Ampliación de Física del Estado Sólido

Relación 2: Dinámica semiclásica

Juan J. Meléndez

Problema 2.1

La relación de dispersión en el borde superior de la banda de valencia de un sólido cúbico con $a = 4$ Å es

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

a) Calcular el tensor masa efectiva para un electrón con $\vec{k} = 0.3 \cdot 10^{10}(2\hat{j}^* + \hat{k}^*)$ (m^{-1}).

b) Para un electrón cuyo vector de onda es $\vec{k} = 10^{10}(\hat{i}^* + 0.6\hat{j}^*)$ (m^{-1}), encontrar su posición en el espacio recíproco y su velocidad en el espacio real, en función del tiempo, cuando se aplica un campo eléctrico $\vec{E} = -20\hat{j}$ $(\mathrm{V{\cdot}m^{-1}})$.

a) Conocida la relación de dispersión, las componentes del tensor masa efectiva inverso se calculan como

$$(m^*)^{-1}_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

En nuestro caso, las derivadas segundas de la relación de dispersión son:

$$\frac{\partial^2\epsilon(\vec{k})}{\partial k_x^2} = -\frac{2\hbar^2}{m_e}\cos\, k_x a$$
$$\frac{\partial^2\epsilon(\vec{k})}{\partial k_y^2} = -\frac{2\hbar^2}{m_e}\cos\, k_y a$$
$$\frac{\partial^2\epsilon(\vec{k})}{\partial k_z^2} = -\frac{2\hbar^2}{m_e}\cos\, k_z a$$
$$\frac{\partial^2\epsilon(\vec{k})}{\partial k_x \partial k_y} = \frac{\partial^2\epsilon(\vec{k})}{\partial k_x \partial k_z} = \frac{\partial^2\epsilon(\vec{k})}{\partial k_y \partial k_z} = 0$$

Entonces:

$$\hat{m}^{*-1} = -\frac{2}{m_e}\begin{pmatrix} \cos k_x a & 0 & 0 \\ 0 & \cos k_y a & 0 \\ 0 & 0 & \cos k_z a \end{pmatrix}$$

Su valor numérico, con $\vec{k} = 0.3 \cdot 10^{10}\,(2\hat{e}_2 + \hat{e}_3)\,\mathrm{m}^{-1}$, es

$$\hat{m}^{*-1} = -2.196 \cdot 10^{30}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.737 & 0 \\ 0 & 0 & 0.362 \end{pmatrix}\ (\mathrm{kg}^{-1})$$

b) Las ecuaciones semiclásicas para un electrón sometido a un campo eléctrico uniforme son

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\vec{k}(t)}{\mathrm{d}dt} = -e\vec{E} \tag{1}$$

y

$$\frac{\mathrm{d}\vec{r}(t)}{\mathrm{d}dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon(\vec{k})}{\partial\vec{k}} \tag{2}$$

De la primera resulta:

$$\hbar \frac{\mathrm{d}k_x}{\mathrm{d}t} = -eE_x = 0$$
$$\hbar \frac{\mathrm{d}k_y}{\mathrm{d}t} = -eE_y$$
$$\hbar \frac{\mathrm{d}k_z}{\mathrm{d}t} = -eE_z = 0,$$

esto es, integrando,

$$k_x(t) = k_{0x}$$
$$k_y(t) = k_{0y} - \frac{eE_y t}{\hbar}$$
$$k_z(t) = k_{0z},$$

cuyo valor numérico es

$$\vec{k}(t) = 10^{10}\hat{e}_1 + (0.6 \cdot 10^{10} - 3.0 \cdot 10^{16} t)\hat{e}_2 \ (\mathrm{m}^{-1}) \tag{3}$$

