

Práctica 6: Electrones en un potencial periódico - Teoría de bandas

Nearly Free Electrons

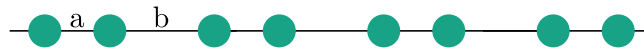
1. Modelo unidimensional:

Analizar la estructura de bandas de un sistema unidimensional sometido a un potencial periódico débil. Considerar en particular el potencial $U(x) = U_0 \cos(Gx)$, donde $G = 2\pi/a$.

- Estudiar la relación de dispersión en la región del primer plano de Bragg (en realidad es un punto) y encontrar el valor del gap.
- ¿Cuánto vale el gap en los otros planos de Bragg?
- Encontrar la forma de las funciones de onda en el borde de la banda.
- Dibujar esquemáticamente la densidad de estados electrónicos $g(E)$.

2. NFE en una red con motivo:

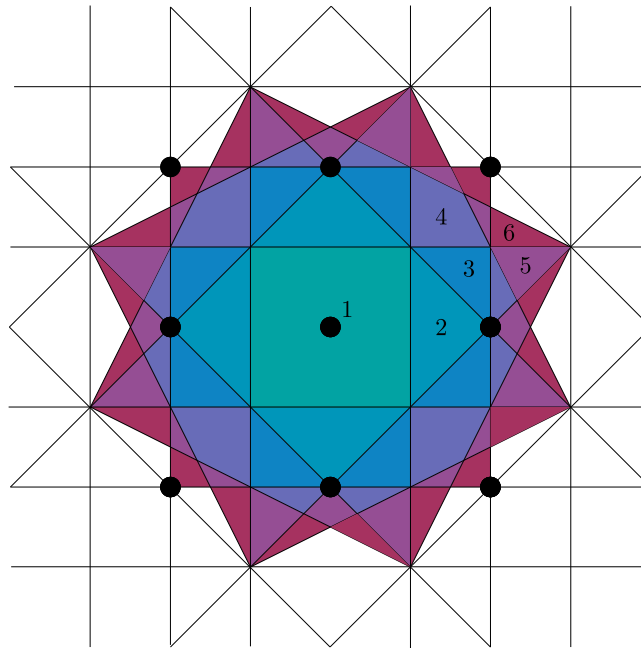
Cuando se considera una red monoatómica con base, tales como la red del diamante o la hcp, se prueba que las componentes de Fourier del potencial periódico V_G son proporcionales al Factor de Estructura Geométrico S_G de dicha estructura (Ashcroft, Cap. 9, pag. 166). Dada la estructura cristalina unidimensional mostrada en la figura:



- Graficar las bandas de energía en un esquema de zona reducida en el límite de electrones libres.
- Estudiar en qué casos (para qué valores de a y b) las componentes de Fourier V_G del potencial pueden anularse.
- Graficar las bandas de energía del sistema, suponiendo un potencial periódico débil, para los siguientes casos:
 - $b = 2a$
 - $b = a$
- Ubicar el nivel de Fermi en todos los esquemas anteriores si cada átomo aporta 1 electrón de conducción. Indicar en cada caso si el sistema es aislador o conductor.

3. Red cuadrada bidimensional:

- Dibujar las primeras zonas de Brillouin para una red cuadrada bidimensional de lado a . Comparar con la figura.
- Dibujar sobre este esquema la circunferencia correspondiente al nivel de Fermi para los casos de 1, 2, 3, y 4 electrones por celda.
- Dibujar en cada caso la superficie de Fermi en un esquema de zona reducida.



- (d) Analizar la estructura de bandas graficando la relación de dispersión cuando el vector de onda varía entre Γ y X, entre X y W, y entre W y γ . Prestar especialmente atención al punto W. Marcar el nivel de Fermi para 1, 2, 3, y 4 electrones.
- (e) Introducir un potencial periódico débil y analizar cualitativamente las modificaciones a la estructura de bandas y a las superficies de Fermi.
- (f) Considerar en particular el potencial: $U(x, y) = -U_0(\cos(Gx) + \cos(Gy))$, con $G = 2\pi/a$. Encontrar el valor del gap en el punto W.
4. Repita el problema 2 para una red hexagonal bidimensional.

Tight Binding

5. Modelo unidimensional:

Considere una cadena lineal de átomos separados por una distancia a . El hamiltoniano del sistema está caracterizado por términos diagonales E_0 y no diagonales entre vecinos próximo $-t$.

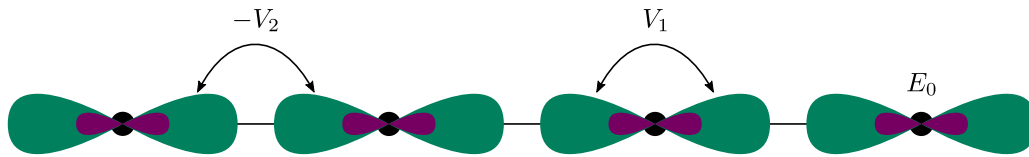
- (a) Calcule la estructura de bandas (considerando un sólo orbital por sitio).
- (b) Calcule la densidad de estados.
- (c) Calcule la energía de Fermi si cada átomo aporta 1 electrón de conducción.
6. Estructura de bandas en 3 dimensiones
- Calcule la relación de dispersión $E(k)$ utilizando un modelo de tight binding con un orbital por sitio para una red cúbica simple, una fcc, y una bcc. Dibuje a lo largo de un camino.

