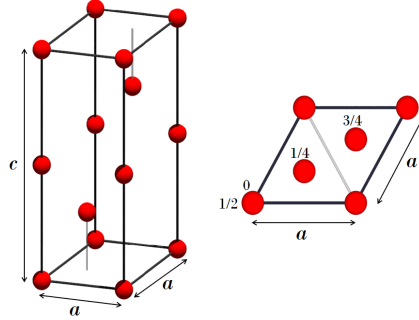


Cal fer els problemes en fulls separats i posar nom i cognoms a tots els fulls.

Només es pot fer servir calculadora, formulari i manual de fórmules i taules (Schaum).

- A.1. (2,5 punts) A la figura adjunta es representa l'estructura cristal·lina de l'americi, en què la base del políedre és un paral·lelogram de costat a i angle agut de 60° , i l'aresta de les cares laterals és c .



- Digues quina és la xarxa de Bravais i dona un conjunt adient de vectors primitius, referits a un sistema d'eixos cartesianes.
- Dona una base atòmica adient, indicant els vectors posició dels àtoms en termes dels vectors primitius.
- Dona l'expressió general del factor d'estructura en termes dels índexs de Miller (hkl) . (Nota: No s'han de discutir extincions sistemàtiques.)
- Calcula el valor del factor d'estructura per a la família de plans (100) .
- Calcula els valors del factor d'estructura per a les famílies de plans (001) , (002) , (003) i (004) .
- Dona raonadament la multiplicitat dels pics que s'obtidrien en un experiment de difracció per a les famílies de plans (100) i (004) i calcula el quocient de les intensitats corresponents, suposant que el factor de forma atòmic és constant i no depèn de l'angle de difracció.

Nota: l'espaiat d'una família de plans qualsevol d'aquesta xarxa de Bravais és $d = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2+k^2-hk)+\left(\frac{a}{c}\right)^2}}$.

- A.2. (2,5 punts) Considera una cadena lineal de longitud L i paràmetre de xarxa $a = 1 \text{ \AA}$, formada per N àtoms de massa M . En aquesta xarxa es donen interaccions a primers i segons veïns amb constants d'acoblament A i B , respectivament, essent nul·les les constants d'acoblament a veïns d'ordre superior.

- (a) Demostra que la relació de dispersió ve donada per l'expressió

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2}{M} \{A[1 - \cos(ka)] + B[1 - \cos(2ka)]\}}.$$

- Dona l'expressió de la velocitat de propagació del so, v_{so} .
- Dona l'expressió de la freqüència màxima d'oscil·lació, ω_{\max} .
- Es fa un experiment de dispersió inelàstica de neutrons amb aquest cristall, en què el neutró incident té una longitud d'ona $\lambda_0 = 3'50 \text{ \AA}$ i el neutró dispersat té una longitud d'ona $\lambda_1 < \lambda_0$:
 - Justifica per què existeix un valor mínim per a la longitud d'ona del neutró dispersat en aquest experiment.
 - Si aquest valor mínim és $\lambda_1 = 2'20 \text{ \AA}$, sabent que la massa del neutró en repòs és $M_n \sim 1'675 \times 10^{-27} \text{ kg}$, $\hbar \sim 1,055 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ i la velocitat del so en aquesta xarxa és $v_{so} = 1000 \text{ m/s}$, determina el quocient B/A .

Cal fer els problemes en fulls separats i posar nom i cognoms a tots els fulls.

Només es pot fer servir calculadora, formulari i manual de fórmules i taules (Schaum).

B.1. (2,5 punts)

- (a) (2,0 punts) Considera un metall unidimensional de longitud L , amb N cel·les primitives i constant de xarxa a , amb una única banda d'energies monoelectròniques

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

en què cada cel·la primitiva aporta un electró:

- (i) Determina el vector d'ona de Fermi, k_F , i l'energia de Fermi, E_F .
- (ii) Dona la velocitat dels electrons en funció de k .
- (iii) Troba la massa efectiva dels electrons en funció de k .
- (iv) Demuestra que el valor de la densitat d'estats $D(E)$ corresponent a l'energia de Fermi és

$$D(E_F) = \frac{16Na^2m}{3\pi^2\hbar^2}.$$

- (b) (0,5 punts) (Qüestió conceptual curta) Considera un material que cristal·litza en una xarxa de Bravais tridimensional qualsevol amb base monoatòmica. Raona quins poden ser els comportaments elèctrics en cadascun dels dos casos següents:

- (i) Àtoms monovalents.
- (ii) Àtoms divalents.

B.2. (2,5 punts) Un sòlid bidimensional de base monoatòmica està format per àtoms de valència 2 situats en els nusos d'una xarxa de Bravais quadrada, de paràmetre de xarxa a .

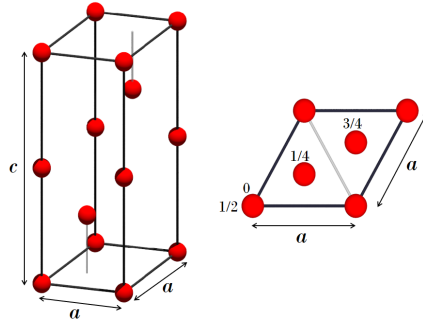
- (a) En el model de xarxa buida:

- (i) Calcula el vector d'ona de Fermi, k_F , i compara'l amb les dimensions característiques de la primera zona de Brillouin: $\vec{k}_X = \frac{\pi}{a}\hat{x}$ (centre d'un costat) i $\vec{k}_M = \frac{\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$ (vèrtex).
- (ii) Troba l'energia de Fermi, E_F .
- (iii) Dona l'expressió general de les bandes d'energia en els punts X i M.
- (iv) Justifica la degeneració de la primera banda d'energia en cadascun d'aquests punts.

