

Introdução à Física do Estado Sólido

Lucy V. C. Assali

2018

Faixas de Energia

O modelo do gás de elétrons livres para metais nos dá uma boa ideia sobre a capacidade térmica, as condutividades elétrica e térmica, etc. No entanto, este modelo falha em nos ajudar a entender a grande distinção entre metais, semimetais, semicondutores e isolantes, além de não ser capaz de explicar a ocorrência de coeficientes Hall positivos. A diferença entre um bom condutor e um bom isolante é tremenda. A resistividade elétrica de um metal puro é tão baixa quanto $10^{-10} \Omega\text{cm}$ ($T = 1\text{K}$), enquanto que a resistividade de um bom isolante pode ser tão alta quanto $10^{22} \Omega\text{cm}$. O intervalo de 10^{32} deve ser o maior entre todas as propriedades físicas de um sólido. Para entender a diferença básica entre condutores e isolantes devemos estender o modelo do elétron livre para levar em conta a periodicidade da rede.

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

As autofunções da eq. de Schrödinger para um potencial periódico

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{\ell}),$$

com $\vec{\ell}$ sendo um vetor de translação da rede cristalina, são

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (\text{teorema de Bloch})$$

onde $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{\ell})$, ou seja, tem a periodicidade do potencial.

Desse modo, a eq. de Schrödinger no espaço recíproco fica:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - \varepsilon \right\} C_{\vec{k}-\vec{G}} + \sum_{\vec{G}'} U_{\vec{G}'-\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}'} = 0$$

onde $\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$ são os vetores de translação da rede no espaço recíproco e \vec{k} são vetores no espaço recíproco contidos na 1ª ZB

Teorema de Bloch: prova

Como $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{\ell})$, então $U(\vec{r})$ pode ser desenvolvido em uma série de Fourier:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}},$$

onde \vec{G} são os vetores de translação da rede no espaço recíproco e

$$U_{\vec{G}} = \frac{1}{V} \int_{célula} U(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} d\vec{r}$$

OBS.: Desde que a energia potencial é real, devemos ter que $U_{\vec{G}} = U_{-\vec{G}}$.

Teorema de Bloch: prova

Para expressar a função de onda no espaço recíproco, devemos impor condições periódicas de contorno, ou seja, a periodicidade da função de onda depende das dimensões do cristal. Assim, designando por \vec{g} os vetores do espaço recíproco (reservando a nomenclatura \vec{k} para designar os vetores \vec{g} contidos na 1^a ZB), podemos escrever

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}}.$$

Resolvendo a equação de Schrödinger: $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}) = \varepsilon \Psi(\vec{r})$, temos:

$$\text{Energia cinética: } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{g}} g^2 C_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}}$$

$$\text{Energia potencial: } \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{g}} U_{\vec{G}} C_{\vec{g}} e^{i(\vec{G}+\vec{g})\cdot\vec{r}}$$

Teorema de Bloch: prova

Como \vec{G} e \vec{g} são índices mudos de \sum , então podemos escrever $\vec{g}' = \vec{G} + \vec{g}$ e

$$\text{Energia potencial: } U(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{g}'} U_{\vec{G}} C_{\vec{g}' - \vec{G}} e^{i\vec{g}' \cdot \vec{r}}$$

Trocando $\vec{g}' \Rightarrow \vec{g}$ e $\vec{G} \Rightarrow \vec{G}'$

$$\text{Energia potencial: } U(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}'} \sum_{\vec{g}} U_{\vec{G}'} C_{\vec{g} - \vec{G}'} e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}}$$

Finalmente, a equação de Schrödinger escreve-se:

$$\sum_{\vec{g}} e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}} \left\{ \left[\frac{\hbar^2 g^2}{2m} - \varepsilon \right] C_{\vec{g}} + \sum_{\vec{G}'} U_{\vec{G}'} C_{\vec{g} - \vec{G}'} \right\} = 0.$$

Teorema de Bloch: prova

Podemos, ainda, escrever os vetores \vec{g} do espaço recíproco em função dos vetores \vec{k} contidos na 1^a ZB e dos vetores \vec{G} de translação da rede recíproca: $\vec{g} = \vec{k} - \vec{G}$; e escrever

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - \varepsilon \right] C_{\vec{k}-\vec{G}} + \underbrace{\sum_{\vec{G}'} U_{\vec{G}'} C_{\vec{k}-\vec{G}-\vec{G}'}}_{\substack{\vec{G}' = \vec{G}'' - \vec{G} \\ \vec{G}'' \Rightarrow \vec{G}'}} = 0$$

e o conjunto de equações de Schrödinger no espaço recíproco é

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - \varepsilon \right] C_{\vec{k}-\vec{G}} + \sum_{\vec{G}'} U_{\vec{G}'-\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}'} = 0$$

Teorema de Bloch: prova

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - \varepsilon \right\} C_{\vec{k}-\vec{G}} + \sum_{\vec{G}'} U_{\vec{G}'-\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}'} = 0$$

→ Equação de Schrödinger no espaço recíproco

Representação matricial

$$\begin{bmatrix} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_1)^2 - \varepsilon \right\} & U_{\vec{G}_2-\vec{G}_1} & \dots & U_{\vec{G}_n-\vec{G}_1} \\ U_{\vec{G}_1-\vec{G}_2} & \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_2)^2 - \varepsilon \right\} & \dots & U_{\vec{G}_n-\vec{G}_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ U_{\vec{G}_1-\vec{G}_n} & \vdots & \dots & \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_n)^2 - \varepsilon \right\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{\vec{k}-\vec{G}_1} \\ C_{\vec{k}-\vec{G}_2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C_{\vec{k}-\vec{G}_n} \end{bmatrix} = 0$$

Teorema de Bloch: prova

Esse conjunto de equações, para um valor fixo de \vec{k} na 1ª ZB e para todos os vetores de translação \vec{G} da rede recíproca, acopla somente os coeficientes C cujos vetores de onda diferem de \vec{k} por um vetor de translação da rede recíproca. O problema original se separa em N equações independentes para cada vetor \vec{k} na 1ª ZB. Cada equação é um problema cujas soluções são superposições de ondas planas contendo o vetor de onda \vec{k} e somente os vetores que diferem de \vec{k} por um vetor de translação da rede recíproca. Assim, podemos escrever que

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G})\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[\sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \right]$$

$u_{\vec{k}}(\vec{r}) \doteq u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{\ell})$. Função que tem a periodicidade do potencial

As autofunções podem ser expressas de duas formas equivalentes:

Esse teorema é talvez o resultado mais importante em física do estado sólido, pois estabelece uma forma única para a solução dos elétrons em um cristal

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \implies \text{Teorema de Bloch}$$

\implies Função de Bloch

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{\ell}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{\ell}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de rede vazia

