

Estructura de la Materia 2

Clase 7 - Teoría

Docentes

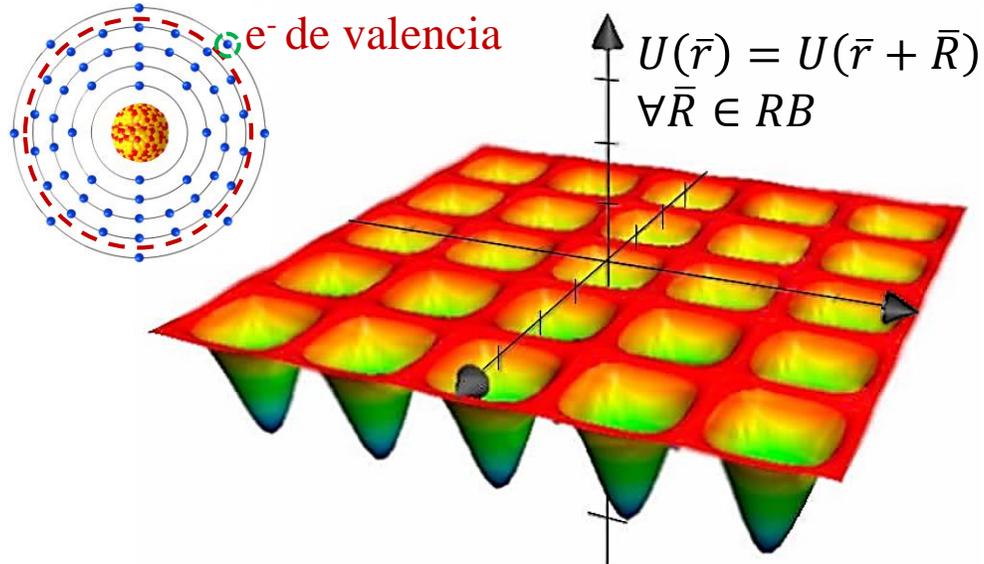
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Adán Garros

Departamento de Física, FCEN, UBA – Primer Cuatrimestre, 2025

Web: <https://asignaturas.df.uba.ar/edlm2-grinblat/>

Repaso

Potencial periódico



Teorema de Bloch y condiciones periódicas de contorno

Los autoestados de $\mathcal{H} = K + U$ pueden elegirse como:

$$\psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \quad \text{con} \quad u_{n\bar{k}}(\vec{r} + \bar{R}) = u_{n\bar{k}}(\vec{r})$$

$\in 1ZB$
 Índice de banda

$$\rightarrow \psi_{n\bar{k}}(\vec{r} + \bar{R}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}} \psi_{n\bar{k}}(\vec{r})$$

$$\bar{k} = \frac{m_1}{N_1} \bar{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \bar{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \bar{b}_3, \quad m_i \in \mathbb{Z}, \quad \bar{k} \in 1ZB$$

$$\psi(\vec{r} + N_i \bar{a}_i) = \psi(\vec{r}); \quad i = 1, 2, 3, \quad N_1 N_2 N_3 = N$$

Consecuencias del teorema de Bloch

$$\begin{cases} \psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \sum_{\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}} e^{i(\bar{k}-\bar{K})\cdot\vec{r}} \\ (\varepsilon - \underbrace{\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0}_{\frac{\hbar^2}{2m}(\bar{k}-\bar{K})^2}) c_{\bar{k}-\bar{K}} = \sum_{\bar{K}'} U_{\bar{K}'-\bar{K}} c_{\bar{k}-\bar{K}'} \end{cases}$$

