INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE OCCIDENTE

Transporte Electrónico en Nanoestructuras

Primavera 2019

ITESO, Universidad Jesuita de Guadalajara

potencial periódico de deltas de dirac

Gráficas de bandas para energías

chiñas fuentes karina

NT704804

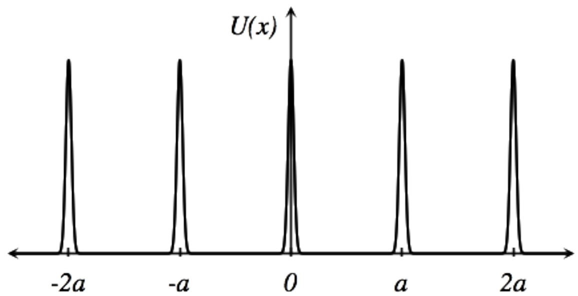
Profesor: Gustavo Montes Cabrera

Tlaquepaque, Jalisco

viernes, 29/marzo/2019

Gráficas de bandas para energías

Se tiene que para un femión, este caso un electrón, sometido al potencial periódico de la forma



que puede estar representado como,

$$U(x) = \alpha \sum_{n}^{N} \delta(x - na), \tag{1}$$

donde N es el número de deltas que contiene el potencial, todas de altua α separadas a una distancia a. Se tiene que la energía va a estar sujeta a el coeficiente de la onda k, definida como

$$k^2 = \frac{1}{\hbar^2} 2mE, \tag{2}$$

siendo m la masa de la partícula y $\hbar$ la constante de Planck dividida entre 2π. Al considerar el **teorema de Floquet**, que establece que una función de onda sometida a un potencial periódico va a caracterizarse por

$$\Psi(x + na) = C^n \Psi(x), \tag{3}$$

donde, por condiciones de normalización, se puede demostrar que

$$C = e^{i\Phi a N}, \tag{4}$$

siendo $\Phi = 2\pi l / Na$, para $l = 0, 1, 2, \cdots, N$. Se puede analizar la forma de la función de onda para las regiones $0 \leq x \leq a$ y $-a \leq x \leq 0$, haciendo uso del teorema de Floquet. Al aplicar las debidas condiciones de continuidad para este sistema, se puede llegar a la siguiente realción

$$\cos(\Psi a) = \cos(ka) + \frac{\beta}{ka} \sin(ka), \tag{5}$$

donde,

$$\beta = \frac{1}{\hbar^2} \alpha m a. \tag{6}$$

Es notable que la igualdad de la ec. (5) no va a cumplirse para todo valor de k, por lo que eso nos daría la cuantización de la energía para este sistema. Realicé un programa en python que grabica los valoes que hacen posible la igualdad de la ec. (5). A continuación se presenta dicho código.

```
Author:  Karina Chinhas-Fuentes

import math
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from numpy import pi, sin, cos, sqrt, exp
from matplotlib.pyplot import savefig
import matplotlib.patheffects as path_effects

alpha = 1
hbar = 1
a = 1.5
m = 1
N = 100
x = 20

beta = m*alpha*a\(hbar**2)

k = np.linspace(0.001,x,10000)
l = np.arange(N + 1)

ZETA = np.zeros(len(k))

phi = lambda L: 2*pi*L\(N*a)
eta = lambda L: cos(phi(L)*a)
zeta = lambda K: cos(K*a) + (beta\K*a)*sin(K*a)

bands = np.zeros((N+1,len(k)))

for z in range(len(k)):
ZETA[z] = zeta(k[z])

for n in range(len(l)):
for z in range(len(k)):
if round(ZETA[z],2) >= -1.00 and round(ZETA[z],2) <= 1.00:
bands[n,z] = eta(l[n])
else:
bands[n,z] = None

titulo = "V(x) = $\\alpha\\sum^N_n\\delta(x-na)$ \n N=" + str(N)
sstyle = "seaborn-poster"
plt.style.use(sstyle)
plt.rc('text', usetex = True)
plt.rc('font', family = 'serif')

plt.figure(figsize = (15,10))
plt.plot(k, ZETA, linewidth = 3.5 )
```

