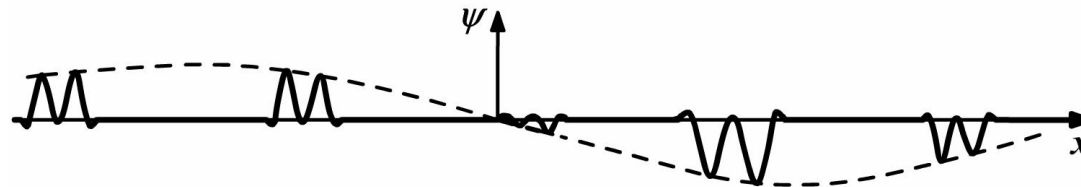


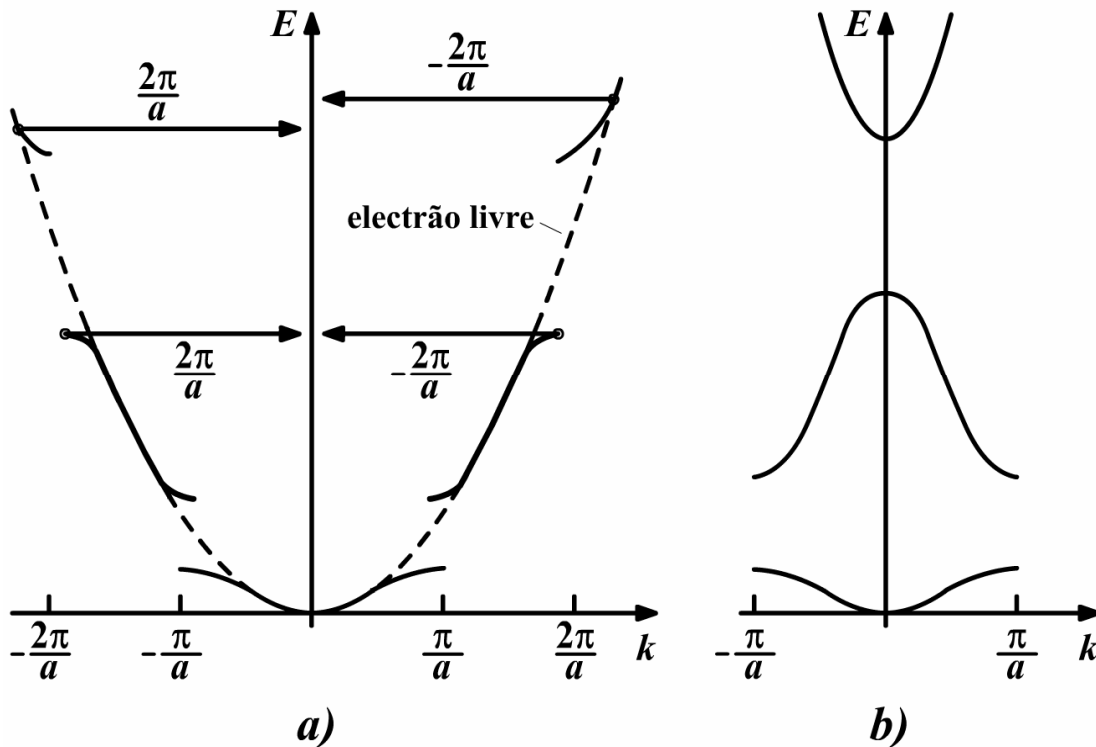
Teorema de Bloch e as suas consequências

	Electrão livre	Electrão num cristal
Números quânticos	3 componentes do momento , variam continuamente , $-\infty < p_x, p_y, p_z < \infty$.	3 componentes do quase-momento , variam de forma quase contínua , $-\infty < p_x, p_y, p_z < \infty$; $\Delta p_x = 2\pi\hbar/L_x$, etc.. É suficiente considerar apenas os estados dentro da 1ª ZB .
Energia	$E_0(\vec{p}) = p^2/2m_0$	$E_0(\vec{p}) = E_0(\vec{p} + \hbar\vec{K})$, uma função periódica no espaço recíproco.
Função de onda	$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(i \frac{\vec{p}}{\hbar} \vec{r}\right)$ (onda plana)	$\psi(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \exp\left(i \frac{\vec{p}}{\hbar} \vec{r}\right); \quad u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a})$ (onda de Bloch)

A função de onda de Bloch (a cheio) é uma função complexa mas periódica, modulada por uma função harmónica (a tracejado).