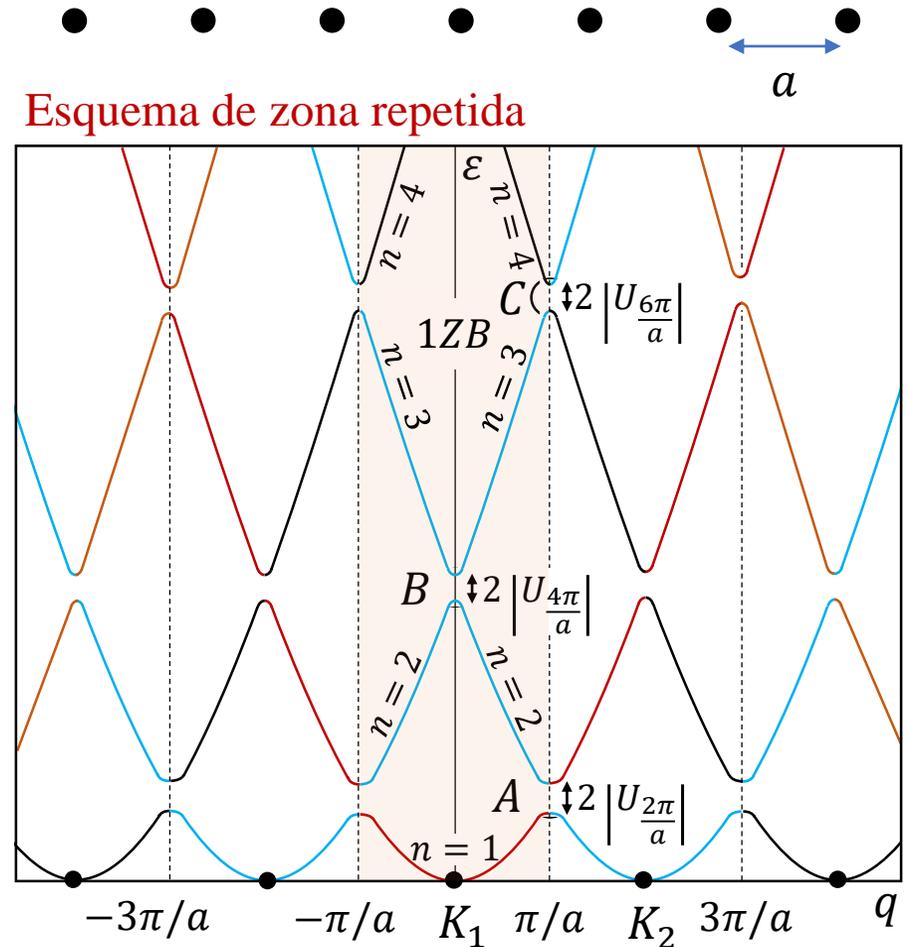
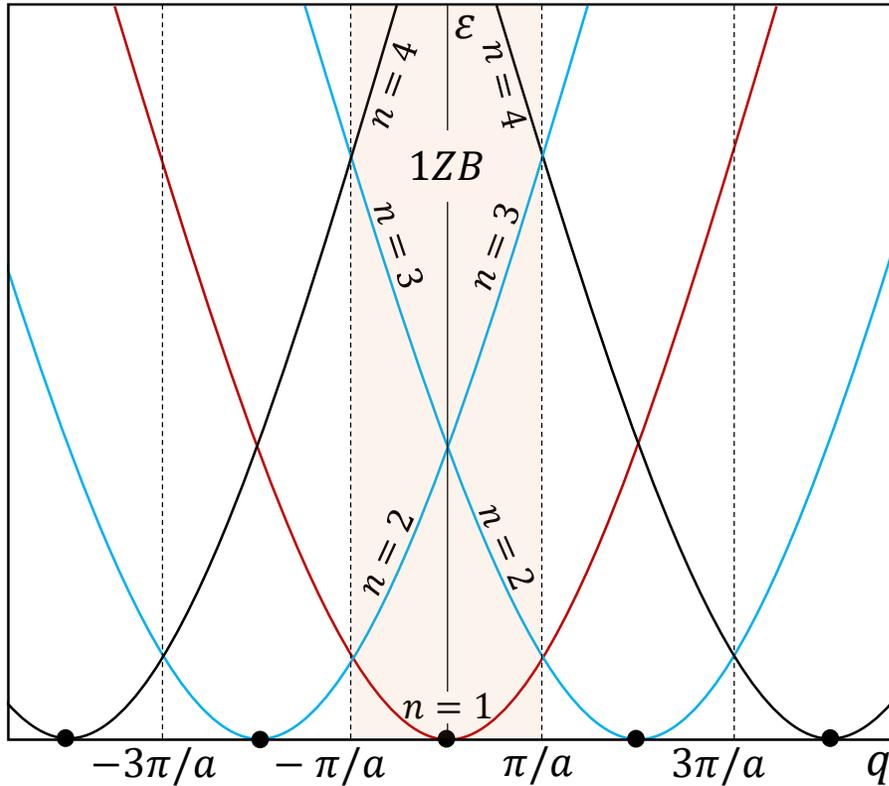
$$\overbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2i\bar{k}\nabla - k^2) + U(\vec{r}) \right]}^{\mathcal{H}_{\bar{k}}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) = \varepsilon u_{n\bar{k}}(\vec{r})$$

