

# PGF5110 - Estado Sólido I

## Lista de exercícios 2 - 2017 (entrega em 15/10/2017)

**1. Zona de Brillouin da rede quadrada** - Na Tarefa 5 foram estudados os pontos  $\mathbf{q}$  dentro da primeira zona de Brillouin (1ZB) da rede quadrada. A primeira figura abaixo mostra esta 1ZB e denota alguns pontos de alta simetria de acordo com a nomenclatura padrão: o ponto  $\Gamma$  corresponde a  $\mathbf{q}_\Gamma = (0,0)$ , o ponto  $X$  é  $\mathbf{q}_X = (\pm\frac{\pi}{a}, 0)$  e o ponto  $M$  representa  $\mathbf{q}_M = (\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a})$ .

O objetivo desde exercício é ajudar você a entender como as bandas de energia são mostradas em gráficos como o da segunda figura.

Considere o caso de elétrons livres, com dispersão  $E^{(j)}(\mathbf{q}) = \hbar^2(\mathbf{q} - \mathbf{G})^2/2m^*$ .

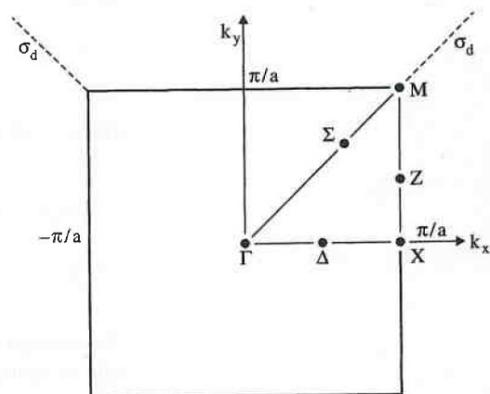
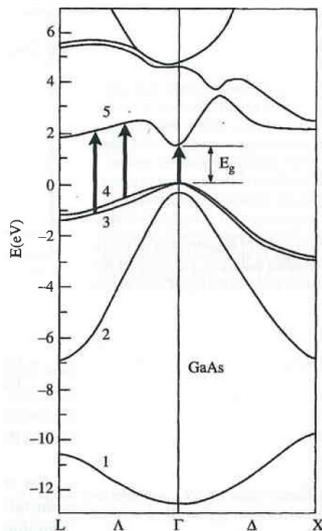


Fig. 2.2 A plan view of the Brillouin zone of a square lattice, with some points of high symmetry labelled.



Faça um diagrama de energias (em unidades de  $\epsilon_1 = \hbar^2\pi^2/(2m^*a^2)$ ) na 1ZB considerando as bandas com energia entre 0 e  $16\epsilon_1$  no caminho fechado  $\Gamma - M - X - \Gamma$  mostrado na figura (isto é, passando pelo ponto  $\Delta$  “na ida” e pelo ponto  $\Sigma$  “na volta”).

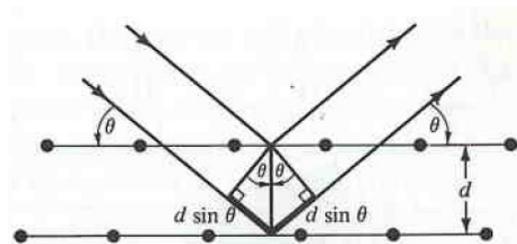
## 2. Redes cúbicas fcc e bcc

- Escreva bases de vetores primitivos  $\mathbf{a}_j$  das redes cúbicas bcc e fcc (Dica: para a rede bcc, use dois vetores da rede cúbica mais um terceiro ligando ao ponto central, vide apêndice A do livro).
- A partir destes vetores, encontre os vetores primitivos  $\mathbf{A}_j$  da rede recíproca nos dois casos. Mostre que a rede recíproca da rede bcc é a rede fcc e vice-versa.
- Construa os vetores  $\mathbf{q}$  ortogonais aos planos que definem as bordas da 1ZB (planos de Bragg) nos dois casos. Dica: Vide figura A5 do livro para o caso da rede bcc.
- Mostre que no caso da rede direta bcc (típica dos metais alcalinos), o volume da 1ZB (célula de Wigner-Seitz na rede recíproca) é maior que uma esfera de raio  $k_F = (3\pi^2n_1)^{1/3}$  onde  $n_1$  corresponde à densidade de um elétron por ponto da rede.

**3. Planos de Miller e Difração de Bragg** - A condição para o primeiro pico de difração de Bragg de um fóton com comprimento de onda  $\lambda$  é:

$$\lambda = 2d \sin(\theta)$$

onde  $d$  é a separação entre os planos cristalinos envolvidos na difração e  $\theta$  é o ângulo de incidência do vetor de onda  $\mathbf{k}$  da partícula em relação à direção do plano (vide figura).



