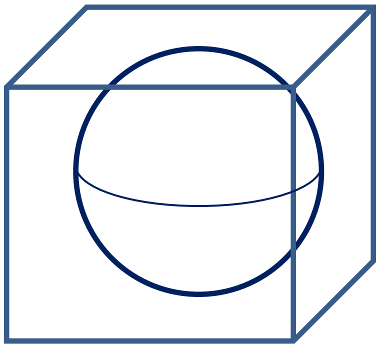
Física del Estado Sólido I **(Grado en Ingeniería de Materiales)** **Curso 2016-17**

Tema 4. Electrones en un potencial periódico. Teorema de Bloch y condiciones de contorno. Esquema de zonas reducidas y bandas de energía. Aproximación a la teoría del enlace débil. Comportamiento de los electrones lejos y en las proximidades de la frontera de zona de Brillouin. Aproximación a la teoría del enlace fuerte. Tipos de sólidos según la estructura de bandas.

Problemas

1) a) Determinar, a partir de la definición de vector de onda de Bloch, el número de orbitales disponibles en una zona de Brillouin de un cristal cúbico simple con parámetro de red a = 4 Å y que tiene forma de cubo de lado 1 cm. **b)** Calcular el volumen del espacio recíproco que se asigna a cada vector de onda y compararlo con el de una celda primitiva del espacio recíproco.

2) Utilizando la aproximación de electrones libres, determinar el número de electrones libres por átomo, Z, que hay en un cristal con red cúbica simple cuando la esfera de Fermi tiene un diámetro, $2k_F$, igual al lado de la celda primitiva unidad en la red recíproca, a^* (es decir, cuando la esfera es tangente a la frontera de la primera zona de Brillouin, ver figura).



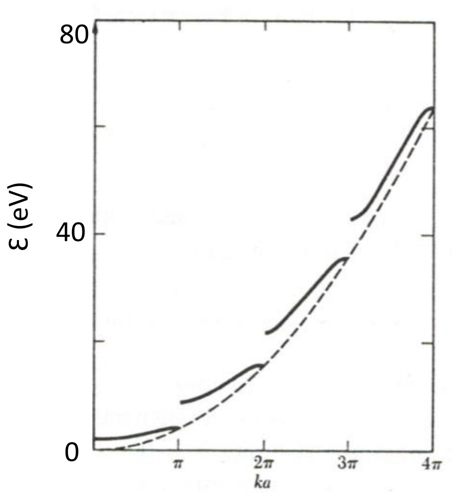
3) Demostrar que si se cumple el Teorema de Bloch en la forma

$$\psi_k(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, u_k(\vec{r}), \quad con \quad u_k(\vec{r}+\vec{R}) = u_k(\vec{r})$$

también debe cumplirse $\psi_k(\vec{r}+\vec{R}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\, \psi_k(\vec{r})$

4) Si el cristal del ejercicio **1)** tuviera una base simple de átomos con configuración electrónica [gas noble](n)d^{10}(n+1)s^1 ¿cuántos orbitales estarán ocupados en la banda ocupada de mayor energía? ¿se comportará como un aislante o como un metal?

5) Tenemos una red cristalina lineal, con base simple, cuya relación de dispersión está representada en la figura de abajo. Suponiendo que cada átomo aporta 7 electrones. ¿Cuál es la energía, en eV, del nivel de Fermi? ¿Se comportará como metal o como aislante a T = 0 K?



6) En la aproximación de enlace fuerte se cumple:

$$E(\vec{k}) = E_0 - \alpha - \gamma \cdot \sum_{\text{más próx}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$$

donde $\vec{R}$ son los vectores que van de un átomo a su vecino más próximo. Determinar la anchura de la banda de energía en función de γ para una red cúbica simple de parámetro a.

7) Un cierto metal hipotético, de estructura cúbica simple y parámetro de red a = 3 Å, posee una relación de dispersión para electrones en la banda de conducción que obedece a la ecuación

$$E(k) = 5 - 0{,}84\cos(ka) \quad (\text{en } eV)$$

a) Representar en una gráfica la relación de dispersión a lo largo de la dirección [100]
b) Determinar la energía de Fermi, suponiendo que el metal es monovalente. Comparar con el valor que se obtendría para electrones libres

8) La densidad de estados para una red unidimensional es de la forma

$$D(E)\ \alpha\ \frac{1}{dE/dk}$$

Hallar la expresión analítica de D(Ɛ) que se obtiene a partir de la relación de dispersión dada en el ejercicio anterior y representarla gráficamente.