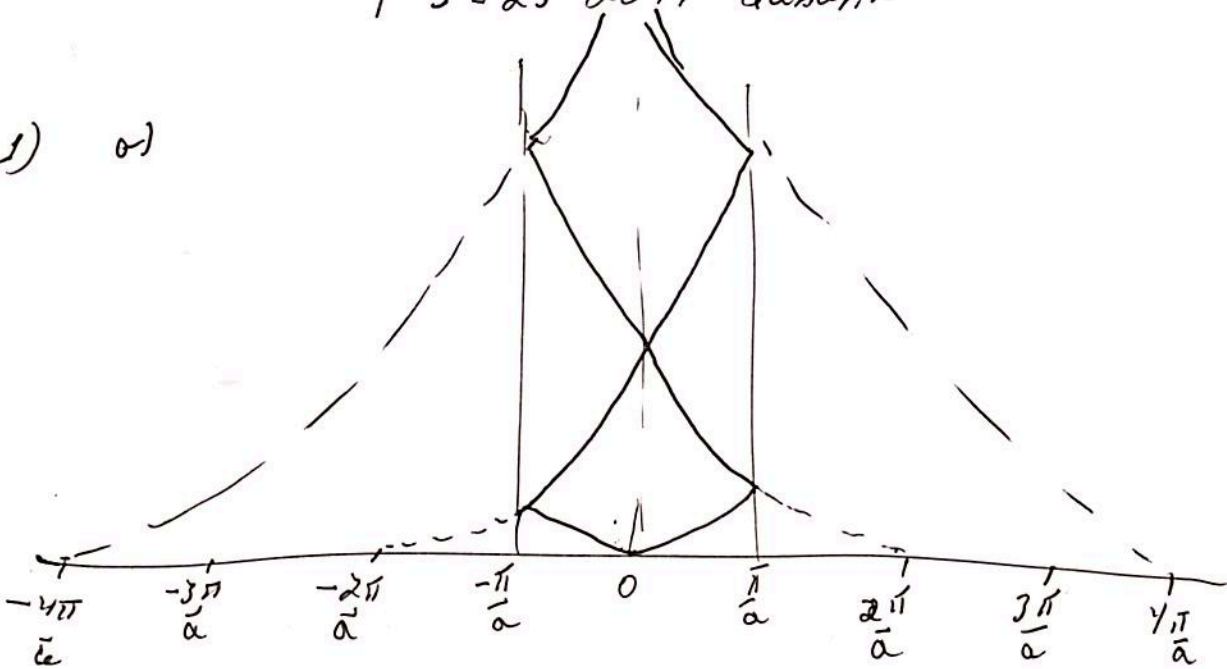


1) a)



$$b) \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (k - G_1)^2 - E \right] C_{k-G_1} + \underbrace{V_{G_2-G_1}}_V C_{k-G_2} = 0$$

$$\underbrace{\left[ \frac{\hbar^2}{2m} (k - G_2)^2 - E \right]}_{E_{G_2}} C_{k-G_2} + \underbrace{V_{G_1-G_2}}_{V^*} C_{k-G_1} = 0$$

$$\begin{vmatrix} E_{G_1} - E & V_G \\ V_G^* & E_{G_2} - E \end{vmatrix} = 0$$

$$(E_{G_1} - E)(E_{G_2} - E) - V_G^2 = 0$$

$$E^2 - (E_{G_1} + E_{G_2})E + E_{G_1}E_{G_2} - V_G^2 = 0$$

$$E = \frac{1}{2} (E_{G_1} + E_{G_2}) \pm \frac{1}{2} \left[ (E_{G_1} + E_{G_2})^2 - 4E_{G_1}E_{G_2} + 4V_G^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{2} (E_{G_1} + E_{G_2}) \pm \frac{1}{2} \left[ (E_{G_1} - E_{G_2})^2 + 4V_G^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$E_{gap} = \Delta E = E_+ - E_- = 2|U_G| \quad \text{with } G = G_2 - G_1$$