- (b) En el model d'electrons feblement lligats i considerant que el desenvolupament en sèrie d'ones planes del potencial és tal que $U_{\vec{G}} = U$ ($U \ll E_F$) per als vectors no nuls més curts de la xarxa recíproca i $U_{\vec{G}} = 0$ per a la resta:

- (i) Determina si el potencial trenca la degeneració en els punts X i M i troba els nous valors de l'energia en aquests punts.
- (ii) Raona si el sòlid és un conductor o un aïllant.

(2,5 punts) A la figura adjunta es representa l'estructura cristal·lina de l'americi, en què la base del políedre és un paral·lelogram de costat a i angle agut de 60° , i l'aresta de les cares laterals és c .



Nota: l'espaiat d'una família de plans qualsevol d'aquesta xarxa de Bravais és

$$d = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + k^2 - hk) + \left(\frac{a}{c}\right)^2}}$$

- (a) (0,3 punts) Digues quina és la xarxa de Bravais i dona un conjunt adient de vectors primitius, referits a un sistema d'eixos cartesianes.

Solució: La figura que es presenta a l'enunciat és la cel·la primitiva de l'americi, la base de la qual té tots els costats iguals, els quals formen angles de 60° dos a dos. A banda, aquesta figura es repeteix al llarg de la direcció perpendicular. Per definició, aquesta cel·la correspon a una xarxa hexagonal (3D). Un possible conjunt de vectors primitius d'aquesta xarxa és el següent:

$$\vec{a}_1 = a\hat{x}, \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \quad \vec{a}_3 = c\hat{z}$$

- (b) (0,4 punts) Dona una base atòmica adient, indicant els vectors posició dels àtoms en termes dels vectors primitius.

Solució: La base atòmica està formada per quatre àtoms iguals situats a les següents posicions:

$$\vec{r}_1 = \vec{0}, \quad \vec{r}_2 = \frac{1}{2}\vec{a}_3, \quad \vec{r}_3 = \frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) + \frac{1}{4}\vec{a}_3, \quad \vec{r}_4 = \frac{2}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) + \frac{3}{4}\vec{a}_3$$

Alternativament, el quart àtom es pot considerar que es troba situat en $\vec{r}_4 = -\vec{r}_3$, una descripció que pot resultar més còmoda a l'hora de calcular el factor d'estructura.

- (c) (0,6 punts) Dona l'expressió general del factor d'estructura en termes dels índexs de Miller $(h\ k\ l)$. (Nota: No s'han de discutir extincions sistemàtiques.)

Solució: L'expressió general del factor d'estructura és

$$S_{\vec{G}} = \sum_i f_i \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_i),$$

on \vec{r}_i són els vectors de la base atòmica i \vec{G} és un vector qualsevol de la xarxa recíproca que, per tant, es pot expressar en termes dels vectors primitius d'aquesta xarxa mitjançant els índexs de Miller com $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$.

Emprant les expressions donades per als vectors \vec{r}_i a l'apartat anterior, tenint en compte la propietat $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$, i prenent el mateix factor de forma atòmic per als quatre àtoms de la base, ja que són tots iguals, el factor d'estructura es pot escriure com

$$S_{hkl} = f \{1 + \exp(-i\pi l) + \exp[-i\pi(\frac{2}{3}(h+k) + \frac{l}{2})] + \exp[i\pi(\frac{2}{3}(h+k) + \frac{l}{2})]\},$$

que es pot arreglar perquè quedi com

$$S_{hkl} = f \{1 + \exp(-i\pi l) + 2 \cos[\pi(\frac{2}{3}(h+k) + \frac{l}{2})]\}.$$

- (d) (0,2 punts) Calcula el valor del factor d'estructura per a la família de plans (100) .

Solució: Substituint els valors dels índexs a l'expressió general del factor d'estructura assolida a l'apartat anterior, tenim el següent valor:

$$S_{100} = f (1 + 1 + 2 \cos \frac{2\pi}{3}) = f.$$

- (e) (0,4 punts) Calcula els valors del factor d'estructura per a les famílies de plans (001) , (002) , (003) i (004) .

Solució: Substituint els valors dels índexs a l'expressió general del factor d'estructura assolida abans, tenim els següents valors:

$$S_{001} = f (1 - 1 + 2 \cos \frac{\pi}{2}) = 0.$$

$$S_{002} = f (1 + 1 + 2 \cos \pi) = 0.$$

$$S_{003} = f (1 - 1 + 2 \cos \frac{3\pi}{2}) = 0.$$

$$S_{004} = f (1 + 1 + 2 \cos 2\pi) = 4f.$$

- (f) (0,6 punts) Dona raonadament la multiplicitat dels pics que s'obtingrien en un experiment de difracció per a les famílies de plans (100) i (004) i calcula el quocient de les intensitats corresponents, suposant que el factor de forma atòmic és constant i no depèn de l'angle de difracció.