Tais planos são chamados de *planos de Miller* e são definidos por um conjunto de índices inteiros  $(m_1, m_2, m_3)$  tais que este plano corta o eixo  $\mathbf{a}_j$  da célula unitária na posição  $\mathbf{a}_j/m_j$ . Por exemplo, no caso da figura, o planos indicados poderiam ser (010) se escolhermos  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_3$  na direção horizontal (o plano corta esses eixos no “infinito” logo é paralelo a eles).

- Considere um vetor na rede recíproca  $\mathbf{G}_{m_1, m_2, m_3} = m_1\mathbf{A}_1 + m_2\mathbf{A}_2 + m_3\mathbf{A}_3$ . Mostre que a distância  $d$

(no espaço real) entre dois planos de Miller adjacentes com os mesmos índices  $(m_1, m_2, m_3)$  de  $\mathbf{G}$  é dada por:

$$d(m_1, m_2, m_3) = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{m_1, m_2, m_3}|}$$

- (b) Mostre que a condição de difração de Bragg é equivalente a

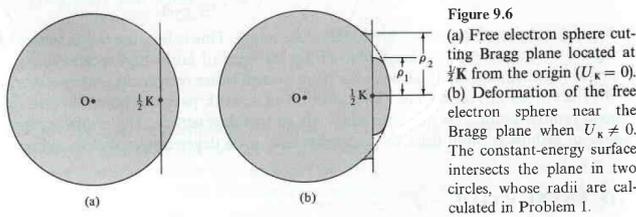
$$\mathbf{G} \cdot \left( \mathbf{k} - \frac{\mathbf{G}}{2} \right) = 0 \Leftrightarrow G^2 = 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}$$

sendo  $\theta$  o ângulo entre  $\mathbf{k}$  e a direção paralela ao plano de Miller (vide figura), sendo  $|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ .

Este é um resultado importante para cristalografia uma vez que relaciona diretamente os pontos da rede recíproca de um cristal à máximos na difração de raios-X.

**4. Deformação da superfície de Fermi nos planos de Bragg** - Vimos em sala que no modelo de potenciais periódicos fracos as alterações na superfície de Fermi ocorrem sempre próximo aos planos de Bragg devido à abertura de gaps no espectro de energia destes valores de  $\mathbf{k}$ .

Argumentamos que a deformação é similar à mostrada na figura abaixo. Vamos entender melhor como estas deformações ocorrem.



Considere um plano de Bragg definido pela condição  $\mathbf{G} \cdot \left( \mathbf{k} - \frac{\mathbf{G}}{2} \right) = 0$  (perpendicular, portanto, a um vetor  $\mathbf{G}$  da rede recíproca).

- (a) Mostre que, para um potencial  $V_{\mathbf{G}}$  pequeno e para um vetor  $\mathbf{k}$  próximo ao plano de Bragg, as soluções para a energia serão:

$$E(\mathbf{k}) \approx \varepsilon_{|\mathbf{G}/2|}^{(0)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \sqrt{4\varepsilon_{|\mathbf{G}/2|}^{(0)} \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + |V_{\mathbf{G}}|^2}$$

onde  $\varepsilon_{|\mathbf{k}|}^{(0)} = \frac{\hbar^2(\mathbf{k})^2}{2m^*}$  é a energia do elétron livre e  $k_{\parallel}$  é a componente de  $\mathbf{k}$  paralela ao plano de Bragg.

- (b) Considere a separação  $\Delta$  entre a energia de Fermi e o menor valor possível da energia da banda inferior definida acima:  $\Delta \equiv E_F - (\varepsilon_{|\mathbf{G}/2|}^{(0)} - |V_{\mathbf{G}}|)$ . Mostre que se  $0 < \Delta < 2|V_{\mathbf{G}}|$ , a superfície de Fermi em torno do plano está toda contida na banda inferior e intersecta o plano de Bragg em um círculo de raio  $\rho$  dado por:

$$\rho = \sqrt{\frac{2m^* \Delta}{\hbar^2}}$$

- (c) Por fim, mostre que se  $\Delta > 2|V_{\mathbf{G}}|$ , a superfície de Fermi estará presente nas duas bandas e cortará o plano de Bragg em dois círculos de raios  $\rho_1$  e  $\rho_2$  de modo que a diferença de área entre eles seja:

$$\pi(\rho_2^2 - \rho_1^2) = \frac{4\pi m^*}{\hbar} |V_{\mathbf{G}}|$$

É esta a situação expressa na figura acima.