TAREA # 10

Física atómica, molecular y materia condensada

22 de mayo de 2010

1. Encontrar las funciones de onda de los niveles de energía de una caja de lado L. La condición de contorno de la función de onda es periódica, es decir, $\Phi(x, y, z) = \Phi(x + L, y + L, z + L)$. Encontrar la expresión de los niveles de energía y explica cual es la degeneración de cada nivel. Cuál es el número de funciones de onda independientes que tienen la misma energía?

2. Ahora puedes suponer que la caja es un cristal que tiene una red primitiva no ortogonal con vectores **a**, **b** y **c**. Aplicando las condicones a la frontera periódicas a la superficie del paralelepípedo con arista $N_1\mathbf{a}$, $N_2\mathbf{b}$ y $N_3\mathbf{c}$, demuestra que la función de onda para electrones libres es de la forma:
$$\Phi = D \exp\left[i \left(\frac{l}{N_1}\mathbf{A} + \frac{m}{N_2}\mathbf{B} + \frac{n}{N_3}\mathbf{C}) \cdot \mathbf{r} \right) \right] \tag{1}$$
donde **A**, **B** y **C** son los vectores de la red recíproca del cristal, l, m y n son numéros enteros al igual que N_1, N_2 y N_3. Encuentra la constate de normalización D y la expresión para los niveles de energía.

3. Considera una cadena de $2N$ atómos que se encuentran a una distancia a_0 uno de otro. La función de onda del estado electrónico de un átmo aislado con energía E_i es $\phi_i(x - na_0)$ en el átomo localizado en na_0. Bajo que condiciones se obtiene una función de onda de un solo electrón deslocalizado sobre la cadena que se aproxima como la combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO)
$$\Psi(x) = \sum_{n=-N}^{n=N} c_n \phi_i(x - na_0).$$
Qué valor tienen los coeficientes c_n cuando $N \to \infty$ para que $\Psi(x)$ sea una función de Bloch?

4. Considera los puntos cerca del mínimo de una banda electrónica para valores de k muy pequenos, tales que la energía de la banda se puede escribir dentro de una aproximación parabólica como
$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right),$$
donde m_x, m_y y m_z son constantes positivas. Demuestra que la densidad de estados es prporcional a $(E - E_c)^{1/2}$ cerca del punto crítico $E_c(k = 0)$.