$$U_G = \frac{1}{a} \int_0^a dx V(x) e^{-iGx}$$

c)  $V(x) = V_2 \gamma (b < x < a)$

$$U_G = \frac{1}{a} \int_b^a dx V_2 e^{-iGx} = \frac{V_2}{a} \frac{e^{-iGx}}{-iG} \Big|_b^a$$

$$= \frac{V_2}{a} \frac{(e^{-iGa} - e^{-iGb})}{(-iG)}$$

$$E_g = 2|U_G| = \frac{2V_2}{aG} [2(1 - \cos G(a-b))]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{2V_2}{aG} [4 \sin^2 \frac{G}{2} (a-b)]^{\frac{1}{2}} = \frac{4V_2}{aG} |\sin \frac{G}{2} (a-b)|$$

$$G = m \frac{2\pi}{a} - n \frac{2\pi}{a} = (m-n) \frac{2\pi}{a} \rightarrow \frac{2\pi}{a} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\Rightarrow E_g = \frac{4V_2}{2\pi n} |\sin \frac{\pi n}{a} (a-b)| = \frac{2V_2}{\pi n} |\sin \frac{\pi n}{a} (a-b)|$$

$$n = 1, 2, 3.$$

$$d) d_1) b = a$$

$$E_g = \frac{2V_2}{\pi n} \left| \sin \frac{\pi a}{2} n \right| = \frac{2V_2}{\pi n} \left| \sin \frac{\pi n}{2} \right|$$

$$E_g(G_1) = \frac{2V_2}{\pi} \quad (\text{gap em } \frac{\pi}{a})$$

$$E_g(G_2) = 0 \quad (\text{gap em } k=0)$$

$$E_g(G_3) = \frac{2V_2}{3\pi} \quad (\text{gap em } k = \frac{\pi}{a})$$

$$d_2) V(x) = aV_0 \delta(x-a)$$

$$U_n = \frac{1}{a} \int_0^a dx V_0 a \delta(x-a) = V_0$$

$$E_g = 2V_0 \quad \forall n=1, 2, 3, \dots$$

No primeiro caso temos um elemento de matriz  $U_n$  que vai com  $\frac{1}{n}$  em uma série  $n=1, 3, \dots$ .

Temos gaps nulos alternadamente.

No segundo caso, limite extremo do caso geral, todos os  $U_n$ 's têm o mesmo valor.