Solució: Al pic de difracció de la família (100) contribuiran també les famílies $(\bar{1}00)$, (010) , $(0\bar{1}0)$, (110) i $(\bar{1}\bar{1}0)$, ja que totes tenen el mateix espaïat ($d = a\sqrt{3}/2$), d'acord amb l'expressió general de l'espaïat donada a l'enunciat.

Ara bé, no hi contribuiran les famílies (001) i $(00\bar{1})$, ja que el seu espaïat ($d = c$) és diferent de l'espaïat d'aquelles que originen aquest pic. Tampoc hi contribuiran les famílies $(\bar{1}10)$, $(1\bar{1}0)$ o aquelles en què el 0 canvia de posició i, per tant, el tercer índex passa a ser no nul, ja que l'espaïat de totes aquestes famílies és diferent de l'espaïat esmentat abans per a la família (100) i equivalents ($d = a\sqrt{3}/2$).

Si es calcula el factor d'estructura per a les famílies (110) i $(\bar{1}\bar{1}0)$ es pot veure que $S_{110} = S_{100} = f$. Per tant, podem dir que la multiplicitat d'aquest pic és $M_{100} = 6$.

Al pic de difracció de la família (004) només hi contribuiran aquesta família i la família $(00\bar{4})$, ja que totes dues tenen el mateix espaïat ($d = c/4$), d'acord amb l'expressió general de l'espaïat donada a l'enunciat.

Ara bé, les famílies en què l'índex no nul és el primer o el segon no contribuiran a aquest pic, ja que el seu espaïat ($d = a\sqrt{3}/8$) és diferent de l'espaïat de les famílies (004) i $(00\bar{4})$.

Per tant, podem dir que la multiplicitat d'aquest pic és $M_{004} = 2$.

Tenint en compte que la intensitat d'un pic és proporcional al producte de la multiplicitat pel quadrat del mòdul del factor d'estructura, podem calcular el quocient d'intensitats com

$$\frac{I_{004}}{I_{100}} = \frac{M_{004} |S_{004}|^2}{M_{100} |S_{100}|^2} = \frac{2(4f)^2}{6f^2} = \frac{16}{3}.$$

(2,5 punts) Considera una cadena lineal de longitud L i paràmetre de xarxa $a = 1 \text{ \AA}$, formada per N àtoms de massa M . En aquesta xarxa es donen interaccions a primers i segons veïns amb constants d'acoblament A i B , respectivament, essent nul·les les constants d'acoblament a veïns d'ordre superior.

(a) (0,5 punts) Demuestra que la relació de dispersió ve donada per l'expressió

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2}{M} \{A [1 - \cos(ka)] + B [1 - \cos(2ka)]\}}.$$

Solució: Plantegem l'equació del moviment per al desplaçament respecte a la posició d'equilibri de l'àtom a la cel·la s :

$$M \frac{\partial^2 u_s}{\partial t^2} = A(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) + B(u_{s+2} + u_{s-2} - 2u_s)$$

Assagem solucions de l'estil $u_s = u_0 \exp[i(ksa - \omega t)]$:

$$-M\omega^2 = A(e^{ika} + e^{-ika} - 2) + B(e^{i2ka} + e^{-i2ka} - 2)$$

Emprem la fórmula d'Euler per reescriure aquesta equació com

$$-M\omega^2 = A[2 \cos(ka) - 2] + B[2 \cos(2ka) - 2]$$

Finalment, aïllem la freqüència per assolir la relació de dispersió:

$$\omega(\vec{k}) = \sqrt{\frac{2}{M} \{A [1 - \cos(ka)] + B [1 - \cos(2ka)]\}}^{1/2}$$

(b) (0,5 punts) Dona l'expressió de la velocitat de propagació del so, v_{so} .

Solució: La velocitat de propagació del so és la velocitat de grup de les ones elàstiques en el límit de longituds d'ona llargues, és a dir, per a $\vec{k} \rightarrow 0$.

Calculem primer, doncs, la velocitat de grup:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{a}{\sqrt{2M}} \frac{A \sin(ka) + 2B \sin(2ka)}{\{A [1 - \cos(ka)] + B [1 - \cos(2ka)]\}^{1/2}}$$

I ara aproximem les funcions trigonomètriques pels primers termes dels seus desenvolupaments de Taylor:

$$\sin \theta \simeq \theta \quad , \quad \cos \theta \simeq 1 - \frac{1}{2}\theta^2$$

$$v_{\text{so}} = \lim_{\vec{k} \rightarrow 0} v_g = \frac{a}{\sqrt{2M}} \frac{A(ka) + 2B(2ka)}{\left[\frac{A}{2}(ka)^2 + \frac{B}{2}(2ka)^2\right]^{1/2}} \rightarrow v_{\text{so}} = a\sqrt{\frac{A+4B}{M}}$$

Alternativament, primer es pot aproximar la relació de dispersió en el límit $\vec{k} \rightarrow 0$, fent servir el desenvolupament de Taylor del cosinus:

$$\omega(\vec{k} \rightarrow 0) \simeq \sqrt{\frac{2}{M}} \left[\frac{A}{2}(ka)^2 + \frac{B}{2}(2ka)^2 \right]^{1/2} = (ka)\sqrt{\frac{A+4B}{M}}$$

Derivant respecte a k , assolim la velocitat del so:

$$v_{\text{so}} = a\sqrt{\frac{A+4B}{M}}$$

- (c) (0,5 punts) Dona l'expressió de la freqüència màxima d'oscil·lació, ω_{max} .