(Gás de elétrons livres)

Na aproximação de rede vazia tomamos $U(\vec{r}) = 0$ e, portanto, $U_{\vec{G}'-\vec{G}} = U_0$ é constante e podemos tomar $U_0 = 0$. O conjunto de equações de Schrödinger a ser resolvido é

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - \varepsilon \right] C_{\vec{k}-\vec{G}} = 0$$

Para um dado \vec{G} tal que $C_{\vec{k}-\vec{G}} \neq 0$, a solução não trivial dessa equação é

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 = \varepsilon$$

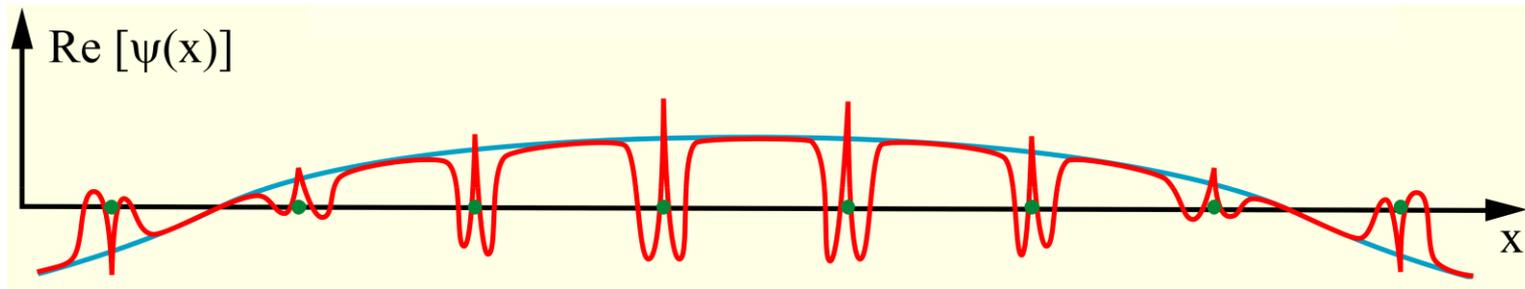
Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Rede unidimensional com parâmetro a

$$\Psi_k(x) = e^{ikx} u(x) \quad \text{onde} \quad u(x) = u(x + a)$$

fator de fase

Função periódica da rede



Substituindo k por $k+G$, onde G são os vetores de translação da rede recíproca, a condição de Bloch fica satisfeita ($e^{i\frac{2\pi}{a}G} = 1$) e k fica restrito à 1ª ZB ($-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$)

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Rede unidimensional com parâmetro a

Rede Direta

$$\vec{a} = a \hat{x} \quad \vec{\ell} = m a \hat{x} \quad (m = \text{n}^\circ \text{ inteiro})$$

Rede Recíproca

$$\vec{b} = \frac{2\pi}{a} \hat{x} \quad \vec{G} = n \frac{2\pi}{a} \hat{x} \quad (n = \text{n}^\circ \text{ inteiro})$$

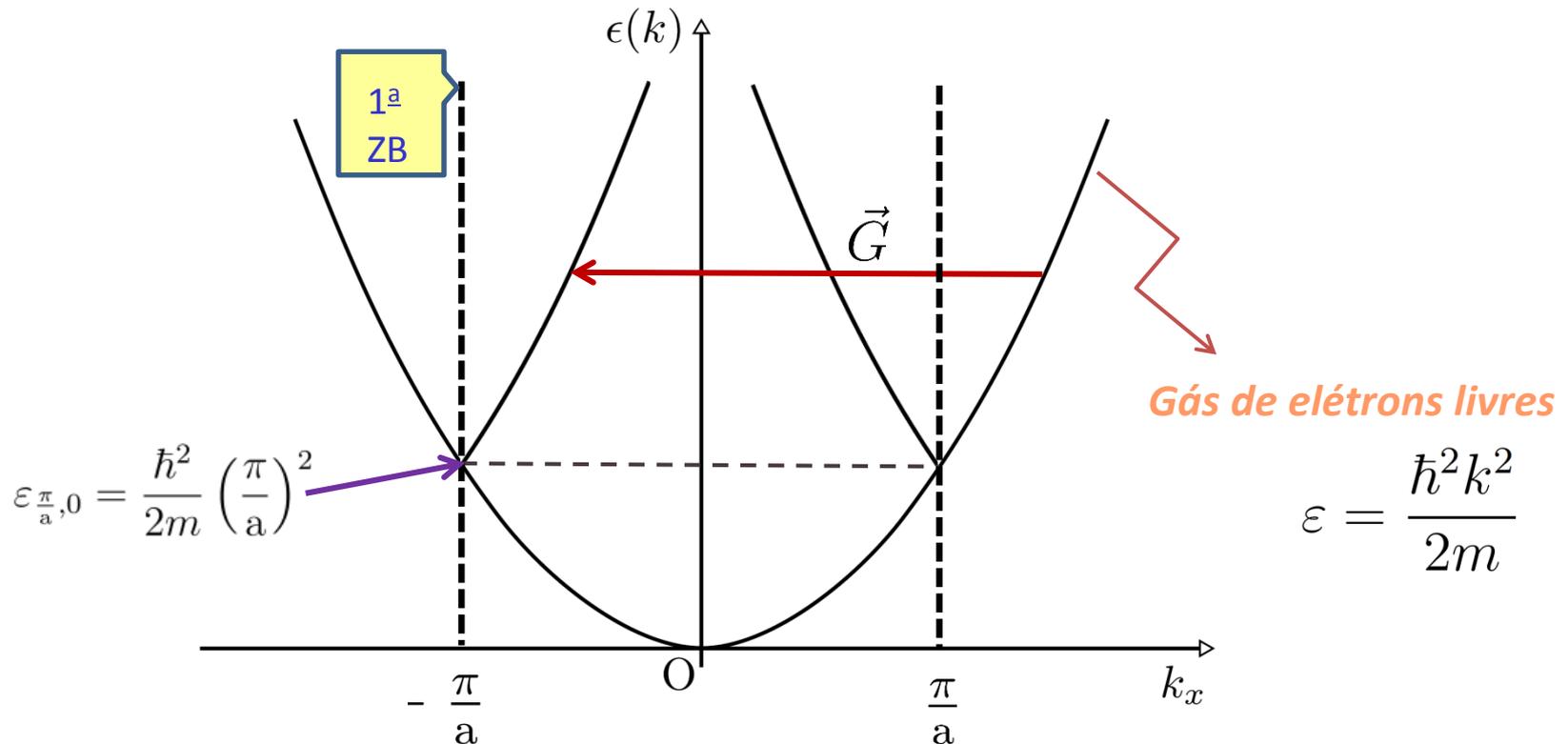
Vetores da 1ª ZB: $\vec{k} = k_x \hat{x}$ com $-\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Rede unidimensional com parâmetro a

$$\varepsilon_{k,n} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k - n \frac{2\pi}{a} \right)^2$$