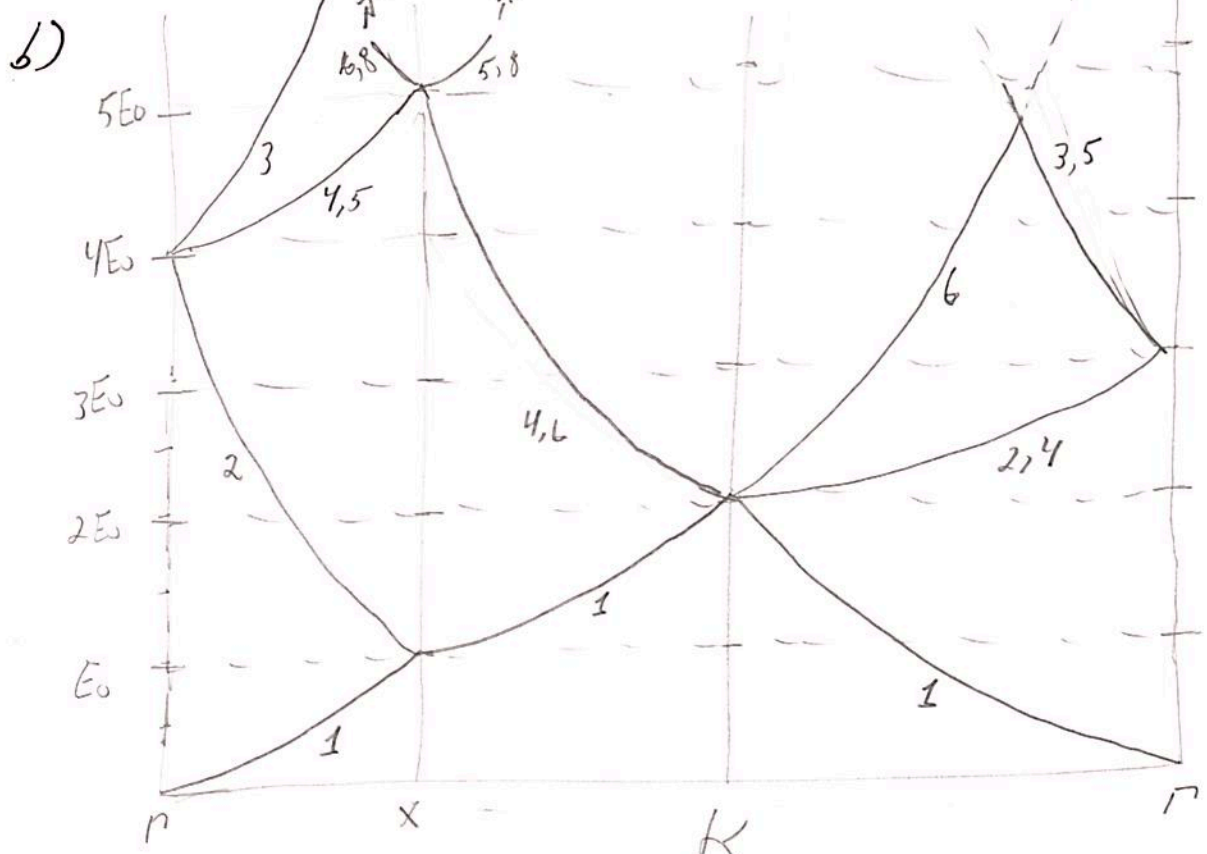
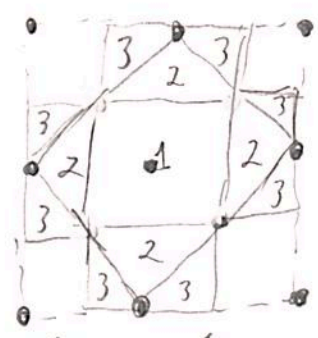
O resultado "parece" estranho e não permite ~~ver~~ identificar um comportamento claro. Os resultados são qualitativamente distintos.

A suspeita deve recair sobre os outros termos na soma de  $\sum_{q_i}$  que foram desprezados. Eles não são pequenos!

Na verdade, a solução é analítica (ver o livro de Kittel). Não há gaps nulos nem constantes. Além do mais, gaps nulos e  $\Rightarrow$  bandas que ~~se~~ <sup>se</sup> cruzam) não são esperados em uma dimensão.

Definitivamente, não podemos ~~excluir~~ excluir os demais termos acoplados. O modelo de 2 bandas é insuficiente. Sempre tem que ter cuidado com transformadas de Fourier de funções abruptas!!!

2) a) Construção de Wigner-Seitz



$$\begin{aligned}
 \frac{2m}{\hbar^2} E(\vec{k}) = & \underbrace{(k_x^2 + k_y^2)}_{1,2,3} + \underbrace{\left[ \left( -\frac{2\pi}{a} + k_x \right)^2 + k_y^2 \right]}_{2,3} + \underbrace{\left[ \left( \frac{2\pi}{a} + k_x \right)^2 + k_y^2 \right]}_{2} \\
 & + \underbrace{\left[ k_x^2 + \left( k_y - \frac{2\pi}{a} \right)^2 \right]}_{2} + \underbrace{\left[ k_x^2 + \left( k_y + \frac{2\pi}{a} \right)^2 \right]}_{2} \\
 & + \underbrace{\left[ \left( \frac{2\pi}{a} + k_x \right)^2 + \left( \frac{2\pi}{a} + k_y \right)^2 \right]}_{2,3} + \underbrace{\left[ \left( \frac{2\pi}{a} + k_x \right)^2 + \left( \frac{2\pi}{a} - k_y \right)^2 \right]}_{3} \\
 & + \underbrace{\left[ \left( \frac{2\pi}{a} - k_x \right)^2 + \left( \frac{2\pi}{a} + k_y \right)^2 \right]}_{3} + \underbrace{\left[ \left( \frac{2\pi}{a} - k_x \right)^2 + \left( \frac{2\pi}{a} - k_y \right)^2 \right]}_{3}
 \end{aligned}$$

