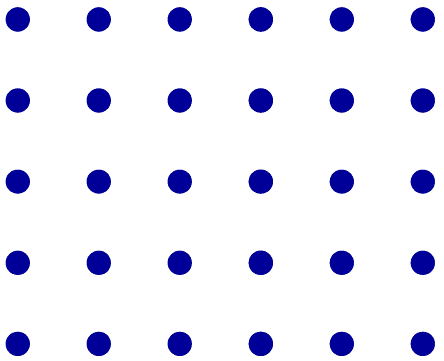
Redes cristalinas

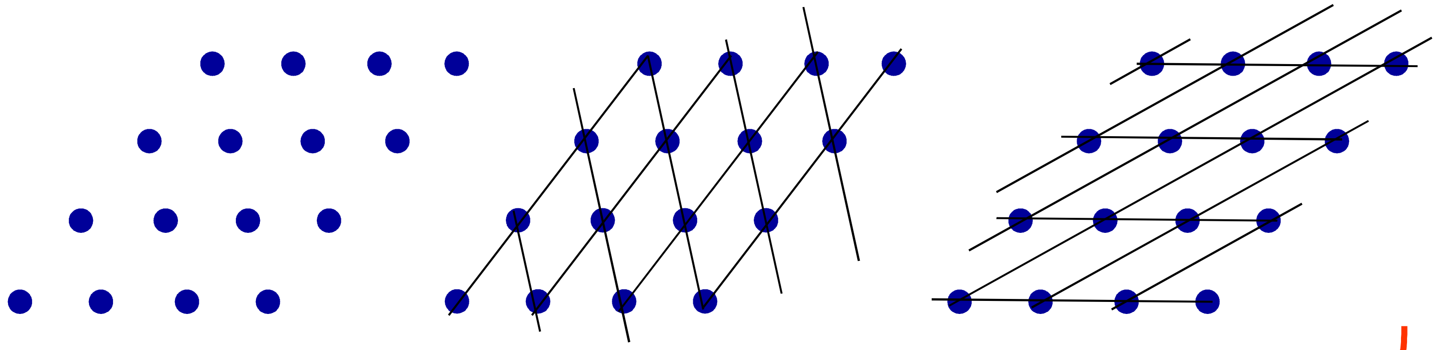
- Rede: conjunto de pontos “idênticos” no espaço.
- Exemplos (1D e 2D):

Rede linear: 

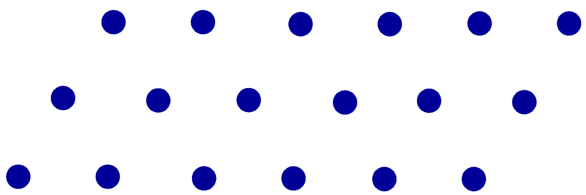
Rede quadrada.



Outras redes. Qual a diferença entre elas?



Rede triangular.

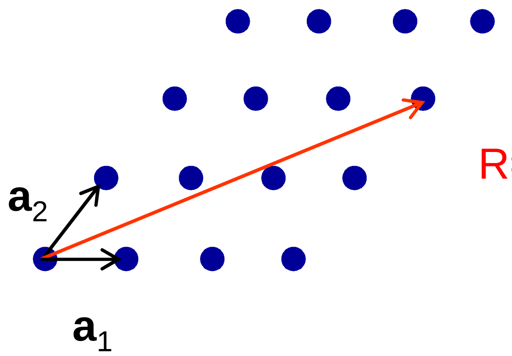


São redes equivalentes!