La velocidad del electrón está dada por la ecuación (2). En nuestro caso,

$$v_x = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial k_x} = -\frac{2\hbar}{m_e a} \operatorname{sen} k_x a$$
$$v_y = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial k_y} = -\frac{2\hbar}{m_e a} \operatorname{sen} k_y a$$
$$v_z = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial k_z} = -\frac{2\hbar}{m_e a} \operatorname{sen} k_z a,$$

donde $\vec{k}$ está dado por (3). El valor numérico del vector velocidad es, en definitiva,

$$\vec{v} = 0.44\hat{e}_1 - 0.58 \cdot \operatorname{sen}(2.4 - 1.2 \cdot 10^7 t)\hat{e}_2 \ \ (\cdot 10^6 \ \mathrm{m{\cdot}s}^{-1})$$

Problema 2.2

Una banda de energía para una estructura cúbica simple de arista a está dada por:

$$\varepsilon(\vec{k}) = -\varepsilon_0(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

Considerar un electrón inicialmente en reposo y un campo eléctrico constante. Encontrar la trayectoria del electrón en el espacio real si el campo eléctrico tiene la dirección [120]. Suponer que el electrón se encuentra inicialmente en reposo

Las ecuaciones semiclásicas para el movimiento de un electrón en el seno de un campo eléctrico $\vec{E}$ son (1) y (2). Comencemos con la primera de ellas. Un campo eléctrico en la dirección [120] tiene la forma:

$$\vec{E} = (E_x, 2E_x, 0)$$

La ecuación (1) se escribe entonces:

$$\frac{\mathrm{d}k_x}{\mathrm{d}t} = -\frac{e}{\hbar}E_x$$
$$\frac{\mathrm{d}k_y}{\mathrm{d}t} = -\frac{e}{\hbar}E_y = -\frac{2e}{\hbar}E_x$$
$$\frac{\mathrm{d}k_z}{\mathrm{d}t} = 0,$$

de donde

$$\begin{aligned} k_x(t) &= k_{0x} - \frac{e}{\hbar}E_x t \\ k_y(t) &= k_{0y} - \frac{2e}{\hbar}E_x t \\ k_z(t) &= k_{0z}, \end{aligned} \tag{4}$$

que dan la variación temporal del vector de onda. Las cantidades k_{0x}, k_{0y} y k_{0z} son las componentes del vector de onda en el instante inicial.

Por otra parte, las ecuaciones (2) se escriben

$$\begin{aligned} v_x(t) &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\epsilon(\vec{k})}{\partial k_x} = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen} k_x(t)a = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen}\left[\left(k_{0x} - \frac{e}{\hbar}E_x t\right)a\right] \\ v_y(t) &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\epsilon(\vec{k})}{\partial k_y} = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen} k_y(t)a = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen}\left[\left(k_{0y} - \frac{2e}{\hbar}E_y t\right)a\right] \\ v_z(t) &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\epsilon(\vec{k})}{\partial k_z} = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen} k_z(t)a = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen} k_{0z}a \end{aligned} \tag{5}$$

Según el enunciado, el electrón parte del reposo. Entonces:

$$v_x(t=0) = \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen} k_{0x}a = 0, \tag{6}$$

de donde

$$k_{0x} = 0$$

y, análogamente,

$$k_{0y} = k_{0z} = 0,$$

de forma que las ecuaciones (5) se reducen a:

$$\begin{aligned} v_x(t) &= \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen}\left(-\frac{ea}{\hbar}E_x t\right) = -\frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen}\frac{eaE_x}{\hbar}t \equiv \frac{dx}{dt} \\ v_y(t) &= -\frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\operatorname{sen}\frac{2eaE_x}{\hbar}t \equiv \frac{dy}{dt} \\ v_z(t) &= 0 \equiv \frac{dz}{dt} \end{aligned} \tag{7}$$

El movimiento del electrón está así restringido al plano OXY. Las componentes del vector de posición del electrón en el espacio directo se obtienen integrando las ecuaciones (7):

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 - \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\int_0^t \operatorname{sen}\left(\frac{eaE_x}{\hbar}t'\right)dt' = x_0 + \frac{\epsilon_0}{eE_x}\left(\cos\frac{eE_x a}{\hbar}t - 1\right) \\ y(t) &= y_0 - \frac{\epsilon_0 a}{\hbar}\int_0^t \operatorname{sen}\left(\frac{2eaE_x}{\hbar}t'\right)dt' = y_0 + \frac{\epsilon_0}{2eE_x}\left(\cos\frac{2eE_x a}{\hbar}t - 1\right) \\ z(t) &= z_0, \end{aligned} \tag{8}$$

donde $\vec{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ es la posición inicial del electrón.