$$\rightarrow \varepsilon_{n\bar{k}} = \langle \psi_{n\bar{k}} | \mathcal{H} | \psi_{n\bar{k}} \rangle = \langle u_{n\bar{k}} | \mathcal{H}_{\bar{k}} | u_{n\bar{k}} \rangle$$

$$\bar{v}_n(\bar{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\bar{k}} \varepsilon_n(\bar{k}) \quad (\text{velocidad media de un e- de Bloch en el estado } n, \bar{k})$$

Electrones en un potencial periódico débil

Potencial débil: RB 1D

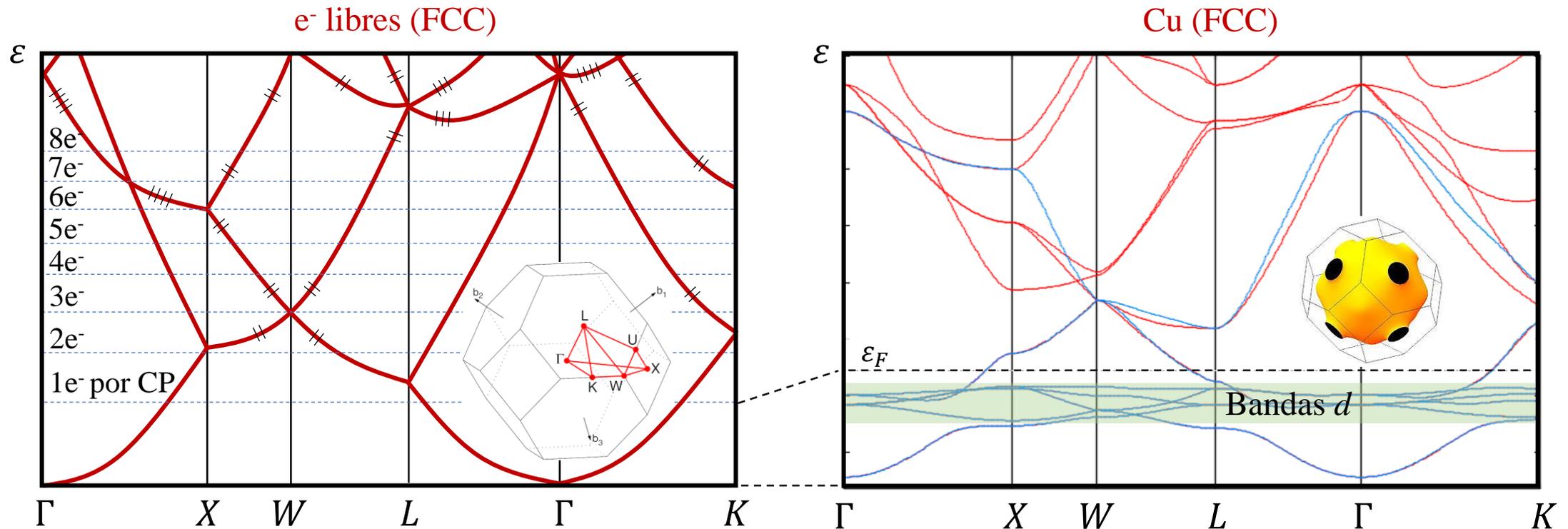


Electrones en un potencial periódico débil

Relación de dispersión para redes en 3D

En el caso de e^- libres, se grafican los valores de $\varepsilon_{\bar{k}-\bar{K}}^0 = \frac{\hbar^2}{2m} (\bar{k} - \bar{K})^2$ para recorridos específicos de \bar{k} dentro de la 1ZB, considerando vectores \bar{K} en torno al origen.

Ejemplo: e^- libres en red FCC y comparación con el caso del Cu



Resumen

- Potencial periódico débil
- Ejemplo en red 1D y red cuadrada
- Potencial periódico débil cerca de un plano de Bragg
- Comportamiento eléctrico
- Relación de dispersión para redes en 3D
- Densidad de estados de electrones

