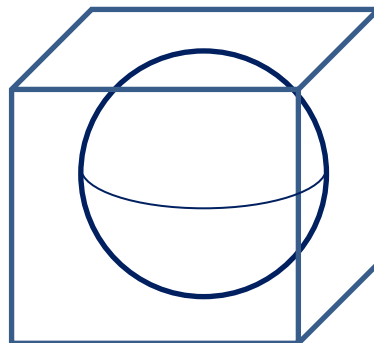


**Tema 4.** Electrones en un potencial periódico. Teorema de Bloch y condiciones de contorno. Esquema de zonas reducidas y bandas de energía. Aproximación a la teoría del enlace débil. Comportamiento de los electrones lejos y en las proximidades de la frontera de zona de Brillouin. Aproximación a la 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  $a = 4 \text{ \AA}$  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

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

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

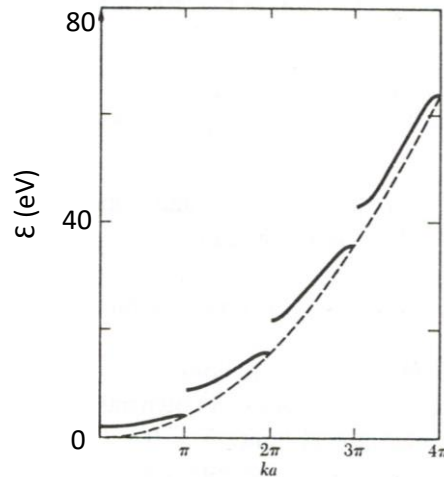
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

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:

$$E(\vec{k}) = E_0 - \alpha - \gamma \cdot \sum_{\text{más pr\u00f3x}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$$

donde  $\vec{R}$  son los vectores que van de un \u00e1tomo a su vecino m\u00e1s pr\u00f3ximo. Determinar la anchura de la banda de energ\u00eda en funci\u00f3n de  $\gamma$  para una red c\u00fabica simple de par\u00e1metro  $a$ .

7) Un cierto metal hipot\u00e9tico, de estructura c\u00fabica simple y par\u00e1metro de red  $a = 3 \text{ \AA}$ , posee una relaci\u00f3n de dispersi\u00f3n para electrones en la banda de conducci\u00f3n que obedece a la ecuaci\u00f3n

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

- Representar en una gr\u00e1fica la relaci\u00f3n de dispersi\u00f3n a lo largo de la direcci\u00f3n  $[100]$
- Determinar la energ\u00eda de Fermi, suponiendo que el metal es monovalente. Comparar con el valor que se obtendr\u00eda para electrones libres

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTOR\u00cdAS T\u00c9CNICAS ONLINE  
LLAMA O ENV\u00cdA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70