Solució: El valor de la freqüència màxima d'oscil·lació es troba a la frontera de la primera zona de Brillouin, ja que la relació de dispersió és una funció creixent dins d'aquest interval.

Per tant,

$$\begin{aligned} \omega_{\text{max}} = \omega\left(\frac{\pi}{a}\right) &= \sqrt{\frac{2}{M} \{A[1 - \cos(\pi)] + B[1 - \cos(2\pi)]\}} \\ &\Rightarrow \omega_{\text{max}} = 2\sqrt{\frac{A}{M}} \end{aligned}$$

Nota: Podem deduir de manera més precisa que el màxim de la relació de dispersió es troba en $k = \pi/a$, derivant $\omega(k)$:

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{a}{2} \sqrt{\frac{2}{M}} \frac{A \sin(ka) + 2B \sin(2ka)}{\{A[1 - \cos(ka)] + B[1 - \cos(2ka)]\}^{1/2}}$$

$$\frac{d\omega}{dk} = 0 \Rightarrow A \sin(ka) + 4B \sin(ka) \cos(ka) = 0$$

$$\sin(ka) [A + 4B \cos(ka)] = 0 \Rightarrow \begin{cases} \sin(ka) = 0 \\ \cos(ka) = -\frac{A}{4B} \end{cases}$$

L'equació $\sin(ka) = 0$ té dues solucions possibles a la primera zona de Brillouin: $k = 0$ o $k = \frac{\pi}{a}$. En el primer cas, $\omega(k = 0) = 0$, de manera que no pot ser un màxim. En el segon cas, $\omega(k = \frac{\pi}{a}) \neq 0$, de manera que ens quedarem amb aquesta solució.

Perquè la segona equació tingui solució, cal que $\frac{A}{4B} \leq 1$. Això voldria dir que la interacció a segons veïns, B , hauria de ser, com a mínim, la quarta part de la interacció a primers veïns, A : $B \geq \frac{A}{4}$. Això té molt poc sentit físic, ja que les interaccions a primers veïns acostumen a ser molt més intenses que les interaccions a segons veïns (per això s'acostumen a descartar). Per tant, considerarem que aquesta solució no té sentit en el context del problema.

- (d) Es fa un experiment de dispersió inelàstica de neutrons amb aquest cristall, en què el neutró incident té una longitud d'ona $\lambda_0 = 3'50 \text{ \AA}$ i el neutró dispersat té una longitud d'ona $\lambda_1 < \lambda_0$:
- (i) (0,5 punts) Justifica per què existeix un valor mínim per a la longitud d'ona del neutró dispersat en aquest experiment.

Solució: En ser $\lambda_1 < \lambda_0$, el balanç d'energies del procés dispersiu és

$$\hbar\omega = E_1 - E_0 = \frac{(2\pi)^2\hbar^2}{2M_n} \left(\frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda_0^2} \right),$$

on E_0 és l'energia del neutró incident, E_1 és l'energia del neutró dispersat i $\hbar\omega$ és l'energia del fonó involucrat en el procés.

En aquest procés, el neutró dispersat pot tenir un ventall de longituds d'ona que depenen del valor concret de la freqüència del fonó involucrat. Si considerem el valor màxim, ω_{\max} , aleshores la longitud del neutró dispersat, λ_1 , assolirà el seu valor més petit possible:

$$\lambda_{1,\min} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\lambda_0^2} + \frac{2M_n}{(2\pi)^2\hbar}\omega_{\max}}}$$

Qualsevol altre valor més petit de ω donarà un denominador més petit i, per tant, un valor més gran per a la longitud d'ona λ_1 .

- (ii) (0,5 punts) Si aquest valor mínim és $\lambda_1 = 2'20 \text{ \AA}$, sabent que la massa del neutró en repòs és $M_n \sim 1'675 \times 10^{-27} \text{ kg}$, $\hbar \sim 1,055 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ i la velocitat del so en aquesta xarxa és $v_{\text{so}} = 1000 \text{ m/s}$, determina el quocient B/A .

Solució: A partir de la relació

$$\hbar\omega_{\max} = \frac{(2\pi)^2\hbar^2}{2M_n} \left(\frac{1}{\lambda_{1,\min}^2} - \frac{1}{\lambda_0^2} \right),$$

substituint-hi les dades de l'enunciat, podem assolir el valor numèric de la freqüència màxima:

$$\omega_{\max} \simeq 1'55 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$$

D'altra banda, a partir de les expressions obtingudes per a ω_{\max} i v_{so} , podem obtenir el quocient B/A :

$$\frac{v_{\text{so}}}{\omega_{\max}} = \frac{a}{2} \sqrt{\frac{A + 4B}{A}} \Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{2}{a} \frac{v_{\text{so}}}{\omega_{\max}} \right)^2 - 1 \right]$$

Substituint valor numèrics, assolim

$$\frac{B}{A} \simeq 0'166$$

És a dir, la interacció a segons veïns és aproximadament un 16'6 % de la interacció a primers veïns.

Nota: la solució trobada permet confirmar l'argument que hem donat anteriorment per rebutjar la solució $\frac{B}{A} \geq 0'25$ com un possible màxim de la relació de dispersió.