→ Relação de dispersão



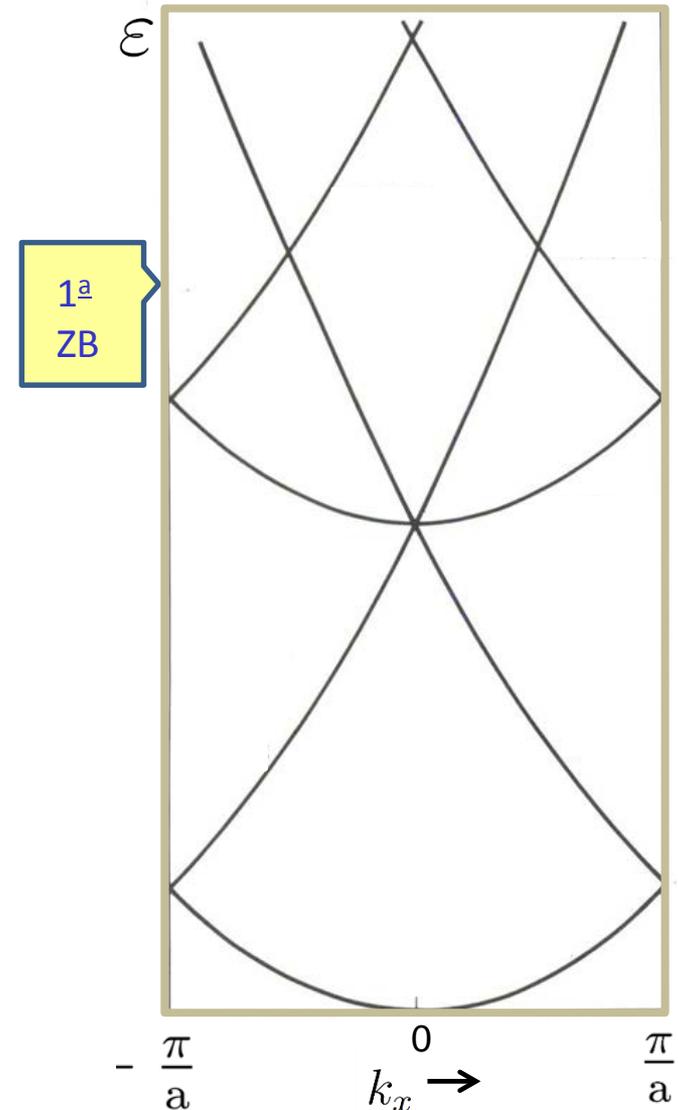
Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Rede unidimensional com parâmetro a

$$\varepsilon_{k,n} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k - n \frac{2\pi}{a} \right)^2$$



Relação de dispersão



Faixas de Energia: Teorema de Bloch

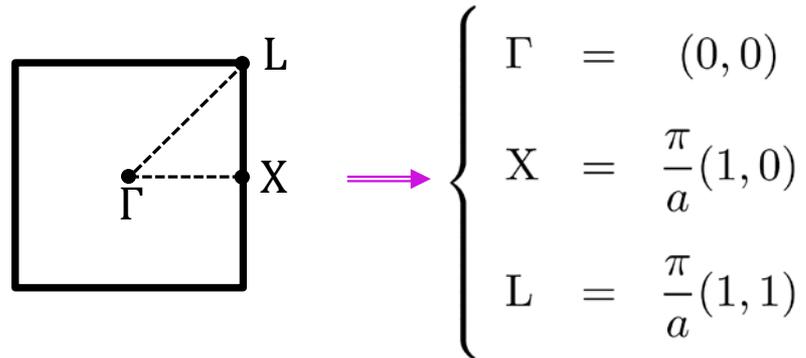
Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

Rede Direta: $\vec{\ell} = \ell_1 a \hat{i} + \ell_2 a \hat{j}$ $\ell_1, \ell_2 =$ números inteiros

Rede Recíproca: $\vec{G} = m_x \frac{2\pi}{a} \hat{i} + m_y \frac{2\pi}{a} \hat{j}$ $m_x, m_y =$ números inteiros

Vetores da 1ª ZB: $\vec{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j} \longrightarrow \begin{cases} -\pi/a \leq k_x \leq \pi/a \\ -\pi/a \leq k_y \leq \pi/a \end{cases}$



$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(k_x - \frac{2\pi}{a} m_x \right)^2 + \left(k_y - \frac{2\pi}{a} m_y \right)^2 \right]$$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

Sejam: $\xi_x = \frac{k_x}{\pi/a}$ e $\xi_y = \frac{k_y}{\pi/a}$

então: $\varepsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left[(\xi_x - 2m_x)^2 + (\xi_y - 2m_y)^2 \right]$

ou: $\varepsilon' = \frac{\varepsilon}{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}} = (\xi_x - 2m_x)^2 + (\xi_y - 2m_y)^2 \rightarrow$ relação de dispersão $\varepsilon(k) \times k$

Para construirmos as bandas de energia da rede quadrada, utilizando a relação de dispersão, precisamos escolher uma direção particular dentro da 1ª ZB.

direção $\overline{\Gamma X}$: $\xi_y = 0$ e $0 \leq \xi_x \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (\xi_x - 2m_x)^2 + 4m_y^2$

direção $\overline{\Gamma L}$: $\xi_x = \xi_y = \xi$ e $0 \leq \xi \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (\xi - 2m_x)^2 + (\xi - 2m_y)^2$

direção $\overline{X L}$: $\xi_x = 1$ e $0 \leq \xi_y \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (1 - 2m_x)^2 + (\xi_y - 2m_y)^2$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

direção $\overline{\Gamma L}$: $\xi_x = \xi_y = \xi$ e $0 \leq \xi \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (\xi - 2m_x)^2 + (\xi - 2m_y)^2$

Atribuindo valores para m_x e m_y (diferentes vetores de translação \vec{G}):

m_x	m_y	ε'	$\varepsilon'_\Gamma (\xi = 0)$	$\varepsilon'_L (\xi = 1)$
0	0	$2\xi^2$	0	2
1	0	$(\xi - 2)^2 + \xi^2$	4	2
0	1	$(\xi - 2)^2 + \xi^2$	4	2
1	1	$2(\xi - 2)^2$	8	2
-1	0	$(\xi + 2)^2 + \xi^2$	4	10
0	-1	$(\xi + 2)^2 + \xi^2$	4	10
1	-1	$(\xi - 2)^2 + (\xi + 2)^2$	8	10
-1	1	$(\xi - 2)^2 + (\xi + 2)^2$	8	10
-1	-1	$2(\xi + 2)^2$	8	18
2	0	$(\xi - 4)^2 + \xi^2$	16	10
0	2	$(\xi - 4)^2 + \xi^2$	16	10