Aproximação de electrões quase livres



Representação da energia do electrão em função do vector de onda na aproximação dos electrões quase livres, nas representações: estendida (a) e reduzida (b).

Efeito do potencial cristalino no espectro electrónico na vizinhança dos planos de Bragg ($2\vec{k} \cdot \vec{K} + K^2 = 0$):

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{2}(E_0(\vec{k}) + E_0(\vec{k} + \vec{K})) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_0(\vec{k}) - E_0(\vec{k} + \vec{K}))^2 + |V_{\vec{k}, \vec{k} + \vec{K}}|^2}$$

Abrem-se gaps de largura $2|V_{\vec{k}, \vec{k} + \vec{K}}|$.

Aproximação de ligação forte (*tight-binding approximation*)

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j a_j \varphi(\vec{r} - \vec{R}_j);$$

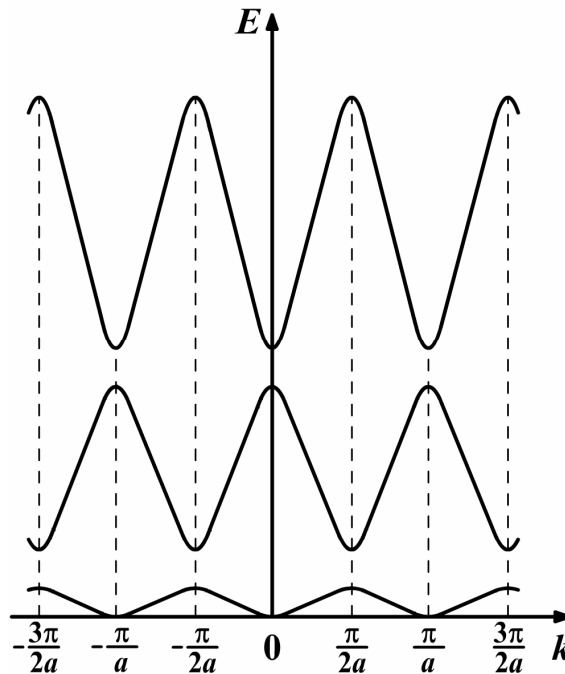
$\varphi_j \equiv \varphi(\vec{r} - \vec{R}_j)$ - orbital atómica

$a_j = e^{i\vec{k}\vec{R}_j}$ - coeficiente correspondente ao átomo situado em \vec{R}_j

$$E(\vec{k}) = \varepsilon + \frac{\sum_j e^{i\vec{k}(\vec{R}_j - \vec{R}_{jj'})} A(\vec{R}_{jj'})}{\sum_j e^{i\vec{k}(\vec{R}_j - \vec{R}_{jj'})} S(\vec{R}_{jj'})};$$

Integrais de sobreposição:

