

F888 - Física do Estado Sólido - PROVA 3 - 2o. semestre 2009

1-Estrutura de banda (4,0 pts). Considere uma rede monoatômica quadrada (direções x e y) com parâmetro de rede a . Considere os orbitais s e d , escritos na forma $\Phi_s(\vec{r}) \equiv \phi_s(r)$ e $\Phi_d(\vec{r}) \equiv xy\phi_d(r)$ (observe que $\phi_s(r)$ e $\phi_d(r)$ têm simetria circular).

(a) Calcule a dispersão das bandas de energia para esse sistema na aproximação do elétron fortemente ligado levando em consideração apenas interação entre os primeiros vizinhos.

(b) Faça um esquema da banda incluindo a dispersão nas direções ao longo da direção $(\Gamma - M)$, e ao longo da direção $(M - X)$, onde $\Gamma \equiv (0,0)$, $M \equiv (0, \pi/a)$, $X \equiv (\pi/a, \pi/a)$. Ou seja, faça o gráfico $\varepsilon(\vec{k}) \times \Gamma - M - X$. Coloque o valor das energias (no eixo de energias) explicitamente para cada banda nos pontos Γ, M, X .

(c) Discuta o que aconteceria se você incluísse a interação com os segundos vizinhos. Indique em um esquema de banda semelhante ao do item (b) (por favor, em um gráfico ao lado). (Não precisa explicitar os valores das energias nesse gráfico, apenas o que muda qualitativamente).

Sugestões: Para sistemas gerais, a expressão se escreve,

$$\varepsilon(\vec{k}) = \sum_{nm} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_m)} \int d\vec{r} \Phi^*(\vec{r} - \vec{R}_m) [H_{at} + V(\vec{r} - \vec{R}_n)] \Phi(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

onde $\Phi(\vec{r} - \vec{R}_n) = \sum_j a_j \phi_j(\vec{r} - \vec{R}_n)$, e os a_j 's são parâmetros variacionais.

Para bandas de orbitais desacoplados, a expressão acima resume-se a:

$$\varepsilon_i(\vec{k}) = \varepsilon_i^{(0)} + \text{sign}(A_i) |A_i| + \text{sign}(B_i) |B_i| \sum_m e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_m)}$$

$$|A_i| = \left| \int d\vec{r} \phi_i(\vec{r}) V(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) \right|$$

$$|B_i| = \left| \int d\vec{r} \phi_i(\vec{r}) V(\vec{r}) \phi_i(\vec{r} - \vec{R}_m) \right|$$

$$V(\vec{r}) = \sum_{m \neq 0} v_{at}(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

$$H_{at} \phi_i(\vec{r}) = \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + v_{at}(\vec{r}) \right] \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i^{(0)} \phi_i(\vec{r})$$

Obs.: Todas as somas ou referências aos \vec{R}_m referem-se a primeiros vizinhos. Para efeitos do

cálculo e gráfico siga as seguintes instruções: a) defina os sinais das integrais claramente; b) assumo que a integral entre as “partes” das funções de onde mais próximas dominam o “sinal” da integral; c) justifique os sinais utilizado nas integrais; d) $\varepsilon_s^{(0)}, |A_s|, |B_s| \gg \varepsilon_d^{(0)}, |A_d|, |B_d|$. Outras integrais que possam ser necessárias para calcular a estrutura de banda podem ser definidas livremente.

2-Transporte (3,0 pts.). Considere uma rede monoatômica quadrada (direções x e y) com parâmetro de rede a . Considere o orbital s na forma $\Phi_s(\vec{r}) \equiv \phi_s(r)$. A estrutura de banda originada desse orbital é descrita por $\varepsilon_s(\vec{k}) = \varepsilon_s^{(0)} - A_s - B_s[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$, com A_i e B_i ambos positivos.

(a) Calcule o tensor de massa efetiva e a condutividade para valores de \vec{k} pequenos próximos do ponto $\Gamma \equiv (0, 0)$.

(b) Calcule o tensor de massa efetiva e a condutividade para valores de \vec{k} pequenos próximos do ponto $X \equiv (\pi/a, \pi/a)$.

Utilize,

$$\bar{\sigma} = ne^2 \tau \overline{\left(\frac{1}{m^*}\right)}$$

onde as componentes do tensor $\overline{\left(\frac{1}{m^*}\right)}$ são,

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}\right), \text{ onde } i, j = x, y$$

e,

$$\overline{m^*} \equiv \overline{\left(\frac{1}{m^*}\right)}^{-1}$$

onde a barra indica um tensor de segunda ordem em um sistema bidimensional expresso por uma matriz 2x2. Compare os resultados de (a) e (b) e comente.

3-Óptica (3,0 pts.). Considere uma rede monoatômica quadrada (direções x e y) com parâmetro de rede a . Considere os orbitais s_1 e s_2 , que têm a forma $\phi_{s_1}(r)$ e $\phi_{s_2}(r)$. Assuma que esses orbitais dão origem a bandas desacopladas (não interessa como!) descritas pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{s_1}(\vec{k}) &= 2B_1 - B_1[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \\ \varepsilon_{s_2}(\vec{k}) &= \varepsilon_g - 2B_2 + B_2[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \end{aligned}$$

e as funções de onda dos elétrons de cada banda são,

$$\psi_{s1,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \phi_{s1}(|\vec{r} - \vec{R}_n|)$$

$$\psi_{s2,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \phi_{s2}(|\vec{r} - \vec{R}_n|)$$

Vamos assumir que a banda $s1$ está completamente cheia e a banda $s2$ completamente vazia no estado fundamental.

(a) Calcule a *força de oscilador* para a contribuição em $\epsilon_2(\omega)$ das transições entre as bandas $s1$ e $s2$, onde a força de oscilador é dada por,

$$f_{21} = \frac{2m\varepsilon g}{\hbar^2} |x_{12}|$$

onde m é a massa do elétron (não confundir com a massa efetiva), e,

$$|x_{12}| = \int d\vec{r} \psi_{s1,\vec{k}}(\vec{r}) x \psi_{s2,\vec{k}'}(\vec{r})$$

e considere apenas integrais entre funções de onda atômicas no mesmo sítio (despreze os outros termos).

Atenção:

(b) A parte imaginária da função dielétrica se escreve na forma,

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi e^2 n}{m} \sum_{ji} f_{ji} \frac{\pi}{2\omega_{ji}} \{ \delta[\hbar\omega - (\varepsilon_j - \varepsilon_i)] - \delta[\hbar\omega + (\varepsilon_j - \varepsilon_i)] \}$$

e é responsável pela absorção. Comente, baseado no resultado de (a), o que você espera para a absorção óptica entre a banda $s1$ e a banda $s2$.