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

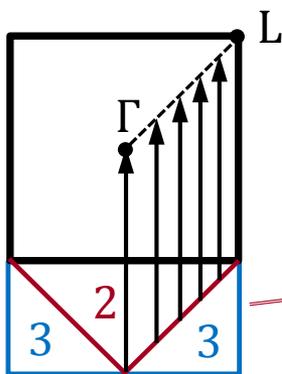
Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

direção $\overline{\Gamma L}$: $\xi_x = \xi_y = \xi$ e $0 \leq \xi \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (\xi - 2m_x)^2 + (\xi - 2m_y)^2$

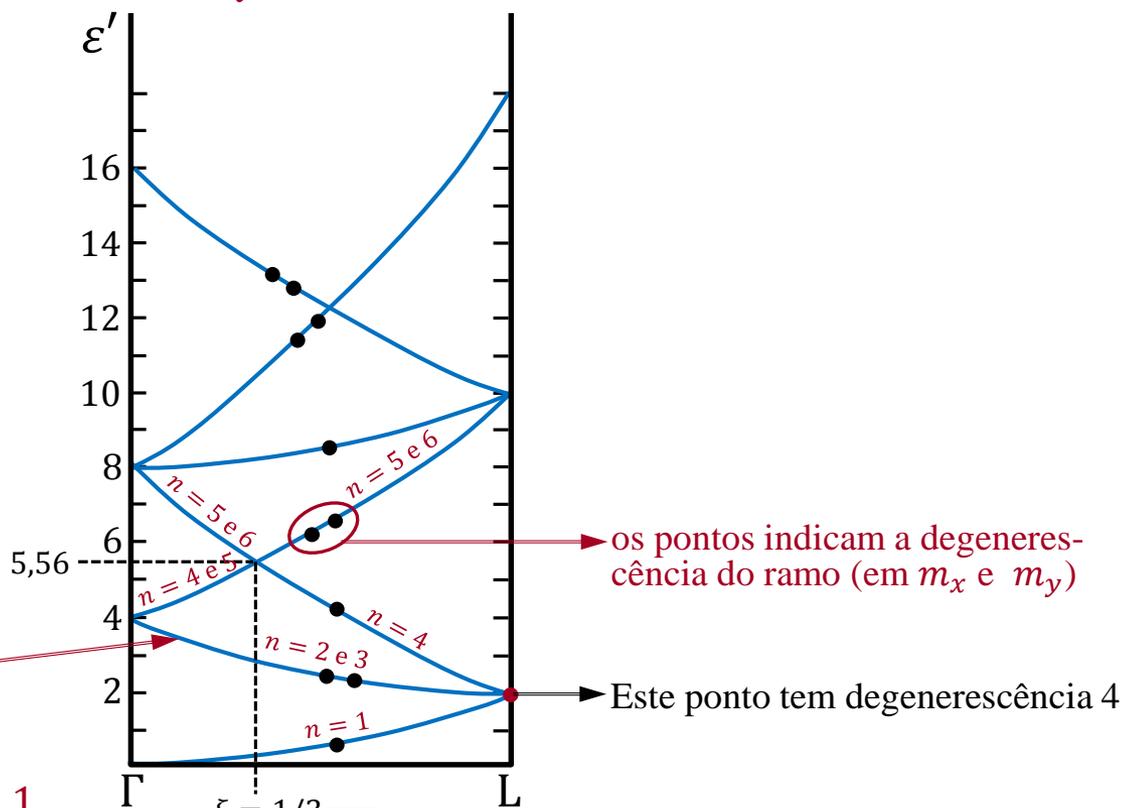
Curva de dispersão na direção $\overline{\Gamma L}$

os índices n dos ramos da curva de dispersão indicam de qual zona de Brillouin (1^a , 2^a , 3^a , ...) esta parte do ramo foi transladada (qual \vec{G})



$$m_x = 0 \text{ e } m_y = 1$$

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} \hat{j}$$



Este valor é encontrado igualando-se as energias dos ramos que se cruzam

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

direção $\overline{\Gamma L}$: $\xi_x = \xi_y = \xi$ e $0 \leq \xi \leq 1$ $\rightarrow \varepsilon' = (\xi - 2m_x)^2 + (\xi - 2m_y)^2$

No ponto L onde $\varepsilon' = 2$, a degenerescência é 4, pois coexistem as 1^a, 2^a, 3^a e 4^a ZB. Como as zonas são separadas por planos de Bragg, os pontos com degenerescência 4 estão na intersecção de 3 planos de Bragg.

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de elétrons quase livres

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - \varepsilon \right\} C_{\vec{k}-\vec{G}} + \sum_{\vec{G}'} U_{\vec{G}'-\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}'} = 0$$

→ Equação de Schroedinger no espaço recíproco:
Funções de Bloch e potencial periódico

Representação matricial

$$\begin{bmatrix} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_1)^2 - \varepsilon \right\} & U_{\vec{G}_2-\vec{G}_1} & \dots & U_{\vec{G}_n-\vec{G}_1} \\ U_{\vec{G}_1-\vec{G}_2} & \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_2)^2 - \varepsilon \right\} & \dots & U_{\vec{G}_n-\vec{G}_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ U_{\vec{G}_1-\vec{G}_n} & \dots & \dots & \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_n)^2 - \varepsilon \right\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{\vec{k}-\vec{G}_1} \\ C_{\vec{k}-\vec{G}_2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C_{\vec{k}-\vec{G}_n} \end{bmatrix} = 0$$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

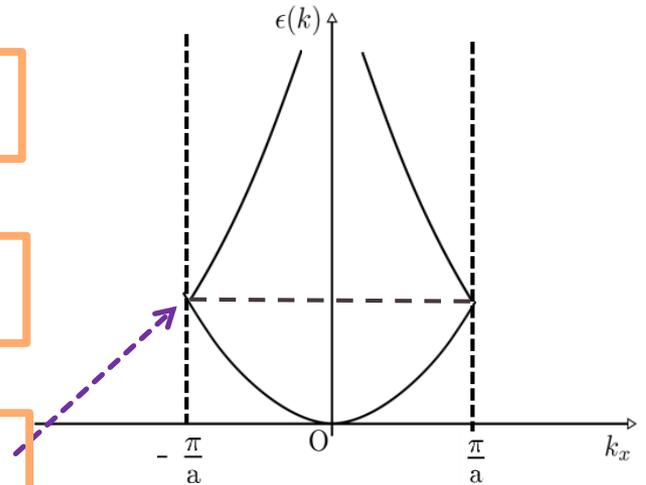
Aproximação de elétrons quase livres

Para o caso degenerado, supondo que para um dado \vec{k} e para todo $\vec{G}' \neq \vec{G}_1$ e \vec{G}_2 , tal que

