"MOMENTO" Revista Depto. Física Universidad Nacional de Colombia,Número 7, Octubre 1992.

Existe Alguna Relación entre las Condiciones Cíclicas de Born - Von Kármán y el Teorema de Bloch?

Mauricio García Castañeda (*)

Departamento de Física

Universidad Nacional de Colombia.

RESUMEN: Auncuando la respuesta es afirmativa, ésta pregunta sorprendería a muchos estudiantes de física. En el presente artículo se proporciona una corta demostración acerca de este importante punto en un curso de Física de Estado Sólido.

ABSTRACT: Even though the answer is yes, this question would surprise many good physics students. Here, we provide a short demostration of this important point in a Solid-State Physics course.

INTRODUCCION

La física del estado sólido cristalino esta fundamentada en la existencia de simetrías generales constituidas por las operaciones contenidas en el denominado "grupo puntual", junto con las operaciones de traslación.

En efecto, partiendo de un paralelepipedo elemental que contenga todas las simetrías puntuales y caracterizado por tres vectores $\vec{t}_1$, $\vec{t}_2$, y $\vec{t}_3$ (propios a cada red de Bravais), un cristal se puede concebir como la yuxtaposición (en principio infinita) de tales celdas primitivas por medio de operaciones de traslación definidas por medio de la relación:

$$\vec{T_n}=n_1\vec{t_1}+n_2\vec{t_2}+n_3\vec{t_3} \tag{1}$$

en donde los n_i son números enteros.

En la enseñanza de la física del estado sólido, una vez así "construido el cristal", tradicionalmente aparecen las condiciones de frontera periódicas (de Born - Von Kármán) cuando se quiere calcular los modos normales de oscilación de la red cristalina [1]. Por otra parte, en la mayoria de los textos (ver por ejemplo las referencias 2 y 3), el teorema de Bloch está relacionado de manera exclusiva con el desarrollo de las propiedades eléctricas de los sólidos. Así las cosas, es en general complicado relacionar este par de importantes conceptos.

CONDICIONES DE FRONTERA CICLICAS

Al estudiar cualquier propiedad física en un cristal real se debe tener en cuenta de manera explícita su tamaño finito.

Para el efecto, se supone que la muestra macroscópica es un paralelepípedo cuyos bordes adyacentes estan especificados por $N_1\,\vec{t_1}$, $N_2\,\vec{t_2}$, $N_3\,\vec{t_3}$ con N_i números enteros grandes (N_i del orden del número de Avogadro), y los $\vec{t}_i$ los vectores base característicos de la red de Bravais particular.

Las condiciones de frontera cíclicas (Born - Von Kármán) suponen que el cristal finito justamente descrito está rodeado por un arreglo regular de paralelepípedos idénticos al original. En tales circunstancias la medición de alguna propiedad física del cristal resulta "idéntica" a la que se efectuaría sobre sus vecinos, lo cual se caracteriza por:

$$\vec{T}_n + l_1N_1\vec{t_1} + l_2N_2\vec{t_2} + l_3N_3\vec{t_3} = \vec{T}_n \tag{2}$$

en donde $\vec{T}_n$ se definió previamente, y los $l_{1,2,3}$ son números enteros.

Geométricamente, la ecuación (2) se puede interpretar como si el cristal original se conectara suavemente por sus superficies. (En un modelo lineal la conexión seria por sus extremos). De ahi el nombre: condiciones ciclicas de frontera.

Desde el punto de vista formal, el grupo de las traslaciones posee una caracteristica de ciclicidad, de tal manera que cuando se aplica $l_i N_i$ ($i = 1,2,3$) traslaciones a los vectores base de la red directa el resultado obtenido es el elemento neutro del grupo, lo cual puede ser entendido como el "regreso al punto de partida" en el cristal.

Lo que se logra realmente con las condiciones de Born - Von Kármán es la continuidad tanto de la función de onda como de su derivada en las fronteras del cristal, gracias a la conexión "artificiosa" con los otros paralelepipedos.