La trayectoria del electrón se obtiene eliminando la variable t de las ecuaciones (8). La segunda ecuación de (8) se puede rescribir como

$$y(t) - y_0 = \frac{\epsilon_0}{2eE_x}\left[\cos^2\left(\frac{eE_x a}{\hbar}t\right) - \operatorname{sen}^2\left(\frac{eE_x a}{\hbar}t\right) - 1\right] =$$
$$= \frac{\epsilon_0}{2eE_x}\left[-2\operatorname{sen}^2\left(\frac{eE_x a}{\hbar}t\right)\right] = -\frac{\epsilon_0}{eE_x}\operatorname{sen}^2\left(\frac{eE_x a}{\hbar}t\right),$$

de donde

$$\operatorname{sen}^2\left(\frac{eE_x a}{\hbar}t\right) = -\frac{eE_x}{\epsilon_0}(y - y_0) \tag{9}$$

Por otra parte, de la primera ecuación de (8) se obtiene

$$\cos\left(\frac{eE_x a}{\hbar}t\right) = \frac{eE_x}{\epsilon_0}(x - x_0) + 1,$$

esto es,

$$\cos^2\left(\frac{eE_x a}{\hbar}t\right) = \left[\frac{eE_x}{\epsilon_0}(x - x_0) + 1\right]^2 \tag{10}$$

Finalmente, sumando (10) y (9) obtenemos la ecuación de la trayectoria del electrón:

$$\left[\frac{eE_x}{\epsilon_0}(x - x_0) + 1\right]^2 - \frac{eE_x}{\epsilon_0}(y - y_0) = 1,$$

o bien

$$\left[(x - x_0) + \frac{\epsilon_0}{eE_x}\right]^2 - \frac{\epsilon_0}{eE_x}(y - y_0) = \left(\frac{\epsilon_0}{eE_x}\right)^2$$

La trayectoria es *parabólica* en estas condiciones.

Problema 2.3

La relación de dispersión para electrones en el borde superior de la banda de valencia de un sólido cúbico es:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{10^{-31}}\left[k^2 - A(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)\right],$$

expresada en el SI con $A = 10^{-16}$ m^2. Si, partiendo de una banda llena, se extrae un electrón del orbital $\vec{k} = 10^8(0.1\hat{\imath}^* + 0.2\hat{\jmath}^*)$ (m^{-1}), calcular el tiempo que tardará el hueco en tener la misma energía que el electrón si se aplica un campo eléctrico de 2 V·m^{-1} de intensidad en la dirección [100] y no existen colisiones.

Al extraer el electrón de la banda de valencia se genera un hueco en esa banda, cuyo vector de onda inicial, que llamaremos $\vec{k}_{h,0}$, es

$$\vec{k}_{h,0} = -\vec{k}_0 \tag{11}$$

y, debido al campo eléctrico aplicado, el vector de onda del hueco varía en el tiempo según la ecuación

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\vec{k}_h}{\mathrm{d}t} = +e\vec{E}$$

que, integrando, lleva a

$$\vec{k}_h(t) = \vec{k}_{h,0} + \frac{e}{\hbar}\int_0^t \vec{E}\cdot dt',$$

o bien, teniendo en cuenta (11) y que el campo aplicado es paralelo al eje OX:

$$\vec{k}_h(t) = -\vec{k}_0 + \frac{et}{\hbar}\vec{E} = \left(-k_{0,x} + \frac{eEt}{\hbar}\right)\hat{e}_1 - k_{0,y}\hat{e}_2 \tag{12}$$