$$|\varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_1}^0 - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}'}^0| \gg U$$

$$|\varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_2}^0 - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}'}^0| \gg U$$

$$|\varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_1}^0 - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_2}^0| \approx U$$



teremos que os únicos termos diferentes de zero fora da diagonal, na equação matricial serão $U_{\vec{G}_2-\vec{G}_1}$ e $U_{\vec{G}_1-\vec{G}_2}$ e devemos resolver a equação

$$\begin{bmatrix} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_1)^2 - \varepsilon \right\} & U_{\vec{G}_2-\vec{G}_1} \\ U_{\vec{G}_1-\vec{G}_2} & \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_2)^2 - \varepsilon \right\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{\vec{k}-\vec{G}_1} \\ C_{\vec{k}-\vec{G}_2} \end{bmatrix} = 0$$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de elétrons quase livres

Para o caso bidegenerado onde, na aproximação de rede vazia, os autovalores eram ε^0 , a solução não trivial da equação é:

$$\varepsilon = \varepsilon^0 \pm |U_{\vec{G}_1 - \vec{G}_2}|$$

ou

$$\varepsilon_+ = \varepsilon^0 + |V| \quad \varepsilon_- = \varepsilon^0 - |V|,$$

onde $U_{\vec{G}_1 - \vec{G}_2} = V$

Quebra na degenerescência da energia

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de elétrons quase livres

Determinados ε_+ e ε_- , podemos escrever as funções de onda correspondentes a estes estados:

$$\Psi_{\vec{k}}^+ = C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^+ e^{i(\vec{k}-\vec{G}_1)\cdot\vec{r}} + C_{\vec{k}-\vec{G}_2}^+ e^{i(\vec{k}-\vec{G}_2)\cdot\vec{r}}$$

$$\Psi_{\vec{k}}^- = C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^- e^{i(\vec{k}-\vec{G}_1)\cdot\vec{r}} + C_{\vec{k}-\vec{G}_2}^- e^{i(\vec{k}-\vec{G}_2)\cdot\vec{r}}$$

Para determinar os coeficientes devemos resolver, para ε_+ , a equação

$$\begin{bmatrix} -\varepsilon_+ + \varepsilon^0 & V \\ V & -\varepsilon_+ + \varepsilon^0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^+ \\ C_{\vec{k}-\vec{G}_2}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Como $\varepsilon_+ = \varepsilon^0 + |V|$, então

$$\left\{ \begin{bmatrix} -|V| & V \\ V & -|V| \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^+ \\ C_{\vec{k}-\vec{G}_2}^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\} \Rightarrow C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^+ = \frac{V}{|V|} C_{\vec{k}-\vec{G}_2}^+$$

Como, em geral, V é atrativo, então $|V| = -V$ e

$$C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^+ = -C_{\vec{k}-\vec{G}_2}^+$$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de elétrons quase livres

Para $\varepsilon_- = \varepsilon^0 - |V|$ temos que

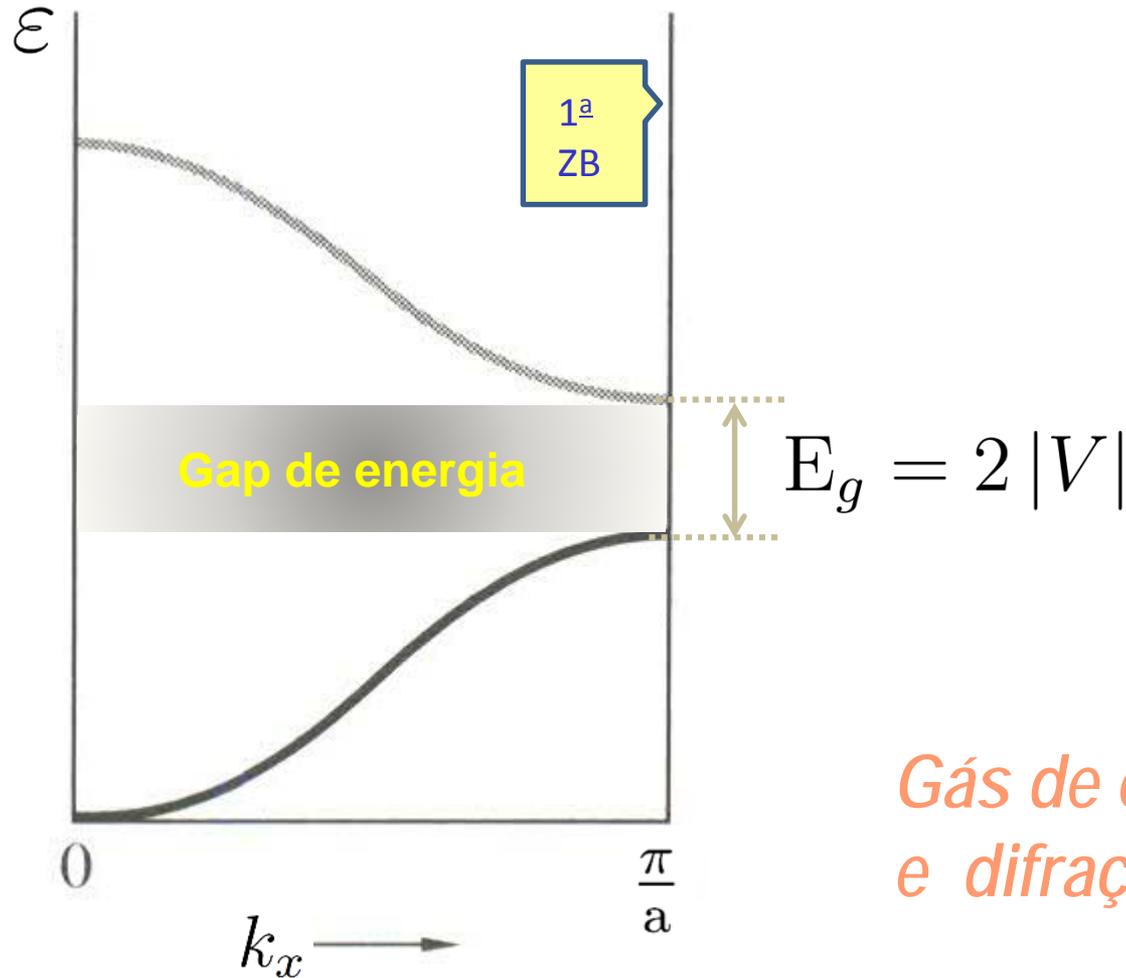
$$C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^- = C_{\vec{k}-\vec{G}_2}^-$$