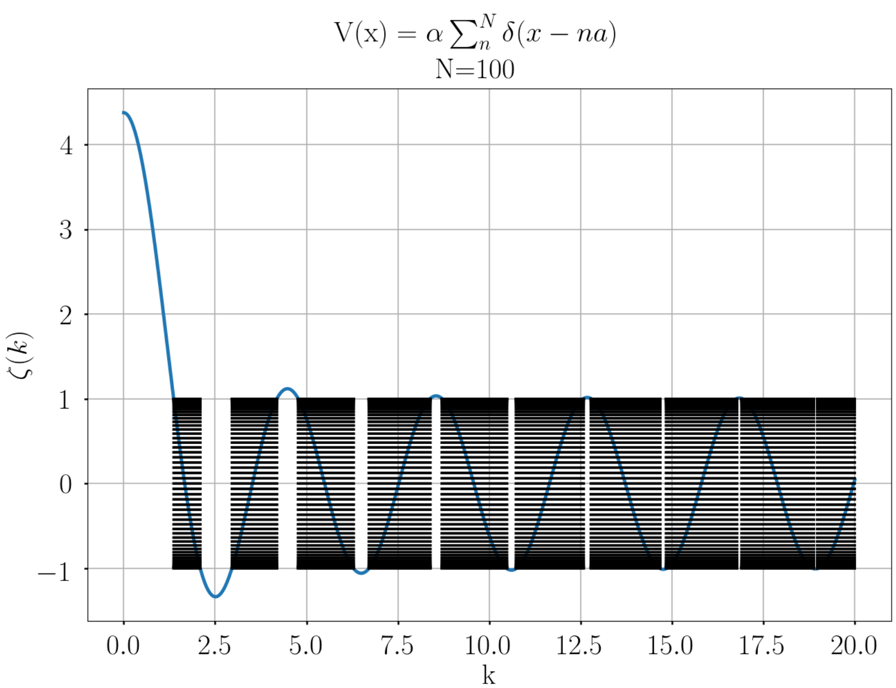
```
for n in range(len(l)):
plt.plot(k, bands[n], color = 'k')


plt.suptitle(titulo, fontsize=30)
plt.ylabel("$\\zeta(k)$")
plt.xlabel("k")
plt.grid()
#plt.savefig( "RT8" + ".png", format = "png")
plt.show()
```