Por otra parte, la energía del hueco es

$$\epsilon_h(\vec{k}_h) = -\epsilon(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2}{10^{-31}}\left[\vec{k}_h^2 - A(k_{x,h}^2k_{y,h}^2 + k_{x,h}^2k_{z,h}^2 + k_{y,h}^2k_{z,h}^2)\right],$$

y varía en el tiempo puesto que $\vec{k}_h$ está dado por (12). Entonces:

$$\begin{aligned}\epsilon_h(t) &= -\frac{\hbar^2}{10^{-31}}\left[\underbrace{\left(-k_{0,x}+\frac{eEt}{\hbar}\right)^2 + k_{0,y}^2}_{\vec{k}_h^2} - A\underbrace{\left(-k_{0,x}+\frac{eEt}{\hbar}\right)^2}_{k_{x,h}^2}\underbrace{k_{0,y}^2}_{k_{y,h}^2}\right] = \\ &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{10^{-31}}\left(k_{0,x}^2 + k_{0,y}^2 - Ak_{0,x}^2k_{0,y}^2\right)}_{\epsilon_0} - \frac{e^2E^2}{10^{-31}}(1 - Ak_{0,y}^2)\left(t^2 - \frac{2k_{0,x}\hbar}{eE}t\right) = \\ &= -\epsilon_0 - \frac{e^2E^2}{10^{-31}}(1 - Ak_{0,y}^2)\left(t^2 - \frac{2k_{0,x}\hbar}{eE}t\right),\end{aligned} \tag{13}$$

donde

$$\epsilon_0 = \frac{\hbar^2}{10^{-31}}(k_{0,x}^2 + k_{0,y}^2 - Ak_{0,x}^2k_{0,y}^2)$$

es la energía inicial del electrón. La energía del hueco es igual a la energía inicial del electrón en el instante $\tilde{t}$ en el que

$$\epsilon_h(\tilde{t}) = \epsilon_0,$$

donde ϵ_h esta dado por (13). El instante $\tilde{t}$ es, entonces, solución de

$$\tilde{t}^{\,2} - \frac{2\hbar k_{0,x}}{eE}\tilde{t} + \frac{2\cdot 10^{-31}\epsilon_0}{e^2E^2(1 - Ak_{0,y}^2)} = 0,$$

cuyo valor numérico es

$$\tilde{t} \approx 7.54\cdot 10^{-8}\ \text{s}$$

Como el período de las oscilaciones de Bloch, este tiempo es superior en varios órdenes de magnitud al tiempo promedio entre colisiones en el gas de electrones. Esto quiere decir que el hueco es dispersado muchísimas veces antes de que pueda adquirir la energía que tenía el electrón que lo produjo. Estos efectos no se consideran en este problema, naturalmente.

Problema 2.4

Las bandas de valencia y de conducción de un sólido vienen dadas por:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \pm\sqrt{\frac{\hbar^2k^2\Delta}{m^*} + \Delta^2},$$

donde m^* y Δ son cantidades positivas. Inicialmente, todos los estados de energía positiva están vacíos, y los de energía negativa llenos. En el instante $t = 0$, un electrón con vector de onda $\vec{k} = (k_0, 0, 0)$ es transferido de la banda de valencia a la de conducción, a la vez que se aplica un campo eléctrico $\vec{E} = E_z\hat{k}$. Calcular, en función del tiempo, las contribuciones de las dos bandas a la densidad de corriente.

Cuando el electrón del enunciado, de vector de onda $\vec{k}_0$, es transferido a la banda de conducción, aparece un hueco en la banda de valencia, y las propiedades físicas de este se expresan en función de las que tenía el electrón *cuando estaba en la banda de valencia.* Así, existen dos contribuciones a la densidad de corriente: la del electrón en la banda de conducción, $\vec{j}_e$, y la del hueco en la banda de valencia, $\vec{j}_h$, dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned} \vec{j}_e &= -n_e e \vec{v}_e \\ \vec{j}_h &= +n_h e \vec{v}_h \end{aligned} \tag{14}$$