E as funções de onda ficam

$$\Psi_{\vec{k}}^+(\vec{r}) = C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^+ \left\{ e^{i(\vec{k}-\vec{G}_1)\cdot\vec{r}} - e^{i(\vec{k}-\vec{G}_2)\cdot\vec{r}} \right\}$$
$$\Psi_{\vec{k}}^-(\vec{r}) = C_{\vec{k}-\vec{G}_1}^- \left\{ e^{i(\vec{k}-\vec{G}_1)\cdot\vec{r}} + e^{i(\vec{k}-\vec{G}_2)\cdot\vec{r}} \right\}$$

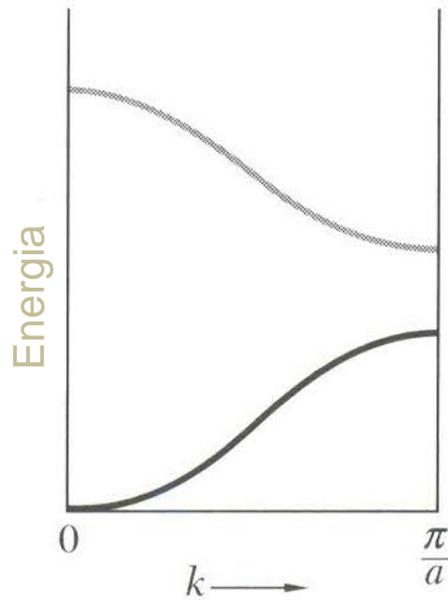
Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de elétrons quase livres

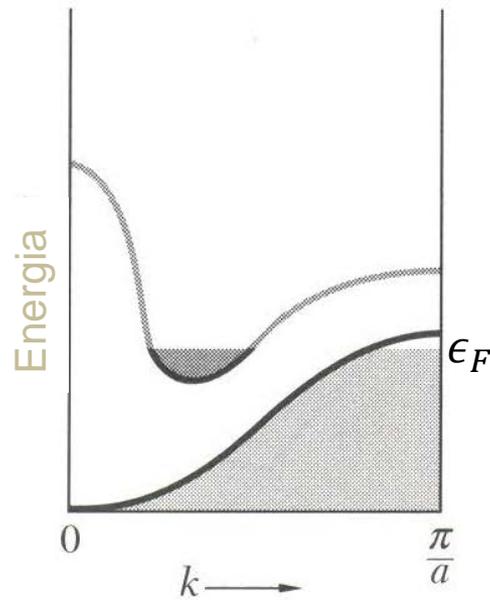


*Gás de elétrons livres
e difração na 1ª ZB*

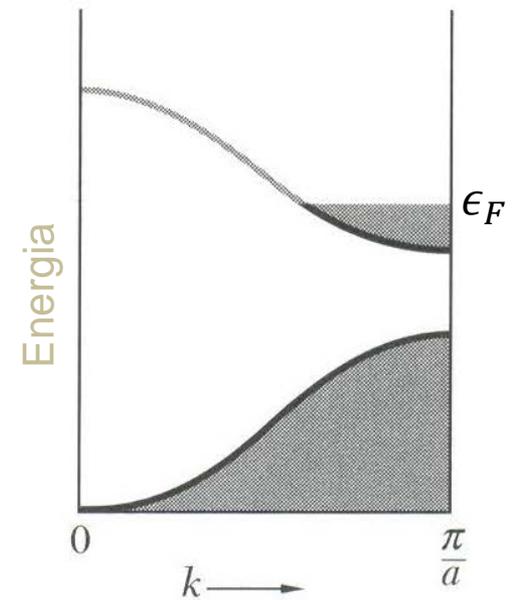
Faixas de Energia: Classificação dos sólidos