(O que importa são os pontos e não a conectividade)

Vetor de translação e vetores primitivos

- Vetores primitivos:



R=3$\mathbf{a}_1$ + 2$\mathbf{a}_2$

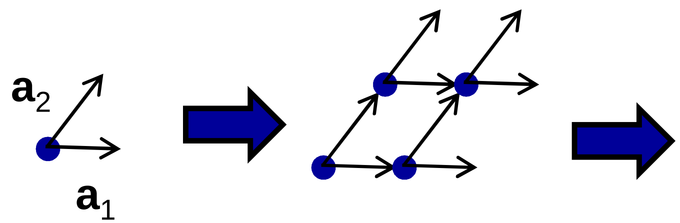
Vetor de translação na rede:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

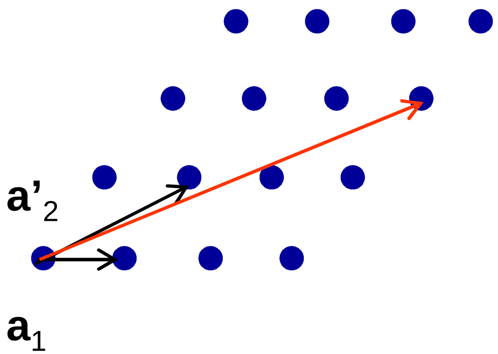
n_1 , n_2 e n_3 são inteiros.

(se não forem inteiros, os vetores a_1, a_2 e a_3 não são primitivos)

- Dados os vetores primitivos, geramos a rede.



- Note que é possível usar outras bases primitivas (às vezes é útil).



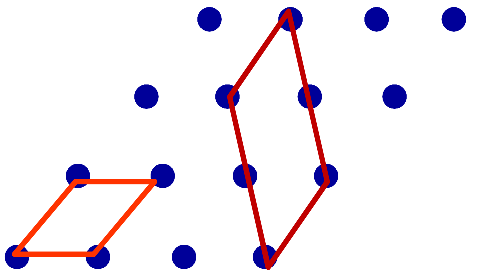
($\mathbf{a'}_2$=$\mathbf{a}_1$+$\mathbf{a}_2$)

R=2$\mathbf{a}_1$ + 2$\mathbf{a'}_2$

$$\mathbf{R} = n'_1\mathbf{a}'_1 + n'_2\mathbf{a}'_2 + n'_3\mathbf{a}'_3$$

Células unitárias e células primitivas

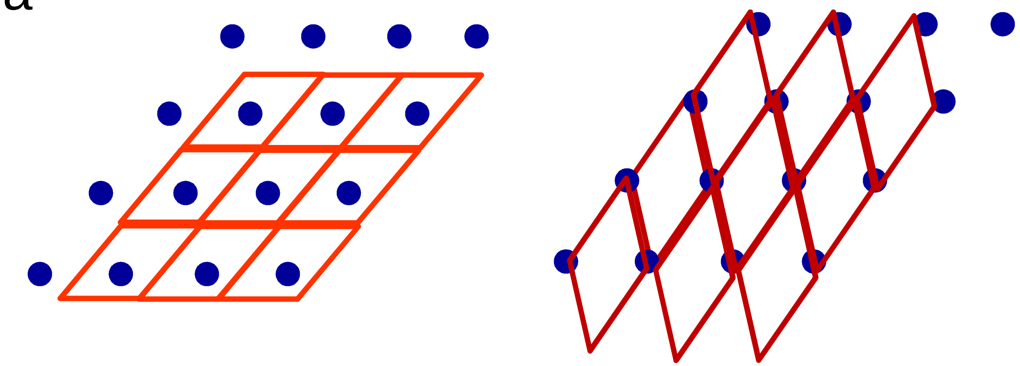
Exemplos:



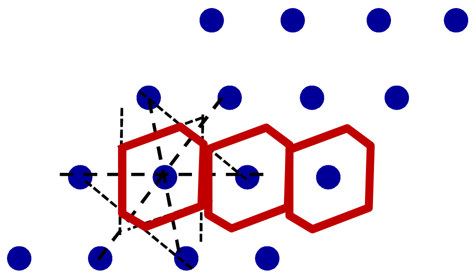
- **Célula unitária:** região do espaço que, se transladada pelo vetores da rede, cobre todo o espaço (infinitas possibilidades)

- **Célula unitária primitiva**: célula unitária que contém apenas um ponto da rede.