c) Três zonas de Brillouin

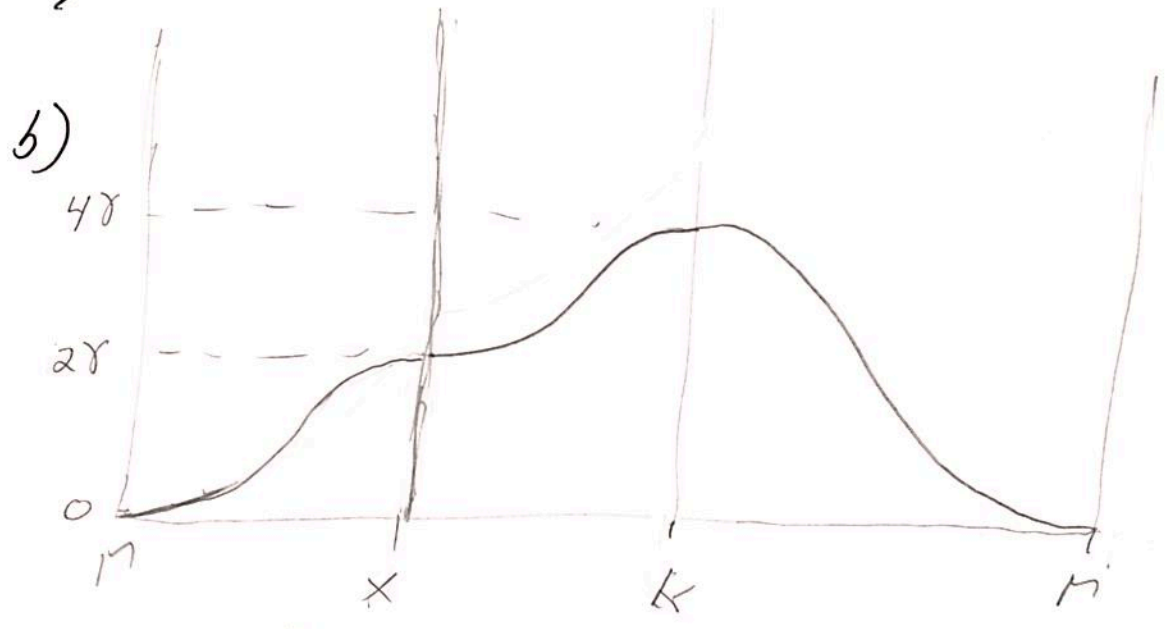
$$3) \text{ a) } \psi(x, y) = \sum_{\substack{m=-\infty \\ m \neq 0}}^{+\infty} \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{+\infty} \psi_{at}(x-na, y-ma)$$

$$- B = \langle \psi_s(x, y) | \psi(x, y) | \psi_s(x, y) \rangle$$

$$- \delta_x = 2 \langle \psi_s(x, y) | \psi(x, y) | \psi_s(x+a, y) \rangle$$

$$- \delta_y = 2 \langle \psi_s(x, y) | \psi(x, y) | \psi_s(x, y+a) \rangle$$

$\frac{\delta_x}{\delta_y} = 1$  por simetria (rede quadrada, sru para a t. -s)



$$\delta = \delta_x = \delta_y$$

c) A banda descreve a primeira banda no que seria a projeção da primeira z.B. Se demais bandas, consequências dos desdobramentos das outras z.B.'s exige a inclusão dos outros estados orbitais atômicos.