- (a) (2,0 punts) Considera un metall unidimensional de longitud L , amb N cel·les primitives i constant de xarxa a , amb una única banda d'energies monoelectròniques

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

en què cada cel·la primitiva aporta un electró:

- (i) (0,6 punts) Determina el vector d'ona de Fermi, k_F , i l'energia de Fermi, E_F .

Solució: Per trobar k_F hem de considerar que en una dimensió tots els electrons, N_e , es troben tancats en un segment de longitud $2k_F$, hem de tenir en compte la degeneració de l'espín, 2, i la densitat d'estats en l'espai de vectors d'ona, $\frac{L}{2\pi}$:

$$N_e = 2(2k_F) \frac{L}{2\pi} \rightarrow k_F = \frac{N_e \pi}{L}$$

Com que cada cel·la primitiva aporta un electró, tenim

$$\frac{N_e}{L} = \frac{1}{a}$$

Per tant,

$$k_F = \frac{\pi}{2a}$$

L'energia de Fermi serà el valor de l'energia de la banda calculat en $k = k_F$:

$$E_F = E(k_F) = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \left(1 - \frac{a^2}{2\pi^2} k_F^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 \left[1 - \frac{a^2}{2\pi^2} \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 \right]$$

Arreglant l'expressió obtenim

$$E_F = \frac{7\pi^2}{64} \frac{\hbar^2}{m a^2}$$

- (ii) (0,4 punts) Dona la velocitat dels electrons en funció de k .

Solució: L'expressió general de la velocitat dels electrons en una banda és

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

En un cas unidimensional, podem escriure directament

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

En el nostre cas,

$$v(k) = \frac{\hbar}{m} k \left(1 - \frac{a^2}{\pi^2} k^2 \right)$$

- (iii) (0,4 punts) Troba la massa efectiva dels electrons en funció de k .

Solució: En una dimensió, el tensor d'inversa de la massa efectiva esdevé un escalar que es pot calcular simplement com

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

En el nostre cas,

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} \left(1 - \frac{3a^2}{\pi^2} k^2 \right)$$

Per tant,

$$m^* = \frac{m}{1 - \frac{3a^2}{\pi^2} k^2}$$

- (iv) (0,6 punts) Demuestra que el valor de la densitat d'estats $D(E)$ corresponent a l'energia de Fermi és

$$D(E_F) = \frac{16Na^2m}{3\pi^2\hbar^2}.$$

Solució: Per trobar la densitat d'estats, que té sentit a $T \neq 0$, ara hem de considerar que els electrons estan tancats en un segment de dimensió variable donada per $2k$:

$$N(k) = 2(2k) \frac{L}{2\pi} = \frac{2Na}{\pi} k$$

D'altra banda, com que resulta complicat aïllar k en termes d' E a partir de la banda d'energia, farem el següent:

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk} \left| \frac{dk}{dE} \right| = \frac{dN/dk}{|dE/dk|}$$

D'una banda, calculem dN/dk :

$$\frac{dN(k)}{dk} = \frac{2Na}{\pi}$$

D'altra banda, calculem dE/dk :

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} k \left(1 - \frac{a^2}{\pi^2} k^2 \right)$$

Per tant,

$$D(E) = \frac{2Nma}{\pi\hbar^2k} \left(1 - \frac{a^2}{\pi^2}k^2\right)^{-1}$$

Per trobar $D(E_F)$ només ens cal substituir $k_F = \frac{\pi}{2a}$ en aquesta expressió:

$$D(E_F) = \frac{2Nma}{\pi\hbar^2k_F} \left(1 - \frac{a^2}{\pi^2}k_F^2\right)^{-1} = \frac{4Nma^2}{\pi^2\hbar^2} \left[1 - \frac{a^2}{\pi^2} \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2\right]^{-1}$$

El resultat de l'operació que apareix entre claudàtors és 3/4 i, com que aquest es troba en el denominador, això porta a l'expressió que dona l'enunciat:

$$D(E_F) = \frac{16Na^2m}{3\pi^2\hbar^2}.$$

- (b) (0,5 punts) (Qüestió conceptual curta) Considera un material que cristal·litza en una xarxa de Bravais tridimensional qualsevol amb base monoatòmica. Raona quins poden ser els comportaments elèctrics en cadascun dels dos casos següents:

- (i) (0,25 punts) Àtoms monovalents.

Solució: En qualsevol banda d'energia caben $2N$ electrons, on N és el nombre de cel·les primitives de l'espai real. Per una altra part, en una xarxa de Bravais tridimensional, la forma de les bandes depèn de la forma concreta de les zones de Brillouin. En concret, les bandes al llarg de diferents direccions poden encavalcar-se i entrecreuar-se.

En el cas d'àtoms monovalents, és a dir, amb un sol electró de valència per àtom, i amb una base monoatòmica, hi ha la meitat dels estats ocupats, justament N . Tenint en compte que la intensitat del potencial iònic normalment fa que el solapament de les bandes al llarg de diferents direccions no sigui gaire gran, en aquesta situació el material només pot ser un conductor, ja que els electrons propers a la superfície de Fermi en la banda ocupada tindran estats lliures accessibles als quals moure's quan s'apliqui un camp elèctric al material.

- (ii) (0,25 punts) Àtoms divalents.