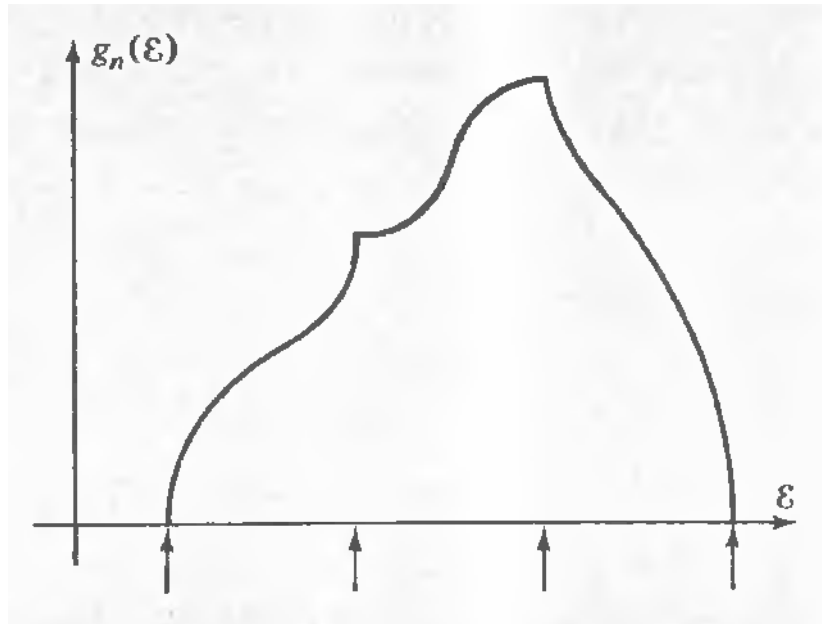
$$A(\vec{R}_{jj'}) = \int (V_{ef} - U_j) \varphi_j \varphi_{j'}^* d\vec{r}; \quad S(\vec{R}_{jj'}) = \int \varphi_j \varphi_{j'}^* d\vec{r}$$



A energia do electrão em função do vector de onda, ao longo de uma das direcções (100), calculada na aproximação de ligação

Densidade de estados numa banda

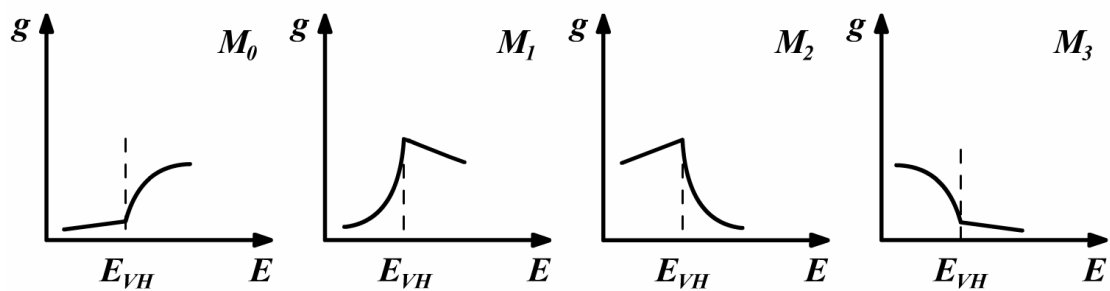
$$g(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\text{superfície } E=\text{const}} \frac{dA}{\left| \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \right|}$$



Na vizinhança dos extremos (espectro parabólico):

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}(m^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_c}$$

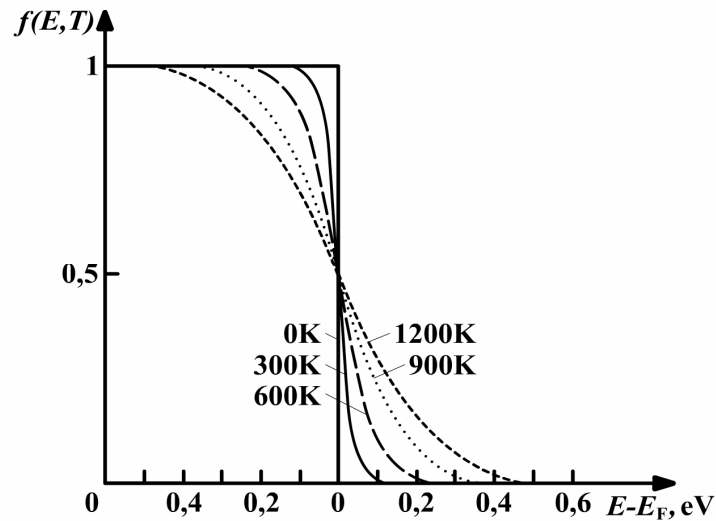
Singularidades de Van Hove:



Ocupação dos níveis electrónicos.

Classificação dos sólidos cristalinos

A função de distribuição de Fermi-Dirac para várias temperaturas



Ocupação dos estados a $T=0$

(BV = banda de valência, BC = banda de condução)