Calculemos la velocidad $\vec{v}_e$. El electrón transferido se encuentra en la banda de conducción, que corresponde al signo "+" en la relación de dispersión. Entonces:

$$\vec{v}_e = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon^+(\vec{k}_e)}{\partial \vec{k}_e} = \frac{\hbar\Delta}{m^*}\left(\frac{\hbar^2\vec{k}_e^2\Delta}{m^*} + \Delta^2\right)^{-1/2}\vec{k}_e \tag{15}$$

En (15) hemos utilizado la notación $\vec{k}_e$ para referirnos al vector de onda del electrón *que está realmente* en la banda de conducción.

Por otra parte, la energía del hueco está relacionada con la energía del electrón cuando se encontraba en la banda de valencia. Llamemos ϵ_e^- a esta energía, que es la correspondiente al signo "−" en la relación de dispersión, y llamemos $\vec{q}_e$ al vector de onda del electrón cuando estaba en la banda de valencia.

Debemos tener en cuenta que este vector $\vec{q}_e$ *no* es el $\vec{k}_e$ del electrón en la banda de conducción. Solo lo es en el instante inicial puesto que, cuando se aplica el campo, el electrón en la banda de conducción evoluciona de forma distinta que el hueco.

Entonces:

$$\vec{k}_h = -\vec{q}_e$$

y

$$\epsilon_h(\vec{k}_h) = -\epsilon_e^-(\vec{q}_e),$$

de modo que la velocidad del hueco es

$$\begin{aligned} \vec{v}_h = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_h(\vec{k}_h)}{\partial \vec{k}_h} &= \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_e^-(\vec{q}_e)}{\partial \vec{q}_e} = -\frac{\hbar\Delta}{m^*}\left(\frac{\hbar^2\vec{q}_e^2\Delta}{m^*} + \Delta^2\right)^{-1/2}\vec{q}_e = \\ &= \frac{\hbar\Delta}{m^*}\left(\frac{\hbar^2\vec{k}_h^2\Delta}{m^*} + \Delta^2\right)^{-1/2}\vec{k}_h \end{aligned} \tag{16}$$

En (16), $\vec{k}_h$ es el vector de onda del hueco que está en la banda de valencia.

Como el sólido se encuentra sometido a un campo eléctrico, tanto $\vec{k}_e$ como $\vec{k}_h$ varían en el tiempo. La variación de estos vectores viene dada por la ecuación semiclásica

$$\hbar\frac{d\vec{k}_{e,h}}{dt} = \mp e\vec{E},$$

en la que los signos "$-$" y "$+$" corresponden al electrón y al hueco, respectivamente. Integrando,

$$\vec{k}_{e,h}(t) = \vec{k}_{e,h}(0) \mp \frac{e\vec{E}}{\hbar}t,$$

donde $\vec{k}_{e,h}(0)$ es el vector de onda inicial del electrón y del hueco. Aplicando la condición inicial resulta

$$\vec{k}_e(0) = \vec{k}_0 = k_0\hat{e}_1$$

y

$$\vec{k}_h(0) = -\vec{k}_0 = -k_0\hat{e}_1,$$

de forma que los vectores de onda instantáneos del electrón y del hueco son, respectivamente,

$$\vec{k}_e = k_0\hat{e}_1 - \frac{eE_zt}{\hbar}\hat{e}_3$$
$$\vec{k}_h = -k_0\hat{e}_1 + \frac{eE_zt}{\hbar}\hat{e}_3,$$

y sus velocidades se obtienen sustituyendo en (15) y (16):

$$\vec{v}_e = \frac{\hbar\Delta}{m^*}\left[\frac{\hbar^2\Delta}{m^*}\left(k_0^2 + \frac{e^2E_z^2t^2}{\hbar^2}\right) + \Delta^2\right]^{-1/2}\left(k_0\hat{e}_1 - \frac{eE_zt}{\hbar}\hat{e}_3\right)$$
$$\vec{v}_h = \frac{\hbar\Delta}{m^*}\left[\frac{\hbar^2\Delta}{m^*}\left(k_0^2 + \frac{e^2E_z^2t^2}{\hbar^2}\right) + \Delta^2\right]^{-1/2}\left(-k_0\hat{e}_1 + \frac{eE_zt}{\hbar}\hat{e}_3\right)$$

En este problema se cumple

$$\vec{v}_e = -\vec{v}_h,$$

aunque este hecho es circunstancial. Se debe a que las bandas de conducción y de valencia son simétricas. En general, la velocidad del electrón en la banda de conducción y del hueco en la banda de valencia no son iguales.

