

Lista de Exercícios VI

1. (problema 7.1, Ibach&Luth) Resolva a equação de Schrödinger para o potencial,

$$V(x, y, z) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ 0, & x \geq 0 \end{cases}$$

e calcule a densidade de carga,

$$\rho(x, y, z) = \frac{e}{V} \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} |\psi_k|^2$$

onde o valor máximo de k é determinado pela energia de Fermi, ε_F . Esquematize $\rho(x)$ e discuta o resultado (oscilações de Friedel). Considere os casos para um metal típico, com densidade eletrônica de 10^{22} cm^{-3} , e para um semicondutor com densidade de 10^{16} cm^{-3} .

2. (problema 2, cap. 7, Ibach&Luth) (a) Um gás de elétrons bidimensional é descrito no espaço recíproco por uma rede bidimensional cuja zona de Brillouin (primitiva) é um quadrado.
(a) Mostre que a energia cinética de um elétron livre no canto da primeira zona de Brillouin é maior por um fator dois do que um elétron com vetor k no meio da borda da zona de Brillouin.
(b) Qual é o fator equivalente para uma rede primitiva em três dimensões?
(c) Mostre que pode ocorrer superposição de banda mesmo para uma rede bidimensional. Para isso, esquematize as seguintes relações de dispersão para o caso de elétrons livres perturbados por um potencial periódico fraco:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k_y) \text{ para } k_x &= 0 \\ \varepsilon(k_y) \text{ para } k_x &= \pi/a \\ \varepsilon(k) \text{ para } k_x &= k_y \end{aligned}$$

3. (problema 4, cap. 7, Ibach&Luth) Considere os pontos na vizinhança de um mínimo da banda eletrônica para valores suficientemente pequenos de k , tais que $\varepsilon(\vec{k})$ possa ser escrito em uma aproximação parabólica,

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon_c + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{2m_x} + \frac{k_y^2}{2m_y} + \frac{k_z^2}{2m_z} \right)$$

onde m_x, m_y, m_z são constantes positivas. Mostre que a densidade de estados $D(\varepsilon)$ é proporcional a $(\varepsilon - \varepsilon_c)^{1/2}$ em torno do ponto crítico $\varepsilon_c(\vec{k} = 0)$.
(b) Considere a densidade de estados na vizinhança de um ponto de sela,

onde

$$\varepsilon_c(\vec{k}) = \varepsilon_c + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{2m_x} + \frac{k_y^2}{2m_y} - \frac{k_z^2}{2m_z} \right)$$

onde m_x, m_y, m_z são positivos. Mostre que a densidade de estados próxima de ε_c , pode ser escrita como

$$D(\varepsilon) \propto \begin{cases} \text{constante para } \varepsilon > \varepsilon_c \\ D_0 - C(\varepsilon - \varepsilon_c)^{1/2} \text{ para } \varepsilon < \varepsilon_c \end{cases}$$

Esquematize $D(\varepsilon)$ na zinhança de (a) um ponto de mínimo e (b) de um ponto de sela de $\varepsilon(\vec{k})$.

4. (problema 1, cap. 8, Marder) (a) Considere uma rede quadrada bidimensional com constante de rede a e

$$V(\vec{r}) = -4V_0 \cos \frac{2\pi x}{a} \cos \frac{2\pi y}{a}$$

Encontre a transformada de Fourier $V_{\vec{k}}$.

(b) Para $\vec{k}_1 = (\pi/a, \pi/a)$, $c_{\vec{k}_1}$ acoplará fortemente três componentes de ψ , $c_{\vec{k}_2}, \dots, c_{\vec{k}_4}$. Quais são esses vetores $\vec{k}_2, \dots, \vec{k}_4$? Identifique os valores de \vec{G} que devem ser incluídos na teoria de perturbação para encontrar $c_{\vec{k}_1}, \dots, c_{\vec{k}_4}$ em primeira ordem em V_0 .

(c) Calcule $V_{\vec{G}}$ para esses valores de \vec{G} . Mostre que $V_{\vec{G}} = V_{-\vec{G}}$ é diferente de zero apenas para um valor de \vec{G} . A teoria de perturbação pode ser reduzida a um subespaço envolvendo apenas $c_{\vec{k}_1}$ e um outro valor de $c_{\vec{k}_i}$.

(d) Escreva a equação de Schrödinger nesse subespaço.

(e) Resolva o sistema de equações 2x2 e encontre as duas energias de Bloch indexadas por \vec{k}_1 .

(f) Esquematize $\varepsilon(\vec{k})$ para as duas bandas de menor energia ao longo da direção $\Gamma - T$, e indique o tamanho do gap.

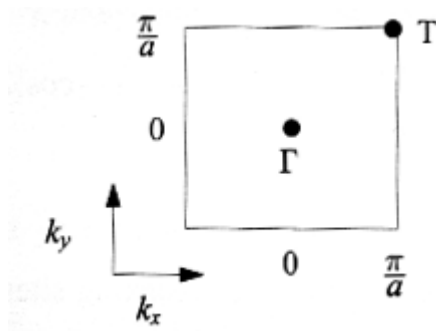


Figure 1: Primeira zona de Brillouin da rede quadrada.