4.

Un metall divalent d'electrons quasi-lliures té una estructura fcc, de paràmetre de xarxa a=4.5A i base monoatòmica.

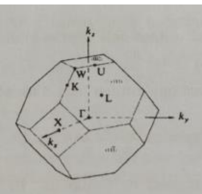


Figura 2: Zona de Brillouin d'una xarxa fcc. Costats de les cares hexagonals = costats cares quadrades = $\sqrt{2}\pi/a$. Coordenades d'alguns punts significatius: $K=(2\pi/a)(3/4,0,3/4)$; $L=(2\pi/a)(1/2,1/2,1/2)$; $U=(2\pi/a)(1/4,1/4,1)$; $W=(2\pi/a)(1/2,0,1)$.

a) Determineu el radi, k_E, de l'esfera que té el mateix volum que la primera zona de Brillouin
b) Calculeu l'energia dels electrons amb $|\boldsymbol{k}| = k_E$ en el model de la xarxa buida
c) A què correspon aquesta energia? Justifiqueu la vostra resposta
d) Compareu el radi d'aquesta esfera amb les distàncies $\Gamma\mathrm{X}$ i ΓL (vegeu la figura 2). En aquesta esfera continguda en la primera zona de Brillouin
e) Trobeu les energies corresponents al màxim de la primera banda i als mínims de la segona i la tercera i compareu-les amb $E(k_E)$

Exercici 5.

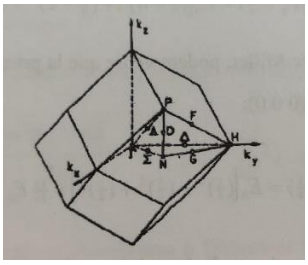
L'alumini té una estructura cristal·lina fcc, de paràmetre de xarxa a=4.05A i base monoatòmica. La seva estructura de bandes s'ajusta a un model d'electrons feblement lligats, amb una energia d'ordre zero $\varepsilon^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m*}$, amb m*= 1,1716$m_e$ i coeficients de Fourier del potencial de la forma $U_1 = U_{\pm1,\pm1,\pm1} = 0{,}4\ eV\ i\ U_2 = U_{\pm2,0,0} = U_{0,\pm2,0} = U_{0,0,\pm2} = 0{,}75\ eV$, essent nul·les totes les altres components.

a) Determineu l'energia de les bandes de menor energia en la direcció $\Gamma\mathrm{K}$ (vegeu figura exercici anterior)
b) Demostreu que el model de la xarxa buida, la segona banda en la direcció $\Gamma\mathrm{K}$ té degeneració 2, excepte en els punts Γ i K.
c) Quan val l'energia d'odre zero en el punt K?

Exercici 6.

En un metall amb xarxa de Bravais cúbica centrada en el cos, de paràmetre de xarxa a, considerem la direcció de Γ a F , on Γ és el centre de la primera zona de Brillouin i

$\mathrm{F} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right)$ el centre d'una aresta, tal com es veu a la figura



a). En l'aproximació de xarxa buida:

1. Escriviu l'expressió general de les bandes d'energia al llarg de la direcció esmentada en termes dels índex de Milles dels vectors de la xarxa recíproca de la cúbica simple,

$\boldsymbol{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{\boldsymbol{x}} + k\hat{\boldsymbol{y}} + l\hat{\boldsymbol{z}})$

2. Doneu el valor de l'energia de la primera banda en el punt F, determineu-ne la degeneració i escriviu l'expressió de les funcions d'ona corresponents.

b). Considereu que el metall té associat un potencial, els coeficients del desenvolupament en sèrie de Fourier del qual es poden expressar en termes del índexs de Miller dels vectors de la xarxa recíproca de la cúbica simple, $\boldsymbol{G}' = \frac{2\pi}{a}(h'\hat{\boldsymbol{x}} + k'\hat{\boldsymbol{y}} + l'\hat{\boldsymbol{z}})$

$$V_{h'k'l'} = \frac{6U}{h'^2 + k'^2 + l'^2} \quad amb\ V_{000=0}$$

1. Escriu el sistema homogeni d'equacions lineals que permet determinar els valors de l'energia en el punt F.
2. Resoleu el sistema d'equacions i trobeu els valors de l'energia corregits pel potencial en el punt F en aquest nivell d'aproximació.

Exercici 7.

Sigui un material bidimensional de xarxa quadrada la banda de conducció del qual ve donada per l'expressió:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2\right) \qquad \vec{k} \in 1a\ ZB$$

Resolució les equacions del moviment en l'espai recíproc per a un electró que inicialment es troba a l'estat $\vec{k}(t=0) = k_0\hat{x}$ per als casos següents:

1. Quan s'aplica un camp elèctric constant i uniforme $\vec{E} = E_o\hat{x}$
2. Quan s'aplica un camp magnètic constant i uniforme $\vec{B} = B_o\hat{z}$ perpendicular al pla del material.