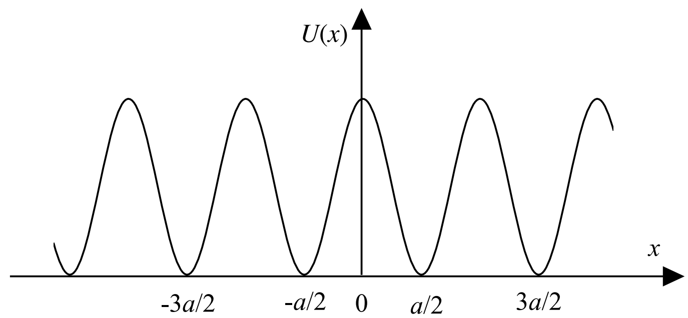
Estado Sólido
Posgrado en Ciencias Físicas 2012-2
Cecilia Noguez
7 de febrero de 2012
TAREA 1

1. Considera un potencial periódico en una dimensión $U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v(x-na)$, como se muestra en la figura. El potencial es la superposición de barreras de potencial $v(x)$ de ancho a centrados



en $x = \pm na$, que además cumple con que $v(x) = v(-x)$. La estructura de bandas se puede escribir en términos de las propiedades del electrón en presencia de una sola barrera $v(x)$. Es decir, la solución a la ecuacón de Schrödinger con energía E se puede escribir como la combinación lineal de la función de onda incidiendo por la izquierda de solo una barrera, $\Psi_i(x)$, y de la correspondiende función de onda incidente por la derecha, $\Psi_d(x)$, es decir:

$$\Psi(x) = A\Psi_i(x) + B\Psi_d(x), \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}.$$

(a) Considerando que la función de onda satisface el teorema de Bloch, $\Psi(x+a) = e^{ika}\Psi(x)$ y su derivada $\Psi'(x+a) = e^{ika}\Psi'(x)$, encuentra la siguiente relación de dispersión entre la energía y el vector de onda k del electrón en el cristal:

$$\cos ka = \frac{t^2 - r^2}{2t} e^{iKa} + \frac{1}{2t} e^{-iKa}, \quad E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m},$$

donde r y t son los coeficientes de transmisión y reflexión dadas por la amplitud de probabilidad de que el electrón atraviese la barrera de potencial y dependen del vector de onda K del electrón incidente.

¿Cómo es la relación de dispersión para los electrones libres, es decir cuando $v \equiv 0$?

(b) Encuentra los niveles de energía E permitidos considerando que $t = |t|e^{i\rho}$, $r = \pm i|r|e^{i\rho}$, donde ρ es real y especifica el cambio de fase de la onda transmitida relativa a la onda incidente. Además $1 = |r|^2 + |t|^2$.

(c) Demuestra que las energías de las bandas prohibidas se hacen muy angostas para barreras muy débiles. Es decir, cuando $|t| \approx 1$, $|r| \approx 0$, $\rho \approx 0$ se encuentra que:

$$E_{\text{gap}} \approx 2\pi n \frac{\hbar^2}{2ma^2}|r|.$$

(d) Ahora considera el caso opuesto, cuando la barrera es muy fuerte tal que $|t| \approx 0$ y $|r| \approx 1$. Demuestra que en ancho de las bandas permitidas son muy angostas con anchos:

$$E_{\max} - E_{\min} = O(|t|).$$

(e) Considera el caso concreto en que las barreras tienen la forma $v(x) = g\delta(x)$, donde $\delta(x)$ es la función delta de Dirac. Demuestra que en este caso:

$$\cot\rho = \frac{\hbar^2 K}{mg}, \quad |t| = \cos\rho\,.$$

2. El átomo de carbóno en su enlace en estructura diamante pose una estructura tetrahedral formada por 4 funciones de onda llamadas $\psi(2sp^3)$, que son combinaciones lineales de las 4 funciones de onda atómicas hidrogenoides (ϕ_i), $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$, dadas por $\psi_i(2sp^3) = \sum_j a_{ij}\phi_j$, en donde

$$\phi_1(2s) = ce^{-\rho}(1-\rho), \qquad \phi_2(2p_z) = ce^{-\rho}\rho\cos\theta, \tag{1}$$

$$\phi_3(2p_x) = ce^{-\rho}\rho\sin\theta\cos\varphi, \quad \phi_3(2p_y) = ce^{-\rho}\rho\sin\theta\sin\varphi, \tag{2}$$

en donde $\rho = Zr/2a_0$, y a_0 es el radio de Bohr.

(a) ¿Qué tipo de enlace es el que se sugiere y porqué?

(b) Haz una gráfica de ψ en función de θ y φ, con ρ constante para los orbitales $2s$ y $2p_x$.

(c) Demuestra que si $\psi(2sp^3)$ es ortonormal, entonces se encuentra que

$$\sum_j a_{ij}a_{kj} = \delta_{ik} \quad \text{con} \quad a_{ij} = a_{ij}^*. \tag{3}$$

(d) ¿Cuáles son las 4 posibles funciones de onda $\psi_i(2sp^3)$ que satisfacen la condición de ortonormalidad con $a_{ij} = 1/2$ o $a_{ij} = -1/2$?

(e) Demuestra que los máximos de $|\psi_i(2sp^3)|^2$ se encuentran localizados en las direcciones de los enlaces entre átomos vecinos.

(f) Demuestra que la densidad electrónica $\sum_i |\psi_i(2sp^3)|^2$ tiene simetría esférica.

3. Un modelo cuántico sencillo para la interacción de van der Waals se obtiene considerando dos osciladores armónicos idénticos (dipolos oscilantes) separados por una distancia R. Cada dipolo consiste de un par de cargas iguales y opuestas con separaciones x_1 y x_2. Además hay una fuerza restauradora f que actua entre el par de dipolos.

(a) Escribe el Hamiltionano, H_0 de los dos osciladores sin interactuar tomando en cuenta la interacción electrostática.

(b) Calcula la energía de interacción, H_1, entre las 4 cargas.

(c) Considerando que $x_1 \ll R$ y $x_2 \ll R$ aproxima el Hamiltoniano de interacción, tal que:

$$H_1 \approx -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}.$$

(d) Demuestra que la siguiente transformación de coordenadas (coordenadas normales) desacopla el Hamiltoniano total en $H = H_0 + H_1$ con una contribución simétrica y otra antisimétrica.

$$x_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad x_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)\,.$$

(e) Calcula las frecuencias ω_s y ω_a de los modos de vibración. Evalua estas frecuencias haciendo una expansión en series de Taylor en $2e^2/(\beta R^3)$ y trunca la expansión a segundo orden.

(f) La energía del sistema completo se puede expresar como

$$U = -\frac{1}{2}\hbar(\omega_s + \omega_a)\,.$$

Deriva la expresión de la energía para osciladores aislados y muestra que esta decrece como c/R^6 cuando hay interacción.

4. Problema dejado en clase el jueves 2 de febrero.

Fecha de entrega: 16 de febrero 2012 antes de la clase