7. Red cuadrada

Calcule la relación de dispersión $E(\mathbf{k})$ utilizando un modelo tight binding con un orbital por sitio para una red cuadrada bidimensional. Dibuje a lo largo de un camino. Compare con la siguiente figura:

8. Semiconductor unidimensional

Considere el modelo tight binding representado en la figura con dos orbitales híbridos sp (ver nota) por átomo:

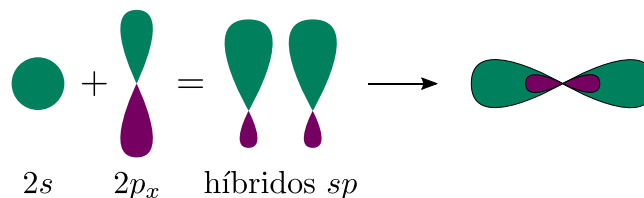


donde:

- $E_0 = (E_p + E_s)/2$.
- $-V_2 =$ hopping entre celdas.
- $V_1 = (E_p - E_s)/2$ hopping dentro de una celda.
- $E_s =$ energía del orbital atómico s.
- $E_p =$ energía del orbital atómico p.

- (a) Calcular la relación de dispersión y graficar las bandas de energía. Calcular el valor de gap de energía y el ancho de las bandas.
- (b) ¿Cómo se comporta el sistema si cada sitio aporta 2 electrones?
- (c) Esquematizar la densidad de estados $g(E)$.
- (d) Analizar e interpretar cuáles son los estados si $V_2 = 0$.
- (e) Analizar e interpretar cuáles son los estados si $V_2 = V_1$. ¿Cómo se comporta el sistema en este caso si cada sitio aporta 2 electrones?

Nota: Orbitales híbridos del carbono



La hibridación consiste en una mezcla de orbitales puros en un estado excitado para formar orbitales híbridos equivalente con orientaciones determinadas en el espacio.

Hibridación sp

Los átomos que se hibridan ponen en juego un orbital s y uno p, para dar dos orbitales híbridos sp colineales que forman un ángulo de 180° . Los otros dos orbitales p no experimentan ningún tipo de perturbación en su configuración.

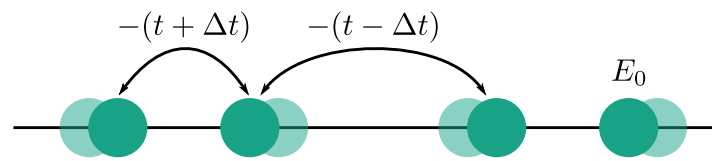
9. Cadena diatómica

Considerar un compuesto con dos tipos de átomos A y B dispuestos alternadamente en una cadena lineal. Considere un modelo tight binding con un orbital por sitio, y hopping a primeros vecinos ($-t$). La energía de sitio es E_A para el átomo A, y E_B para el átomo B. Calcule la relación de dispersión y grafique las bandas de energía. Ubicar el nivel de Fermi suponiendo que cada átomo aporta 1 electrón de conducción. Analizar los límites $|E_A - E_B| \ll t$ y $|E_A - E_B| \gg t$.

10. Transición metal-aislante

Considerar un modelo unidimensional para un metal donde hay un átomo por celda y cada átomo aporta un electrón de conducción.

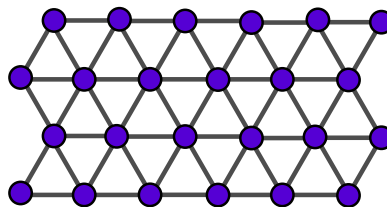
- Calcular la estructura de bandas del sistema tomando un modelo tight binding con energía de sitio E_0 y hopping entre primeros vecinos $-t$. Ubicar el nivel de Fermi.
- Ahora el sistema sufre una transición de fase estructural, donde los átomos se juntan de a pares (dimerización). Considerando que la energía de sitio no se modifica y que el hopping cambia de acuerdo a la figura:



- Calcular la estructura de bandas del sistema en la fase dimerizada.
- Graficar la densidad de estados en las dos fases y compararlas.
- ¿Qué ocurre con el sistema respecto a sus propiedades de conducción?

11. Red hexagonal plana

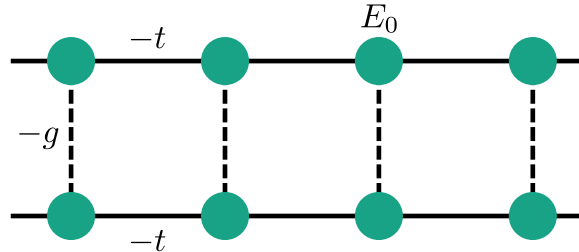
Calcular la relación de dispersión para una red hexagonal plana (ver figura) utilizando un modelo tight binding con un orbital por sitio. El hamiltoniano del sistema está caracterizado por términos diagonales E_0 y no diagonales entre primeros vecinos $-t$. Dibujar la relación de dispersión a lo largo de un camino (elegirlo) dentro de la primera zona de Brillouin.