Las contribuciones a la densidad de corriente (14) son, entonces,

$$\vec{j}_e = -\frac{n_e e\hbar\Delta}{m^*}\left[\frac{\hbar^2\Delta}{m^*}\left(k_0^2 + \frac{e^2E_z^2t^2}{\hbar^2}\right) + \Delta^2\right]^{-1/2}\left(k_0\hat{e}_1 - \frac{eE_zt}{\hbar}\hat{e}_3\right),$$

y

$$\vec{j}_h = -\frac{n_e e\hbar\Delta}{m^*}\left[\frac{\hbar^2\Delta}{m^*}\left(k_0^2 + \frac{e^2E_z^2t^2}{\hbar^2}\right) + \Delta^2\right]^{-1/2}\left(k_0\hat{e}_1 - \frac{eE_zt}{\hbar}\hat{e}_3\right),$$

y la densidad de corriente neta es

$$\vec{j}_{neta} = \vec{j}_e + \vec{j}_h =$$
$$= -\frac{2n_e e\hbar\Delta}{m^*}\left[\frac{\hbar^2\Delta}{m^*}\left(k_0^2 + \frac{e^2E_z^2t^2}{\hbar^2}\right) + \Delta^2\right]^{-1/2}\left(k_0\hat{e}_1 - \frac{eE_zt}{\hbar}\hat{e}_3\right)$$

Problema 2.5

Considerar un sólido bidimensional de red cuadrada y parámetro reticular a, en el que la banda de conducción está descrita por:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_2},$$

donde m_1 y m_2 son dos constantes positivas. Se aplica un campo magnético constante $\vec{B}$ perpendicular al sólido. Escribir las ecuaciones de las trayectorias en el espacio real y en el recíproco para un electrón de la banda de conducción cuyo estado inicial es $\vec{k} = \left(0, \frac{\pi}{2a}\right)$.

Las ecuaciones semiclásicas bajo campo magnético son

$$\frac{\mathrm{d}\vec{r}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon(\vec{k})}{\partial\vec{k}} \tag{17}$$

y

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\vec{k}(t)}{\mathrm{d}t} = -e\vec{v}(t)\times\vec{B} \tag{18}$$

En nuestro caso, (17) es

$$v_x = \frac{\hbar k_x}{m_1} \tag{19}$$

$$v_y = \frac{\hbar k_y}{m_2} \tag{20}$$

Por otra parte, (18) lleva a

$$\hbar\frac{\mathrm{d}\vec{k}}{\mathrm{d}t} = \hbar\frac{\mathrm{d}k_x}{\mathrm{d}t}\hat{\imath} + \hbar\frac{\mathrm{d}k_y}{\mathrm{d}t}\hat{\jmath} = -e\vec{v}(\vec{k})\times\vec{B} = \left\|\vec{B}\parallel OZ\right\| = -eB\left(\frac{\hbar k_y}{m_2}\hat{\imath} - \frac{\hbar k_x}{m_1}\hat{\jmath}\right),$$

es decir,

$$\frac{\mathrm{d}k_x}{\mathrm{d}t} = -\frac{eB}{m_2}k_y \tag{21}$$

$$\frac{\mathrm{d}k_y}{\mathrm{d}t} = \frac{eB}{m_1}k_x \tag{22}$$

Para resolver este conjunto de ecuaciones, derivemos de nuevo con respecto al tiempo la ecuación (21). En tal caso, resulta:

$$\frac{\mathrm{d}^2k_x}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{eB}{m_2}\frac{\mathrm{d}k_y}{\mathrm{d}t} = -\frac{(eB)^2}{m_1m_2}k_x, \tag{23}$$

donde hemos tenido en cuenta (22). Análogamente, derivando con respecto al tiempo (22) y usando (21) se llega a:

$$\frac{\mathrm{d}^2k_y}{\mathrm{d}t^2} + \frac{(eB)^2}{m_1m_2}k_y = 0 \tag{24}$$

