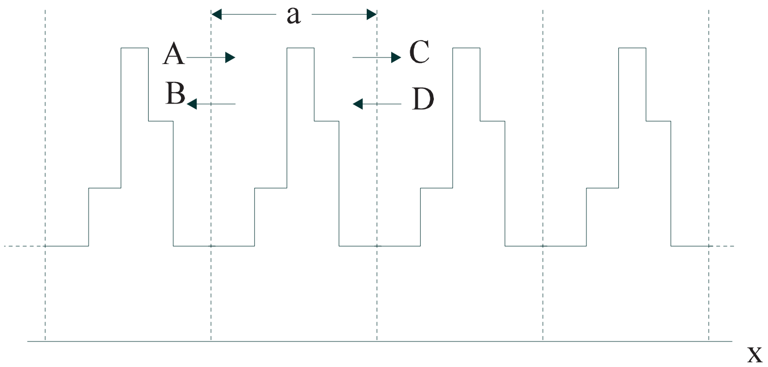
Potenciales periódicos. Bandas de energía.

En este apartado vamos a estudiar los potenciales periódicos. Vamos a ver cómo la matriz de propagación nos permite encontrar también en este caso los posibles valores de la energía. Veremos que para un potencial periódico el espectro de energías es continuo pero formado por bandas. De esta forma veremos cómo surge la teoría de bandas en cristales.

En primer lugar vamos a analizar una propiedad importante de la función de onda en un potencial periódico que se conoce como el teorema de Bloch. Vamos a suponer que tenemos un potencial periódico como el que se muestra en la siguiente figura.



Se trata de un potencial periódico de periodo (espacial) a. En cada una de las celdas la función de onda a la izquierda y a la derecha de la celda estará relacionada mediante una matriz de propagación, de modo que para la celda indicada en la figura se verificará que:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Si trasladamos el sistema una distancia a el sistema trasladado es idéntico. Como consecuencia todas las propiedades físicas del sistema deben ser funciones periódicas de periodo a. En particular tanto la densidad de probabilidad como la densidad de corriente de probabilidad deben ser funciones periódicas.

$$\begin{aligned} \psi^*(x)\psi(x) &= \text{función periódica de periodo } a. \\ \Re\left(\psi^*(x)\left(-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\right) &= \text{función periódica de periodo } a. \end{aligned}$$

Vamos a escribir la función de onda de la siguiente forma:

$$\psi(x) = u(x)e^{i\alpha(x)}$$

donde $u(x)$ es una función periódica y $\alpha(x)$ una función real que no es periódica (si hubiera una parte de la función $\alpha(x)$ que fuera periódica la incluiríamos en la función $u(x)$). De esta forma la densidad de probabilidad será automáticamente una función periódica. Vamos a imponer ahora la condición de que la densidad de corriente sea una función periódica:

$$j = \Re\left(u^*(x)e^{-i\alpha(x)}\left(-\frac{i\hbar}{m}\frac{d}{dx}\right)u(x)e^{i\alpha(x)}\right) = \frac{\hbar}{m}\left|u(x)\right|^2\frac{d\alpha(x)}{dx} + \Re\left(\frac{i\hbar}{m}u^*(x)\frac{du(x)}{dx}\right)$$

Está claro que el segundo sumando del término de la derecha es una función periódica. Sin embargo el primer sumando sólo será una función periódica si se verifica que $\frac{d\alpha(x)}{dx}$ sea una función periódica. La única forma de que la función $\alpha(x)$ no sea una función periódica mientras que su derivada si lo sea, es que la derivada de la función $\alpha(x)$ sea una constante. Por tanto, la función $\alpha(x)$ será de la forma $\alpha(x) = kx$. En consecuencia la función de onda en un potencial periódico será de la forma:

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}$$

donde $u(x)$ es una función periódica. Este resultado se conoce como el teorema de Bloch y la cantidad k de la ecuación anterior se conoce como el número de onda de Bloch. Si trasladamos la función de onda una distancia a resulta que se verifica la siguiente condición:

$$\psi(x+a) = u(x+a)e^{ik(x+a)} = u(x)e^{ikx}e^{ika} = \psi(x)e^{ika}$$

que es una propiedad importante de la función de onda en un potencial periódico.

La ecuación anterior impone una condición sobre la matriz de propagación. Si nos fijamos en la figura anterior resulta que se debe verificar la siguiente condición:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = e^{ika} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

o bien:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = e^{-ika} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

entonces:

$$\begin{pmatrix} P_{11} - e^{-ika} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} - e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = 0$$

Para que este sistema de ecuaciones pueda tener solución el determinante de la matriz debe se nulo, de modo que se debe verificar la siguiente condición:

$$\begin{vmatrix} P_{11} - e^{-ika} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} - e^{-ika} \end{vmatrix} = \left(P_{11} - e^{-ika}\right)\left(P_{22} - e^{-ika}\right) - P_{12}P_{21} = 0$$

