

Física Atómica y Materia Condensada
Semestre 2019-2
Prof: Asaf Paris Mandoki



Tarea 6
Entrega: 04 junio 2019

Ejercicio 1 : Aliasing

15 Puntos

En clase discutimos que para una cadena de masas con una separación de equilibrio a entre ellas, una onda con número de onda k es físicamente equivalente a una onda con número de onda $k + 2\pi/a$. Haz una gráfica donde esta aseveración se ilustre claramente. Graficar en el eje X las posiciones de equilibrio de los átomos y usar el eje Y para indicar su desplazamiento de la posición de equilibrio δx_n . Indicar con puntos las posiciones reales de los átomos y con líneas continuas las dos distintas ondas (de k y $k + 2\pi/a$) que pueden ser representada con el mismo acomodo de masas. **Nota:** El efecto es más claro eligiendo $|k| \leq \frac{\pi}{2a}$.

Ejercicio 2 : Malla recíproca

15 Puntos

Si \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 , son los vectores primitivos de la malla directa muestra que los vectores definidos en clase como

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$
$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$
$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}.$$

son los vectores primitivos para la malla recíproca. Es decir, muestra que satisfacen

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}.$$

Además, muestra que con esta condición se satisface que un vector de la malla directa

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3,$$

donde n_1 , n_2 y n_3 son enteros, y un vector de la malla recíproca

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3,$$

satisfacen la relación

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$$

siempre y cuando m_1, m_2 y m_3 sean enteros.

Ejercicio 3 : Funciones periódicas

30 Puntos

Considera los puntos de una malla $\{\mathbf{R}\}$ y una función periódica $\rho(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x} + \mathbf{R})$. Muestra que ρ puede escribirse como

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}},$$

donde la suma es sobre todos los puntos de la malla recíproca $\{\mathbf{G}\}$.

Ejercicio 4 : Preguntas conceptuales

20 Puntos

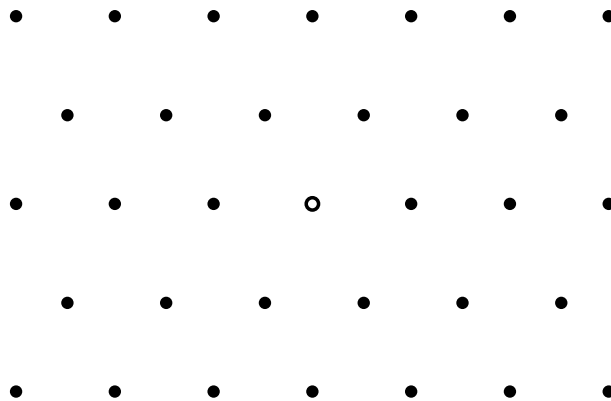
- ¿Qué es la primer zona de Brillouin y por qué es importante?
- De acuerdo a la teoría de bandas ¿Cómo se comporta un material cristalino que tiene un electrón por celda unitaria?
- En clase discutimos las propiedades eléctricas para materiales con uno o dos electrones de valencia por celda unitaria. ¿Qué pasa para cuatro electrones como es el caso de un cristal de carbono (diamante)?
- Investiga y describe en términos de teoría de bandas cómo funciona un diodo y un transistor NPN.

Ejercicio 5 : Celda de Wigner-Seitz

20 Puntos

La celda de Wigner-Seitz es una manera para construir celdas primitivas unitarias. Normalmente no se utiliza en redes de espacio directo sino más bien en el espacio recíproco para encontrar la forma de la primer zona de Brillouin en redes de más de una dimensión.

- a. Investiga y escribe la definición de la celda de Wigner-Seitz.
- b. Dibuja la forma de la primer zona de Brillouin (i.e. la celda de Wigner-Seitz) para la siguiente red bidimensional recíproca (el punto blanco corresponda a $\mathbf{k} = 0$):



Ejercicio 6 : Electrón fuertemente ligado a cadena de iones**+100 Puntos**

Este ejercicio vale 100 puntos extra. Es opcional pero conveniente si no sacaste 10 en todas tus tareas anteriores.

En clase estudiamos orbitales moleculares construyéndolos a partir de orbitales atómicos (ver sección ion H_2^+ del capítulo 7 de las notas). Se puede utilizar un método análogo para estudiar construir los orbitales de un electrón confinado a una cadena de átomos. A esta descripción se le conoce como *modelo fuertemente ligado* o en inglés *tight binding model*. En este ejercicio deberás encontrar la relación de dispersión asociada a este modelo.

Considera una cadena de N iones donde la distancia entre vecinos es a y donde denotamos un orbital del estado base centrado en el n -ésimo átomo por $|n\rangle$, con $n = 1 \dots N$ (puedes considerar condiciones de frontera periódicas y además que $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$). Supón que

$$\langle n|H|m\rangle = \epsilon\delta_{n,m} - t(\delta_{n-1,m} + \delta_{n+1,m}).$$

Es decir, supón que la energía de estos orbitales es ϵ y que el elemento de matriz para que el electrón salte a un vecino es $-t$.

- a) Suponiendo que el orbital $|\psi\rangle$ del electrón en toda la cadena se puede escribir como combinación lineal de los orbitales fuertemente ligados

$$|\psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle,$$

escribe la ecuación de Schrödinger $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ y multiplícala por $\langle m|$ de ambos lados para obtener la ecuación para la m -ésima componente.

- b) Si supones que el eigenvector tiene la forma

$$\phi_n = \frac{e^{ikna}}{\sqrt{N}},$$

encuentra la relación de dispersión de $E(k)$.

- c) Cerca del mínimo de la banda, el electrón obedece una relación de dispersión de la forma $E(k) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, donde m^* es una masa efectiva. ¿Cuánto vale esta masa efectiva en términos de los parámetros del problema? ¿Cuál es la masa efectiva cerca de los máximos de la banda?
- d) Escribe un programa para diagonalizar numéricamente el Hamiltoniano en función de t . Grafica los eigenvalores obtenidos en función de t para un número de átomos $N > 40$. Puedes suponer que $\epsilon = 0$ ¿Qué pasaría si usas $\epsilon \neq 0$? Explica por qué comporta así la gráfica en términos de “cruces evitados” (avoided crossings).