Universidade do Minho

Problemas de Física da Matéria Condensada – Série 5

1- Considere-se um cristal em que os eletrões que nele circulam estão sujeitos à ação do potencial periódico da rede cuja forma geral é a seguinte:

$$U(\vec{r}) \;=\; \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}}\, e^{i\vec{G}.\vec{r}}\,,$$

Aqui a soma é sobre todos os vetores da rede recíproca, $\vec{G}$. A utilização deste potencial na equação aos valores próprios da energia leva a funções de onda dos eletrões para os estados estacionários da forma,

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \;=\; \sum_{\vec{G}} C(\vec{k}-\vec{G})\, e^{i(\vec{k}-\vec{G}).\vec{r}}\,.$$

Tais funções de onda são pois sobreposições de ondas planas, $e^{i(\vec{k}-\vec{G}).\vec{r}}$, sendo $C(\vec{k}-\vec{G})$ os respetivos coeficientes. Mostre que estas funções de onda obedecem ao Teorema de Bloch e portanto podem ser escritas como,

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \;=\; u_{\vec{k}}(\vec{r})\, e^{i\vec{k}.\vec{r}}\,,$$

onde $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ tem a simetria da rede, tal que,

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) \;=\; u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{T})\,,$$

e $\vec{T}$ é um vetor de translação dessa mesma rede.

2- Para simplificar, considere-se o caso unidimensional em que $\vec{k}$ e $\vec{G}$ são representados por números reais k e G, respetivamente. Os coeficientes $C(k-G)$ das funções de onda da questão anterior obedecem à chamada equação central:

$$(\hbar^2 k^2/2m - \varepsilon)C(k) \;+\; \sum_{G} U_G\, C(k-G) = 0\,.$$

Nesta equação $U_G = U_{-G}$. Considere que $k = \pm G/2$ pertence aos limites da primeira zona de Brillouin e que apenas os coeficientes $C(G/2)$ e $C(-G/2)$ da equação central são finitos. Calcule as duas correspondentes funções de onda e respetivas energias. Relacione os resultados obtidos com o hiato de energia do espetro eletrónico. Justifique a sua resposta.

3- Calcule as duas funções de onda e respetivas energias da questão anterior no caso em que k corresponde à vizinhança de $G/2$ e portanto $(k-G/2)$ é pequeno mas finito, considerando que apenas os coeficientes $C(k)$ e $C(k-G)$ relativos ao vetor da rede recíproca G em causa são finitos. Qual o significado físico das funções de onda e energias obtidas?

4- Num cristal com rede unidimensional os eletrões estão sujeitos ao potencial periódico da rede e têm um espetro de energia $\varepsilon = \varepsilon(k)$ com a simetria $\varepsilon(k) = \varepsilon(-k)$. Este espetro apresenta um hiato de energia Δ nos limites da primeira zona de Brillouin tal que $\Delta \ll \varepsilon_F$. Sabendo que o número de eletrões, N, é igual ao dobro do número de pontos da rede N_a, isto é, $N = 2N_a$, e que a energia eletrónica se pode escrever na forma,

$$E = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \varepsilon(k) f(k)$$

onde

$$f(k) = \frac{1}{1 + e^{[\varepsilon(k) - \mu]/k_B T}}$$

justifique, se necessário com a ajuda de uma figura, porque é que o calor específico é praticamente nulo para temperaturas $T < \Delta / k_B$.

5- Considere que o hiato dos dois espetros de energia obtidos na resolução do problema 3 é pequeno. Chamamos às bandas abaixo e acima desse hiato de energia, banda de valência e banda de condução, respetivamente.

a) Derive para valores de $\tilde{k} = k - G/2$ pequenos expressões simplificadas desses espetros, expandindo até à ordem de $\tilde{k}^2$.

b) Indique qual a expressão das energias E_v e E_c correspondentes à energia máxima da banda de valência e à energia mínima da banda de condução, respetivamente, as quais definem o hiato de energia, $E_g = E_c - E_v$.

c) Indique também qual a expressão das curvaturas e das massas efetivas da banda de valência para energias abaixo e perto de E_v e da banda de condução para energias acima e perto de E_c e escreva as expressões dos espetros de energia das correspondentes bandas em termos das quantidades da alínea b) e de tais massas.

Dados auxiliares

$$\cos(a + b) = \cos(a)\cos(b) - \sin(a)\sin(b) \,,$$

$$\cos x \approx 1 - \frac{1}{2} x^2 + ... \text{ para } x \ll 1$$