Las soluciones generales de (23) y (24) son entonces, respectivamente,

$$\begin{aligned} k_x(t) &= A_1\cos\omega_c t + A_2 \,\mathrm{sen}\,\omega_c t \\ k_y(t) &= C_1\cos\omega_c t + C_2 \,\mathrm{sen}\,\omega_c t, \end{aligned} \tag{25}$$

donde $\omega_c = \frac{(eB)}{(m_1m_2)^{1/2}}$.

El hecho de que en (25) aparezcan cuatro constantes de integración (en lugar de las dos que cabría esperar, porque la ecuación semiclásica para $\vec{k}$ es de primer orden) se debe a que hemos derivado las ecuaciones (21) y (22) una vez más con respecto al tiempo. De esta forma, hemos transformado el sistema de dos ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas en un sistema de dos ecuaciones de segundo orden desacopladas.

Las constantes A_1, A_2, C_1 y C_2 que aparecen en (25) no son independientes, puesto que se deben verificar las ecuaciones (21) y (22). De (21) se obtiene

$$-A_1\omega_c \text{ sen } \omega_c t + A_2\omega_c \cos \omega_c t = -\frac{eB}{m_2}\left(C_1 \cos \omega_c t + C_2 \text{ sen } \omega_c t\right),$$

es decir, teniendo en cuenta que las funciones trigonométricas son ortogonales,

$$-\omega_c A_1 = -\frac{eB}{m_2} C_2 \implies C_2 = A_1 \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{1/2}$$

y

$$\omega_c A_2 = -\frac{eB}{m_2} C_1 \implies A_2 = -C_1 \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{1/2}$$

La condición (22) lleva a las mismas relaciones entre las constantes de integración. Así pues, las componentes del vector de onda son

$$k_x(t) = A_1 \cos \omega_c t - \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{1/2} C_1 \text{ sen } \omega_c t$$
$$k_y(t) = C_1 \cos \omega_c t + \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{1/2} A_1 \text{ sen } \omega_c t,$$

definidas ahora en términos de solo dos constantes, que se determinan imponiendo la condición inicial

$$\vec{k}(t=0) = \left(0, \frac{\pi}{2a}\right)$$

Entonces:

$$A_1 = 0$$
$$C_1 = \frac{\pi}{2a},$$

de modo que el vector de onda instantáneo es, finalmente,

$$k_x(t) = -\frac{\pi}{2a}\left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{1/2} \text{ sen } \omega_c t \tag{26}$$
$$k_y(t) = \frac{\pi}{2a} \cos\ \omega_c t \tag{27}$$

Para encontrar la ecuación de la trayectoria en el espacio recíproco, escribamos

$$\text{sen } \omega_c t = -\frac{k_x}{\frac{\pi}{2a}\left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{1/2}}$$

y

$$\cos\ \omega_c t = \frac{k_y}{\frac{\pi}{2a}},$$

de manera que:

$$\frac{k_x^2}{\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 \frac{m_1}{m_2}} + \frac{k_y^2}{\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2} = 1,$$

que es la ecuación de la trayectoria del electrón en el espacio recíproco. Esta trayectoria es una elipse de semiejes $\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}\frac{\pi}{2a}$ y $\frac{\pi}{2a}$.