isolante

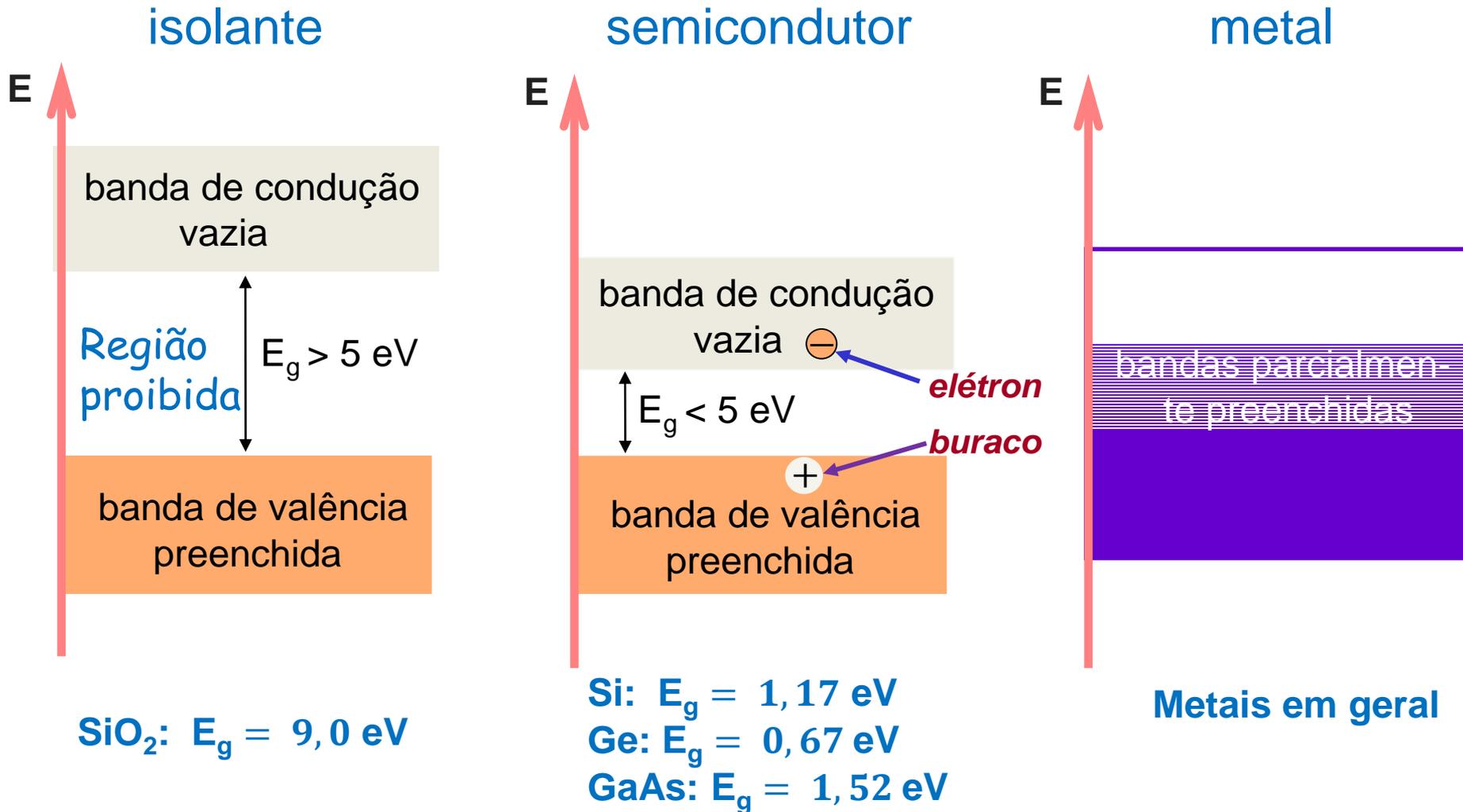


semi-metal

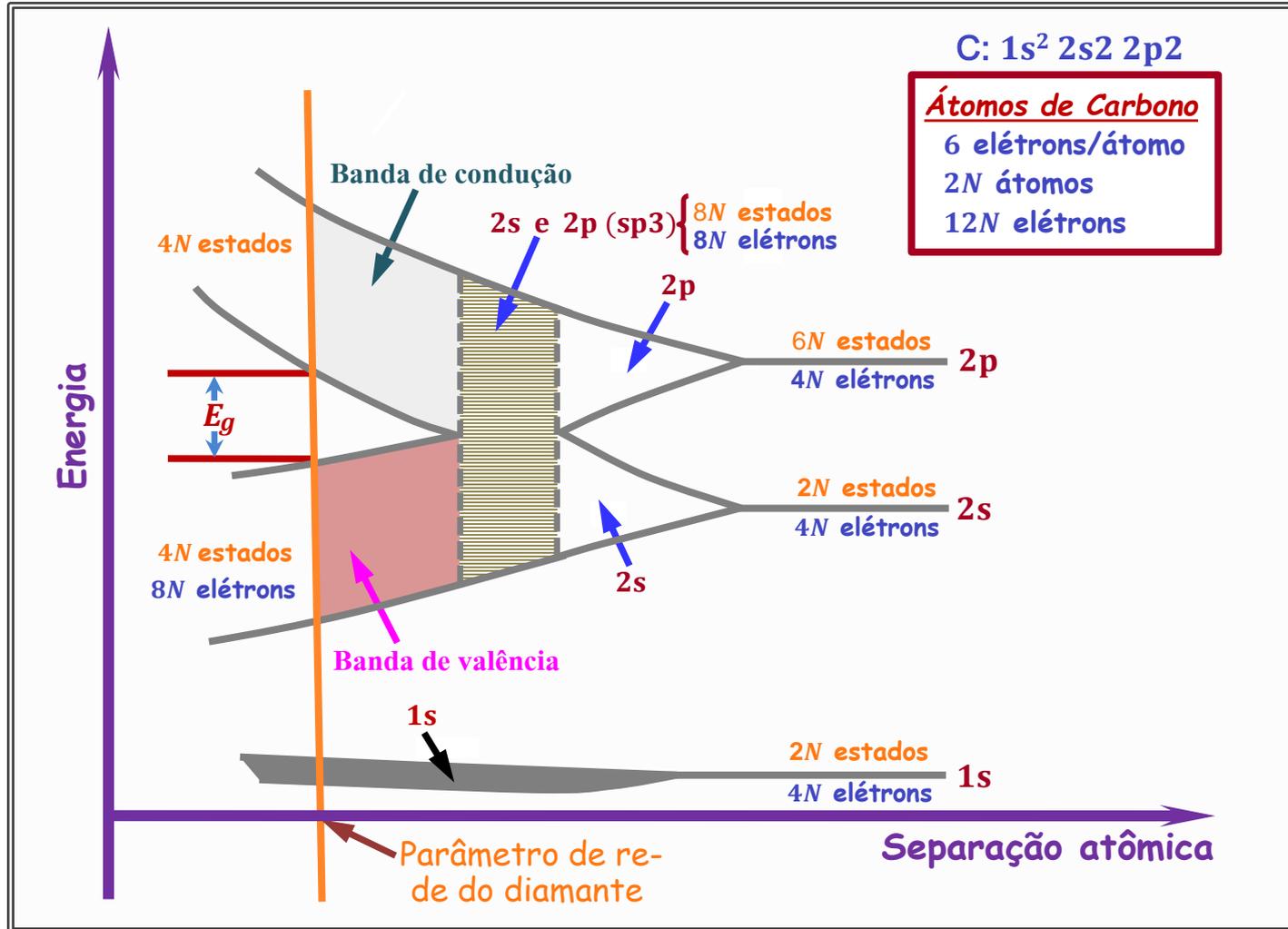


metal

Estrutura de bandas de energia: Classificação dos sólidos



Faixas de Energia: Estrutura de bandas do diamante



Faixas de Energia: Teorema de Bloch

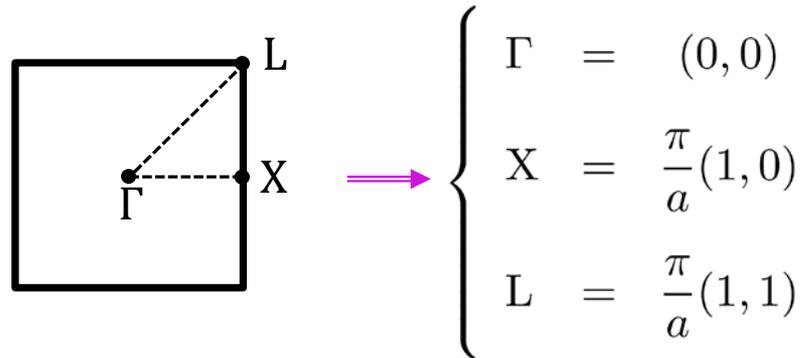
Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

Rede Direta: $\vec{\ell} = \ell_1 a \hat{i} + \ell_2 a \hat{j}$ $\ell_1, \ell_2 =$ números inteiros

Rede Recíproca: $\vec{G} = m_x \frac{2\pi}{a} \hat{i} + m_y \frac{2\pi}{a} \hat{j}$ $m_x, m_y =$ números inteiros

Vetores da 1ª ZB: $\vec{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j} \longrightarrow \begin{cases} -\pi/a \leq k_x \leq \pi/a \\ -\pi/a \leq k_y \leq \pi/a \end{cases}$



$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(k_x - \frac{2\pi}{a} m_x \right)^2 + \left(k_y - \frac{2\pi}{a} m_y \right)^2 \right]$$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