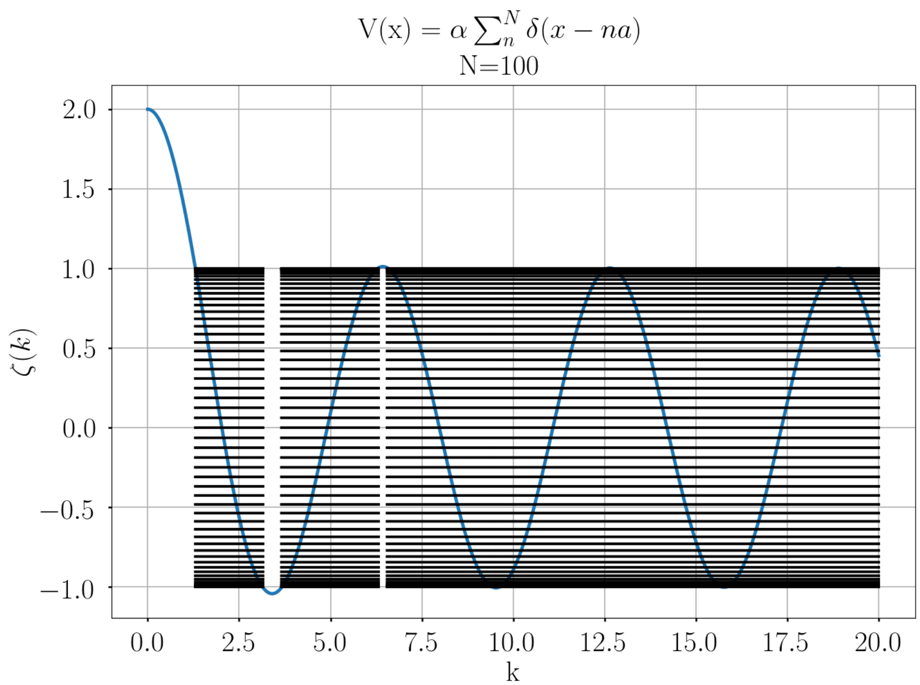
Siendo

$$\zeta(k) = \cos(ka) + \frac{\beta}{ka}\sin(ka)\,, \tag{7}$$

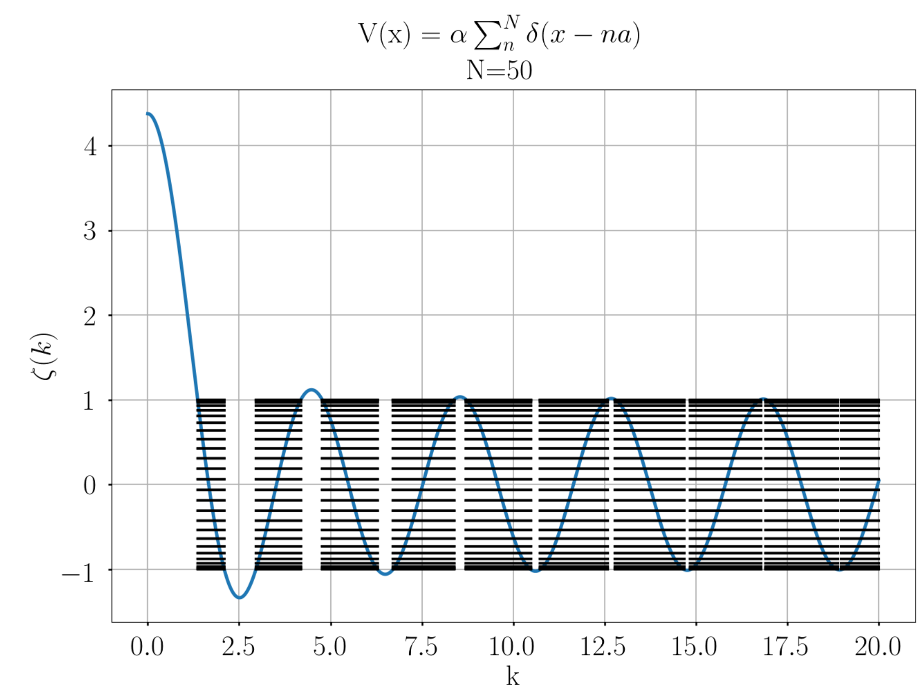
el resultado del código para los parámetros $a = 1.5$ y $N = 100$ es:



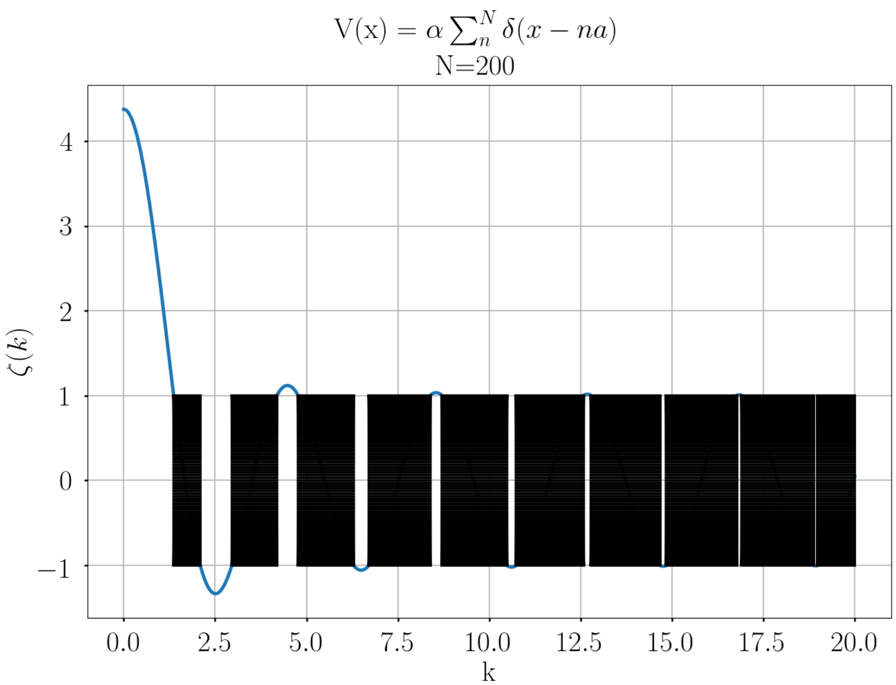
Para una a más chica, es posible notar que la función $\zeta(k)$ converge a 1 y -1 para valors de k más chicos, conservando el mismo numero de deltas de Dirac. El resultado del código para $a = 1$ y $N = 100$ es:



Mientras que para el mismo valor de a pero disminuyendo o decreciendo el valor de N, cambia el número de líneas para las regiones válidas de k. Como se puede ver en las siguientes imágener, para $N = 50$



y para $N = 200$



Los resultados de las gráficas para determianos valores que caracterizan al sistema, nos da una idea de los posibles valores cuantizados, o cuasi continuos, de la enería.