Solució: En aquest cas hi ha dos electrons per àtom i, com que la base és monoatòmica, hi ha dos electrons per cel·la primitiva. Així, seguint amb el raonament anterior, els $2N$ estats electrònics estaran ocupats. L'ocupació, però, dependrà de la forma precisa de les bandes. Així, ens podem trobar dos casos possibles:

- Que no hi hagi solapament de bandes i, per tant, l'última banda ocupada ho estigui totalment i la primera banda buida també ho estigui totalment. Aleshores, es tractarà d'un aïllant, ja que els electrons situats prop del màxim de la banda ocupada no disposaran d'estats lliures accessibles dins la mateixa banda als quals moure's quan s'apliqui un camp elèctric al material.
- Que hi hagi solapament de bandes, de manera que hi hagi ompliment parcial de les dues últimes bandes ocupades. Aleshores, es tractarà d'un metall per solapament i els electrons situats prop de les branques de la superfície de Fermi que es trobin en les dues bandes parcialment ocupades disposaran d'estats lliures accessibles als quals moure's quan s'apliqui un camp elèctric al material, de manera que conduirà el corrent elèctric.

(2,5 punts) Un sòlid bidimensional de base monoatòmica està format per àtoms de valència 2 situats en els nusos d'una xarxa de Bravais quadrada, de paràmetre de xarxa a .

(a) En el model de xarxa buida:

- (i) (0,3 punts) Calcula el vector d'ona de Fermi, k_F , i compara'l amb les dimensions característiques de la primera zona de Brillouin: $\vec{k}_X = \frac{\pi}{a}\hat{x}$ (centre d'un costat) i $\vec{k}_M = \frac{\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$ (vèrtex).

Solució: Per trobar k_F hem de considerar que en dues dimensions tots els electrons, N , es troben tancats en un cercle de radi k_F , hem de tenir en compte la degeneració de l'espín, 2, i la densitat d'estats en l'espai de vectors d'ona, $S/(2\pi)^2$:

$$N = 2(\pi k_F^2) \frac{S}{(2\pi)^2} \rightarrow k_F = \left(2\pi \frac{N}{S}\right)^{1/2}$$

Com que cada cel·la primitiva de superfície $S = a^2$ té un àtom i aquest aporta dos electrons, tenim

$$\frac{N}{S} = \frac{2}{a^2}$$

Per tant,

$$k_F = \left(\frac{4\pi}{a^2}\right)^{1/2} \rightarrow k_F = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\pi}{a} \approx 1'13 \frac{\pi}{a}$$

Tenint en compte les dimensions dels vectors que dona l'enunciat,

$$\vec{k}_X = \frac{\pi}{a}\hat{x} \rightarrow k_X = \frac{\pi}{a},$$

i

$$\vec{k}_M = \frac{\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y}) \rightarrow k_M = \sqrt{2} \frac{\pi}{a} \approx 1'41 \frac{\pi}{a},$$

podem dir que

$$k_X < k_F < k_M,$$

és a dir, el cercle de Fermi sobresurt lleugerament pels centres dels costats de la primera zona de Brillouin (punt X) i no arriba de bon tros als vèrtexs (punt M), de manera que la primera i la segona zona de Brillouin estan parcialment ocupades.

- (ii) (0,1 punts) Troba l'energia de Fermi, E_F .

Solució: L'energia de Fermi serà el valor de l'energia d'electrons lliures, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, calculat en $k = k_F$, on k_F l'hem trobat a l'apartat anterior:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \rightarrow E_F = \frac{2\pi\hbar^2}{ma^2}$$

- (iii) (0,4 punts) Dona l'expressió general de les bandes d'energia en els punts X i M.

Solució: En aquesta aproximació l'expressió general de les bandes d'energia és

$$E_{\vec{k}-\vec{G}}^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} - \vec{G}|^2,$$

on $\vec{G} = h\vec{b}_1 + l\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + l\hat{y})$.

Per donar les expressions en els punts X i M, només cal que emprem els vectors d'ona que descriuen les posicions d'aquests punts:

- Punt X: $\vec{k}_X = \frac{\pi}{a}\hat{x}$

$$\vec{k}_X - \vec{G} = \frac{2\pi}{a} \left[\left(\frac{1}{2} - h \right) \hat{x} + l\hat{y} \right]$$

$$E_{hl}^{(0)}(X) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \left[\left(\frac{1}{2} - h \right)^2 + l^2 \right]$$

Si definim $E_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2$, podem escriure l'expressió general de les bandes en X com

$$E_{hl}^{(0)}(X) = E_0 \left[\left(\frac{1}{2} - h \right)^2 + l^2 \right]$$

- Punt M: $\vec{k}_M = \frac{\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$

$$\vec{k}_M - \vec{G} = \frac{2\pi}{a} \left[\left(\frac{1}{2} - h \right) \hat{x} + \left(\frac{1}{2} - l \right) \hat{y} \right]$$

$$E_{hl}^{(0)}(M) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \left[\left(\frac{1}{2} - h \right)^2 + \left(\frac{1}{2} - l \right)^2 \right]$$

$$E_{hl}^{(0)}(M) = E_0 \left[\left(\frac{1}{2} - h \right)^2 + \left(\frac{1}{2} - l \right)^2 \right]$$

- (iv) (0,3 punts) Justifica la degeneració de la primera banda d'energia en cadascun d'aquests punts.

Solució: La primera banda d'energia correspon sempre als índexs (00), corresponents al vector $\vec{G}_{00} = \vec{0}$.