Sejam: $\xi_x = \frac{k_x}{\pi/a}$ e $\xi_y = \frac{k_y}{\pi/a}$

então: $\varepsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left[(\xi_x - 2m_x)^2 + (\xi_y - 2m_y)^2 \right]$

ou: $\varepsilon' = \frac{\varepsilon}{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}} = (\xi_x - 2m_x)^2 + (\xi_y - 2m_y)^2 \rightarrow$ relação de dispersão $\varepsilon(k) \times k$

Para construirmos as bandas de energia da rede quadrada, utilizando a relação de dispersão, precisamos escolher uma direção particular dentro da 1ª ZB.

direção $\overline{\Gamma X}$: $\xi_y = 0$ e $0 \leq \xi_x \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (\xi_x - 2m_x)^2 + 4m_y^2$

direção $\overline{\Gamma L}$: $\xi_x = \xi_y = \xi$ e $0 \leq \xi \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (\xi - 2m_x)^2 + (\xi - 2m_y)^2$

direção $\overline{X L}$: $\xi_x = 1$ e $0 \leq \xi_y \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (1 - 2m_x)^2 + (\xi_y - 2m_y)^2$

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

direção $\overline{\Gamma L}$: $\xi_x = \xi_y = \xi$ e $0 \leq \xi \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (\xi - 2m_x)^2 + (\xi - 2m_y)^2$

Atribuindo valores para m_x e m_y (diferentes vetores de translação \vec{G}):

m_x	m_y	ε'	$\varepsilon'_\Gamma (\xi = 0)$	$\varepsilon'_L (\xi = 1)$
0	0	$2\xi^2$	0	2
1	0	$(\xi - 2)^2 + \xi^2$	4	2
0	1	$(\xi - 2)^2 + \xi^2$	4	2
1	1	$2(\xi - 2)^2$	8	2
-1	0	$(\xi + 2)^2 + \xi^2$	4	10
0	-1	$(\xi + 2)^2 + \xi^2$	4	10
1	-1	$(\xi - 2)^2 + (\xi + 2)^2$	8	10
-1	1	$(\xi - 2)^2 + (\xi + 2)^2$	8	10
-1	-1	$2(\xi + 2)^2$	8	18
2	0	$(\xi - 4)^2 + \xi^2$	16	10
0	2	$(\xi - 4)^2 + \xi^2$	16	10

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

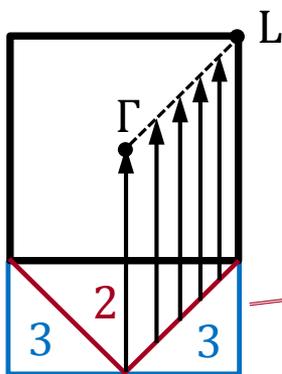
Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

direção $\overline{\Gamma L}$: $\xi_x = \xi_y = \xi$ e $0 \leq \xi \leq 1 \rightarrow \varepsilon' = (\xi - 2m_x)^2 + (\xi - 2m_y)^2$

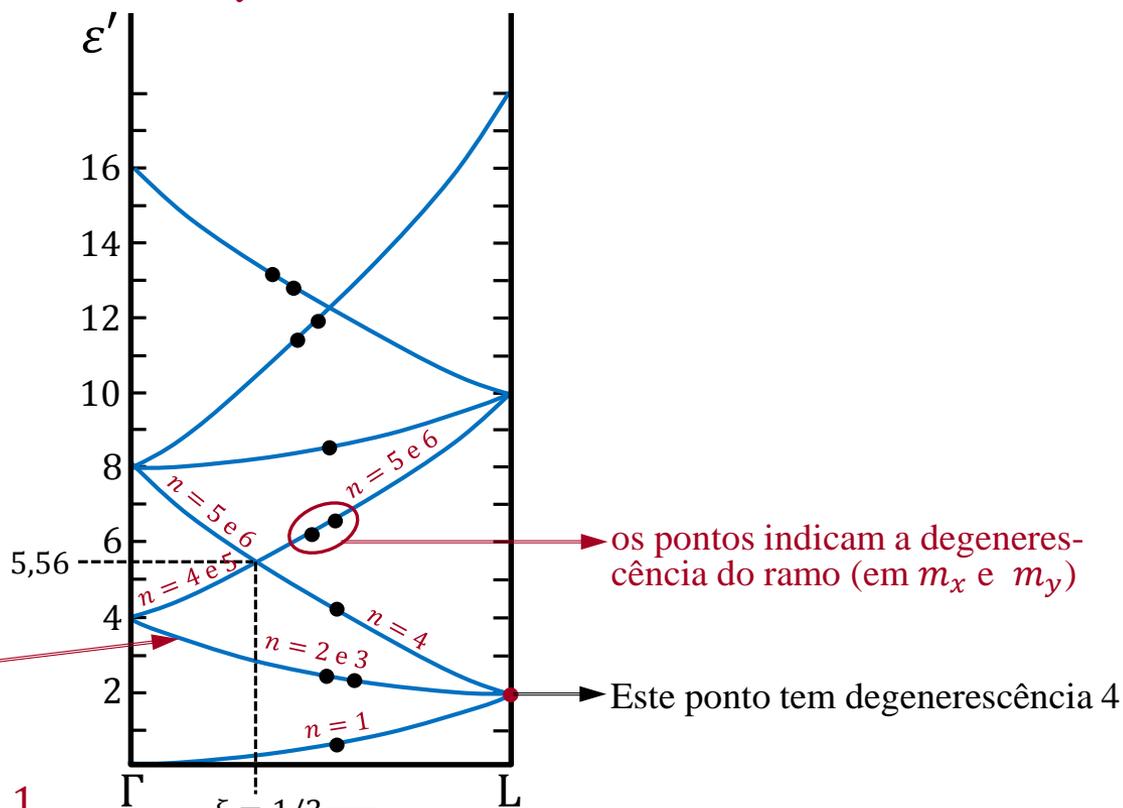
Curva de dispersão na direção $\overline{\Gamma L}$

os índices n dos ramos da curva de dispersão indicam de qual zona de Brillouin (1^a , 2^a , 3^a , ...) esta parte do ramo foi transladada (qual \vec{G})



$$m_x = 0 \text{ e } m_y = 1$$

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} \hat{j}$$



Este valor é encontrado igualando-se as energias dos ramos que se cruzam

Faixas de Energia: Teorema de Bloch

Aproximação de rede vazia

Rede bidimensional com parâmetro a

direção $\overline{\Gamma L}$: $\xi_x = \xi_y = \xi$ e $0 \leq \xi \leq 1$ $\rightarrow \varepsilon' = (\xi - 2m_x)^2 + (\xi - 2m_y)^2$

No ponto L onde $\varepsilon' = 2$, a degenerescência é 4, pois coexistem as 1^a, 2^a, 3^a e 4^a ZB. Como as zonas são separadas por planos de Bragg, os pontos com degenerescência 4 estão na intersecção de 3 planos de Bragg.