F-888 – Lista 3

(Ibach & Lüth, Cap. 7)

19) Seja um elétron em um cristal sujeito à ação de um potencial periódico causado pela presença dos núcleos e dos demais elétrons. Demonstre o teorema de Bloch para os autoestados do Hamiltoniano, i.e. , $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$, onde $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ é uma função periódica $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3)=u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$.

20) Mostre que os autoestados de um elétron em um potencial cristalino satisfazem $\psi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r})=\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ e que os autovalores satisfazem $E(\boldsymbol{k})=E(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})$. Note que, devido a estas condições de periodicidade no espaço recíproco, as relações de dispersão $E(\boldsymbol{k})$ só precisam ser descritas dentro da primeira zona de Brillouin.

21) Considere um elétron cujas autofunções do Hamiltoniano satisfazem as condições de periodicidade exigidas pelo teorema de Bloch, mas cujo potencial de interação periódico $V(\boldsymbol{r})=\sum_{\boldsymbol{G}} V_{\boldsymbol{G}} e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}}$ é suficientemente fraco para poder ser tratado como uma perturbação (aproximação do elétron quase-livre). Mostre esquematicamente em um gráfico para E(k) como as bandas e os gaps de energia são formados quando $\boldsymbol{k}^2\approx|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}|^2$, comparando com o limite do elétron livre. Qual a relação entre o gap de energia nas fronteiras da zona de Brillouin e a componente $V_{\boldsymbol{G}}$ da expansão de $V(\boldsymbol{r})$ em série de Fourier acima ?

22) Mostre que, dentro da aproximação de tight binding, as bandas de energia derivadas de um nível atômico E_i podem ser descritas como $E_i(\boldsymbol{k})\approx E_i-A-B\sum_{\boldsymbol{m}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_n-\boldsymbol{r}_m)}$. Explicite as constantes A e B em função de integrais envolvendo os orbitais atômicos e comente sobre o significado físico deste resultado.

23) Desmembre explicitamente a relação de dispersão $E_i(\boldsymbol{k})$ obtida na questão anterior para (a) uma rede cúbica simples, (b) uma rede cúbica de corpo centrado, e (c) uma rede cúbica de face centrada.

24) Ibach & Lüth, problema 7.2

25) Ibach & Lüth, problema 7.5