- Punt X:

$$E_{00}^{(0)}(X) = E_0 \left[\left(\frac{1}{2} - 0 \right)^2 + 0 \right] = \frac{E_0}{4}$$

El mateix valor de l'energia s'obté per als índexs (10), corresponents al vector $\vec{G}_{10} = \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$:

$$E_{10}^{(0)}(X) = E_0 \left[\left(\frac{1}{2} - 1 \right)^2 + 0 \right] = \frac{E_0}{4}$$

Per tant, la degeneració de l'energia en aquest punt és 2.

- Punt M:

$$E_{00}^{(0)}(M) = E_0 \left[\left(\frac{1}{2} - 0 \right)^2 + \left(\frac{1}{2} - 0 \right)^2 \right] = \frac{E_0}{2}$$

El mateix valor de l'energia s'obté per als índexs (10), corresponents al vector $\vec{G}_{10} = \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$, els índexs (01), corresponents al vector $\vec{G}_{01} = \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$, i els índexs (11), corresponents al vector $\vec{G}_{11} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$:

$$E_{10}^{(0)}(M) = E_0 \left[\left(\frac{1}{2} - 1 \right)^2 + \left(\frac{1}{2} - 0 \right)^2 \right] = \frac{E_0}{2}$$

$$E_{01}^{(0)}(M) = E_0 \left[\left(\frac{1}{2} - 0 \right)^2 + \left(\frac{1}{2} - 1 \right)^2 \right] = \frac{E_0}{2}$$

$$E_{11}^{(0)}(M) = E_0 \left[\left(\frac{1}{2} - 1 \right)^2 + \left(\frac{1}{2} - 1 \right)^2 \right] = \frac{E_0}{2}$$

Per tant, la degeneració de l'energia en aquest punt és 4.

- (b) En el model d'electrons feblement lligats i considerant que el desenvolupament en sèrie d'ones planes del potencial és tal que $U_{\vec{G}} = U$ ($U \ll E_F$) per als vectors no nuls més curts de la xarxa recíproca i $U_{\vec{G}} = 0$ per a la resta:

- (i) (1,0 punts) Determina si el potencial trenca la degeneració en els punts X i M i troba els nous valors de l'energia en aquests punts.

Solució:

- Punt X:

Com hem vist, la degeneració en el punt X és 2, de manera que s'ha de resoldre l'equació central,

$$[E_X^{(0)} - E]C_i + \sum_j V_{\vec{G}_j - \vec{G}_i} C_j = 0,$$

on $E_X^{(0)} = E_0/4$, i i j són els estats que donen origen a la degeneració i $C_j \equiv C_{\vec{k}_X - \vec{G}_j}$, amb els vectors \vec{G}_{00} i \vec{G}_{10} que hem donat abans.

En aquest cas, aquests estats corresponen respectivament als vectors de la xarxa recíproca amb índexs (00) i (10). Calculem les diferències d'aquests vectors, $\vec{G}_j - \vec{G}_i$, com a diferències dels seus índexs de Miller:

	(00)	(10)
(00)	(00)	(10)
(10)	($\bar{1}$ 0)	(00)

(Els índexs dels vectors \vec{G}_j es troben a la fila superior i els índexs dels vectors \vec{G}_i es troben a la columna de l'esquerra.)

D'acord amb l'enunciat, només els índexs (10) i ($\bar{1}$ 0) que apareixen a la taula anterior tenen coeficient del potencial no nul, U . Així, si definim $x \equiv [E_X^{(0)} - E]/U$, el sistema d'equacions queda de la manera següent:

$$\begin{pmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{00} \\ C_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Perquè aquest sistema tingui solució no trivial, imposem que el determinant s'anul·li:

$$\begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow x^2 - 1 = 0 \Rightarrow \begin{cases} x_1 = -1 \\ x_2 = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} E_1 = E_X^{(0)} + U \\ E_2 = E_X^{(0)} - U \end{cases}$$

Per tant, el potencial trenca totalment la degeneració en el punt X.

• Punt M:

Com hem vist, la degeneració en el punt M és 4, de manera que s'ha de resoldre l'equació central,

$$[E_M^{(0)} - E]C_i + \sum_j V_{\vec{G}_j - \vec{G}_i} C_j = 0,$$

on $E_M^{(0)} = E_0/2$, i i j són els estats que donen origen a la degeneració i $C_j \equiv C_{\vec{k}_M - \vec{G}_j}$, amb els vectors \vec{G}_{00} , \vec{G}_{10} , \vec{G}_{01} i \vec{G}_{11} que hem donat abans.

En aquest cas, aquests estats corresponen respectivament als vectors de la xarxa recíproca amb índexs (00), (10), (01) i (11). Calculem les diferències d'aquests vectors, $\vec{G}_j - \vec{G}_i$, com a diferències dels seus índexs de Miller:

	(00)	(10)	(01)	(11)
(00)	(00)	(10)	(01)	(11)
(10)	($\bar{1}$ 0)	(00)	($\bar{1}$ 1)	(01)
(01)	(0 $\bar{1}$)	(1 $\bar{1}$)	(00)	(10)
(11)	($\bar{1}$ $\bar{1}$)	(0 $\bar{1}$)	($\bar{1}$ 0)	(00)

(Els índexs dels vectors \vec{G}_j es troben a la fila superior i els índexs dels vectors \vec{G}_i es troben a la columna de l'esquerra.)