Para calcular la trayectoria en el espacio directo, partamos de las componentes de la velocidad (19) y (20) que, teniendo en cuenta (26) y (27), son

$$v_x = -\frac{\hbar}{(m_1 m_2)^{1/2}} \frac{\pi}{2a} \text{ sen } \omega_c t$$

y

$$v_y = \frac{\hbar}{m_2} \frac{\pi}{2a} \cos\ \omega_c t$$

Estas ecuaciones pueden integrarse para calcular el vector de posición. Así:

$$x(t) - x_0 = -\frac{\pi\hbar}{2a(m_1 m_2)^{1/2}} \int_0^t \text{ sen } \omega_c t' dt' =$$

$$= \frac{\pi\hbar}{2a(m_1 m_2)^{1/2}} \frac{1}{\omega_c} [\cos\ \omega_c t - 1] = \left\| \omega_c = \frac{eB}{(m_1 m_2)^{1/2}} \right\| = \frac{\pi\hbar}{2a} \frac{1}{eB} [\cos\ \omega_c t - 1]$$

y

$$y(t) - y_0 = \frac{\hbar}{m_2} \frac{\pi}{2a} \int_0^t \cos\ \omega_c t' dt' =$$

$$= \frac{\pi\hbar}{2m_2 a} \frac{1}{\omega_c} \text{ sen } \omega_c t = \frac{\pi\hbar}{2a} \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{1/2} \frac{1}{eB} \text{ sen } \omega_c t,$$

donde (x_0, y_0) es el vector de posición del electrón para $t = 0$. De aquí,

$$\cos\ \omega_c t = 1 + \frac{2a}{\pi\hbar} eB(x - x_0)$$

$$\text{sen } \omega_c t = \frac{2a}{\pi\hbar} \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{1/2} eB(y - y_0),$$

de manera que la ecuación de la trayectoria en el espacio directo es

$$\left[1 + \frac{2a}{\pi\hbar} eB(x - x_0)\right]^2 + \left[\frac{2a}{\pi\hbar} \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{1/2} eB(y - y_0)\right]^2 = 1,$$

o bien,

$$\left[\frac{\pi\hbar}{2aeB} + (x - x_0)\right]^2 + \frac{m_2}{m_1}(y - y_0)^2 = \left(\frac{\pi\hbar}{2a} \frac{1}{eB}\right)^2,$$

que también es una elipse, como cabía esperar.

Problema 2.6

Las superficies isoenergéticas de un sólido vienen dadas por:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \hbar^2 \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \frac{k_z^2}{2m_l} \right),$$

donde m_t y m_l son constantes positivas. Demostrar que la frecuencia de ciclotrón para un campo magnético estático paralelo al eje OX es

$$\omega_c = \frac{eB}{(m_t m_l)^{1/2}}$$

Volvamos a plantear las ecuaciones semiclásicas para electrones sometidos a un campo magnético. Para la relación de dispersión del problema, la ecuación (17) lleva a

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \frac{\hbar k_x}{m_t} \hat{e}_1 + \frac{\hbar k_y}{m_t} \hat{e}_2 + \frac{\hbar k_z}{m_l} \hat{e}_2$$

Por otra parte, para un campo magnético en la dirección del eje OX, (18) da

$$\hbar \frac{\mathrm{d}k_x}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{28}$$

$$\hbar \frac{\mathrm{d}k_y}{\mathrm{d}t} = -\frac{e\hbar B}{m_l} k_z \tag{29}$$

$$\hbar \frac{\mathrm{d}k_z}{\mathrm{d}t} = \frac{e\hbar B}{m_t} k_y \tag{30}$$

Si ahora derivamos (29) con respecto al tiempo y usamos (30), resulta

$$\frac{\mathrm{d}^2 k_y}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{eB}{m_l} \frac{\mathrm{d}k_z}{\mathrm{d}t} = -\frac{e^2 B^2}{m_l m_t} k_y \equiv -\omega_c^2 k_y,$$

que es la ecuación de un movimiento armónico simple de frecuencia de ciclotrón

$$\omega_c = \frac{eB}{(m_l m_t)^{1/2}},$$

como queríamos demostrar.

Si hubiéramos derivado con respecto al tiempo la ecuación (30), habríamos obtenido el mismo resultado, naturalmente.