Vamos a utilizar ahora las propiedades de los coeficientes de la matriz de propagación, que eran $P_{22} = P_{11}^*$, $P_{21} = P_{12}^*$ y $P_{11}P_{22} - P_{12}P_{21} = 1$. Utilizando esta última condición la ecuación anterior queda:

$$P_{11}P_{22} + e^{-2ika} - P_{11}e^{-ika} - P_{22}e^{-ika} - P_{11}P_{22} = 0$$

o bien:

$$e^{-2ika} - P_{11}e^{-ika} - P_{22}e^{-ika} + 1 = 0$$

Si tenemos ahora en cuenta la propiedad $P_{22} = P_{11}^*$ esta ecuación se puede escribir como

$$e^{-2ika} - 2\Re(P_{11})e^{-ika} + 1 = 0$$

o bien:

$$e^{-ika} - 2\Re(P_{11}) + e^{ika} = 2\cos(ka) - 2\Re(P_{11}) = 0$$

Por tanto hemos llegado a la siguiente condición:

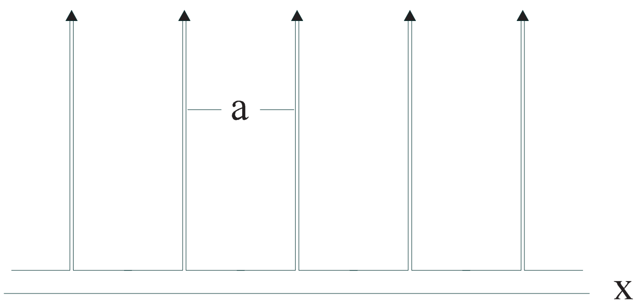
$$\cos(ka) = \Re(P_{11})$$

Para que esta ecuación tenga solución el módulo del término de la derecha debe ser menor que la unidad, de modo que el coeficiente P_{11} en un potencial periódico tiene que verificar la condición:

$$|\Re(P_{11})| \leq 1$$

Esta desigualdad impone una condición sobre las posible energías. Como vamos a ver a continuación en un ejemplo concreto las energías permitidas están formadas por bandas, separadas por bandas de energías prohibidas.

Como ejemplo vamos a considerar un potencial periódico formado por funciones delta de Dirac $\alpha\delta(x)$, lo que se conoce como el modelo de Kronig-Penney. El potencial se ilustra en la siguiente figura.



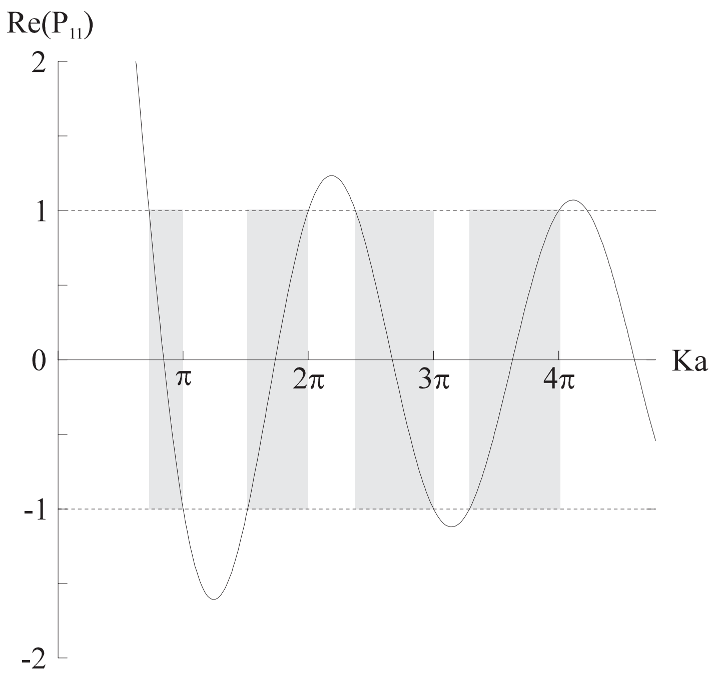
La matriz de propagación de este potencial para una celda será la matriz de una delta multiplicada por una matriz de propagación libre para una distancia a, de modo que si notamos por K el número de ondas, la matriz de propagación será:

$$\begin{pmatrix} 1 + i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K} & i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K} \\ -i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K} & 1 - i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-iKa} & 0 \\ 0 & e^{iKa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(1 + i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K}\right) e^{-iKa} & i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K} e^{iKa} \\ -i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K} e^{-iKa} & \left(1 - i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K}\right) e^{iKa} \end{pmatrix}$$

El coeficiente P_{11} vale $P_{11} = \left(1 + i\dfrac{m\alpha}{\hbar^2 K}\right) e^{-iKa}$ y la parte real del coeficiente:

$$\Re(P_{11}) = \cos Ka + \frac{m\alpha a}{\hbar^2} \frac{\sin Ka}{Ka}$$

En la siguiente figura está representada la parte real de este coeficiente, así como las bandas de energías permitidas para el caso particular $m\alpha a = 5\hbar^2$.



Con este apartado hemos terminado el estudio de los potenciales escalonados. De acuerdo con todo lo estudiado, la matriz de propagación resulta de gran utilidad ya que permite calcular coeficientes de transmisión y reflexión, energías de los estados ligados, bandas de energía, etc. También hemos visto que el calcular la matriz de propagación es sencillo, basta con dividir el potencial en tramos, escribir la matriz de cada tramo y por último multiplicar las matrices de cada tramo. En el siguiente apartado comenzaremos el estudio de un potencial tan importante como es el oscilador armónico.