Física del Estado Sólido - Tema 3 Ejercicio 7

Lucas Pérez Romero

November 2024

Enunciado

La función de ondas electrónica de un sólido cristalino bidimensional con red cristalina cuadrada de parámetro de red a viene mediada por el potencial:

$$U\left(x,y\right) = V_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\left[1+\lambda\cos\left(\frac{6\pi y}{a}\right)\right]$$

a) Comprueba que el potencial es periódico en x e y

b) Obtén los coeficientes $U_{\vec{G}}$ de la expansión del potencial $U\left(x,y\right)$ al realizar un desarrollo en serie de Fourier.

c) Determina la estructura de bandas del sólido cristalino según el modelo del electrón libre (red vacía) y comprueba que existen estados electrónicos degenerados para todo vector $\vec{k}$ del borde de la primera zona de Brillouin.

d) Asumiendo que el potencial es débil, evalúa la energía de los estados electrónicos en $\vec{k} = (\pi/a, 0)$ según el modelo del electrón débilmente ligado.

1 Periodicidad del potencial $U(x,y)$

Para demostrar la periodicidad del potencial propuesto, podemos obtener el período de cada función trigonométrica por la que está compuesto. Así pues, encontramos en $U(x,y)$ dos cosenos:

$$\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right), \cos\left(\frac{6\pi y}{a}\right)$$

como son cosenos, su período corresponderá a la x e y para las cuales la función resulte 1. Por tanto, el argumento de cada coseno tendrá que ser igual a un múltiplo de 2π :

$$\frac{2\pi x}{a} = 2\pi n \qquad\qquad \frac{6\pi y}{a} = 2\pi m$$

$$x = na \qquad\qquad y = \frac{ma}{3}$$

Como son funciones con un período en función de los números enteros n y m podemos concluir en que son funciones periódicas.

2 Coeficientes $U_{\vec{G}}$

Para obtener los coeficientes de la serie de Fourier del potencial existen dos métodos. Resolver la integral que corresponde a la expansión en serie o expandir los cosenos en función de su exponencial compleja. Para este ejercicio, aplicaremos el segundo método. Los cosenos pueden expandirse como:

$$\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) = \frac{e^{i\frac{2\pi x}{a}} + e^{-i\frac{2\pi x}{a}}}{2}$$
$$\cos\left(\frac{6\pi y}{a}\right) = \frac{e^{i\frac{6\pi y}{a}} + e^{-i\frac{6\pi y}{a}}}{2}$$

Sustituyendo en el potencial nos queda:

$$U\left(x,y\right) = V_0 \frac{e^{i\frac{2\pi x}{a}} + e^{-i\frac{2\pi x}{a}}}{2}\left[1 + \lambda \frac{e^{i\frac{6\pi y}{a}} + e^{-i\frac{6\pi y}{a}}}{2}\right]$$

Operando las exponenciales obtenemos la siguiente expresión:

$$U\left(x,y\right) = \frac{V_0}{2}\left[e^{i\frac{2\pi x}{a}} + e^{-i\frac{2\pi x}{a}} + \lambda\left(e^{i\frac{2\pi}{2}(x+3y)} + e^{i\frac{2\pi}{2}(x-3y)} + e^{i\frac{2\pi}{2}(-x+3y)} + e^{i\frac{2\pi}{2}(-x-3y)}\right)\right]$$

Los términos que acompañan a las coordenadas x e y corresponden a los índices de Miller h,j,l del vector $\vec{G}$ y por tanto el potencial se puede escribir en función de sus coeficientes de Fourier de la siguiente forma:

$$U(x,y) = \frac{V_0}{2}\left[U_{1,0} + U_{-1,0} + \lambda\left(U_{1,3} + U_{1,-3} + U_{-1,3} + U_{-1,-3}\right)\right]$$

3 Estructura de Bandas y Estados Degenerados

Para caracterizar la estructura de bandas del sólido debemos sustituir los diferentes vectores $\vec{G}$ del espacio recíproco que hemos obtenido en la ecuación anterior en la siguiente expresión:

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

Banda (1,0):

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

Banda (-1,0):