  (também infinitas possibilidades)



- **Célula de Wigner-Seitz**: célula primitiva tal que "seus pontos estão mais próximos de um dado ponto da rede do que de qualquer outro ponto da rede."
- Em 2D, são hexágonos ou retângulos

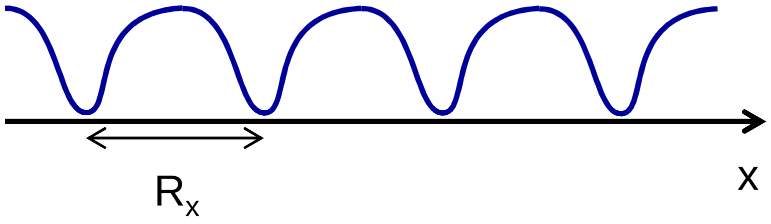


(Vide Lista)

Partículas em potenciais periódicos

- Potencial periódico: $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$

$$V(x) = V(x + R_x)$$



- Transformada de Fourier "no espaço":

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{G}}$$

A periodicidade de V(r) implica em:

$$\boxed{e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}} = 1 \Rightarrow \mathbf{R}\cdot\mathbf{G} = 2n\pi}$$ com n inteiro.

- Rede recíproca:

Vetor de translação na rede direta: $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$

Logo, os vetores **G** no espaço recíproco obedecem:

$$\mathbf{G} = m_1\mathbf{A}_1 + m_2\mathbf{A}_2 + m_3\mathbf{A}_3$$

onde os $\mathbf{A}_k$ são tais que:

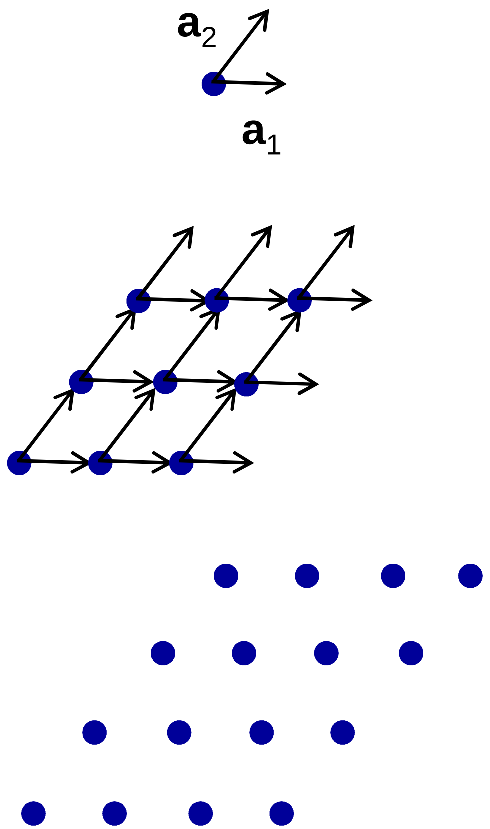
$$\boxed{\mathbf{a}_\ell \cdot \mathbf{A}_j = 2\pi\delta_{\ell j}}$$

$\mathbf{a}_l$: vetores primitivos da rede direta.

$\mathbf{A}_k$: vetores primitivos da rede recíproca.

Rede recíproca e Zona de Brillouin.

- Rede direta

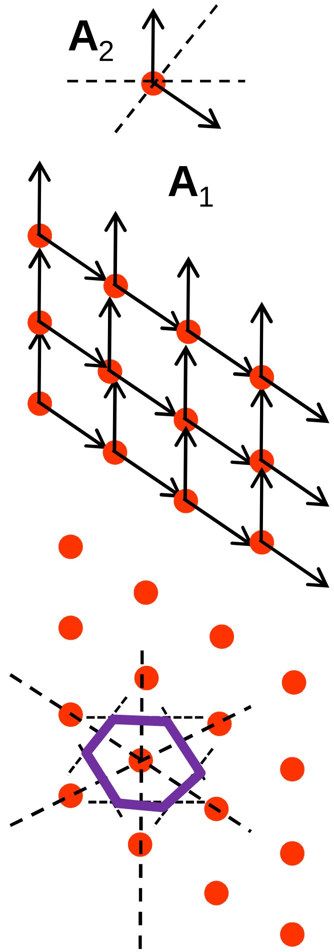


$$\boxed{\mathbf{a}_\ell \cdot \mathbf{A}_k = 2\pi\delta_{\ell k}}$$

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{A}_1 = \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{A}_2 = 2\pi$$