En particular, si $\vec{k}$ es el vector de propagación involucrado en la función de onda, en vez de tener una "onda viajera" (caso de un cristal infinito) se obtiene merced a las condiciones mencionadas "ondas estacionarias" cuyos posibles modos (los valores permitidos de $\vec{k}$) se pueden escribir por medio de la ecuación (1-3) :

$$\vec{k} = \frac{m_1}{N_1}\vec{g}_1 + \frac{m_2}{N_2}\vec{g}_2 + \frac{m_3}{N_3}\vec{g}_3 \tag{3}$$

con m_i números enteros y los $\vec{g}_i$ los vectores base en el espacio reciproco de la correspondiente red de Bravais.

EL TEOREMA DE BLOCH

La concepción cristalina de un sólido puede representarse en términos de la función de la energia potencial de la siguiente manera:

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{T}_n) \tag{4}$$

de tal suerte que dos puntos dentro del cristal separados por una operación de traslación resultan físicamente indistinguibles puesto que las interacciones caracterizadas por medio del potencial V resultan idénticas.

Al hacer el estudio de los estados estacionarios de un electrón dentro de un cristal, esto es, al resolver la ecuación de Schrödinger con $V(\vec{r})$ dado por (4), se asegura que las funciones de onda correspondientes pueden escribirse como:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})\, U_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{5}$$

y que además la función $U_{\vec{k}}$ posee la periodicidad de la red cristalina, es decir:

$$U_{\vec{k}}(\vec{r}) = U_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}_n) \tag{6}$$

Las ecuaciones (5) y (6) conforman lo que tradicionalmente se reconoce como el teorema de Bloch.

Además, $\vec{k}$ es una cantidad vectorial que representa el conjunto de "buenos números cuánticos" para la descripción de los estados electrónicos dentro del cristal, y que sirve, más aún, para distinguir las variadas soluciones de la ecuación de Schrödinger.

En últimas, $\vec{k}$ es el vector de propagación para una onda plana modulada espacialmente por la función $U_{\vec{k}}(\vec{r})$, como puede observarse de (5).

Con el objeto de COMPROBAR que las funciones de onda de Bloch satisfacen las condiciones de Born - Von Kármán, examinemos la siguiente situación. Las condiciones de frontera cíclicas requieren que si

$$\vec{T}_o = N_1 \vec{t}_1 + N_2 \vec{t}_2 + N_3 \vec{t}_3$$

entonces

$$\Psi_{\vec{k}} (\vec{r} + \vec{T}_o) = \Psi_{\vec{k}} (\vec{r}) \tag{7}$$

es decir, la continuidad de la función de onda en las superficies del cristal.

Pero por otra parte, las funciones de Bloch deben ser de la forma:

$$\Psi_{\vec{k}} (\vec{r} + \vec{T}_o) = \exp \{ i \vec{k} . (\vec{r} + \vec{T}_o) \} U_{\vec{k}} (\vec{r})$$

puesto que las funciones U poseen la simetría traslacional de la red, de acuerdo con (6).

La última expresión se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\Psi_{\vec{k}} (\vec{r} + \vec{T}_o) = \exp (i \vec{k} . \vec{r}) U_{\vec{k}} (\vec{r}) \{ \exp i (\sum_{i=1}^{3} \frac{m_i}{N_i} \vec{g}_i . N_i \vec{t}_i) \}$$

$$= \Psi_{\vec{k}} (\vec{r})$$

como se requiere por las condiciones cíclicas de frontera de Born - Von Kármán.

Para la obtención de la última ecuación se tuvo en cuenta (3) y el hecho de que el término entre el paréntesis {} siempre es uno ya que $\vec{g}_i . \vec{t}_j = 2 \pi \delta_{ij}$.

(*) Profesor Asociado Departamento de Física Universidad Nacional de Colombia.

REFERENCIAS

1. Introduction to Solid State Physics. C. Kittel, 5 ed. J. Wiley.
2. Solid State Physics. Aschroft, Mermim, Holt.
3. Elementary Solid State Physics, A. Omar, Addison Wesley.