12. Ladder (escalera)

Considere un estructura pseudo-unidimensional en forma de ladder (escalera) tal como se muestra en la figura. Esta estructura es relevante para describir las propiedades magnéticas de diversos óxidos. La estructura electrónica de la ladder puede describirse

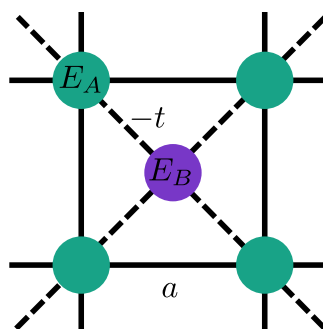
mediante un modelo tight binding con un orbital por átomo, energía de sitio E_0 , hopping a primeros vecinos $-t$ entre átomos de una misma cadena y hopping a primeros vecinos $-g$ entre átomos de cadenas diferentes (peldaños).



- (a) Calcular y graficar la estructura de bandas.
- (b) Determinar las funciones de onda de todos los estados electrónicos del sistema. ¿Hay algo que le resulte familiar? ¿Las puede interpretar de alguna manera?
- (c) Suponga que cada átomo aporta 1 electrón de conducción. Esquematice la estructura de bandas, ubique el nivel de Fermi, y clasifique al sistema de acuerdo a sus propiedades de conducción en los siguientes casos particulares:
 - i. $t = 0$ (¿cómo interpreta este caso?)
 - ii. $g \ll t$
 - iii. $g = 1.9t$
 - iv. $g = 3t$

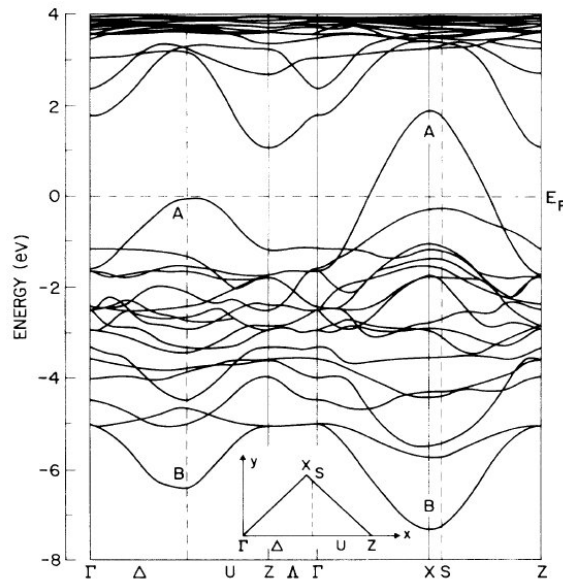
13. Estructura tipo CsCl en 2D

- (a) Calcular la estructura de bandas de un cristal bidimensional utilizando el modelo de tight binding mostrado en la figura. Dibuje las bandas a lo largo de direcciones de simetría.
- (b) Si los átomos A aportan dos electrones de conducción y los átomos B aportan sólo un electrón de conducción, ubique esquemáticamente el nivel de Fermi

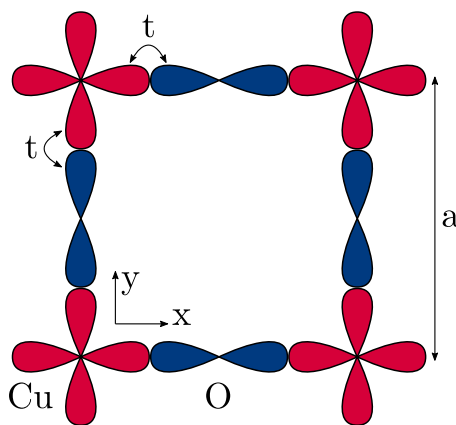


14. Superconductores de alta T_c

La siguiente figura corresponde a la estructura de bandas del superconductor de alta temperatura crítica La_2CuO_4 (¡A no asustarse!)



A pesar de su complejidad se ha determinado que las bandas más importantes de este material, entre las cuáles se encuentra la que cruza el nivel de Fermi, pueden ser reproducidas por un simple modelo tight binding para los planos de CuO_2 . Este modelo sólo incluye los orbitales 3d del Cu y 2p del O. El hamiltoniano del sistema está entonces caracterizado por términos diagonales E_d y E_p para orbitales del Cu y del O, respectivamente (tomar $E_d > E_p$); y hopping a primeros vecinos t .



- (a) Calcular la estructura de bandas y graficar a lo largo de la dirección $\Gamma - X - W - \Gamma$.
- (b) Ubicar el nivel de Fermi en el gráfico anterior suponiendo que cada átomo de Cu aporta 1 electrón de conducción y cada átomo de O aporta 2 electrones de conducción.
- (c) Analizar qué le ocurre cualitativamente a las bandas si se añade un término de hopping a primeros vecinos t' entre átomos de oxígeno.