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{A}_2 = \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{A}_1 = 0$$

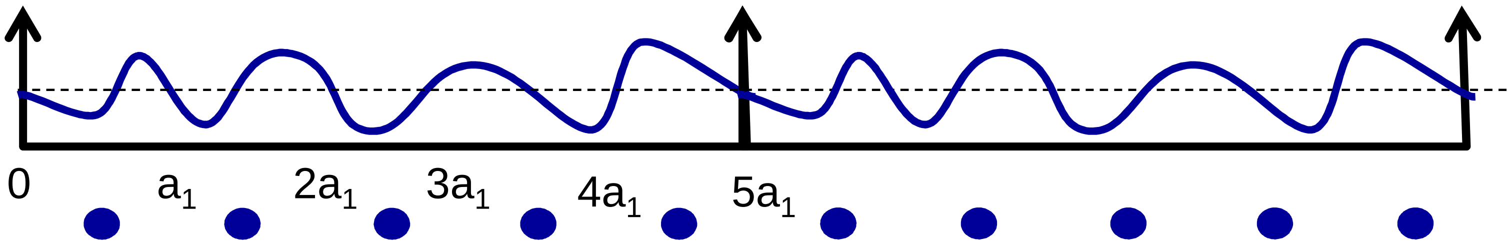
- Rede recíproca



A célula de Wigner-Seitz na rede recíproca é chamada de primeira **Zona de Brillouin**.

Condições de contorno de Born-von Karman

- Tamanho do sistema = número de células primitivas:



$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

Tamanho do sistema:

$$\mathbf{L} = N_1\mathbf{a}_1 + N_2\mathbf{a}_2 + N_3\mathbf{a}_3$$

Volume do sistema:

$$V_{\mathbf{r}} = N_1 N_2 N_3 \left(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3\right)$$

Condições periódicas de contorno:

$$\boxed{\phi(\mathbf{r}+\mathbf{L}) = \phi(\mathbf{r}) \Rightarrow e^{i\sum_j N_j \mathbf{a}_j\cdot\mathbf{k}} = 1}$$

$$\boxed{\mathbf{a}_\ell \cdot \mathbf{A}_j = 2\pi\delta_{\ell j}}$$

Quantização de **k**:

$$\boxed{\mathbf{k} = \sum_{j=1}^{3} \frac{m_j}{N_j}\mathbf{A}_j}$$

Volume ocupado por cada estado no espaço **k**:

$$V_{\mathbf{k}}^{1\mathrm{st}} = \frac{\mathbf{A}_1}{N_1} \cdot \frac{\mathbf{A}_2}{N_2} \times \frac{\mathbf{A}_3}{N_3} = \frac{1}{N}\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 \times \mathbf{A}_3$$

Eq. de Schrödinger em um potencial periódico

- Eq. de Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\Psi(\mathbf{r})$$

Solução (ondas planas):

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{C}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad \mathbf{k} = \sum_{j=1}^{3} \frac{m_j}{N_j}\mathbf{A}_j$$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{G}}$$

$$\mathbf{G} = m_1\mathbf{A}_1 + m_2\mathbf{A}_2 + m_3\mathbf{A}_3$$

- Substituindo na Eq. de Schrodinger (Tarefa):

$$\boxed{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \varepsilon\right)\mathcal{C}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}}\mathcal{C}_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} = 0}$$

- Escrevendo em termos de um vetor **q** na 1a ZB (Tarefa): $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{G}'$

$$\left(\frac{\hbar^2(\mathbf{q} - \mathbf{G}')^2}{2m^*} - \varepsilon\right)\mathcal{C}_{\mathbf{q}-\mathbf{G}'} + \sum_{\mathbf{G}''} V_{\mathbf{G}''-\mathbf{G}'}\mathcal{C}_{\mathbf{q}-\mathbf{G}''} = 0$$

Equação de auto-valores.
Nossa tarefa: Encontrar os coeficientes!