D'acord amb l'enunciat, només els índexs (10), ($\bar{1}$ 0), (01) i (0 $\bar{1}$) que apareixen a la taula anterior tenen coeficient del potencial no nul, U . Així, si definim $x \equiv [E_M^{(0)} - E]/U$, el sistema d'equacions queda així:

$$\begin{pmatrix} x & 1 & 1 & 0 \\ 1 & x & 0 & 1 \\ 1 & 0 & x & 1 \\ 0 & 1 & 1 & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{00} \\ C_{10} \\ C_{01} \\ C_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Perquè aquest sistema tingui solució no trivial, cal que el determinant s'anul·li:

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 0 \\ 1 & x & 0 & 1 \\ 1 & 0 & x & 1 \\ 0 & 1 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

$$(x+2) \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & x & 0 & 1 \\ 1 & 0 & x & 1 \\ 1 & 1 & 1 & x \end{vmatrix} = (x+2) \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & x-1 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & x-1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & x \end{vmatrix} =$$

$$= x(x+2) \begin{vmatrix} x-1 & -1 \\ -1 & x-1 \end{vmatrix} = x(x+2)(x^2 - 2x) = x^2(x+2)(x-2) = 0$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} x_{1,2} = 0 \\ x_3 = -2 \\ x_4 = 2 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_{1,2} = E_M^{(0)} \\ E_3 = E_M^{(0)} + 2U \\ E_4 = E_M^{(0)} - 2U \end{array} \right\}$$

Com veiem, el potencial trenca parcialment la degeneració en el punt M, ja que un dels valors té encara degeneració 2.

Els diferents passos seguits en la resolució del determinant són els següents (C vol dir “columna”, F vol dir “fila”):

- Pas 1: $C1 = C1 + C2 + C3 + C4$ i es treu $(x+2)$ factor comú de C1
- Pas 2: $F_i = F_i - F1$ ($i = 2, 3, 4$)
- Pas 3: es desenvolupa el determinant 4x4 per la columna C1 i el determinant 3x3 subsegüent per la fila F3
- Pas 4: es calcula el determinant 2x2 i es resol l'equació resultant

Alternativament, el determinant es pot resoldre tenint en compte la simetria que presenta:

$$\begin{vmatrix} A & B \\ B & A \end{vmatrix} = 0,$$

on

$$A = \begin{pmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

En aquest cas,

$$\begin{vmatrix} A & B \\ B & A \end{vmatrix} = \det(A^2 - B^2) = \det(A+B) \det(A-B) = 0$$

Calculem

$$\det(A+B) = \begin{vmatrix} x+1 & 1 \\ 1 & x+1 \end{vmatrix} = (x+1)^2 - 1 = x^2 + 2x = x(x+2)$$

$$\det(A-B) = \begin{vmatrix} x-1 & 1 \\ 1 & x-1 \end{vmatrix} = (x-1)^2 - 1 = x^2 - 2x = x(x-2)$$

$$\det(A+B) \det(A-B) = x^2(x+2)(x-2) = 0$$

Resolent aquesta equació obtenim els mateixos valors que hem assolit seguint el primer mètode:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{1,2} = 0 \\ x_3 = -2 \\ x_4 = 2 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_{1,2} = E_M^{(0)} \\ E_3 = E_M^{(0)} + 2U \\ E_4 = E_M^{(0)} - 2U \end{array} \right\}$$

(ii) (0,4 punts) Raona si el sòlid és un conductor o un aïllant.

Solució: En el tercer apartat hem vist que, en el model de xarxa buida, es verifica $E_X^{(0)} = E_0/4$ i $E_M^{(0)} = E_0/2 = 2E_X^{(0)}$. D'aquesta manera, el mínim de la

segona banda en el punt X es troba a un valor d'energia que és la meitat del màxim de la primera banda en el punt M i, per tant, el material és un metall per solapament.

Aquesta relació no es veu gaire alterada per l'efecte del potencial, ja que $U \ll E_F$, de manera que, quan aquest trenca la degeneració en els punts X i M i apareixen els nous valors de l'energia, podem continuar suposant que el nou mínim de la segona banda en el punt X, $E_{X,\min,2B} = E_0/4 + U$, és aproximadament la meitat del nou màxim de la primera banda en el punt M, $E_{M,\max,1B} = E_0/2 - 2U$ i, en conseqüència, el material continua sent un metall per solapament.

D'altra banda, anteriorment hem trobat que l'energia de Fermi és

$$E_F = \frac{2\pi\hbar^2}{ma^2}$$

Si emprem la definició d' E_0 donada abans, veiem que podem escriure

$$E_F = \frac{E_0}{\pi} \approx \frac{E_0}{3} \Rightarrow E_X^{(0)} < E_F < E_M^{(0)}$$

D'aquesta manera, l'energia de Fermi es troba entre el mínim de la segona banda en el punt X i el màxim de la primera banda en el punt M, cosa que fa que la segona banda en el punt X comenci a omplir-se abans que la primera banda en el punt M estigui plena del tot. (Això ja ho hem vist al primer apartat, quan vèiem com quedava el vector d'ona de Fermi respecte els punts X i M.) Hi ha, per tant, estats ocupats i estats lliures a les dues bandes i això fa que, si s'aplica un camp elèctric, els electrons es puguin moure i, en conseqüència, el material sigui un conductor.