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(k_x + \frac{2\pi}{a}\right)^2\right]$$

Banda (1 ,3):

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(k_x-\frac{2\pi}{a}\right)^2+\left(k_y-\frac{6\pi}{a}\right)^2\right]$$

Banda (1,-3):

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(k_x-\frac{2\pi}{a}\right)^2+\left(k_y+\frac{6\pi}{a}\right)^2\right]$$

Banda (-1,3):

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(k_x+\frac{2\pi}{a}\right)^2+\left(k_y-\frac{6\pi}{a}\right)^2\right]$$

Banda (-1,-3):

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(k_x+\frac{2\pi}{a}\right)^2+\left(k_y+\frac{6\pi}{a}\right)^2\right]$$

A continuación para encontrar los estados degenerados para el borde de la primera zona de Brillouin debemos sustituir el vector $\vec{k}$ por sus valores en el borde de 1ZB, $\vec{k}=(\frac{\pi}{a},0),\vec{k}=(0,\frac{\pi}{a})y\vec{k}=(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a})$.

Borde $(\frac{\pi}{a},0)$:

Bandas (1,0) , (1,3) y (1,-3):

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

Bandas (-1,0),(-1,3) y (-1,-3):

$$E=\frac{9\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Borde $(-\frac{\pi}{a},0)$:

Bandas (1,0) , (1,3) y (1,-3):

$$E=\frac{9\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Bandas (-1,0),(-1,3) y (-1,-3):

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

Borde $(0, \frac{\pi}{a})$:

Bandas (1,3) y (-1,3):

$$E = \frac{25\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Bandas (1,-3) y (-1,-3):

$$E = \frac{49\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Borde $(0, -\frac{\pi}{a})$:

Bandas (1,3) y (-1,3):

$$E = \frac{49\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Bandas (1,-3) y (-1,-3):

$$E = \frac{25\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

3.1 Diagonales $(\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a})$:

Para cualquiera de las diagonales de la 1ZB no existen estados degenerados.

4 Energía para un Potencial débil

Para evaluar la energía en un potencial débil debemos usar la ecuación de la energía para un potencial a primer orden de perturbación:

$$E = E^{(0)}_{\vec{k}-\vec{G}_1} + \sum \frac{|U_{\vec{G}-\vec{G}_1}|^2}{E^{(0)}_{\vec{k}-\vec{G}_1} - E^{(0)}_{\vec{k}-\vec{G}}}$$

Donde $U_{\vec{G}-\vec{G}_1}$ son para este caso los coeficientes del potencial evaluados en $\vec{k} = (\frac{\pi}{a}, 0)$, las energías $E^{(0)}_{\vec{k}-\vec{G}_1}$ son las energías obtenidas en el apartado anterior y $E^{(0)}_{\vec{k}-\vec{G}}$ es la energía a orden cero de perturbaciones, es decir, la de un electrón libre:

$$E^{(0)}_{\vec{k}-\vec{G}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

A continuación calcularemos $\Delta E_{\vec{k}-\vec{G}}$ para los estados no degenerados:

$$\Delta E_{\vec{k}-\vec{G}} = \frac{|U_{1,0}|^2}{\frac{4\hbar^2\pi^2}{ma^2}} + \frac{|U_{-1,3}|^2}{\frac{4\hbar^2\pi^2}{ma^2}} + \frac{|U_{-1,-3}|^2}{\frac{4\hbar^2\pi^2}{ma^2}} = \lambda^2 \frac{3V_0^2}{2} \frac{1}{\frac{4\hbar^2\pi^2}{ma^2}}$$

Finalmente:

$$\Delta E_{\vec{k}-\vec{G}} = \lambda^2 \frac{3V_0^2}{\frac{8\hbar^2\pi^2}{ma^2}}$$

Para los casos degenerados se resolvería un determinante y con dos resultados, al resolver la ecuación de segundo grado resultante. La variación se obtendría restando ambos. Finalmente se sumaría a la $\Delta E_{\vec{k}-\vec{G}}$ obtenida anteriormente. (No entiendo de qué forma se obtiene la matriz para este caso)