

PGF5110 - Estado Sólido I

Lista de exercícios 2 - 2018 (entrega em 08/10/2018)

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 Γ 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 $E^{(j)}(\mathbf{q}) = \hbar^2(\mathbf{q} - \mathbf{G})^2/2m^*$ sendo $\mathbf{G} = m_1\mathbf{A}_1 + m_2\mathbf{A}_2$ um vetor de deslocamento na rede recíproca.

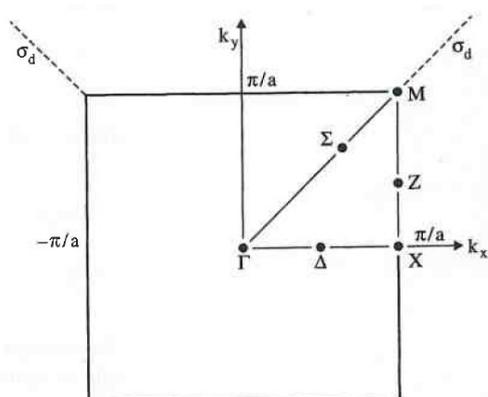
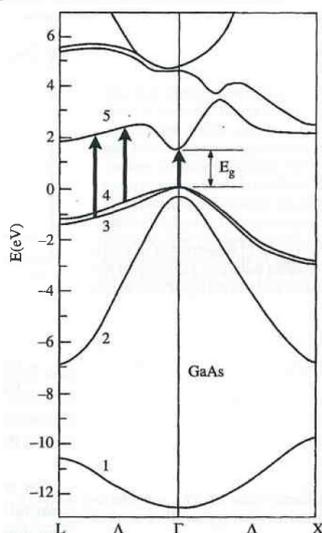


Fig. 2.2 A plan view of the Brillouin zone of a square lattice, with some points of high symmetry labelled.



- Construa uma tabela listando as energias nos pontos Γ , M e X para todas as combinações $m_1, m_2 = 0, \pm 1, \pm 2$ em unidades de $\epsilon_1 = \hbar^2\pi^2/(2m^*a^2)$.
- Faça um diagrama de energias (em unidades de

$\epsilon_1 = \hbar^2\pi^2/(2m^*a^2)$) na 1ZB no caminho fechado $\Gamma - M - X - \Gamma$ mostrado na figura (isto é, passando pelo ponto Δ “na ida” e pelo ponto Σ “na volta”). Por clareza, use uma escala entre 0 e $18\epsilon_1$ para a energia.

Nota: no item (b), é permitido o uso de scripts (Mathematica, MatLab, Python, etc.). Neste caso, anexe a listagem do código-fonte.

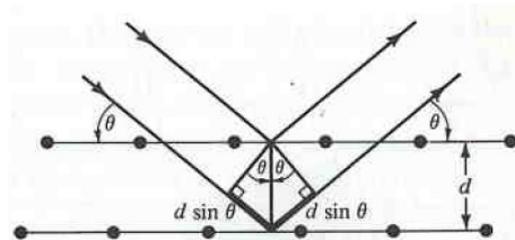
2. Redes cúbicas fcc e bcc

- 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 λ é:

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

onde d é a separação entre os planos cristalinos envolvidos na difração e θ 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).

- (a) 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 θ 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.

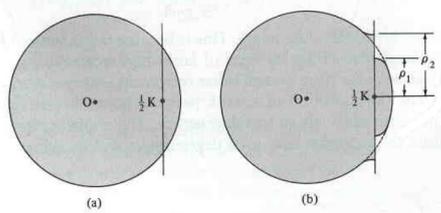


Figure 9.6
(a) Free electron sphere cutting Bragg plane located at $\frac{1}{2}\mathbf{K}$ from the origin ($U_{\mathbf{k}} = 0$).
(b) Deformation of the free electron sphere near the Bragg plane when $U_{\mathbf{k}} \neq 0$. The constant-energy surface intersects the plane in two circles, whose radii are calculated in Problem 1.

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 Δ 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 ρ 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 ρ_1 e ρ_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.