

## 2. Cristal con Imperfecciones

El objetivo de este trabajo consiste en investigar el efecto de impurezas en una red atómica unidimensional.

Los estados monoeléctricos de una cristal unidimensional se deducen considerando la función de onda

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} \sum_n a_n |n\rangle$$

donde  $|n\rangle$  es el estado electrónico del átomo  $n$ -ésimo. Si  $d$  es la distancia interatómica, entonces  $|\psi(t)\rangle$  es un estado estacionario del hamiltoniano cristalino y la energía viene dada por la expresión

$$E(k) = \varepsilon_0 - 2\tau \cos(kd)$$

siendo  $\varepsilon_0$  la energía asociada a cada sitio por separado (tomamos todos los sitios iguales) y  $\tau$  la integral de acoplo entre sitios adyacentes. El número cuántico  $k$  se denomina *vector de ondas* y está restringido al intervalo  $[-\pi/d, \pi/d]$ . Finalmente, la amplitud de probabilidad de encontrar al electrón en el sitio  $n$  es, simplemente,

$$a_n = e^{iknd}$$

Supongamos que la red tiene una imperfección en el sitio  $n = 0$  de tal forma que la energía asociada a ese sitio es  $\varepsilon_0 + V$ . En el caso en que  $V > 0$ , una onda electrónica incidente sobre la imperfección interaccionará con una barrera de energía que la hará dispersarse, existiendo, por tanto, una probabilidad  $R$  de que el electrón se refleje y una probabilidad  $T$  de que se transmita a través de la barrera.

1. Considerar la amplitud de probabilidad

$$a_n = \begin{cases} e^{iknd} + r e^{iknd} & \text{si } n < 0 \\ \alpha & \text{si } n = 0 \\ t e^{iknd} & \text{si } n > 0 \end{cases}$$

que describe una onda incidente de flujo unidad ( $e^{iknd}$ ), una onda reflejada hacia la izquierda de amplitud  $r$  y una onda transmitida hacia la derecha de amplitud  $t$ .  $\alpha$  es la amplitud de la onda en el sitio de la impureza. Sustituir esta función de onda en la ecuación de Schrödinger y proyectar sobre  $\langle -1|$ ,  $\langle 0|$  y  $\langle 1|$  para obtener un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas ( $r$ ,  $t$  y  $\beta$ ).

Demostrar que  $\beta = 1 + r = t$  y razonar por qué esto debe ser así. Hallar la probabilidad de transmisión  $T = |t|^2$ :

$$T = \frac{4\tau^2 \sin^2 kd}{V^2 + 4\tau^2 \sin^2 kd}$$

y comprobar que se cumple la condición de conservación de flujo ( $R + T = 1$ ) donde  $R = |r|^2$ .

2. Representar  $T$  en función de la energía  $E$  y explicar los casos límite  $E \ll V$  y  $E \gg V$ .
3. Considerar el caso de una impureza atractiva ( $V < 0$ ). Demostrar que la función de onda formada a partir de las amplitudes evanescentes

$$a_n = \begin{cases} e^{qnd} & \text{si } n < 0 \\ \alpha & \text{si } n = 0 \\ e^{-qnd} & \text{si } n > 0 \end{cases}$$

es un autoestado estacionario del hamiltoniano y que la energía asociada a este estado se sitúa *por debajo* del fondo de la banda. Determinar a qué tipo de estado corresponde dicha energía.

4. Analizar el caso de una *doble* impureza, es decir, dos barreras de potencial situadas en los sitios  $n = -1$  y  $n = 1$ . Para simplificar, suponer que el potencial de ambas imperfecciones es el mismo:  $\varepsilon_0 + V$  con  $V > 0$ . Hallar la transmisión y discutir el perfil resonante de la misma. Buscar en la literatura un dispositivo electrónico que exhiba un comportamiento similar.